

FY1006 Innføring i kvantefysikk og TFY4215 Kjemisk fysikk og kvantemekanikk: Kort orientering om undervisningsopplegget i kjemisk fysikk, mars og april 2009

Plan:

Uke 14-17: 4 x 2 forelesningstimer (30. mars, 02., 16., og 20. april)

Uke 17-18: 3 regneøvinger (22.04, 23.04, 27.04, 29.04, 30.04 i datasalene i BU2)

Stikkord:

Kvantekjemi: $H\Psi=E\Psi$ anvendt på molekyler. Litt mangepartikkelteori.

Hva innebærer det å gjøre kvantemekaniske beregninger på molekyler?

Hva slags informasjon kan vi få ut av slike beregninger?

Tilstander: bølgefunksjoner, molekylorbitaler. Energier.

Spektroskopi. Vibrasjonsfrekvenser.

Kjemiske reaksjoner: kinetikk og termodynamikk.

Stereokjemi. Optisk aktive forbindelser.

Organisk kjemi. Navnsetting. (Orienteringsstoff.)

Regneøvingene:

Kvantemekaniske beregninger på PC med programmet Spartan

3 øvinger, 2 obligatoriske, gjør helst alle 3

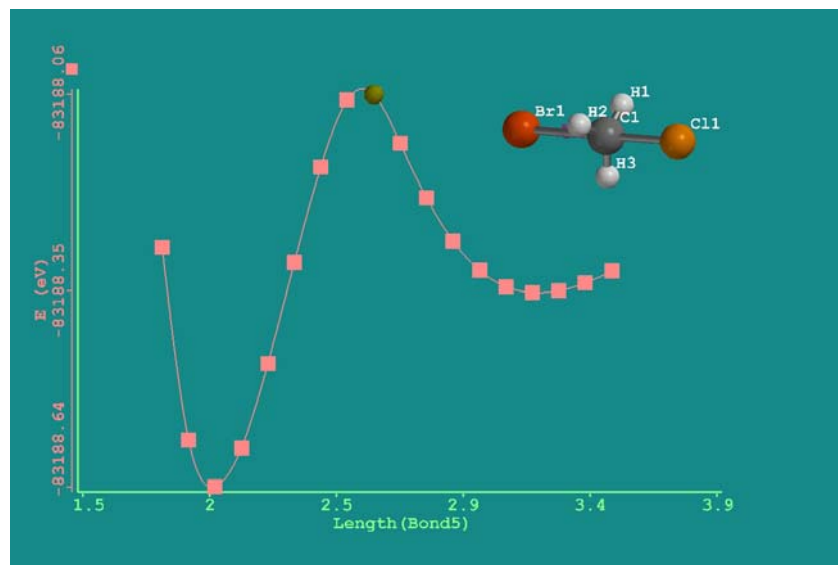
Jobb alene, eller to og to sammen

Veiledning på datasaler, BU2-153, BU2-123, BU2-117

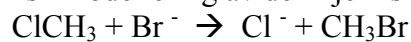
Installasjon på (f.eks egen) PC: Start – Run \\smb-pub.nt.ntnu.no\spartan\$\install.cmd
og deretter Cancel på spørsmål om Activate

Innlevering utenfor R1 (som vanlig)

Spartan:



Kvantemekanisk modellering av den kjemiske reaksjonen



(Øving 2)