

FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk: Kort orientering om undervisningsopplegget i kjemisk fysikk, mars/april 2011.

Plan:

Uke 13-14: 4 x 2 forelesningstimer (30. og 31. mars i R5, 1. april i R7 og 6. april i R5)

Uke 14-15: 3 regneøvinger (7., 8., 13., 14. og 15. april i datasalene BU2-123 og BU2-153)

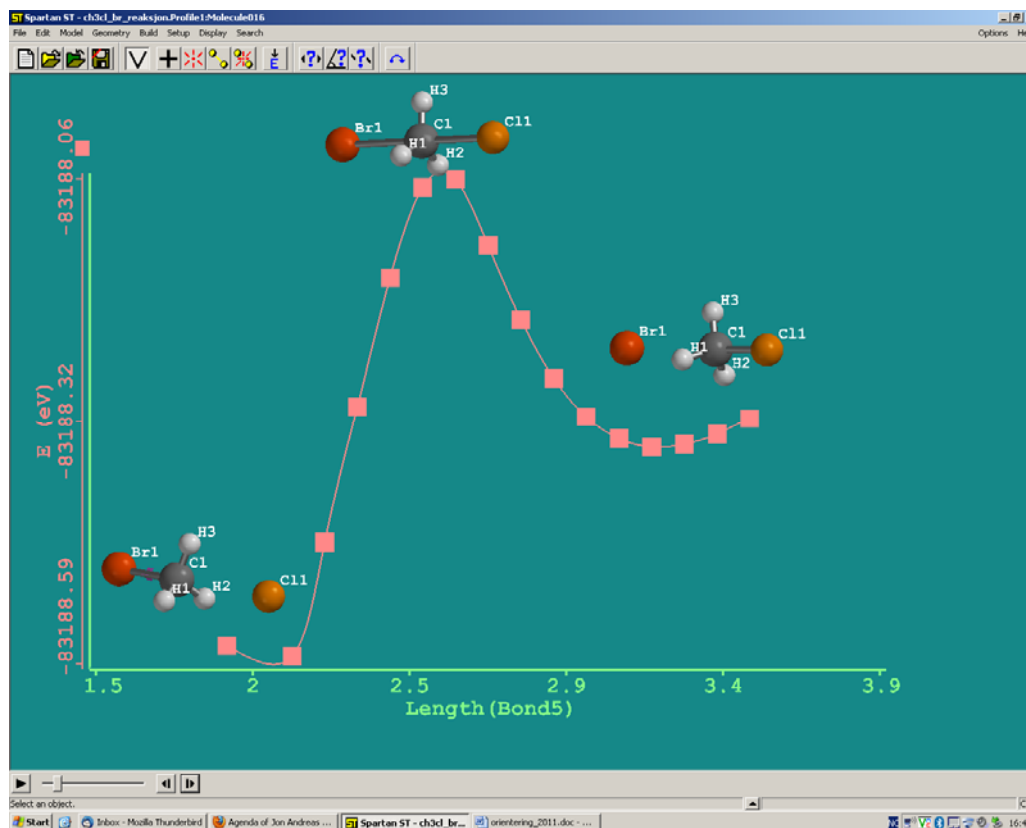
Stikkord:

- 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.

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 datasalene BU2-123 og BU2-153
- Installasjon på egen PC: Start – Run –
[\\smb-pub.ntnu.no\spartan\\$\SpartanStudentEdition\install.cmd](http://smb-pub.ntnu.no\spartan$\SpartanStudentEdition\install.cmd)
(”Cancel” hvis du får spørsmål om ”Activate”)
- Innlevering utenfor R1 (som vanlig)

Spartan grensesnitt:



Kvantemekanisk modellering av reaksjonen $\text{ClCH}_3 + \text{Br}^- \rightarrow \text{Cl}^- + \text{CH}_3\text{Br}$ (Øving 2)