

FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk: Kort orientering om undervisningsopplegget i kjemisk fysikk, mars/april 2012.

Plan:

Uke 13+15: 4 x 2 forelesningstimer (27. mars i S2, 29. mars i R2, 28. mars og 11. april i R5)

Uke 15+16: 3 regneøvinger (12., 17., 18., 19. og 24. april i datasal BU2-123 og BU2-153)

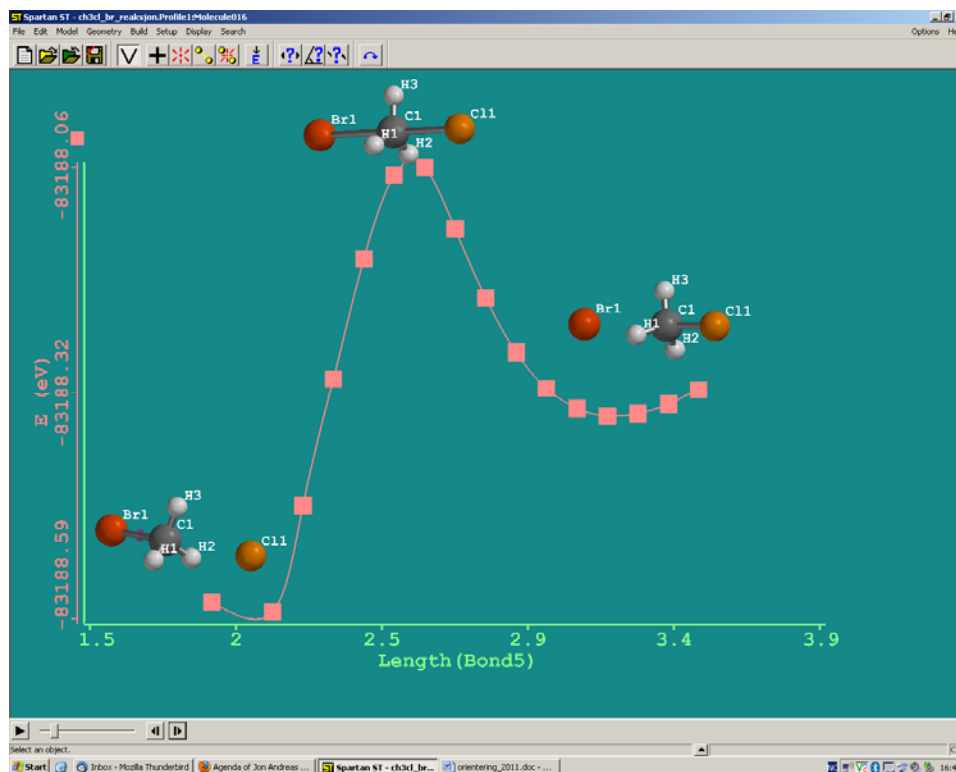
Stikkord:

- 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 – og skriv inn
[\\smb-pub.nt.ntnu.no\spartan\\$\SpartanStudentEdition\install.cmd](http://smb-pub.nt.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)