

Föreläsningsplan

Alla hänvisningar till Atkins & de Paula, "Physical chemistry", 9:e uppl.

Föreläsning	Förberedelse*	Kapitel
1 Introduktion, historik, kvantisering, våg-partikel-dualitet, vågfunktioner, Borns tolkning.	Avsnittet Materievågor från kursen Fysik TB.	7:1-4
2 Schrödingerekvationen, egenvärden, egenvektorer, lösningar för en fri partikel.	Egenvärden, egenfunktioner, linjära operatorer, andra ordningens differkvationer, komplexa tal	7:5
3 Heisenbergs osäkerhetsrelation, dubbelspaltexperimentet. Lösningar till Schrödingerekvationen, partiklar i en- och två-dimensionella lådor, degeneration.	7:6-7, Kvantmekanik från Fysik TB	7:6-7 8:1-2
4 Kvantmekaniska tolkningar, Modellsystem, tunnling, vibration.	Harmonisk svängning från Mekanikkursen, 8:4	8:3-5
5 Rotation i 2D och 3D, vektormodellen. spinn.	Rörelsemängdsmoment från Mekanikkursen	8:6-8
6 Väteliknande atomer.	Avsnitten om atomer från Fysik TB. 9:1	9:1-3
7 Flerelektronatomer, termer.	9:4 (i <i>b</i>) endast om Pauli-principen).	9:4, 9:9-10
8 Molekylorbitaler, approximationer.	10:1, (10:2)	10:3-4
9 Polyatomära system, Variationsprincipen, Hückel-approximationen.	10:5a,b 9:5	10:5-8
10 Gästföreläsning Patrick Norman: Kvantkemiska beräkningar.		
11 Introduktion till spektroskopi, Vibrations- och rotationsspektroskopi, Ekvipartitionsprincipen.	12:1, 12:8, 12:13 2.2	12:2, (12:3-5), 12:8-10, 12:13-14
12 Elektronövergångar och elektronspektroskopi	13:1 9:6-7	13:2-3 10:4e
13 Fluorescens och fosforescens Magnetresonans	13:4a, 14:1-2, Magnetism och magnetfält från Fysik TB	13:4-5 14:1-4
14 Magnetresonans		14:5-7
15 NMR-tekniker/ Statistisk termodynamik	15:1 (ssk Boltzmann-fördelning)	14:8-14 15:1-2
16 Statistisk termodynamik		15:3-7

* Det som anges i denna kolumn är nödvändiga förkunskaper inför föreläsningen, och kommer på sin höjd att gås igenom summariskt, eller inte alls. Övriga avsnitt i Atkins som anges i anslutning till varje föreläsning förutsätts vara genomlästa, men kommer att behandlas mer ingående.

Lektioner

Inför varje lektion förväntas Förberedelse-uppgifterna vara lösta och förstådda, och det är givetvis lämpligt att på egen hand försöka lösa även lektionsuppgifterna – även om några är ganska knepiga...!

"P" = Problems och "E" = Exercises i Atkins, "X" = extrauppgifter på stencil.

Lektion	Förberedelse	Uppgifter	Förslag för egna övningar
1	Kvantmekanikens grunder	P7.17, P7.19, P7.4, P8.1, P7.20	P7.16, P7.22, P7.25, P7.26
2	Enkla tillämpningar	P8.21, P8.31	P8.2, P8.10, P8.24, P8.25
3	Atomstruktur	X2, P9.1, P9.13	E9.7, E9.26, P9.6, P9.18
4	Molekylstruktur	P10.2, P10.18, X4:1	P10.6, P10.10, E10.8, E10.10a, X4:2
5	Polyatomära system	X5c, P10.9	X5ab, P10.12, P10.26
6	Vibrationsspektroskopi	E12.23, P12.9	E12.18, P12.12, P12.24
7	Elektron-spektroskopi	X7a, P13.11, E13.15	P9.30, P13.1, E13.16, P13.13, P13.16
8	Magnetresonans	X8, P14.23, P14.5 (kvalitativt)	P14.1, P14.15, P14.9
9	Statistisk termodynamik	P15.14, P15.7	P15.19, P15.11, E15.4, P15.6