

Föreläsningsplan

Alla hänvisningar till Atkins & de Paula, "Physical chemistry", 10:e uppl.

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

* 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, "E" = Exercises, "I" = Integrated activities i Atkins, "X" = extrauppgifter på stencil.

Lektion	Förberedelse	Uppgifter	Förslag för egna övningar
1 Kvantmekanikens grunder	E7C.8, E7A.6, E7C.9a, P7B.1	P7C.3, P7C.5, P7B.4, P8A.1, P7C.2	P7C.11a,b, P7C.10, P7C.11c, P7C.12
2 Enkla tillämpningar	E8A.3, E8A.5, E8B.1, E8B.2, P8B.4	P8C.3, P8A.2	P8B.1, P8A.8, P8C.7
3 Atomstruktur	E9A.3, P9A.6, E9A.7, E9C.7	X2, P9C.1, P9A.1	E9A.4, E9C.11, P9C.6, P9A.6
4 Molekylstruktur	E10C.1, E10D.3, E10B.1, E10C.6	P10C.1, P10B.3, X4:1	P10B.2, P10.5, E10D.2, E10B.2, X4:2
5 Polyatomära system	E10E.1, E10E.3	X5c, P10E.1	X5ab, P10E.2, P10E.8
6 Vibrationsspektroskopi	E12D.2, E12E.2	E12E.1, P12D.3	E12D.4, P12D.4, P12D.7
7 Elektron-spektroskopi	E12A.11, E12A.3	X7a, P13B.1, E13A.11a	P13A.8, P12A.10, P13A.2, E13A.11b, P13C.1, I13.5
8 Magnetresonans	E14A.5, E14A.7, E14B.2	X8, X9	X10
9 Statistisk termodynamik	E15A.3, E15B.1, E15B.13	P15A.1, P15B.3	E15A.6, P15B.7, P15A.4, P15D.1