

Föreläsningsplan 2021

Siffrorna i läsanvisningarna hänvisar till kapitel ("topics") i Atkins, de Paula & Friedman; "Physical chemistry: Quanta, matter and change", 2:a uppl.

Föreläsning	Förberedelse*	Kapitel	
1	Introduktion, historik, kvantisering, våg-partikel-dualitet, vågfunktioner, Borns tolkning.	1, 3, Avsnittet Materievågor från kursen Fysik TB.	4, 5
2	Schrödingerekvationen, egenvärden, egenvektorer, lösningar för en fri partikel.	Egenvärden, egenfunktioner, linjära operatorer, andra ordningens diffekvationer, komplexa tal	6, 7
3	Heisenbergs osäkerhetsrelation, dubbelspaltexperimentet. Lösningar till Schrödingerekvationen, partiklar i en- och två-dimensionella lådor, degenerering.	8.1-2, Kvantmekanik från Fysik TB	8, 9 11
4	Kvantmekaniska tolkningar, Modellsystem, tunnling, vibration.	Harmonisk svängning från Mekanikkursen	10, 12
5	Rotation i 2D och 3D, vektormodellen. spinn.	Rörelsemängdsmoment från Mekanikkursen	13, 14
6	Väteliknande atomer.	Avsnitten om atomer från Fysik TB	17, 18
7	Flerelektronatomer, termer.	20	19-21
8	Molekylorbitaler, approximationer.	22	23
9	Polyatomära system, Variationsprincipen, Hückelapproximationen.	Determinanter (algebra)	24-26
10	Kvantkemiska beräkningar. Inställt, ej i schemat!		
11	Introduktion till spektroskopi, Vibrations- och rotationspektroskopi, Ekvipartitionsprincipen.	2.3b, 34, 40	41-44
12	Elektronövergångar och elektronspektroskopi		45
13	Fluorescens, fosforescens, fotokemi		46, 93
	Magnetresonans	Magnetism och magnetfält från Fysik TB	47
14	Magnetresonans		48
15	NMR-tekniker		49
	Statistisk termodynamik	2.3 Boltzmann-fördelning	51-52
16	Statistisk termodynamik	2.2	53-54

* Det som anges i denna kolumn är nödvändiga förkunskaper inför föreläsningen, och som antingen ingår i tidigare kurser, eller som inte kommer att gås igenom.

Lektioner

Inför varje lektion förväntas Förberedelseuppgifterna 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, "F" = Integrated activities i Atkins, "X" = extrauppgifter på stencil.

Lektion	Förberedelse	Uppgifter	Förslag för egna övningar
1 Kvantmekanikens grunder	E8.1, E4.2, E8.3, P5.8a,b	E6.3a, E6.3b, P5.1, P11.1, P6.2	P7.5, P7.2, P7.6, P7.7
2 Enkla tillämpningar	E9.3, E9.5, E12.1, E12.2, P12.3	P13.6, P9.8	P12.2, P10.4, P14.8, P11.2
3 Atomstruktur	E17.4, E18.4, E18.6, E21.8	X2, P17.1, P18.3a	P18.2, E21.12, P21.4, P18.7
4 Molekylstruktur	E24.1, E25.3*, E23.1a, E24.6	P24.1, P23.3, X4:1	P23.2, P26.2, E25.2, E23.2, X4:2
5 Polyatomära system	E26.1, E26.3	X5c, P26.1	X5ab, P26.3, P26.9
6 Vibrationsspektroskopi	E43.2, E44.2	E44.1, P43.1	E43.4, P43.2, P43.5
7 Elektronspektroskopi	E40.9, P45.1, E40.2	X7a, P46.1, E45.11a, P45.8	P40.14, P45.3, E45.11b, P40.11, F9.5
8 Magnetresonans	E47.5, E47.9, E48.2	X8, P48.3, X9	P47.2, P48.1, X10
9 Statistisk termodynamik	E51.3, E52.1, E52.13	P51.1, P52.3	E51.6, P52.7, P51.4, P54.1

*Till E25.3 Molekylorbitaldiagram för NO och SO.

