

Kemisk bindning, 6.0 hp

Chemical Bonding, 6.0 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFM82

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Andra halvår 2025

Fastställd av

Fastställandedatum

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå, eller
- på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.

Särskild information

Målgruppen är forskarstuderande som avlagt examen på avancerad nivå inom kemi, molekylär fysik eller motsvarande.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:

- uppvisa kunskap och förståelse genom att kunna redogöra för enkel kvantmekanisk teori och hur denna kan tillämpas för att härleda kvantisering och orbitalbegreppet samt för att utföra kvantkemiska beräkningar
- använda molekylorbitalteori för att förklara molekylers elektronstruktur
- beskriva kovalent bindning i molekyler baserat på molekylorbitalteori
- diskutera olika former av kemisk bindning och deras relevans för ämnens egenskaper
- demonstrera färdighet och förmåga genom att kunna utföra enkel datorbaserad molekylmodellering
- tillämpa symmetriargument och grupp teori för att klassificera molekylgeometrier, orbitaler och vibrationsmoder samt för att förklara uppkomsten av elektronexcitationsspektras och vibrationsspektras utseende

Värderingsförmåga och förhållningssätt förmedlas genom medvetandegörande av teoretisk modellering som ett komplement eller ersättning till annan experimentell verksamhet.

Kursinnehåll

Kursen behandlar hur molekylers elektronstruktur och geometriegenskaper bestäms av resultaten från den elementära kvantmekaniska teorin, samt hur molekylernas egenskaper avspeglar sig i elektroniska och strukturella egenskaper hos olika ämnen. Kursen diskuterar kemisk bindning utifrån molekylorbitalbegreppet och förklarar orbitalernas utseende och spektra från infraröd- och ramanspektroskopi utifrån symmetrihänsyn, samt förmedlar färdigheter i att hantera moderna molekylmodelleringsverktyg.

Kvantmekanik: Schrödingerekvationen, energikvantisering, vågfunktioner, väteatomen, atomorbitaler, orbitalenergidiagram.

Kvantkemi: diatomära molekyler, molekylorbitaler, kemiska bindningstyperna kovalent bindning, polär kovalent bindning och jonbindning, större molekyler, Hückelapproximationen, beräkningskemi.

Symmetri: operationer och symmetrielement, symmetriklassificering, punktgrupper, karaktärstabeller, tillämpningar på molekylorbitaler, elektronexcitations- och vibrationsspektroskopi.

Laborationskurs där molekylmodellering utförs samt vibrationsspektra undersöks.

Undervisnings- och arbetsformer

Undervisnings- och arbetsformer i denna kurs är föreläsningar, lektioner och laborationer.

Examination

Examination sker genom en skriftlig tentamen samt genom två laborationsrapporter. Närvaro vid laborationerna, genomförda laborationer och godkända laborationsrapporter är obligatoriskt för godkänd kurs.

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

Kurslitteratur är kursboken Peter Atkins, Julio de Paula, James Keeler: Atkins' Physical Chemistry, Oxford University Press, och den vetenskapliga artikeln Emma M. Björk et al., Formation of block-copolymer-templated mesoporous silica, Journal of Colloid and Interface Science 521/2018/183-189, <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2018.03.032>, samt laborationsinstruktioner.

Kompletterande kurslitteratur är Yves Jean François Volatron: An introduction to molecular orbitals, Oxford University Press.

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare.