

KJM5600/KJM9600

Rapport, Høsten 2022

Thomas Bondo Pedersen

Hylleraas-senteret/Seksjon for Teoretisk Kjemi, Kjemisk Institutt

Undervisere

Emneansvarlig, foreleser og gruppelærer: Thomas Bondo Pedersen

Bakgrunn

Forelesninger og gruppetimer (fem per uke) ble avholdt fysisk i seminarrom Avogadro og Berzelius.

Undervisning

Det var fem påmeldte studenter, herav en stipendiat (KJM9600). Tre av studentene fulgte undervisningen mens to studenter sluttet å møte opp etter noen uker. De tre studentene var svært motiverte og vi var ferdig med pensum da det var 4–5 uker tilbake av semesteret. Da valgte vi å gå ut over pensum for å studere molekylære egenskaper som vibrasjoner og vekselvirking med elektromagnetiske felter.

En av masterstudentene valgte i tillegg å skrive et computer program til kvantekjemiske beregninger fra bunn, mens den andre masterstudenten studerte teorien for periodiske systemer (krystaller, overflater) og ga et glitrende foredrag om dette. Stipendiaten studerte et ganske omfattende forskningsarbeide om *Natural Bond Orbitals* (NBO) som brukes til å analysere avanserte kvantekjemiske beregninger i vanlige kjemiske termer (f.eks. lone pairs, enkel- og dobbel-bindinger), og ga to foredrag om dette, inkludert presentasjon av egen kode til illustrasjon av sentrale deler av NBO teorien.

Tiltak

Foreleseren blir leder av Hylleraas-senteret i perioden 01.07.2023 - 01.11.2027 og skal derfor ikke undervise emnet i samme periode. Det er derfor ikke planlagt endringer.

Eksamen

De tre aktive studentene var meldt på muntlig eksamen. En av de ble syk. De to studentene som fullførte eksamen fikk karakter A og “bestått” (stipen-

diaten).