



## MOLEKYLFYSIK

FBR030

### Molecular Physics

**Antal högskolepoäng:** 7,5. **Betygskala:** TH. **Nivå:** A (Avancerad nivå).

**Undervisningsspråk:** Kursen ges på begäran på engelska. **Valfri för:** F4, F4asf.

**Kursansvarig:** Frederik Ossler, frederik.ossler@forbrf.lth.se, Fysik, kurslaboratoriet.

**Förutsatta förkunskaper:** FAF160 Fysik I våglära och atomfysik och FAF240

Kvantfenomen och nanoteknologi. **Prestationsbedömning:** För att bli godkänd i kursen måste studenten erhålla godkänt resultat på skriftlig tentamen, laboration,

inlämningsuppgifter. Betyget erhålls genom tentamen. Väl genomförda

inlämningsuppgifter ger extra poäng på tentamen. **Övrigt:** Kursen ges nästa gång ht 2007.

**Hemsida:** <http://www.forbrf.lth.se>.

#### Syfte

Kursen syftar till att ge en både teoretiska och praktiska delar som behandlar grundläggande molekylteori och praktisk molekylspektroskopi.

#### Mål

##### *Kunskap och förståelse*

För godkänd kurs skall studenten

kunna beskriva hur en molekyl växelverkar med elektromagnetisk strålning via elektriska dipolövergångar och Ramanspridningsprocesser.

kunna beskriva hur temperatur och molekylsymmetri kan inverka på växelverkan.

kunna förklara principerna för växelverkan med rotations-, vibrations-, och elektroniska tillstånd för några av de enklare molekylerna.

kunna beskriva och jämföra fördelar och nackdelar med olika tekniker för olika våglängdsområden från mikrovågor till röntgen

##### *Färdighet och förmåga*

För godkänd kurs skall studenten

kunna analysera molekylspektra för för diatomära och polyatomära molekyler.

kunna beräkna olika parametrar såsom t.ex temperatur och tröghetsmoment från ett spektrum av en diatomär molekyl.

kunna bestämma symmetriegenskaperna hos diatomära och några enklare polyatomära molekyler utgående från analys av olika spektra för t.ex IR och Ramanspridning.

kunna skriva laborationsrapporter med en genomgripande analys av mätdata.

skriftligt och muntligt sammanfatta en projektliknande inlämningsuppgift. Inlämningsuppgiften kan vara av utredande karaktär på hur molekylspektroskopi kan tillämpas inom vetenskap, industri och samhälle.

kunna tillgodogöra sig den väsentliga informationen i en avancerad engelsk lärobok.

kunna lösa uppgifter som kräver utnyttjande av information från andra källor än kursmaterialet, t.ex. via Internet och databaser.

### **Innehåll**

Introduktion, repetition av atomstruktur, grundläggande molekylorbitalteori (metod av linjärkombination av atomorbitaler, bindande och anti-bindande orbitaler, hybridisering av orbitaler, kovalenta bindningar, grundläggande molekylegenskaper som kan förklaras med dessa teorier), Born-Oppenheimer approximationen, spektralövergångar, urvalsregler, Franck-Condon principen och övergångsintensiteter, termbeteckningar. Mikrovågsspektroskopi: molekylrotation av enkla och polyatomära molekyler, tekniker för rotationsspektroskopi. Infrarödsspektroskopi: Vibrationer hos enkla och polyatomära molekyler, infrarödtekniker; teori för Ramanspektroskopi. Elektronisk spektroskopi: teori och tekniker.

Laboration: Datorsimulering av enkla molekylspektra och anpassning till mätdata.

Demonstrationer: Emissionsspektroskopi, Laser-inducerad fluorescens.

### **Litteratur**

Banwell, C.N and McCash, E: Fundamentals of Molecular Spectroscopy, Mc-Graw-Hill, 1994, och utdelat material.