

# TFYA78 Molekylfysik

## En kurs i spektroskopiska grunder

Spektroskopi: Studiet av växelverkan mellan materia och elektromagnetisk strålning.

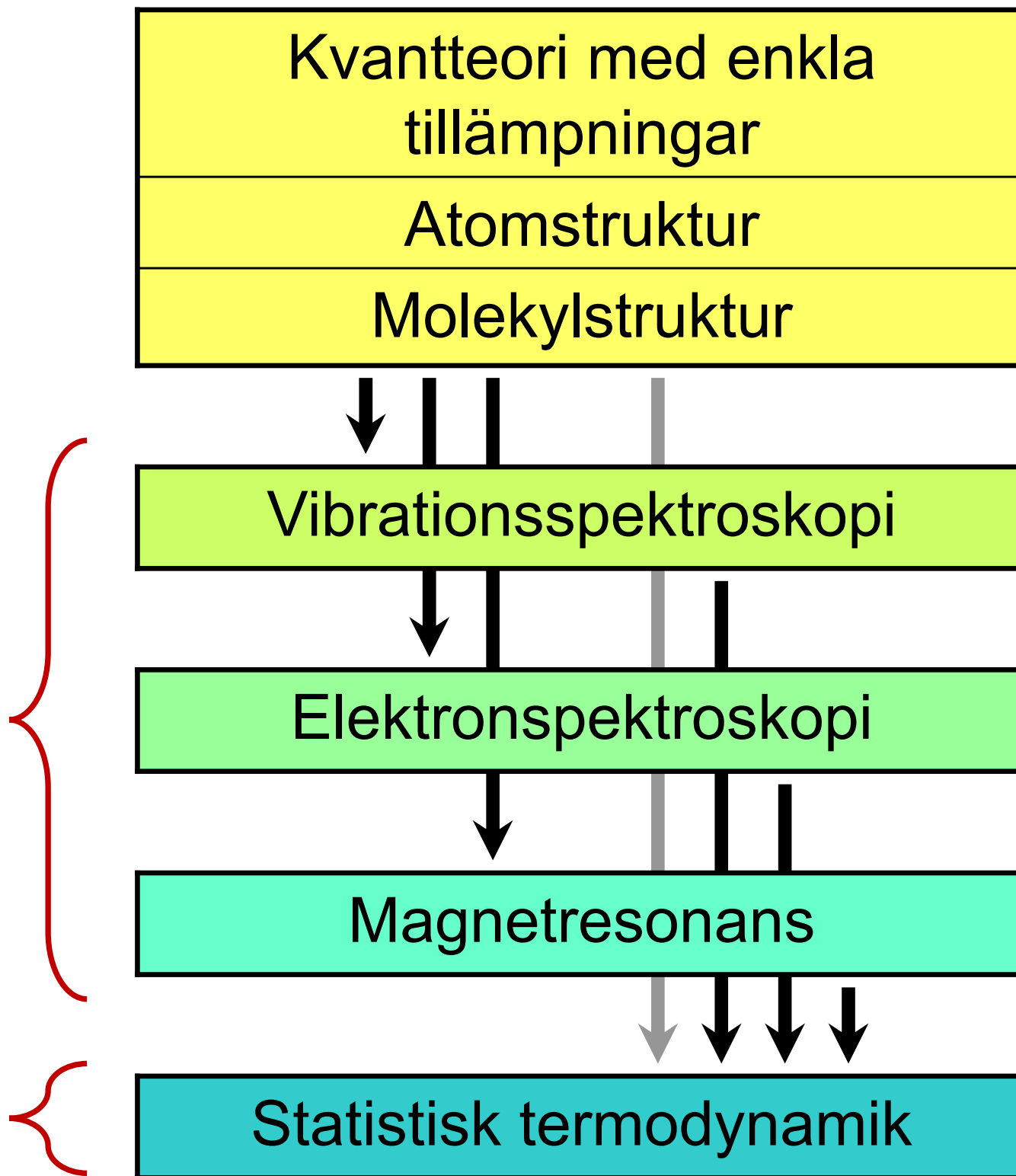
Av (lat.) *specere* : att se, betrakta, och (gr.) *skopein* : undersöka

# Kursens innehåll

Familjer av metoder

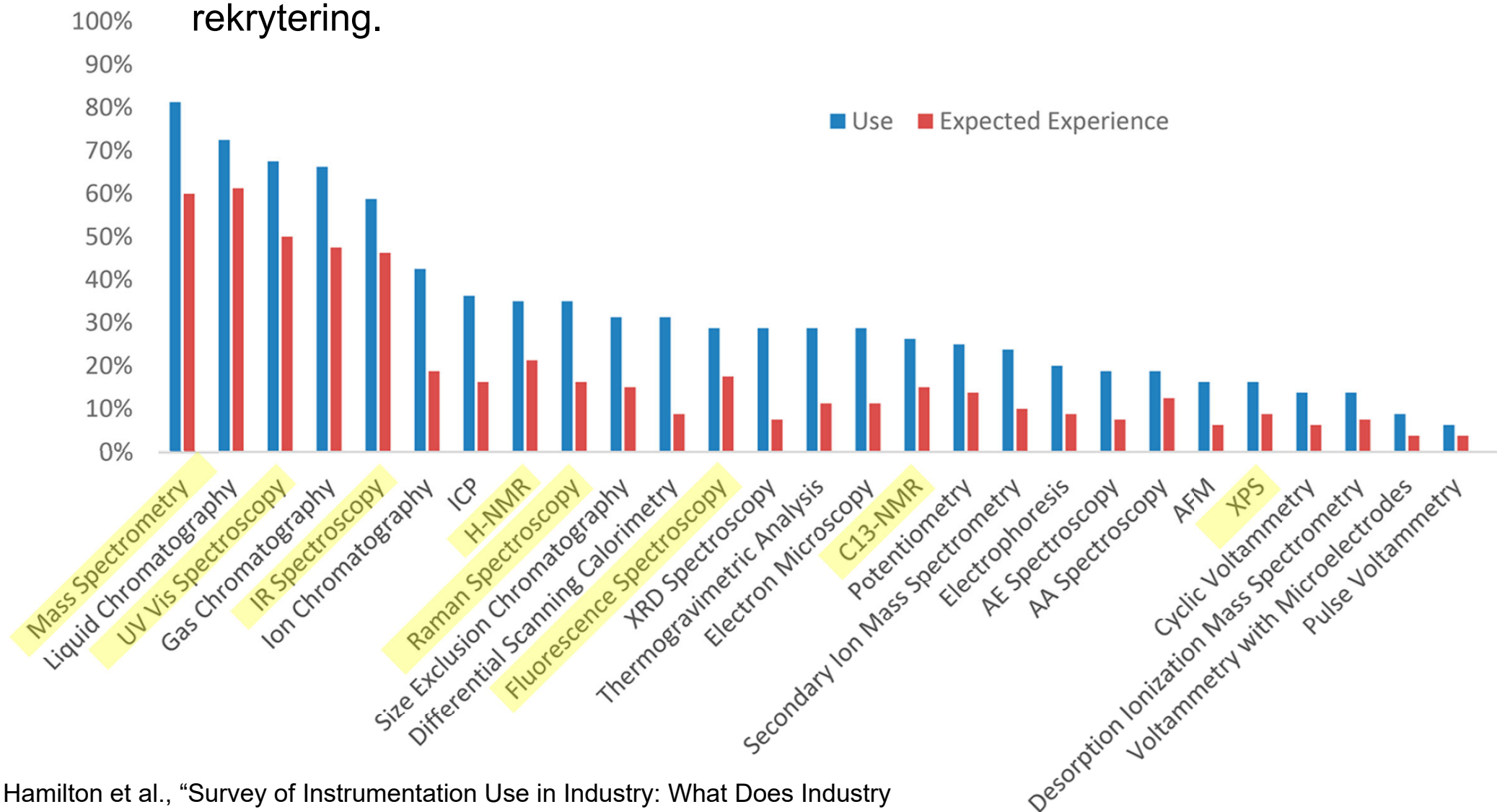
- Vitt spridda
- Många varianter

Länk mellan  
kvantmekanik och  
termodynamik  
( $P$ ,  $V$ ,  $T$ , ...)



# Har man användning för spektroskopi?

Andel företag inom kemisk och bioteknisk industri ( $N = 80$ ) som anger användning (i blått) och förväntad erfarenhet (rött) av olika tekniker vid rekrytering.



# Kursens lärandemål:

Kursen har som mål att studenten skall tillgodogöra sig grundläggande kunskaper i kvantmekanik, kunna tillämpa sambanden mellan kvantmekaniska beskrivningar och spektroskopiska metoder för bestämning av struktur hos atomer och molekyler, samt kunna göra grundläggande populationsberäkningar i kvantmekaniska system.

Efter genomförd kurs skall studenten kunna:

- Redogöra för samt tillämpa grundläggande kvantmekaniska resonemang och analyser på modellsystem och enkla atom- och molekylmodeller
- Förklara spektroskopiska metoder och resultat i termer av kvantmekaniska principer, samt att kvalitativt och kvantitativt analysera resultat från atom- och molekylspektroskopi
- Beräkna fördelningar mellan nivåer i kvantmekaniska system med hjälp av grundläggande statistisk termodynamik

# Förkunskaper

I kursen används stoff från tidigare kurser i hög grad:

## Matematik

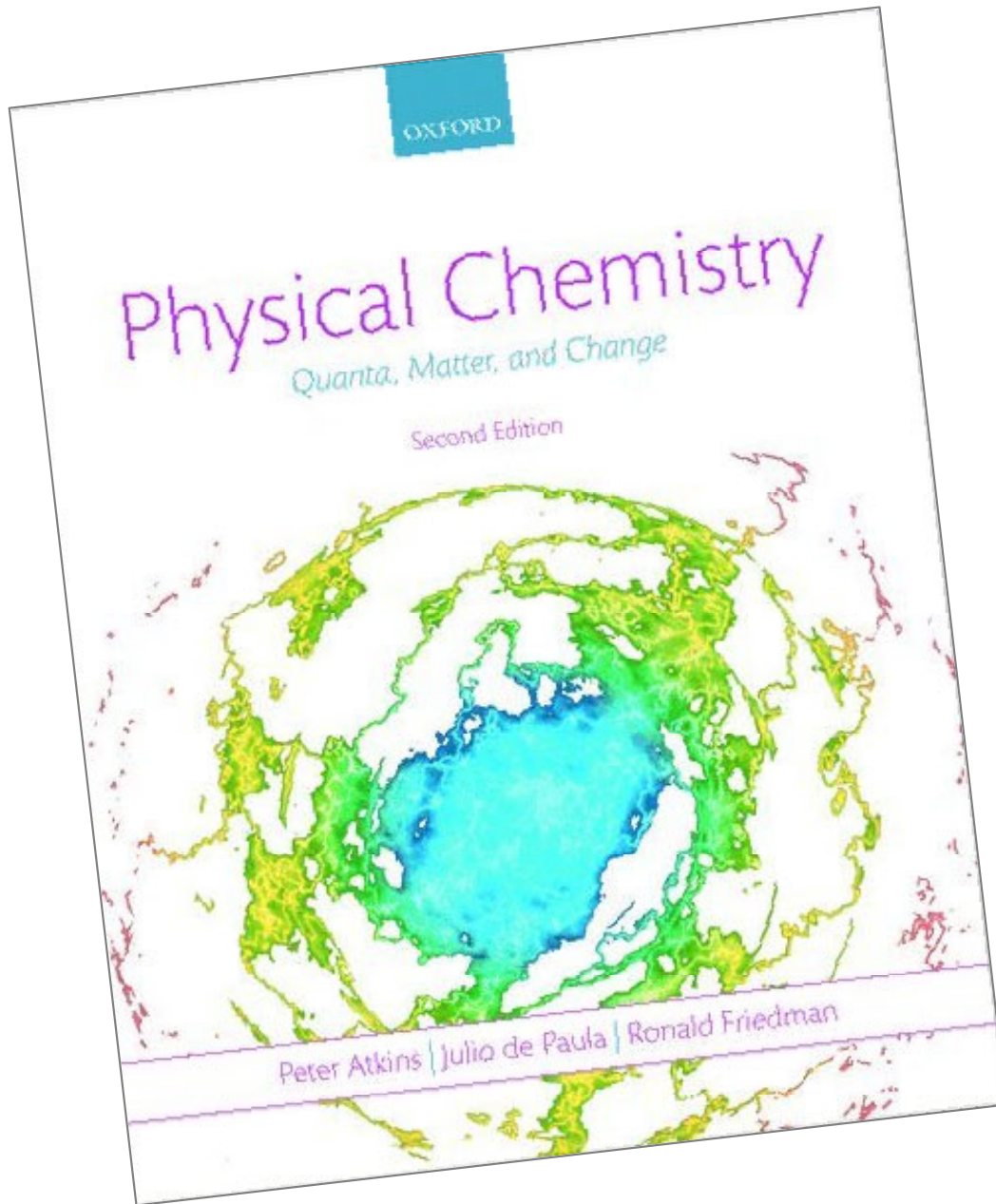
Analys (en- och flervariabel)  
Linjär algebra  
Sannolikhetslära och statistik

## Fysik

Mekanik  
Modern fysik

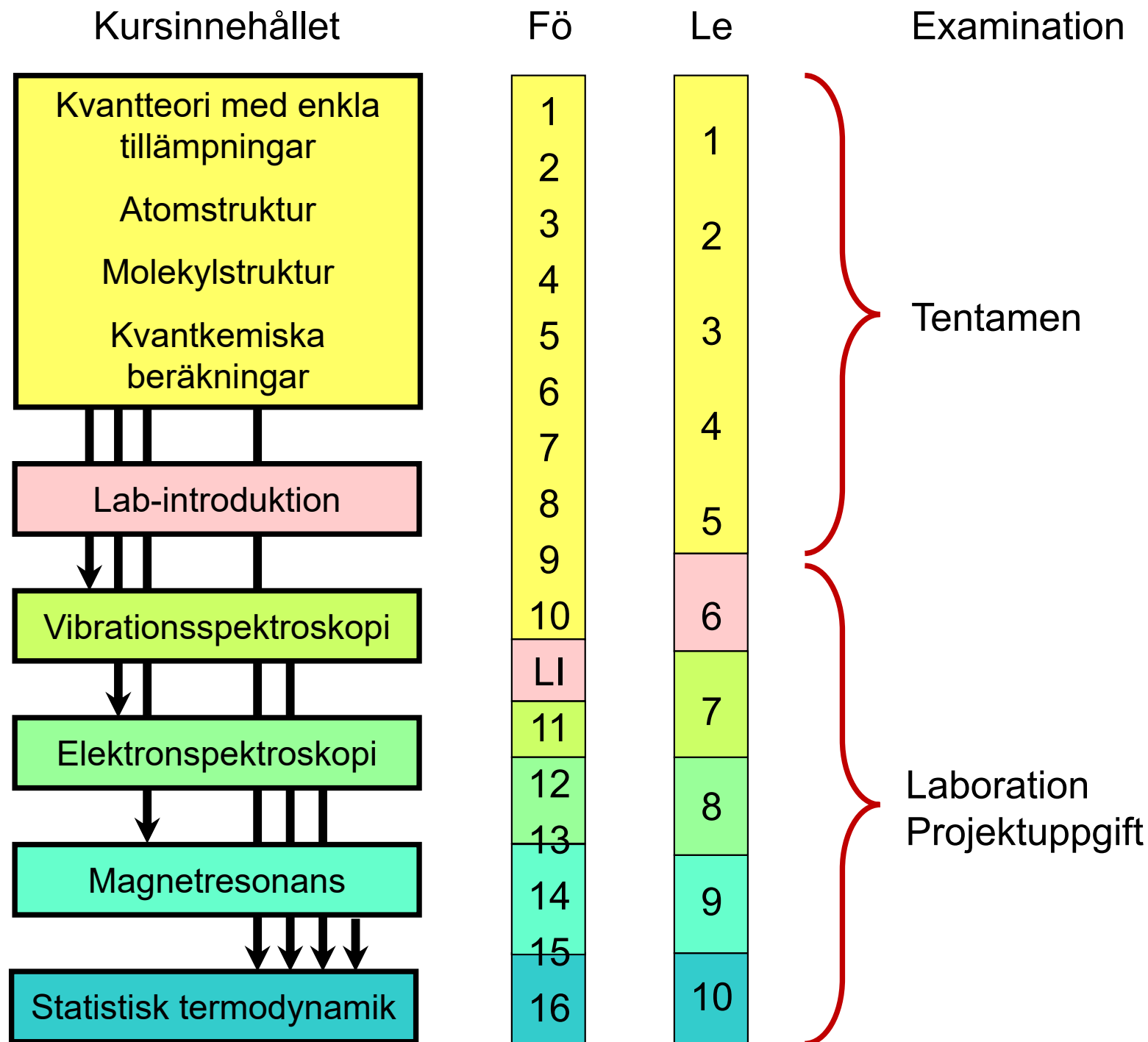
I planeringen på kurshemsidan [molekylfysik.se](http://molekylfysik.se)  
anges innehåll från tidigare kurser som utnyttjas  
på respektive föreläsning.

# Kurslitteratur



Atkins, de Paula & Friedman:  
*Physical Chemistry: Quanta,  
Matter, and Change*, 2 ed.

Gamla upplagor av Atkins:  
*Physical Chemistry* går  
utmärkt att använda.  
Läsanvisningar till dessa  
finns på hemsidan.



# Examination

|             |                           |             |                   |
|-------------|---------------------------|-------------|-------------------|
| <b>TEN1</b> | <b>Skriftlig tentamen</b> | <b>4 hp</b> | <b>U, 3, 4, 5</b> |
|-------------|---------------------------|-------------|-------------------|

Tenta på kvantmekanikdelen efter period 1, med 6 uppgifter á 4 p, 10 p krävs för godkänt.

Uppgifterna 1, 2 och 6 på gamla tentor (TFYA35) är relevanta för övning till tentan i denna kurs.

|             |                   |             |             |
|-------------|-------------------|-------------|-------------|
| <b>LAB1</b> | <b>Laboration</b> | <b>1 hp</b> | <b>U, G</b> |
|-------------|-------------------|-------------|-------------|

|             |                       |             |                   |
|-------------|-----------------------|-------------|-------------------|
| <b>UPG1</b> | <b>Projektuppgift</b> | <b>3 hp</b> | <b>U, 3, 4, 5</b> |
|-------------|-----------------------|-------------|-------------------|

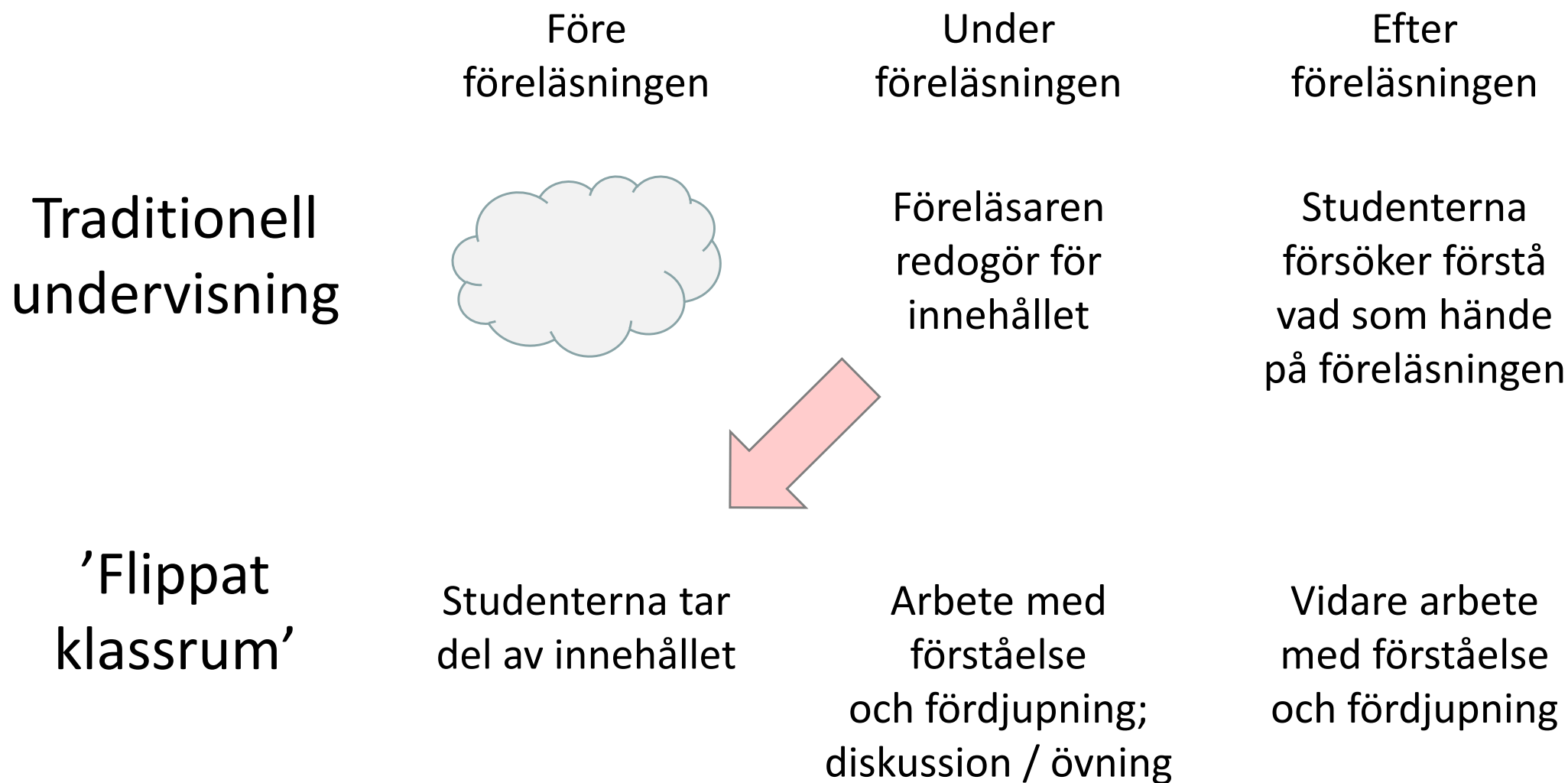
Arbete i grupper, varje grupp får en substans för undersökning, och ska redovisa metoder, resultat och slutsatser i en rapport.

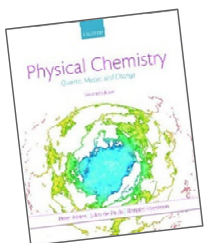
Detaljer kring projektet kommer att presenteras senare!



# Tanken med 'flippat klassrum'

(från engelskans 'flipped classroom')





Bra om man  
hinner först!

# Den röda tråden

Kommer knappast  
att fungera!



$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a}$$
$$e = 2,718281828$$
$$\int f(\varphi(x)) \varphi'(x) dx = \int f(u) du$$
$$x^m + a_{m-1}x^{m-1} + \dots + a_1x + a_0$$
$$x^n + b_{n-1}x^{n-1} + \dots + b_1x + b_0$$
$$P(A|B) = P(A \cap B)$$

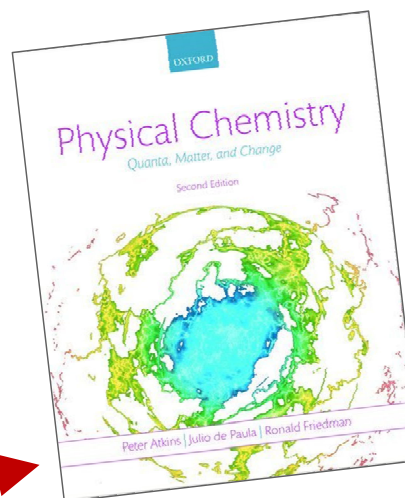


Videoor  
introducerar  
teorin.

Kört fast?

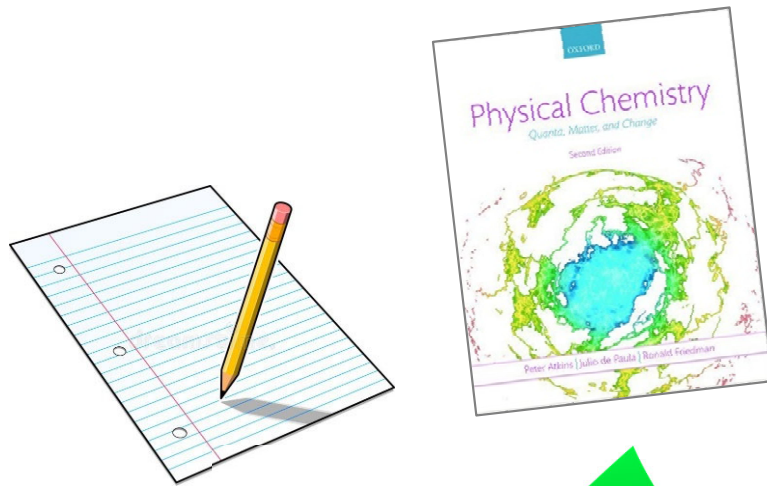
Räkne-  
övningar  
för att öva  
färdighet.

Föreläsningarna  
diskuterar och  
fördjupar innehållet  
i videorna.

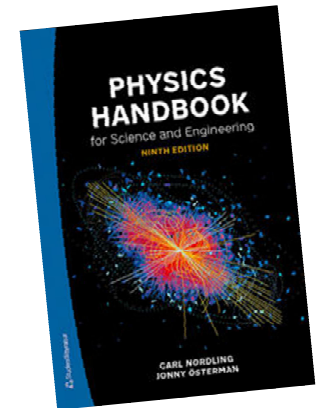
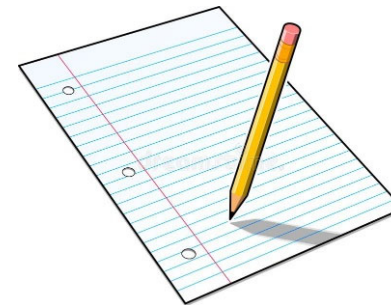


Läs litteraturen  
för att få  
sammanhang  
och exempel.

# Lämplig utrustning på lektionerna



"Jag vill lära mig hitta i  
Physics Handbook"



Formlerna i Physics Handbook presenteras utan relevant sammanhang, och läsning i PH bidrar därför inte det minsta till sådan teoribildning som krävs för att kunna använda kursinnehållet för att lösa problem!

# Vad säger den pedagogiska och ämnesdidaktiska forskningen?

Om problemlösning i allmänhet i fysik och kemi:

## Fungerande strategier:

- Sammanfatta relevant information
- Rita figurer
- Prova sig fram, även om målet är oklart
- Använd papper och penna

Se t.ex. G M Bodner, (2015).  
*Research on Problem Solving in Chemistry*.  
<https://doi.org/10.1002/9783527679300.ch8>

Om att lösa problem i kvantmekanik:

## Fungerande strategier:

- Repetera de matematiska grunderna
- Fokusera på *innebörden* av de icke-klassiska koncepten (våg-partikeldualitet, superposition, osäkerhetsrelationen, etc.)
- Arbeta själv igenom exempel och härledningar
- Visualisera där det är möjligt
- Diskutera med andra (studenter, lärare, ...)
- Fokusera på förståelse, inte utantillinlärning

Se t.ex. litteratur citerad i S C McAfee m.fl, (2025), *A review of research on the teaching and learning of quantum mechanics*.  
<https://doi.org/10.1039/D5RP00030K>

# Förra årets kursutvärderingar

## Synpunkter:

Svår kurs

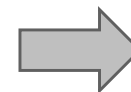
Svårt att klara tentan

## Åtgärder:

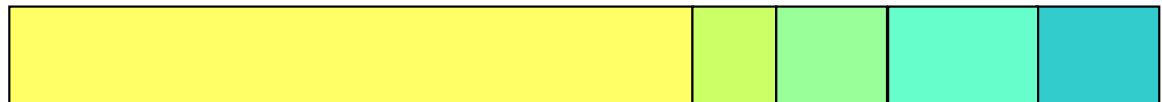
Kontinuerligt arbete med att förbättra kursen, tydliggöra innehållet och underlätta inläring.

Kursens plats i programmet motiveras av spektroskopi-innehållet, som kräver förberedelserna i kvantmekanik, vilket gör det svårt att minska innehållet genom att ta bort stoff och minska kursen.

**Kvantmekanik**



**Spektroskopi**



# Förra årets kursutvärderingar

## Synpunkter:

Fö och Le inte relevanta för projektarbetet

Projektet spiller över i VT1

## Åtgärder:

Fortsatt anpassning av innehåll och utformning av föreläsningarna till det mer tillämpade projektarbetet.

Återkoppling på inlämnade rapporter tidigare under HT2.

## Invändning:

Under kurstillfället 2024 var studenternas deltagande i undervisningen under HT2 lågt under både Fö och Le.

