

TFYA78 Molekylfysik

En kurs i spektroskopiska grunder

Spektroskopi: Studiet av växelverkan mellan materia och elektromagnetisk strålning.

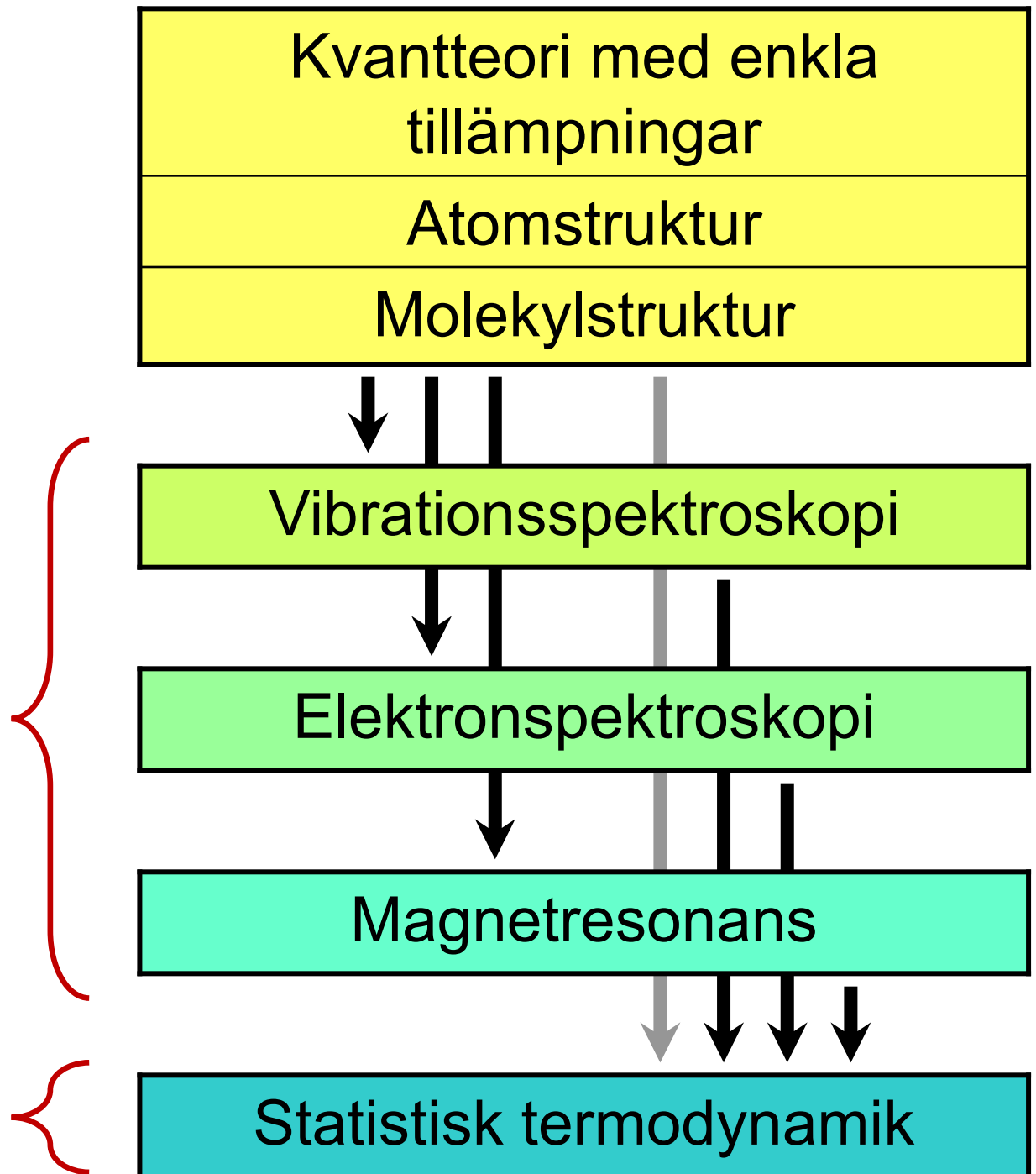
Av (lat.) *specere* : att se, betrakta, och (gr.) *skopein* : undersöka

Kursens innehåll

Familjer av metoder

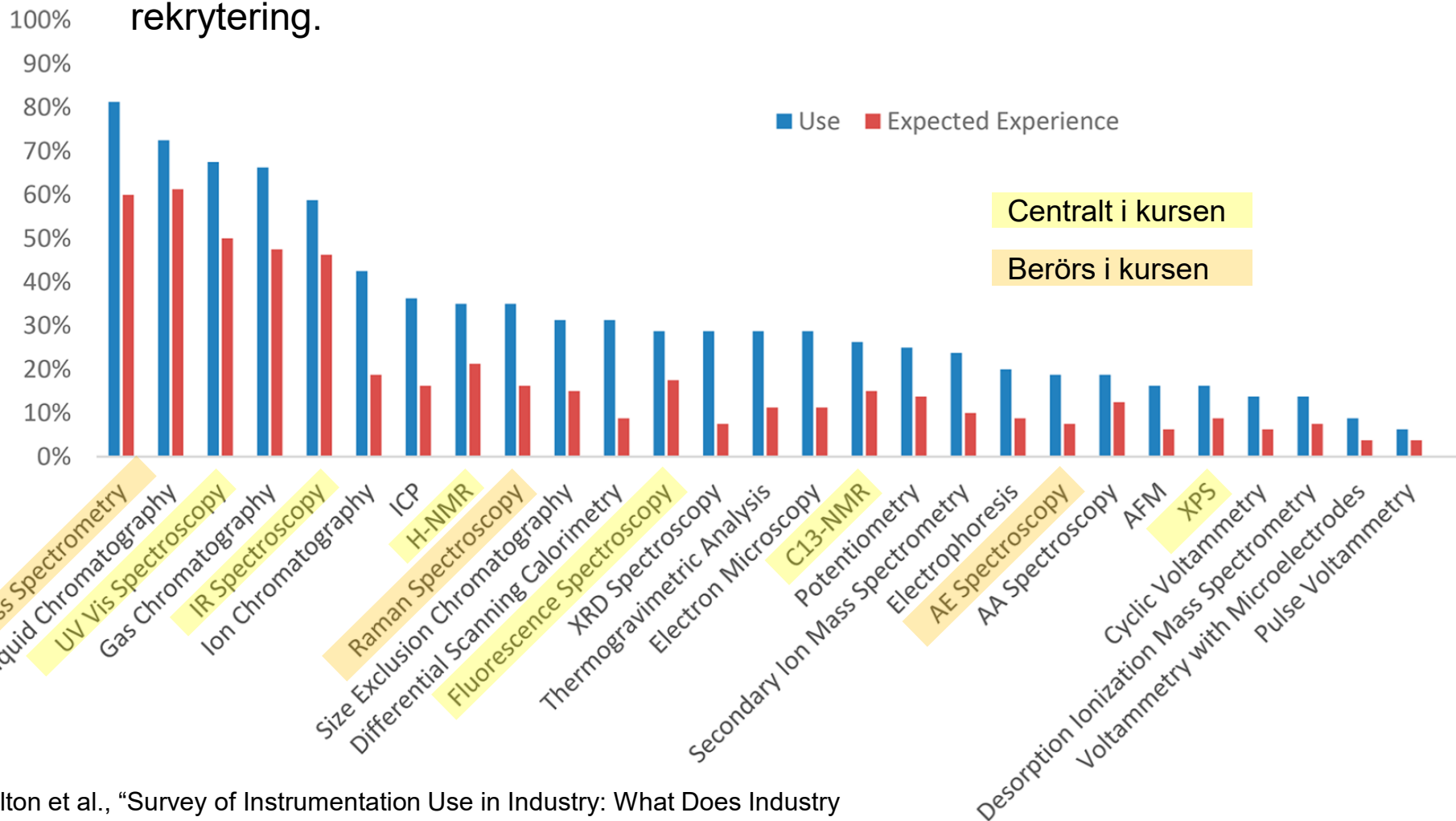
- Vitt spridda
- Många varianter

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

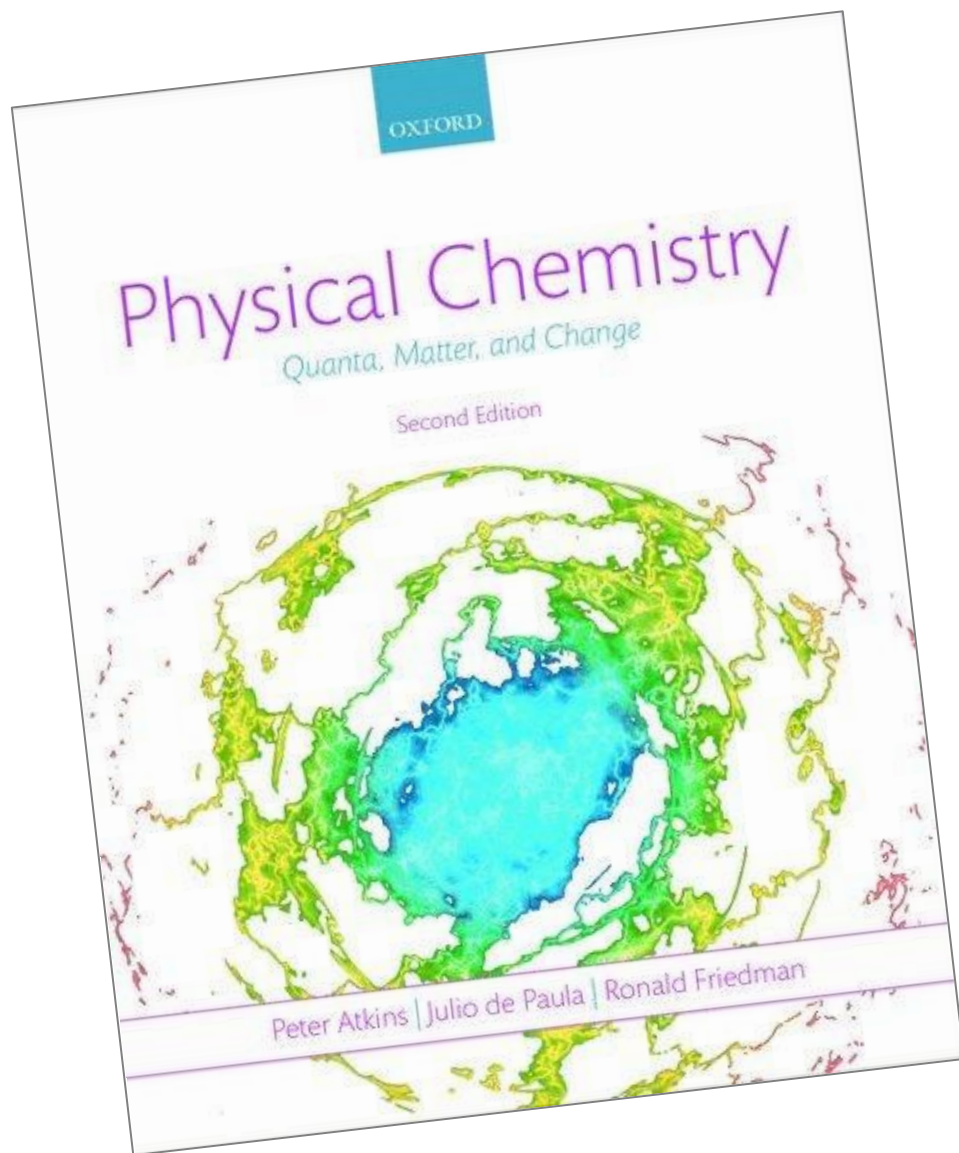
Analys (en- och flervariabel)
Linjär algebra
Sannolikhetslära och statistik

Fysik

Mekanik
(Modern) Fysik

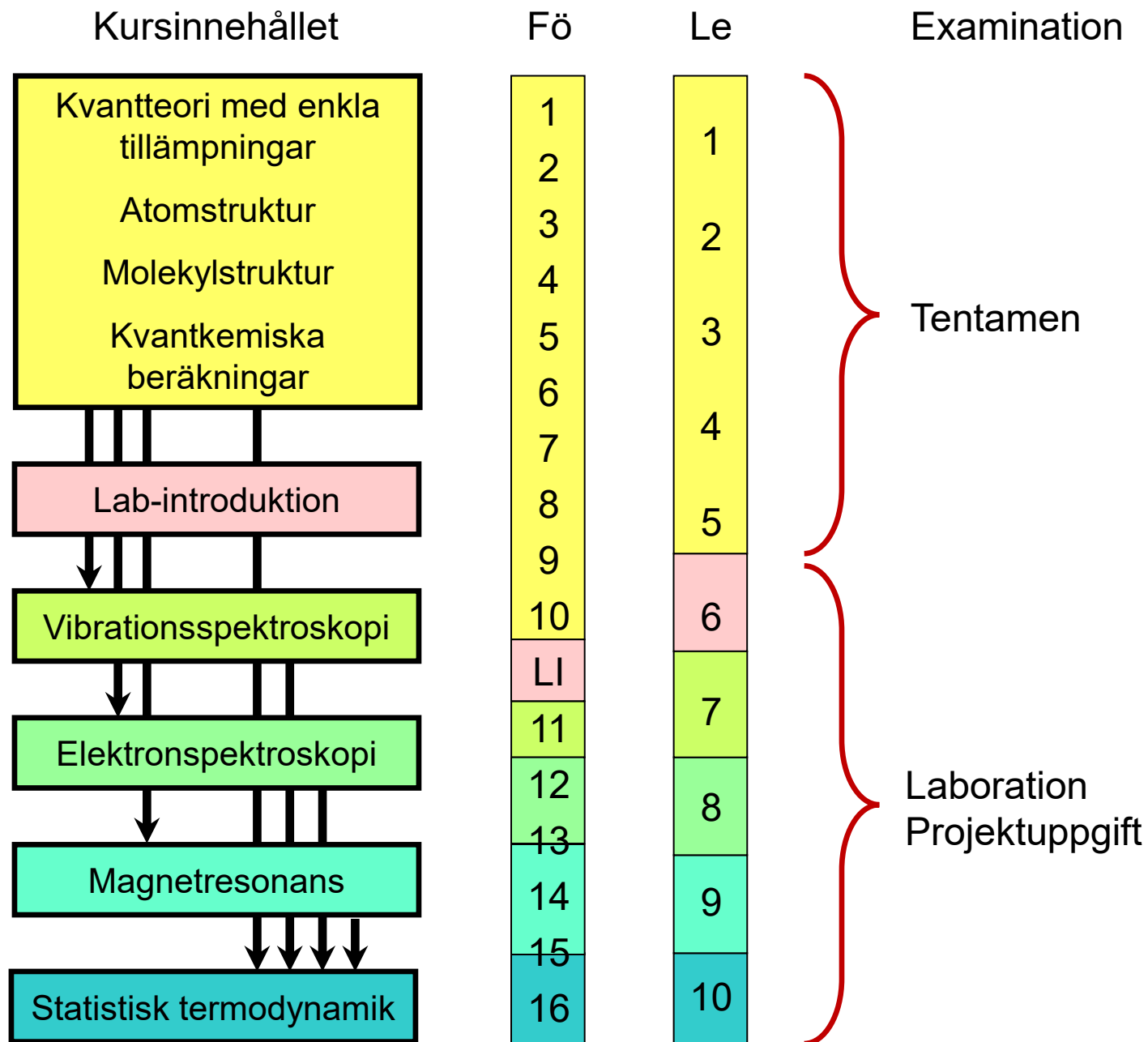
I planeringen på kurshemsidan molekylfysik.se
anges innehåll från tidigare kurser som utnyttjas
på respektive föreläsning.

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 (t.o.m. 10
upplagan).



Examination

TEN1	Skriftlig tentamen	4 hp	U, 3, 4, 5
-------------	---------------------------	-------------	-------------------

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.

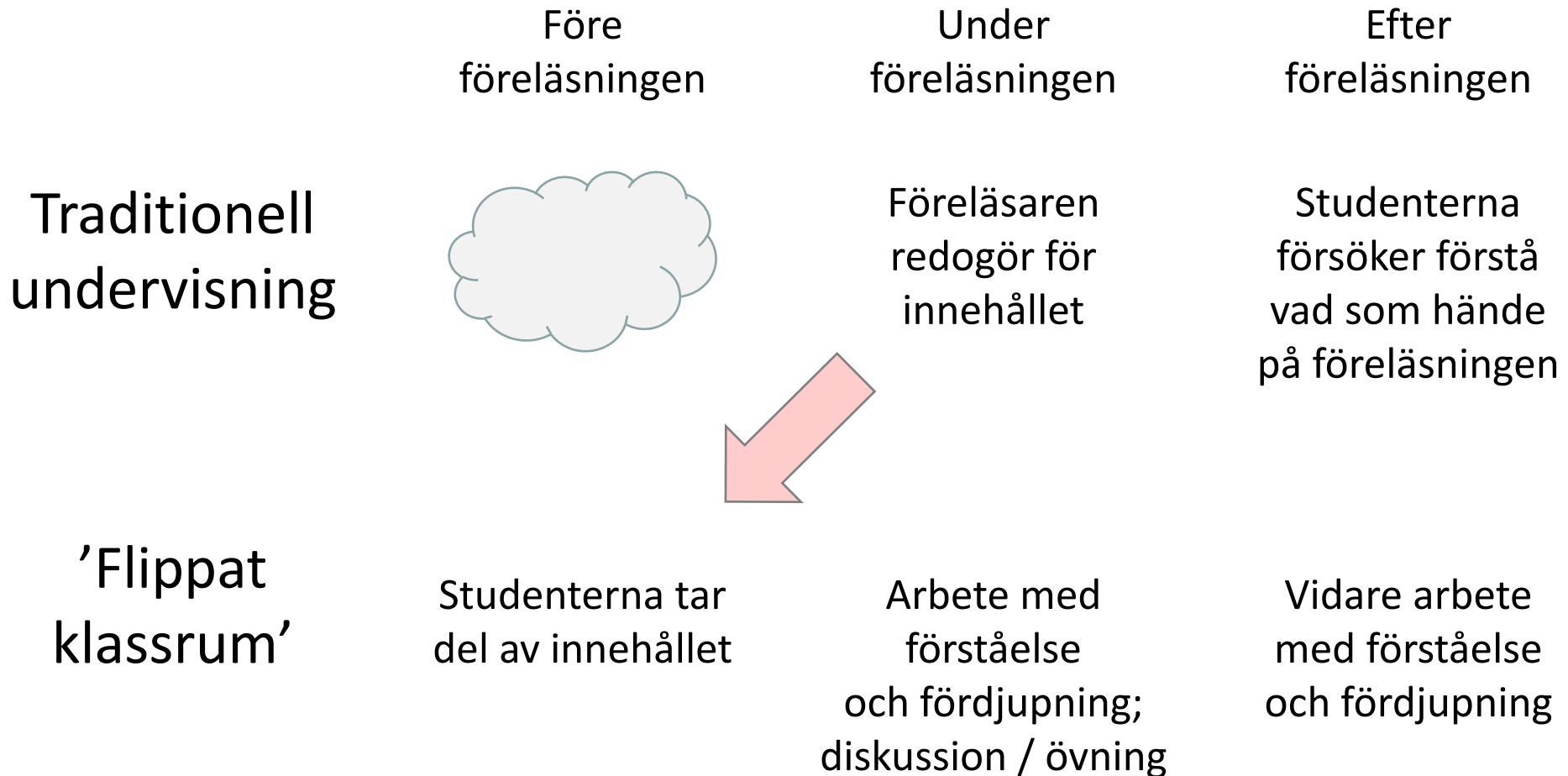
LAB1	Laboration	1 hp	U, G
UPG1	Projektuppgift	3 hp	U, 3, 4, 5

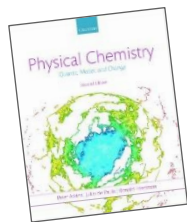
Arbete i grupper, varje grupp får en substans för undersökning, och ska redovisa metoder, resultat och slutsatser i en rapport.

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!



Videor
introducerar
teorin.



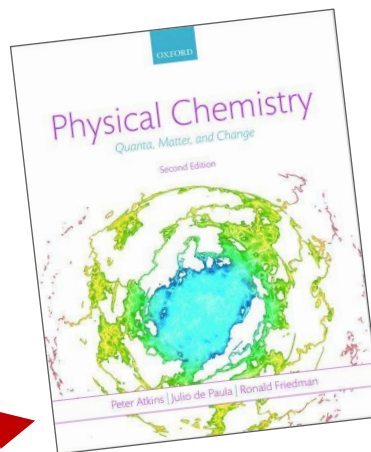
Föreläsningarna
diskuterar och
fördjupar innehållet
i videorna.



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

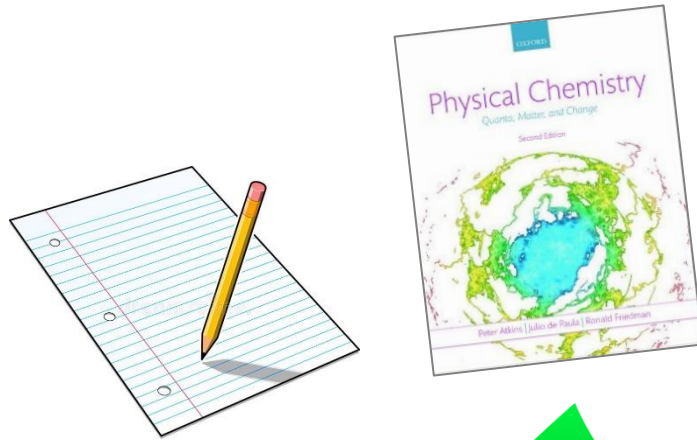
Kört fast?

Räkne-
övningar
för att öva
färdighet.

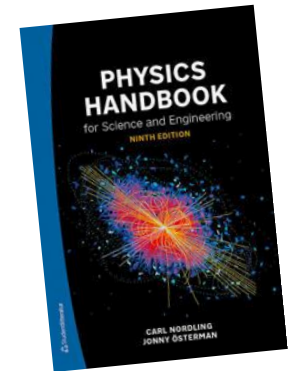
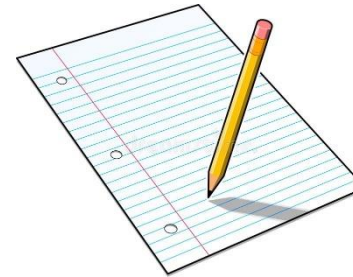


Läs litteraturen
för att få
sammanhang
och exempel.

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 utantillinläring

Se t.ex. litteratur citerad i S C McAfee m.fl, (2025), *A review of research on the teaching and learning of quantum mechanics.*

DOI: 10.1039/D5RP00030K,

eller I C Singh & E Marshman, (2015), *Review of student difficulties in upper-level quantum mechanics.*

DOI: 10.1103/PhysRevSTPER.11.020117

Förra årets kursutvärderingar

Allmänna synpunkter:

Svår kurs

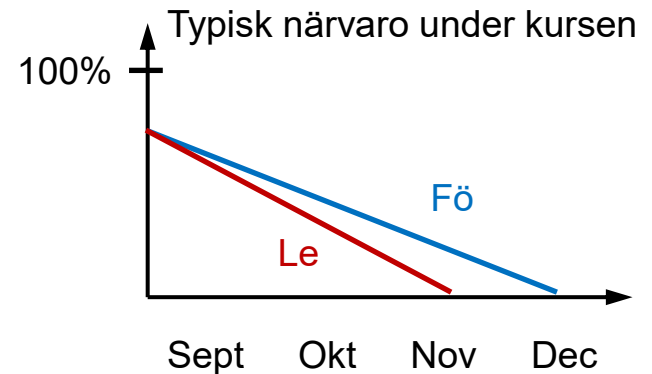
Svårt att klara tentan

Tidskrävande

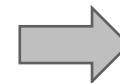
Åtgärder:

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

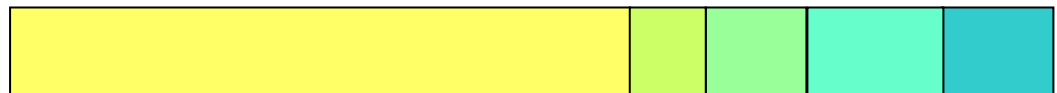
Kursens plats i programmet motiveras av spektroskopi-innehållet, som kräver förberedelserna i kvantmekanik, vilket gör det svårt att minska innehållet genom att ta bort stoff och minska kursen.



Kvantmekanik



Spektroskopi



Förra årets kursutvärderingar

Synpunkter på föreläsningarna:

Videorna skulle kunna vara av högre kvalitet

Ibland otydligt vad som är centralt

Åtgärder:

Videor uppdateras ibland – saknar lokal med lämplig utrustning

Summering av syfte och mål i början på varje föreläsning

Synpunkter på lektionerna:

Önskar genomgång av fler exempel

Lösningsförslag till exempelsamlingen

~~Åtgärder:~~ Kommentarer:

Upp till studenterna och lektionshandledaren att komma överens om ett lämpligt upplägg.

Lösningsförslag till exempelsamlingen kommer inte att erbjudas.