

TFY4215 Våren 2017, Uke 13 og 14:

MOLEKYLFYSIKK

Molecular physics is the study of the physical properties of molecules, the chemical bonds between atoms as well as the molecular dynamics. Its most important experimental techniques are the various types of spectroscopy; scattering is also used. The field is closely related to atomic physics and overlaps greatly with theoretical chemistry, physical chemistry and chemical physics.

TFY4215, kort orientering om innholdet i Molekylfysikk, mars/april 2017.

Forelesninger:

Uke 13 og 14: 1 + 3 x 2 forelesningstimer (27. og 28. mars, 3. og 4. april)

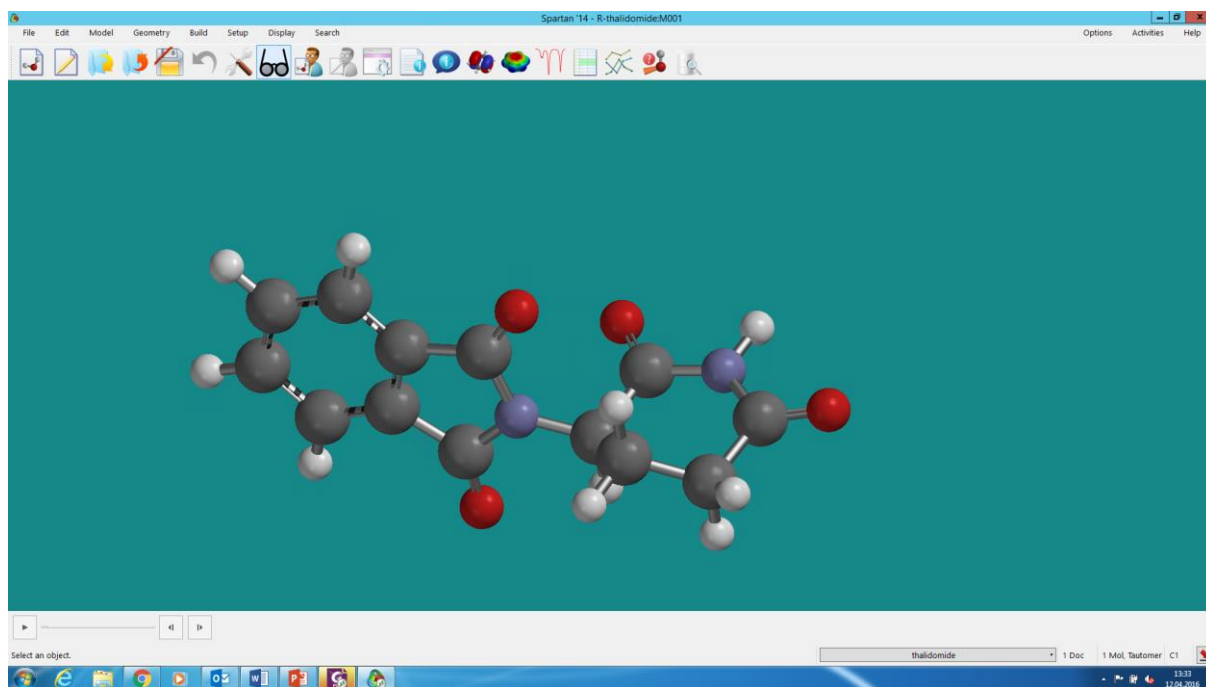
Stikkord:

- $H\Psi=E\Psi$ anvendt på molekyler. Litt mangepartikkelteori.
- Hva innebærer det å gjøre kvantemekaniske beregninger på molekyler?
- Hva slags informasjon kan vi få ut av slike beregninger?
- Tilstander: bølgefunksjoner, molekylorbitaler. Energier.
- Spektroskopi. Vibrasjonsfrekvenser.
- Kjemiske reaksjoner: kinetikk og termodynamikk.

Regneøvinger:

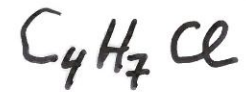
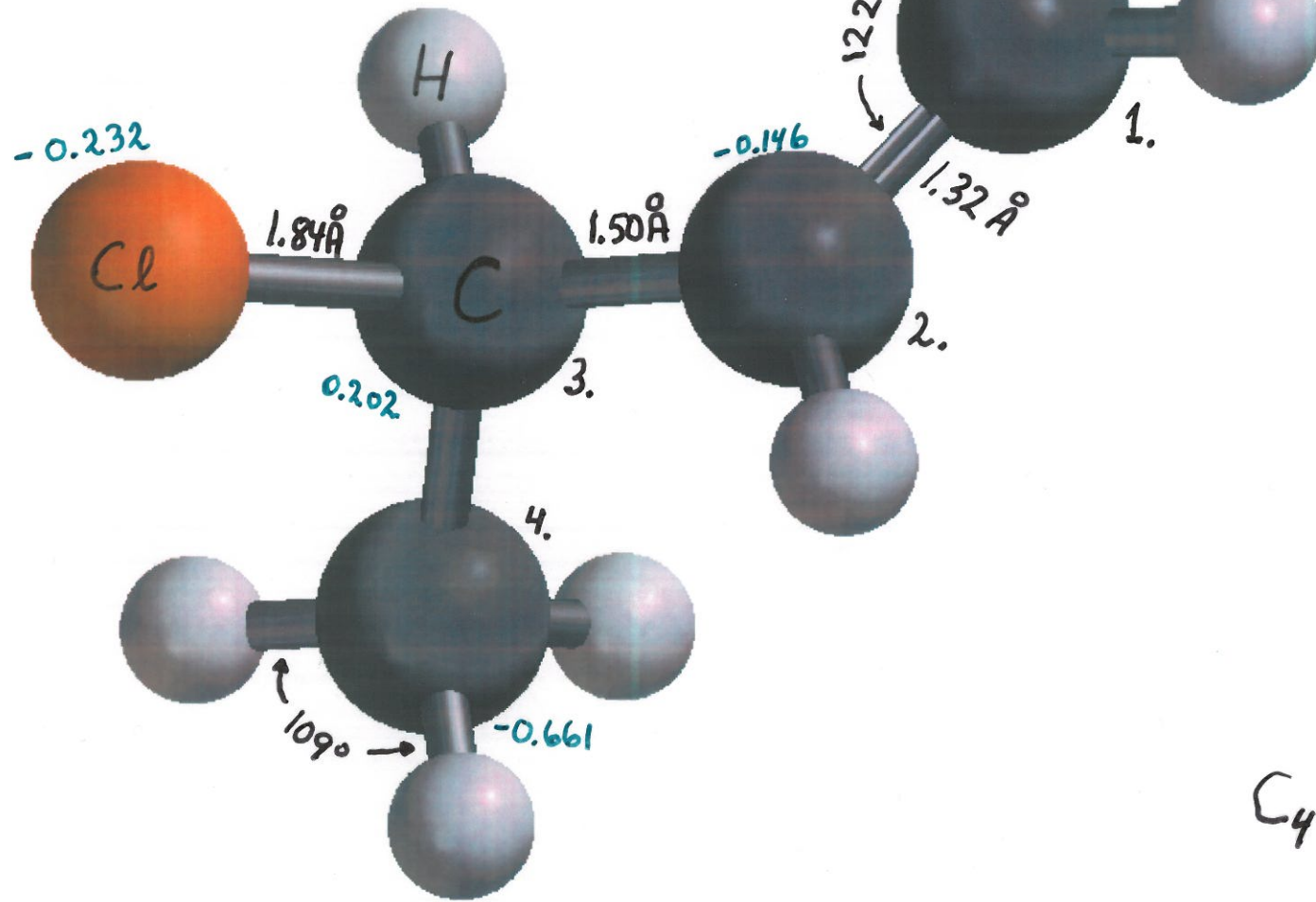
- Kvantemekaniske beregninger på PC/Mac med programmet Spartan'14
- 3 frivillige øvinger
- Veiledning onsdag og fredag i ukene 14 og 16
- Spartan'14 er tilgjengelig på NTNU Programfarm

Spartan'14 grensesnitt:



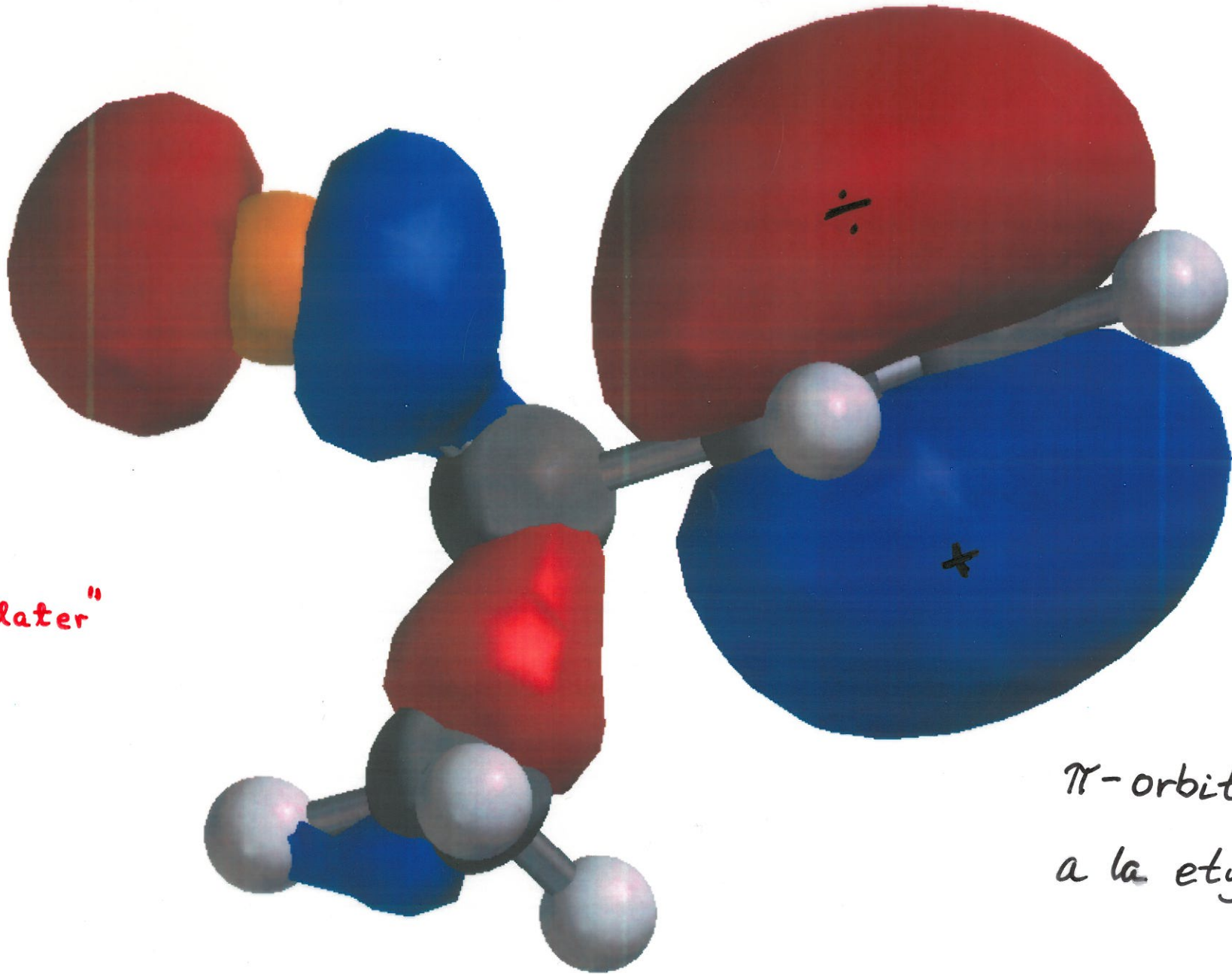
QM beregning =>

- geometri (Exp: elektron-diffraksjon)
- energi (=> relativ stabilitet av ulike isomere)
- Ladningsfordeling (=> dipolmoment etc.)
- vibrasjons frekvenser (Exp: IR-spektroskopi)



Navn: 3-kloro-1-buten

Molekylorbital

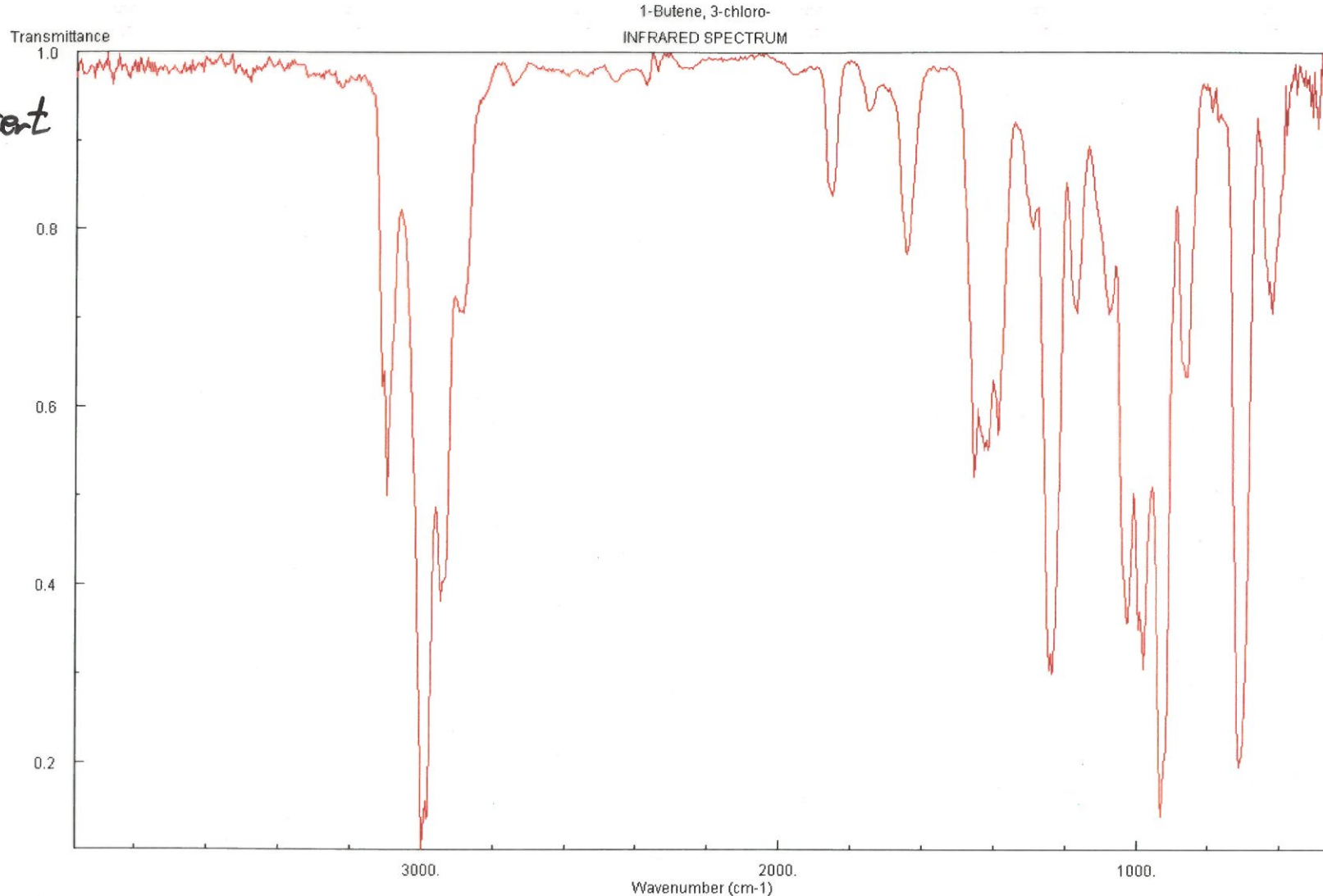


"ekvi- Ψ -flater"

π -orbital
a la etylen

Absorbere lys med bestemte bølgelængder:

Transmittert lys



NIST JCAMP-DX Viewer

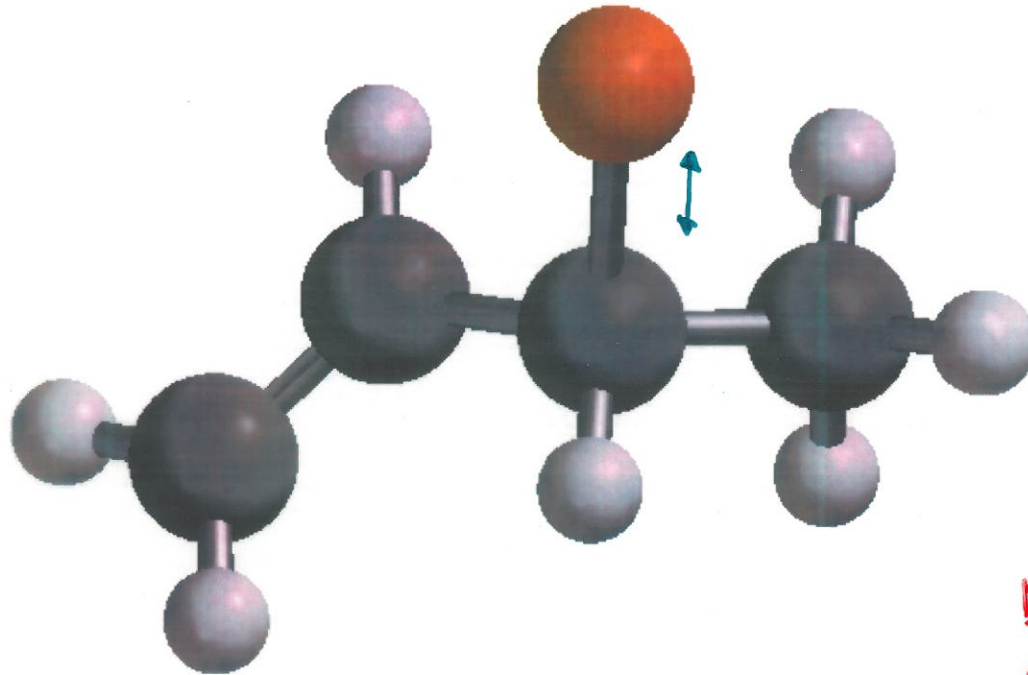
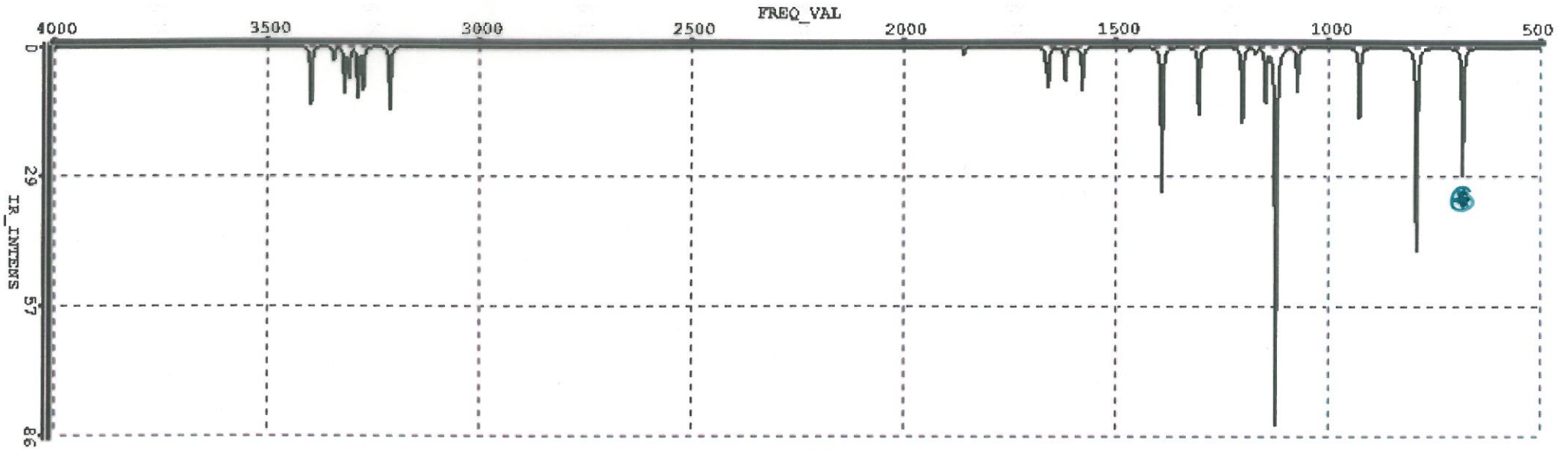
Bølgetall (Invers bølgelængde)

Reverse X cm-1 Transmittance Help...

Notice: Concentration information is not available for this spectrum and, therefore, molar absorptivity values cannot be derived.

Bestegnet transmisjonspektrum

4.



⊕ C-Cl strekk

Matematisk: Diagonalisering av matrise; eigenverdiene gir frekvensene, eigenvektorene gir vibrasjonsbeveegelsene.