

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](#).

FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk: Kort orientering om undervisningsopplegget i «Molekylfysikk», april 2016.

Forelesninger:

Uke 15: 3 x 2 forelesningstimer (12/4 i R7, 13/4 i R2, 15/4 i R7)

Uke 16: Hvis behov: 2 forelesningstimer (19/4 i R7)

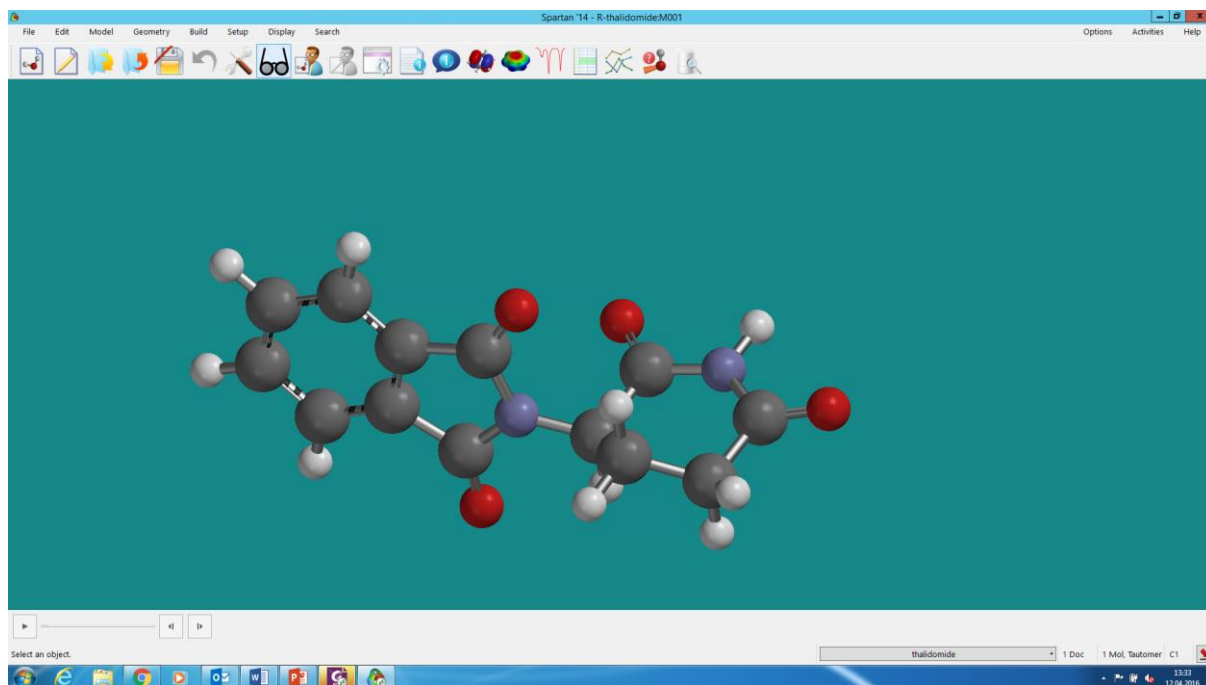
Stikkord:

- $H\Psi=E\Psi$ 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:

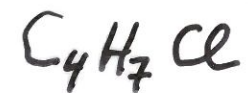
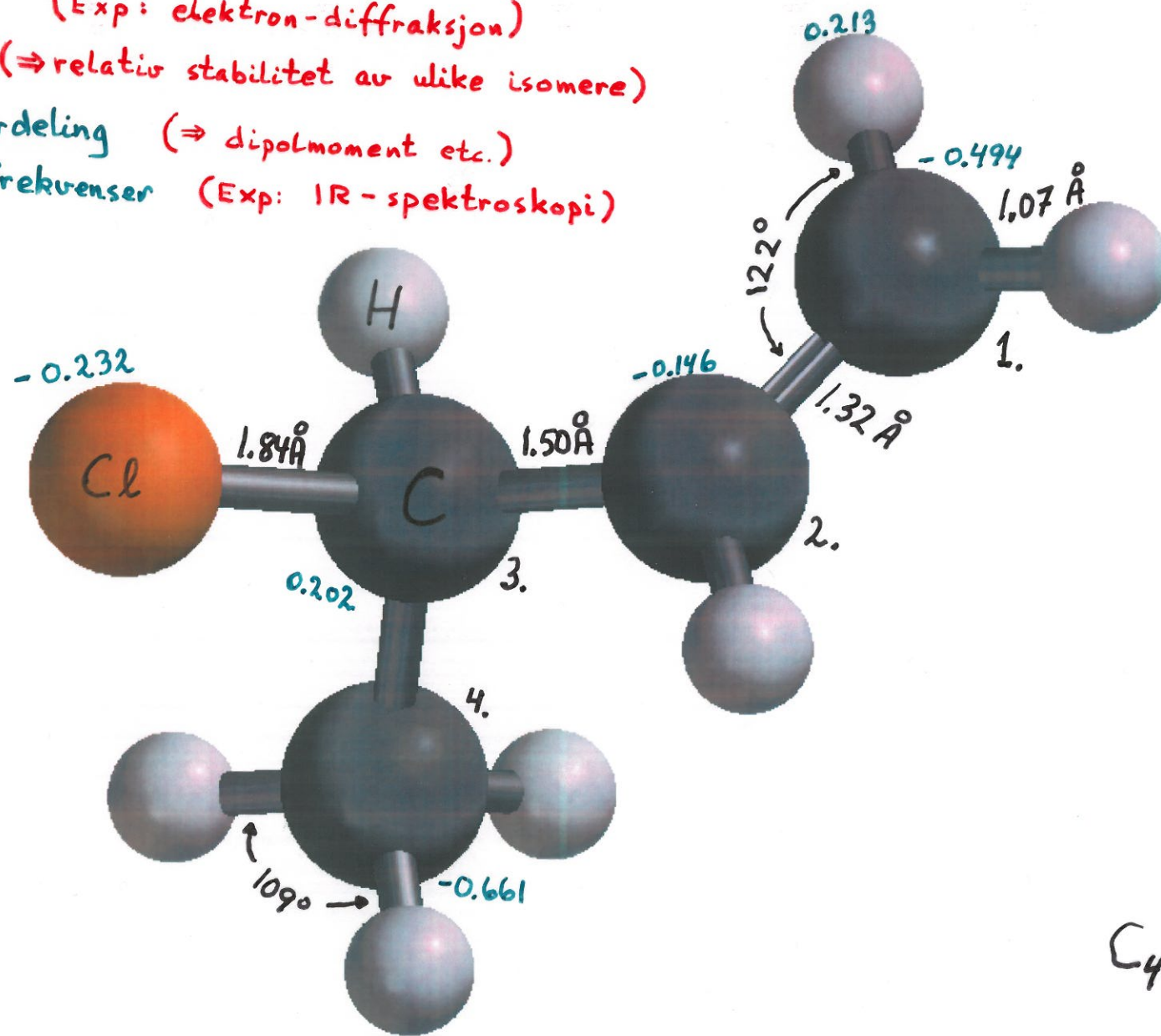
- Kvantemekaniske beregninger på PC/Mac med programmet Spartan'14
- 3 frivillige øvinger
- Veiledning onsdag og torsdag i uke 16
- Spartan'14 er tilgjengelig på NTNU Programfarm

Spartan'14 grensesnitt:



QM beregning $\Rightarrow$

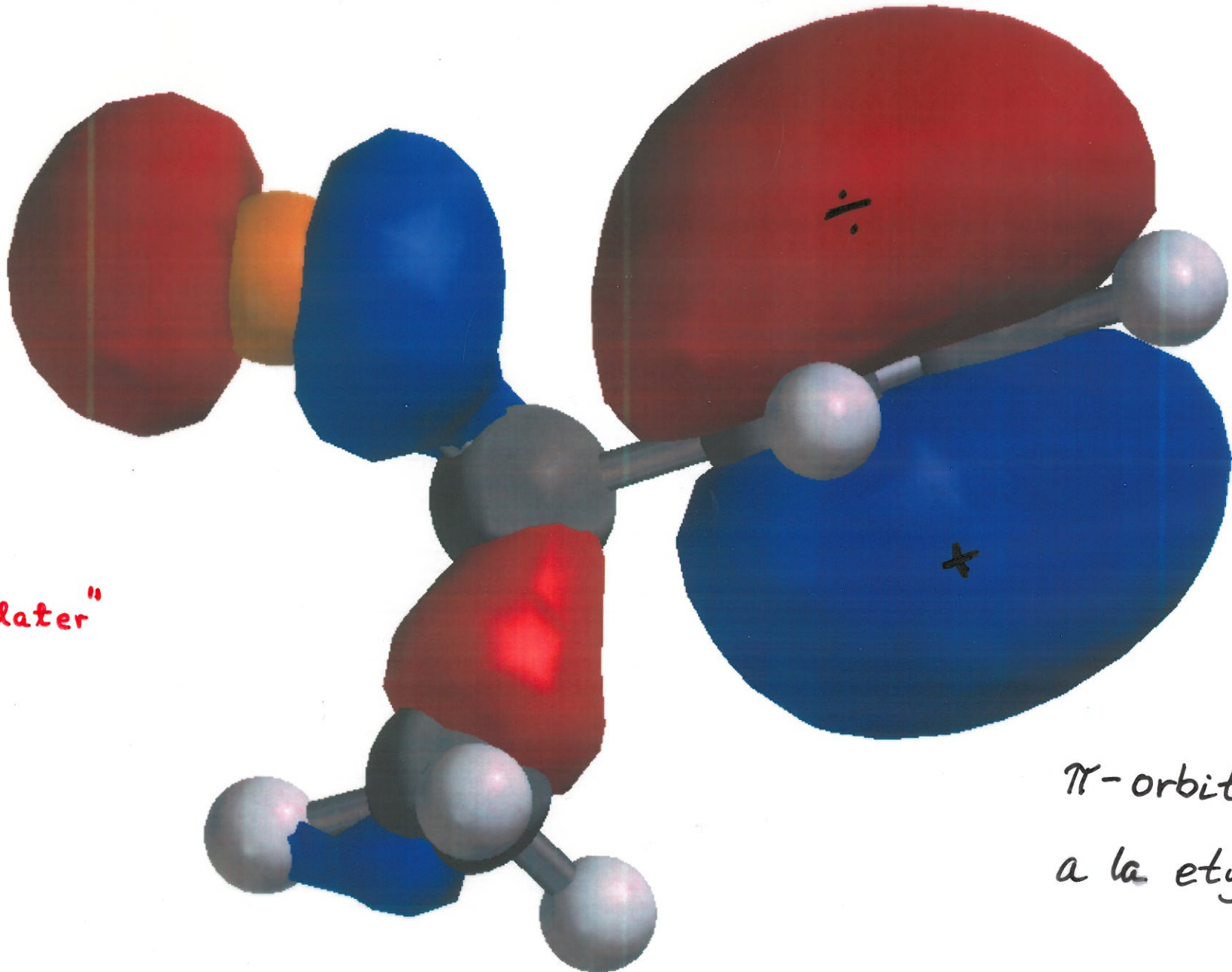
- geometri (Exp: elektron-diffraksjon)
- energi ($\Rightarrow$ relativ stabilitet av ulike isomere)
- Ladningsfordeling ($\Rightarrow$ dipolmoment etc.)
- vibrasjons frekvenser (Exp: IR-spektroskopi)



Navn: 3-kloro-1-buten

Molekylorbital

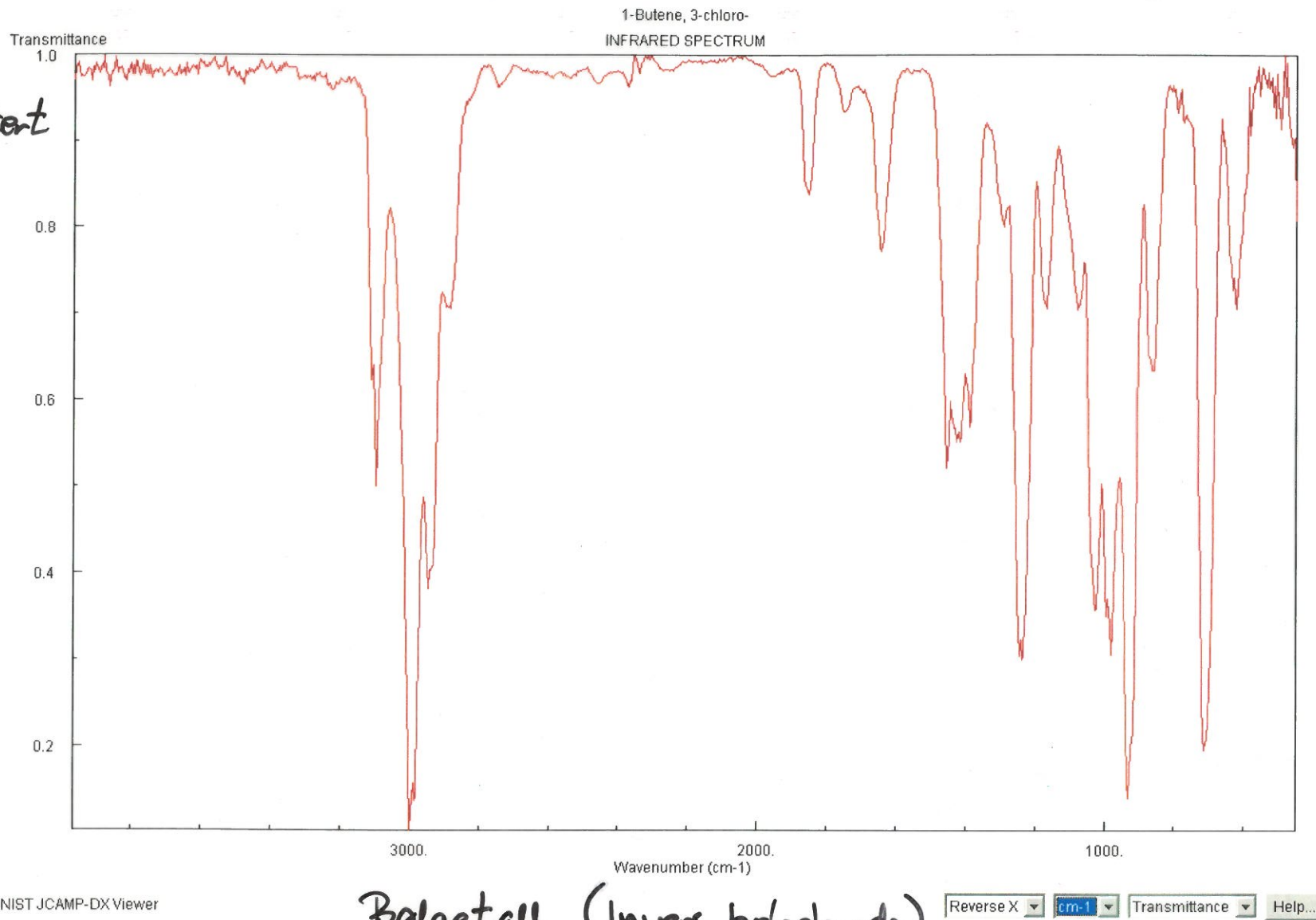
2.



"ekvi- Ψ -flater"

π -orbital
a la etylen

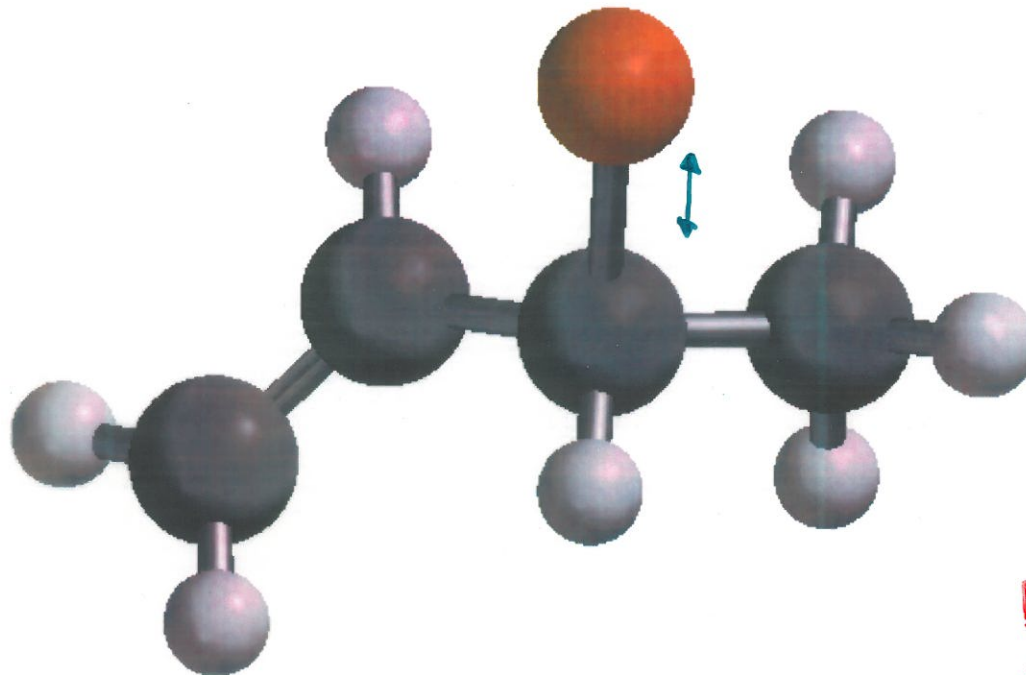
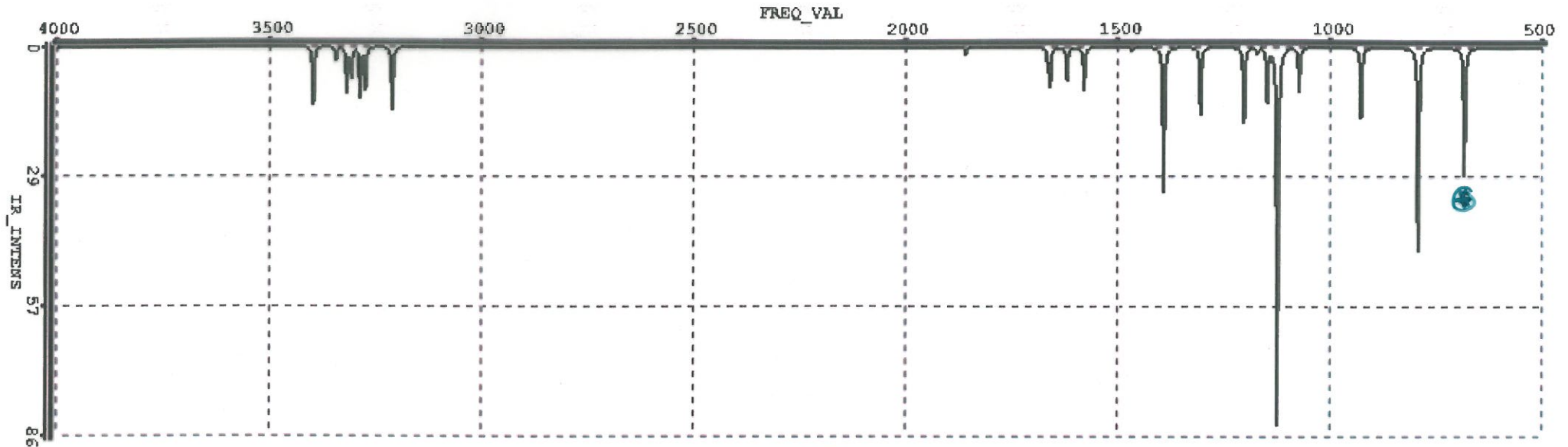
Absorbere lys med bestemt bølgelængde:

Transmittert
lys

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

Beregnet transmisjonsspektrum

4.



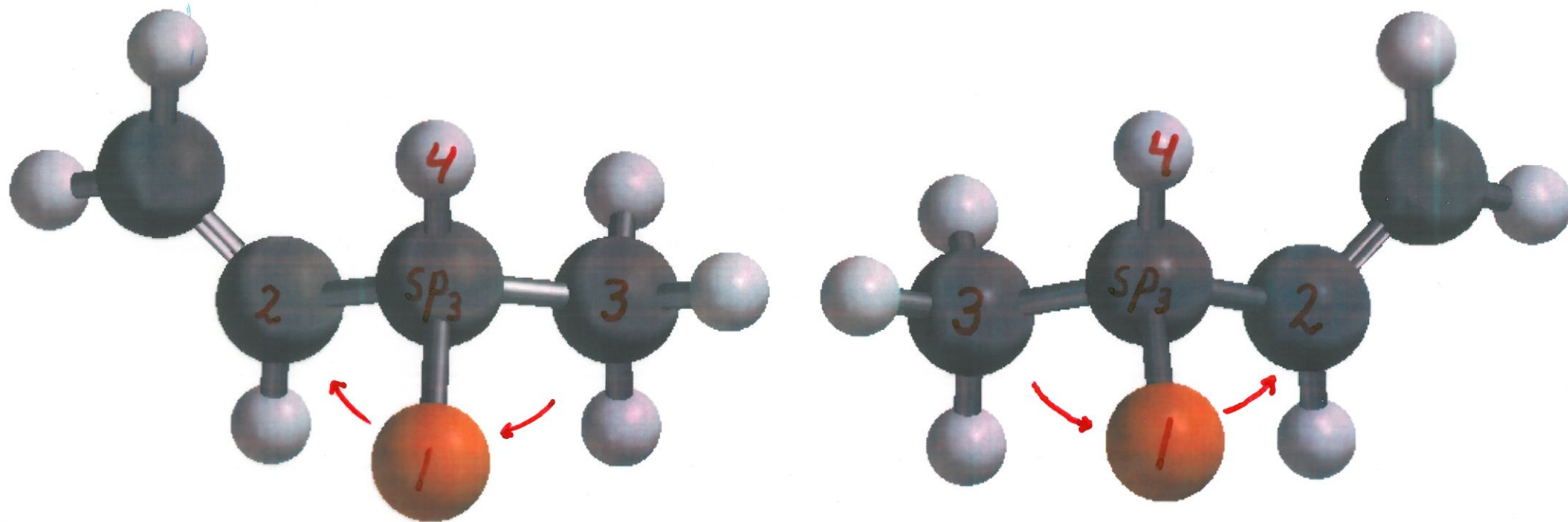
⊕ C-Cl strekk

Matematisk: Diagonalisering
av matrise; egenverdier
gir frekvensene, egenvektorene
gir vibrasjonsberegningene

Isomere

5.

(= samme formel, ulike molekyler)



Hverandres speilbilde!

Ikke identiske egenskaper!

(Roterer polarisasjonsplanet til linearpolarisert lys i hver sin retning $\Rightarrow$ "optiske isomere")