

Infrarödspektroskopi, 4.0 hp

Infrared spectroscopy, 4.0 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFMA3

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Första halvår 2025

Fastställd av

Fastställandedatum

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå, eller
- på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.

För denna kurs krävs dessutom*.*

Grundläggande kunskaper i modern fysik.

Särskild information

Infrarödspektroskopi (IR-spektroskopi) är en icke-förstörande metod som ger information om molekylär sammansättning, struktur och interaktioner i ett prov, och som utnyttjar det faktum att molekyler vibrerar och absorberar strålning vid specifika frekvenser i det infraröda området, och som är karakteristiska för deras struktur. På grund av dess utbredda användning inom många områden inom vetenskap och teknik, är denna kurs lämplig för studenter inom alla områden som är intresserade av kemisk eller strukturell karakterisering av prover. Kursen ger en omfattande översikt av principer, instrumentering och tillämpningar inom IR-spektroskopi i allmänhet, och Fourier-transform IR (FTIR) spektroskopi i synnerhet. Dessutom kommer utvalda tillämpningar och metoder, samt andra relevanta vibrationsspektroskopitekniker också att behandlas.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas* *studenten kunna:

- Förstå och förklara teorin och de bakomliggande principerna för vibrationsspektroskopi.
- Förstå hur FTIR-datainsamling och bearbetning av dessa data påverkar de resulterande spektra och deras upplösning.
- Utföra IR-experiment med olika provtagningsmetoder
- Bearbeta, konvertera, analysera och tolka IR-spektra av olika typer
- Välja en mätmetod som är lämplig för ett givet problem, och att beskriva typiska användningsområden, samt fördelar och begränsningar med olika mätmetoder och tillbehör för provtagning.

Kursinnehåll

- i. Molekylära vibrationer, ljus-materia interaktion, infrarödaktivitet, molekylär symmetri, övergångsdipolmoment. Normalmoder, övertoner och kombinationsmoder, Fermi-resonanser.
- ii. Fourier-transform IR (FTIR) spektrometern och vanliga komponenter i IR-optik: källor, detektorer, stråldelare, fönster, speglar, polarisatorer.
- iii. FTIR-spektroskopi, datainsamling och bearbetning: Apodisering, nollfyllning, fasfel, spektral upplösning. Bakgrundsspektra, spektrumsutsubtraktion, baslinjekorrigerings, kvantitativ analys, dekonvolution.
- iv. Tolkning av spektra: karakteristiska vibrationer, gruppfrekvenser, *fingerprint region*. Spektrum-struktur korrelationer. Exempel på föreningar i gas-, flytande- och fast fas.
- v. Provtagningsmetoder: Transmission, Reflektans (ATR, IRAS, DRIFT), Mikroskopi, 2D IR, PM-IRAS, vibrations-CD, *step-scan* FTIR.
- vi. Andra vibrationspektroskopitekniker: Sum-Frequency Generation (SFG), inelastisk neutronspridning (INS), Raman-spridning, ytförstärkt Raman-spridning (SERS), fotoakustisk IR-spektroskopi, Elektronenergiförlustspektroskopi (*electron energy loss spectroscopy*, EELS), inelastisk elektrontunnelspektroskopi (IETS).

Undervisnings- och arbetsformer

Kursen genomförs via föreläsningar, datorövningar, laborationer med experimentellt arbete (deltagarna uppmanas att ta med egna prover för undersökning i laborationerna), samt seminarier där det experimentella arbetet sammanfattas och presenteras.

Examination

Inlämningsuppgifter som delas ut efter några av föreläsningarna. En skriftlig rapport och en muntlig presentation som sammanfattar det obligatoriska experimentella arbetet.

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

H Günzler, IR Spectroscopy, Wiley 2019

(eller H Günzler, IR Spectroscopy – An Introduction, Wiley 2002).

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare.