

Bindinger

Ioniske: NaCl standardeksempel

Na  $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$   $\rightarrow$  elektron til "overs"

Ioniseringsenergi: 5,1 eV

Cl  $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$   $\rightarrow$  elektron "mangler"

"ioniseringsenergi": -3,7 eV

Kost for å lage  $\text{Na}^+$  og  $\text{Cl}^-$  er 1,4 eV.

Bindingenergi mellom  $\text{Na}^+$  og  $\text{Cl}^-$  er 7,9 eV. Avstand 2,8 Å.

Totalt overskudd på 6,5 eV for å lage NaCl.

Bindet er Coulombtiltreking.

Kovalente:  $\text{H}_2$  standardeksempel. "Deler" på elektronene.

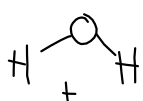
Andre eksempler  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  og  $\text{CH}_4$

Bindingenergi for  $\text{H}_2$  er 4,52 eV. Avstand 0,74 Å.

Metallbindinger:  $\gamma$ -elektroner sitter løst og deles. God ledningsevne.

Mellom molekylar: Større ladningsfordeling gir binding pga. Coulombtiltreking.

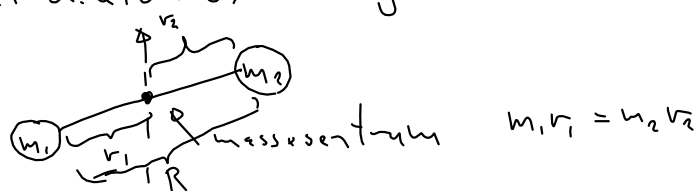
$\text{H}_2\text{O}$  er en dipol



Andre molekylar kan bli indusert dipol, eller ladningsfluktasjoner.

Rotasjon

Vi ser på et diatomisk molekyl  $\text{CO}$



Klassisk fysikk: rotasjonsenergi som funksjon av angulærmoment  $L$

Kvantemekanikk:  $L \rightarrow \hat{L}$ , kvantisere angulærmomentet

Klassisk: 
$$\begin{aligned} L &= m_1 v_1 r_1 + m_2 v_2 r_2 && (\text{flere atomer} \Rightarrow \text{flere ledd}) \\ &= m_1 \omega r_1^2 + m_2 \omega r_2^2 && (\text{i en hel sirkel} \Rightarrow \omega = \frac{v_1}{r_1} = \frac{v_2}{r_2}) \\ &= (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega \\ &\equiv I \omega && I \text{ er treghetsmoment} \end{aligned}$$

$$K = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_1 r_1^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \omega^2 = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

Mer-k!  $L$  og  $I$  er en generalisering av bevegelsesmengde og masse

Kvantemekanikk:  $\hat{L}^2$  har egenverdier  $\hbar^2 l(l+1)$   $l=0,1,2,\dots$

Da har  $\hat{K}$  egenverdier  $\frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$ .

$$E_l^{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

$p = m v$	$L = I \omega$
$K = \frac{p^2}{2m}$	$K = \frac{L^2}{2I}$

Hvor er  $\frac{h^2}{2I}$  ?

Massesenteret gitt ved  $m_1 r_1 = m_2 r_2$ .  $R = r_1 + r_2$ .

$$R = r_1 + r_2 = r_1 + \frac{m_1}{m_2} r_1 = \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right) r_1 = \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right) r_2$$

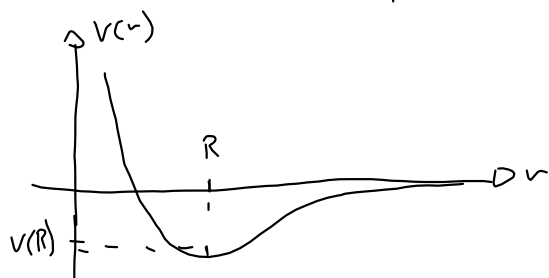
Treghtsmomentet er da

$$\begin{aligned} I &= m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = m_1 \frac{R^2}{\left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)^2} + m_2 \frac{R^2}{\left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)^2} = \frac{m_1 m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} R^2 + \frac{m_1^2 m_2}{(m_1 + m_2)^2} R^2 \\ &= \frac{m_1 m_2 (m_1 + m_2)}{(m_1 + m_2)^2} R^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R^2 = \mu R^2 \quad \text{hvor } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ er redusert masse.} \end{aligned}$$

Rotasjonsenergi kan skrives som  $E_x^{\text{rot}} = \frac{h^2}{2\mu R^2} \ell(\ell+1)$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$

## Vibrasjon

Potensial som funksjon av avstand  $r$ . For  $r$  nær  $R$  (likevekt) så kan vi skrive



$$V(g) = \frac{1}{2} k g^2, \quad k = V''(R)$$

$$V(r) = V(R) + V'(R)(r-R) + \frac{1}{2} V''(R)(r-R)^2 + \dots$$

Vi kan ignorere  $V(R)$  fordi vi alltid kan velte potensialet.

$$V'(R) = 0 \text{ slik at for } |r-R| \text{ er}$$

$$V(r) \approx \frac{1}{2} V''(R)(r-R)^2 \text{ eller}$$

$$V(g) = \frac{1}{2} V''(R) g^2 \text{ hvor } g = r - R. \quad \text{HO potensiale!}$$

Vi vet de at energiene er kvantisert som

$$E_n^{\text{vib}} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{og} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Mer-h!  $E_0^{\text{vib}} > 0$ , nullpunktenergi alltid tilstede.

Mer-h! Forskjellen mellom vibrasjonivåene er generelt større enn forskjellen mellom rotasjonivåer. Rotasjon eksiteres lettere.

$$\hbar\omega \text{ større enn } \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}$$

### Molekylspektra

Rotasjons- og vibrasjonsspektrum

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} l(l+1) + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Ikke alle overganger er tillatte: utvalgsregler.

Før å bevare angularmoment og spin  $n_i$   $l_i$   $h_i$

$$\Delta l \equiv |l_i - l_f| = 1 \quad \text{og} \quad \Delta n \equiv |n_i - n_f| = 1$$

Rotasjon er  $\uparrow$  spin-1 slik at molekylet må endre orbitalt angularmoment med  $\pm 1$ .