

Molekylspektra

Eksempel: HCl-molekyler i en overgang $n_i = 0$ til $n_f = 1$

Dersom l_i går til $l_f = l_i + 1$ er

$$\begin{aligned}\Delta E &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} [l_f(l_f+1) - l_i(l_i+1)] \\ &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} [(l_i+1)(l_i+2) - l_i(l_i+1)] \\ &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{I_{cm}} (l_i+1)\end{aligned}$$

Dersom l_i går til $l_f = l_i - 1$ er ($l_i = 0$ er unmulig)

$$\begin{aligned}\Delta E &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} [(l_i-1)l_i - l_i(l_i+1)] \\ &= \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{I_{cm}} l_i\end{aligned}$$

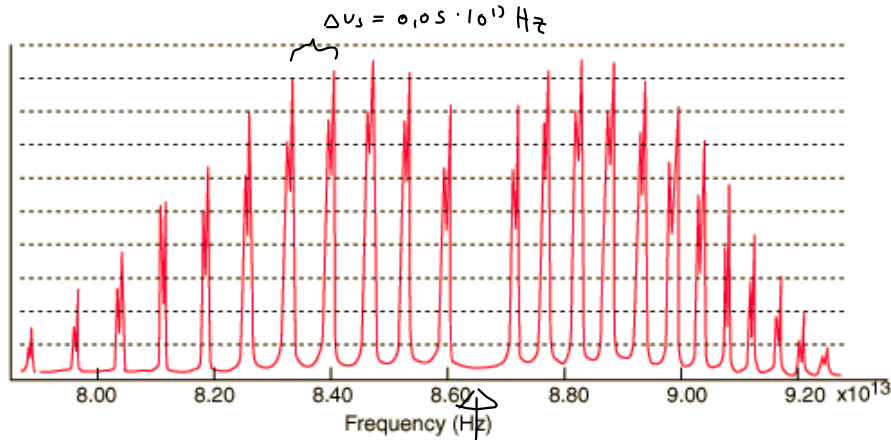
$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I_{cm}} l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_{\text{vib}} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Delta l = |l_1 - l_2| = 1, \quad \Delta n = |n_1 - n_2| = 1$$

Hva kan vi lære fra spektra?

- * Hovedenergien $\hbar\omega$ (den vanligste linje) gir bindingsstyrken til molekyl gjennom "fjor-hasteren" $k = \mu\omega^2$. [k] = Nm^{-1}
- * Avstanden mellom linjer er $\frac{\hbar^2}{I_{cm}}$ som gir molekyls treghetsmoment I_{cm}
- * Med atommasser kan en finne avstanden R mellom atomene for $I_{cm} = \mu R^2$.



$$\begin{aligned}
 E &= h \nu \\
 &= 6.67 \times 10^{-34} \text{ Js} \cdot \nu \\
 &= 4.17 \times 10^{-15} \text{ eV Hz}^{-1} \cdot \nu
 \end{aligned}$$

Fløved frekvensen $\nu = 8,65 \cdot 10^{13} \text{ Hz} \Rightarrow E = h\nu = 4,17 \cdot 10^{-15} \text{ eV Hz}^{-1} \cdot 8,65 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$
 $\approx \underline{0,36 \text{ eV}}$

Reduksert masse $\mu = \frac{m_H \cdot m_{ca}}{m_H + m_{ca}} = \frac{1u \cdot 35u}{1u + 35u} = \frac{35}{36} \cdot 931,5 \text{ MeV}/c^2 = 905 \cdot \text{MeV}/c^2$

Fjærehastighet $k = \mu \omega^2 = \frac{905 \text{ MeV}}{(3,0 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2} \cdot (5,43 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1})^2 \approx 3,0 \cdot 10^{21} \text{ eV m}^{-2}$

$\omega = 2\pi\nu$
 $= \frac{3,0 \cdot 10^{21} \text{ eV m}^{-2}}{1,60 \cdot 10^{19} \text{ eV}} = 188 \text{ Nm}^{-1}$

Vi vet at $\Delta\nu_s h = \frac{h^2}{I_{cm}}$ slik at

$$I_{cm} c^2 = \frac{h^2 c^2}{\Delta\nu_s h} = \frac{(197,3 \text{ eV nm})^2}{5 \cdot 10^{14} \text{ Hz} \cdot 4,17 \cdot 10^{-15} \text{ eV Hz}^{-1}} = 1,9 \cdot 10^9 \text{ eV nm}^2 = 19 \text{ MeV nm}^2$$

$$I_{cm} = 19 \text{ MeV}/c^2 \text{ nm}^2$$

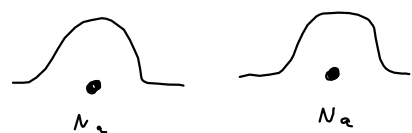
$$R = \sqrt{\frac{I_{cm}}{\mu}} = \sqrt{\frac{19 \text{ MeV}/c^2 \text{ nm}^2}{905 \text{ MeV}/c^2}} \approx 0,14 \text{ nm} \quad (\text{i tabellen } R = 0,13 \text{ nm})$$

Ledningsevne (båndteori)

Metaller leder godt fordi de har ledige orbitaler for "overledelselektronene".

Eksempel: Na. Ser på det som en kjerne med et elektron $(Ne)(3s)^1$

To atomer langt unna hverandre

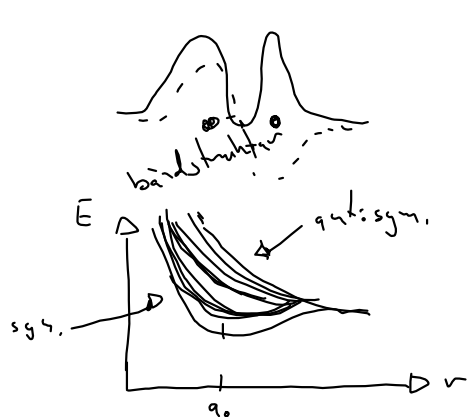


to 3s-elektroner, samme energi

1 krystall



symmetrisk vanlig bølgefunksjon \rightarrow lavere energi

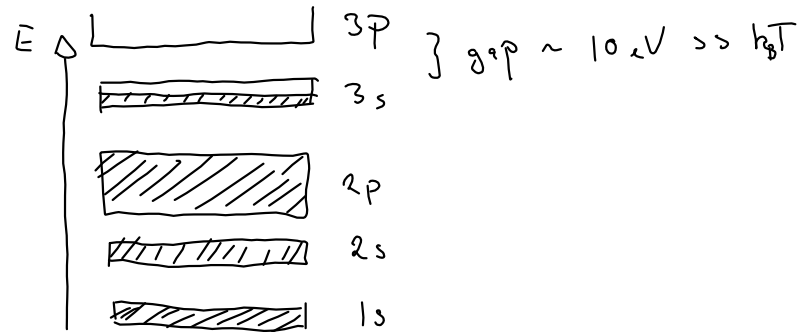


antisymmetrisk vanlig bølgefunksjon

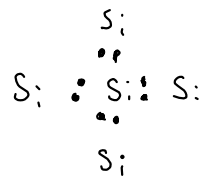
Et elektron i et krystall med N -atomer har N forskjellige energi.

Isolatoren har fylte valensbånd.

Båndstruktur til natrium

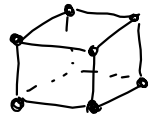


Halvleder: Si som eksempel

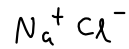
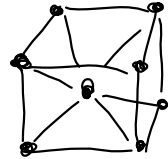


Tre hovedtyper krysaller

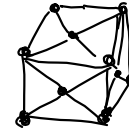
Kubiske (simpel)



SC

Body-centered cubic
(BCC)

Fe, Na

Face-centered cubic
(FCC)

Au

- * Kovalente krysaller. Deler elektroner. Dårlig leder.
 - * Ioniske krysaller. Atomer med fylte ytterste skall. F. eks. NaCl. Dårlig leder.
 - * Metaller. Kovalente bindinger, men elektroner til overs. God leder.
 - * Molekylkrysaller. Holdes sammen av dipolkrefter. F. eks. H_2O .
- Typisk svake krysaller: