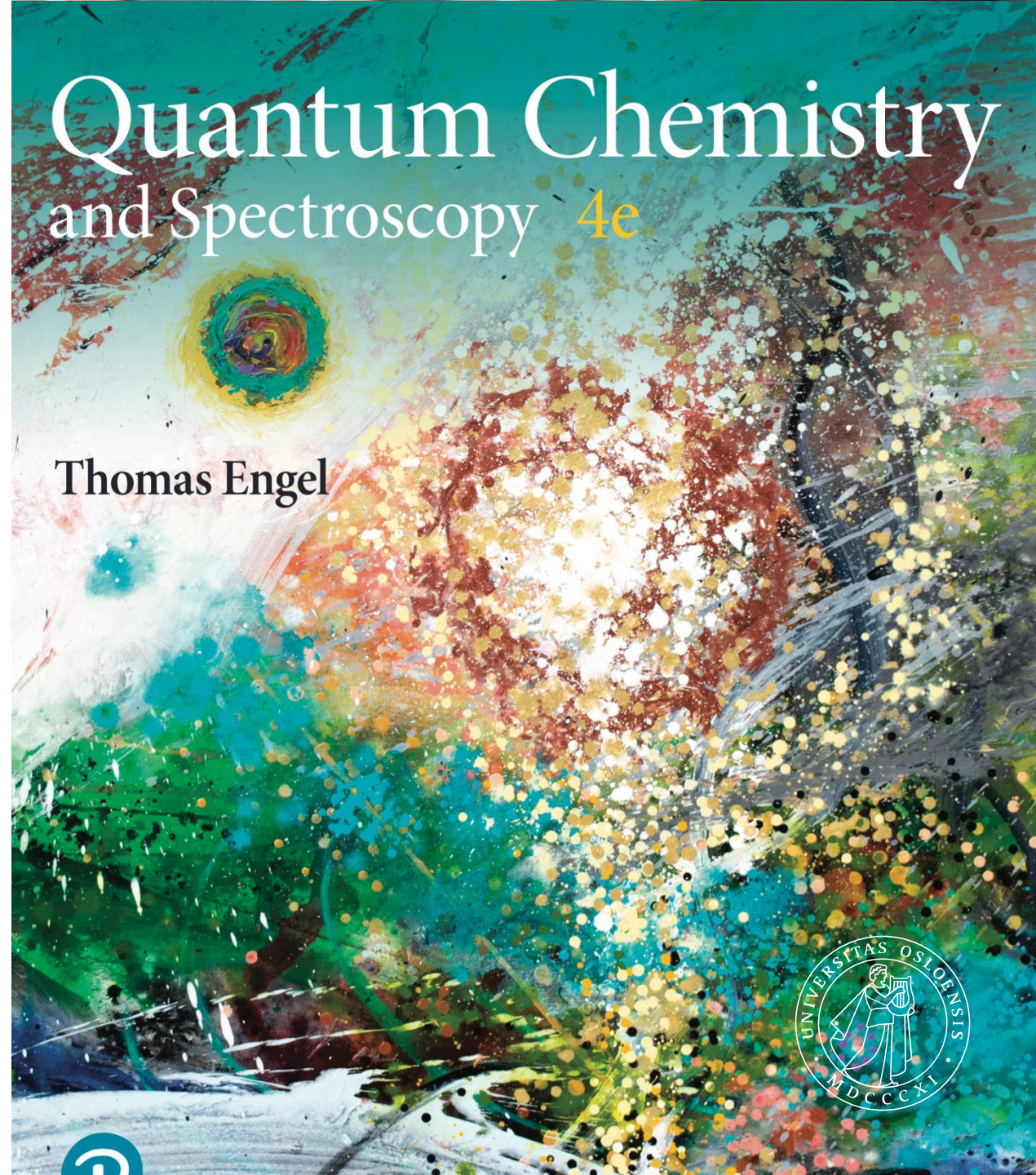


# UNIVERSITETET I OSLO

## KJM2601 – forelesning 9 og 10

Simen Kvaal ([simen.kvaal@kjemi.uio.no](mailto:simen.kvaal@kjemi.uio.no))  
Førsteamanuensis  
Hylleraassenteret

25-26/9/2024





Litt repetisjon fra forrige uke

# En kjapp menti ...

# Total bevegelse = Translasjon + rotasjon + vibrasjon

- Vi har følgende tilnærming for kjernebevegelse

$$\hat{H}_{nuc} \approx \hat{H}_{vib} + \hat{H}_{rot} + \hat{H}_{trans}$$

$$\Psi_{tot} \approx \Psi_{vib}(\mathbf{R}_{int})\Psi_{rot}(\phi, \theta, \psi)\Psi_{trans}(\mathbf{R}_{CM})$$

- Translasjon: bevegelse av massesenter, som fri partikkel
  - Små energier
- Rotasjon: rotasjon av molekylet om massesenter
  - Medium energier
- Vibrasjon: kollektive vibrasjoner av molekylet
  - Større energier
- Dette motiverer oss til å studere hver enkelt komponent separat
- Vi skal snart se på Born-Oppenheimer-tilnærmingen

# Harmonisk oscillator

- Beskriver vibrasjonsbevegelse med konstant frekvens
  - Klassisk:

$$H(x, p) = \frac{1}{2\mu} p^2 + \frac{1}{2} k x^2 \quad x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

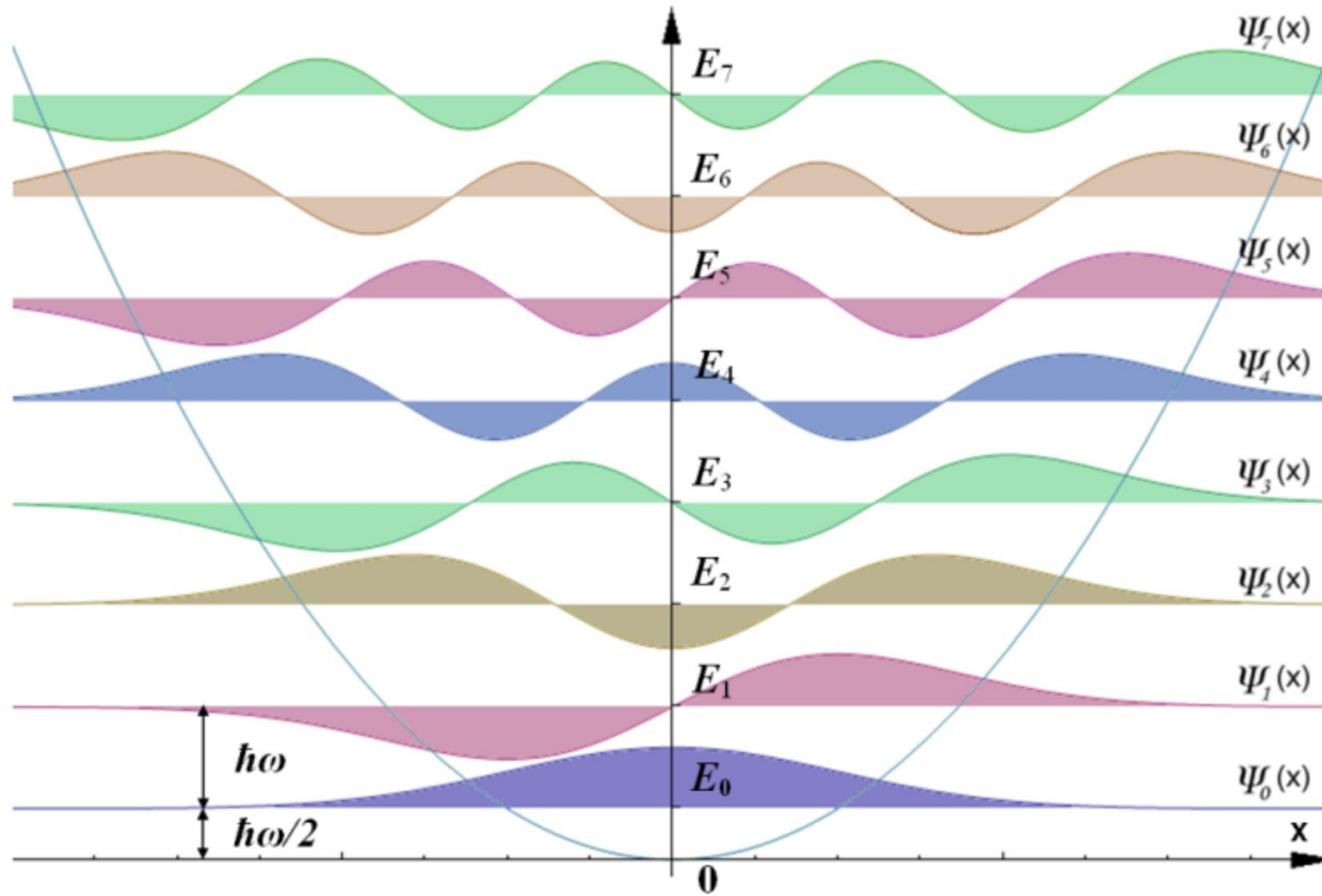


- Kvantemekanisk

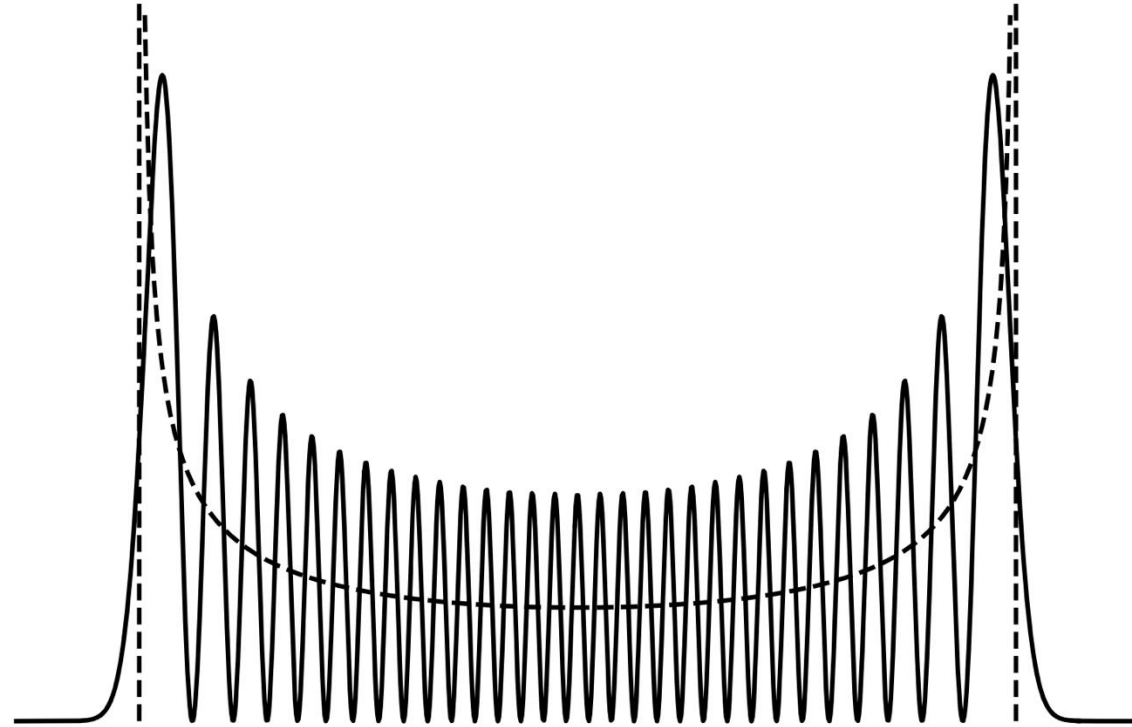
$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k x^2 \quad \hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\psi_n(x) = \frac{(\alpha/\pi)^{1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2}$$

# Eigenfunksjonene til H.O.



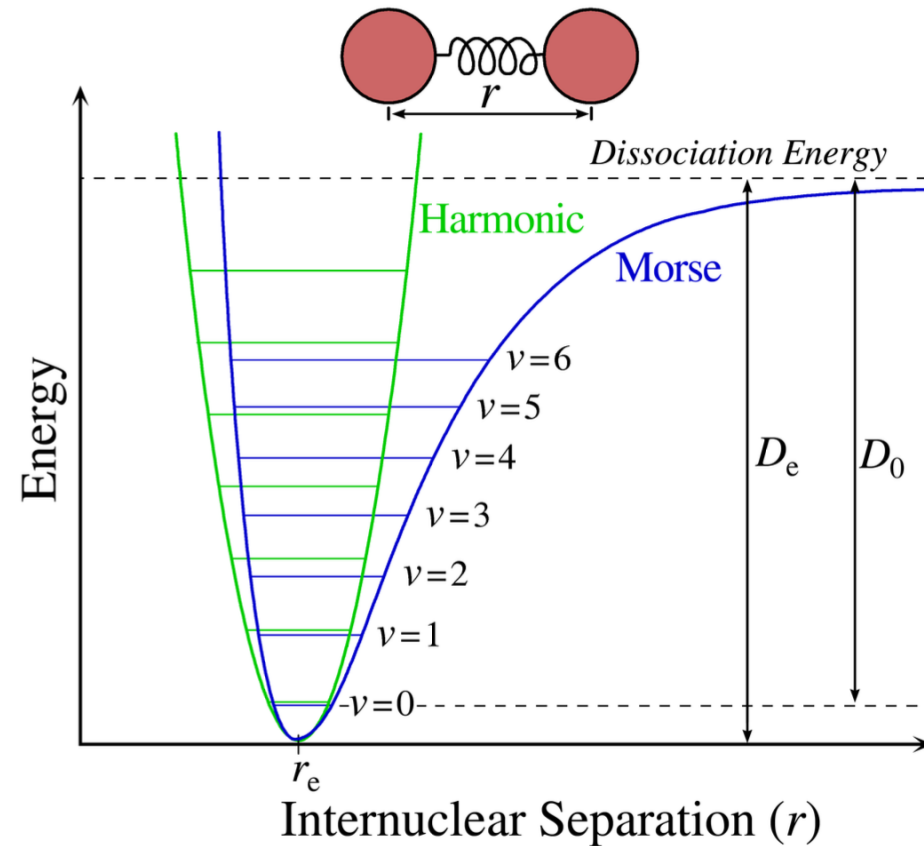
# Klassisk grense



**Figure:** Sannsynlighetstettheten  $|\Psi_{30}(x)|^2$  (oscillerende funksjon) sammenlignet med klassisk sannsynlighetstetthet (stiplet funksjon) og klassisk forbudt område (stiplet vertikal linje)

# H.O. og molekylære vibrasjoner

- “Harmonisk tilnærming”
- Det ekte potensialet likner veldig på H.O. nær likevekt



**Figure:** I nærheten av likevektsavstanden  $r_e$  ligner potensialet som funksjon av avstanden mellom atomene  $r$ , på en harmonisk oscillator.



# Rotasjon i planet

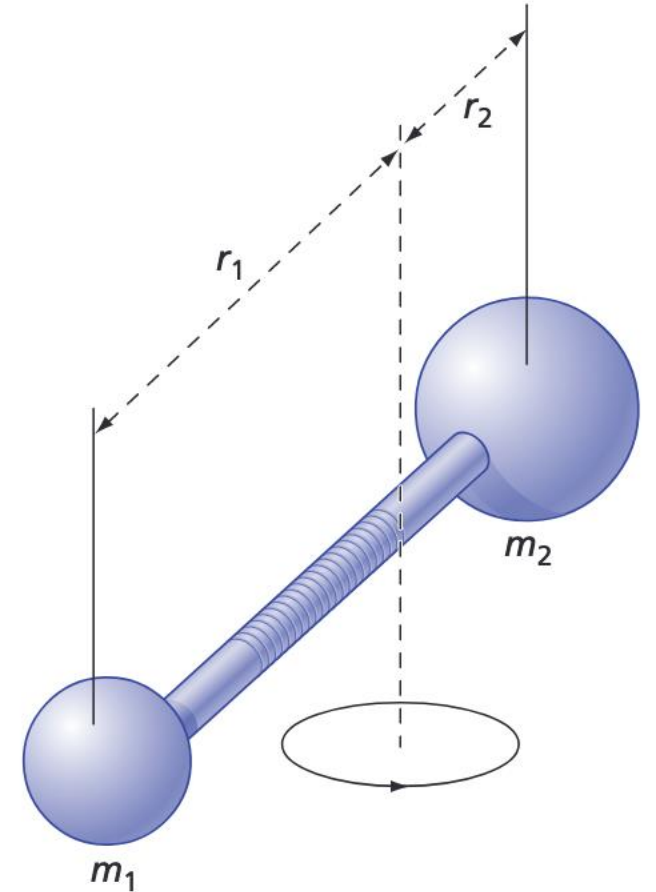
- Totasjonsbevegelse for rigid rotor i planet:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \ell_z^2, \quad \ell_z = I\dot{\theta}, \quad I = mr$$
$$\theta(t) = \theta_0 + \omega t$$

- Merk: samme uttrykk som for “fri partikkel”

$$\theta \leftrightarrow x, \quad \ell_z \leftrightarrow p_x, \quad I \leftrightarrow m$$

- Men! Vinkel er periodisk, det er ikke  $x$



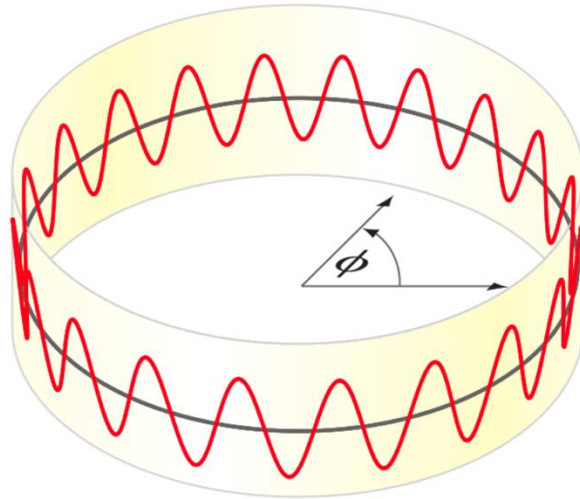
**Figure 7.3**

**Sketch of a rigid rotor.** A rigid rotor consisting of two masses is separated by a fixed distance. The dashed vertical line is the axis of rotation and is perpendicular to the plane of rotation and passes through the center of mass.

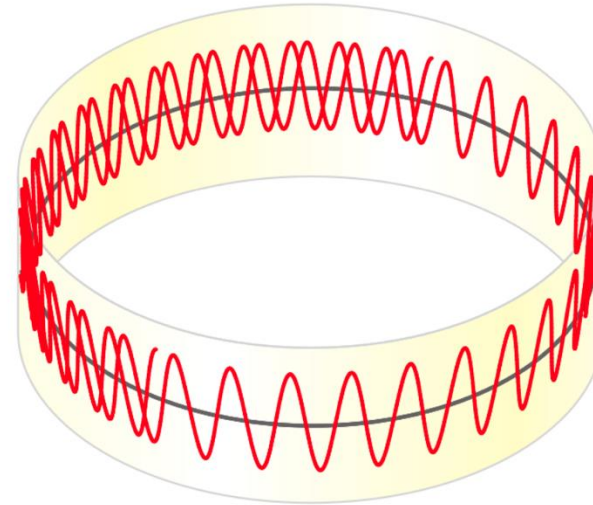
# Kvantemekanisk rotasjon i planet

- Hamiltonoperator og SL:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \hat{\ell}_z^2 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad \hat{H}\psi_m(\phi) = E_m\psi_m(\phi) \quad \psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$



(a)  $m_l = \pm \text{integer}$



(b)  $m_l \neq \pm \text{integer}$

$m$  må være et heltall,  
ellers er ikke  
randbetingelsene  
oppfylt

# Rotasjon i 3D

- Angulærmoment:  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ ,  $L_z = xp_y - yp_x, \dots$

- Klassisk Hamiltonfunksjon

$$H(\theta, \phi, \mathbf{L}) = \frac{1}{2I} |\mathbf{L}|^2$$

- Rotasjon om en akse, konstant vinkelfrekvens  $|\mathbf{L}| = I\omega$

- Kvantemekanisk:  $\hat{H} = \frac{1}{2I} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)$

$$\hat{H} Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

Kuleflatefunksjoner



**Figure 7.5**

Use of the right-hand rule to determine the direction of the angular velocity vector.

# Introduksjon til spektroskopi

# Spektroskopi er et fantastisk verktøy

- Spektroskopi = analyse spektre fra eksperimenter der molekyler utsettes for elektromagnetisk stråling
- En kan finne:
  - Molekylstruktur
  - Båndlengder og vinkler
  - Elektroniske overganger
  - Vibrasjonelle moder
  - Rotasjonsoverganger
  - ... Og mye mer ...



# Hvilke typer spektroskopi skal vi studere?

- Vibrasjonell spektroskopi
  - IR-spektroskopi (absorpsjon, elastisk spredning av lys)
  - Raman-spektroskopi (uelasisk spredning av lys)
- Rotasjonell spektroskopi
  - Også kalt MW-spektroskopi
- Elektronspektroskopi
  - Også kalt UV/VIS spektroskopi
- Elektron-paramagnetisk resonans-spektroskopi (EPR)
  - Resonante uparede elektroner i magnetfelt,
  - Stråling i MW-regimet
- Kjerne-magnetisk resonans (NMR)
  - Kjernene vekselvirker med MW-stråling og magnetfelt

# Grunnleggende mekanisme

- Intuisjon:

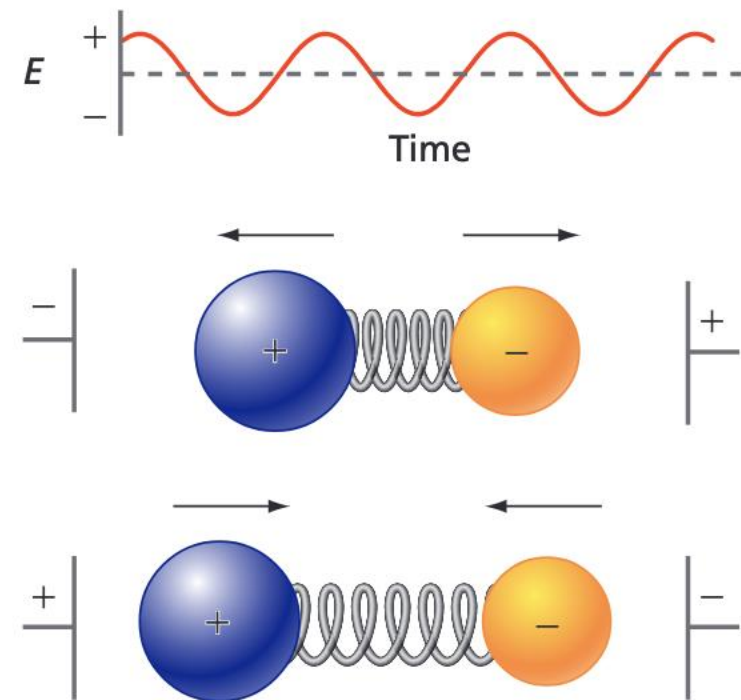
- Et molekyl utsettes for EM-bølger
- Ladede partikler akselereres
- Molekylet kan ta opp energi

- Energinivåene er kvantiserte:

$$|E_1 - E_2| = h\nu = hc\tilde{\nu}$$

Frekvens

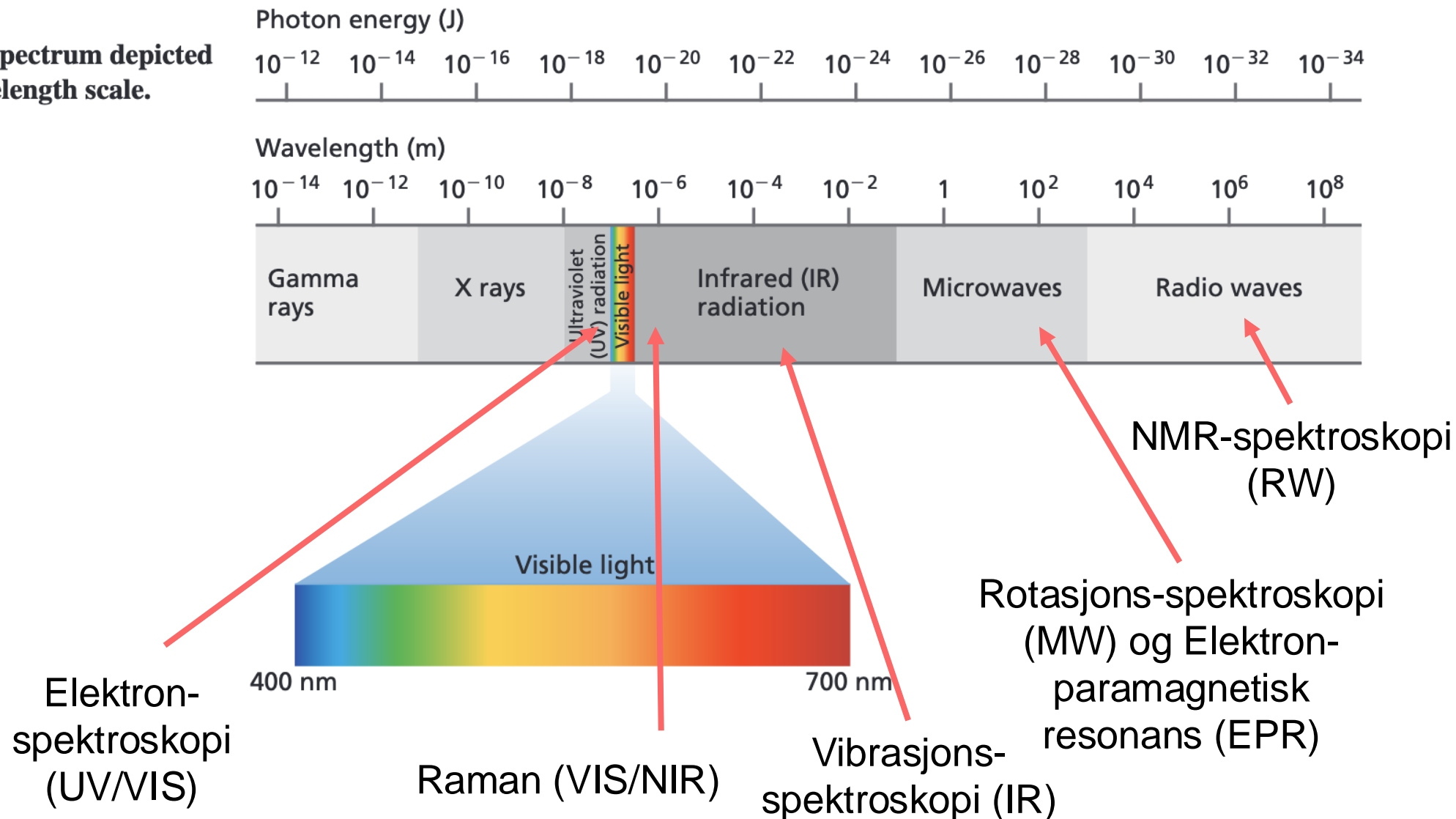
- Måler man spektret vil man finne “features” på de relevante frekvensene
- Spektroskopister måler ofte energi ved hjelp av bølgetallet:  $\tilde{\nu} [\text{cm}^{-1}]$



# Det elektromagnetiske spektrum

**Figure 8.1**

The electromagnetic spectrum depicted on a logarithmic wavelength scale.



# Maxwells likninger og Born-Oppenheimer

- Vekselvirkning mellom EM-stråling og kvantemekaniske partikler
- Vi skal gå gjennom Maxwells likninger
  - For å forstå litt om hvordan EM-bølger oppfører seg
- Vi skal gå gjennom Born-Oppenheimer-tilnærmingen
  - For å forstå hierarkiet av rotasjoner, vibrasjoner, og elektroniske eksitasjoner
- Dette er delvis orienteringsmateriale
- Lite om dette i Engel
- Notat: ...

# Born-Oppenheimer-tilnærmingen



# Molekylets partikler

- $N$  elektroner, ladning  $e$ , masse  $m_e$

$$r = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

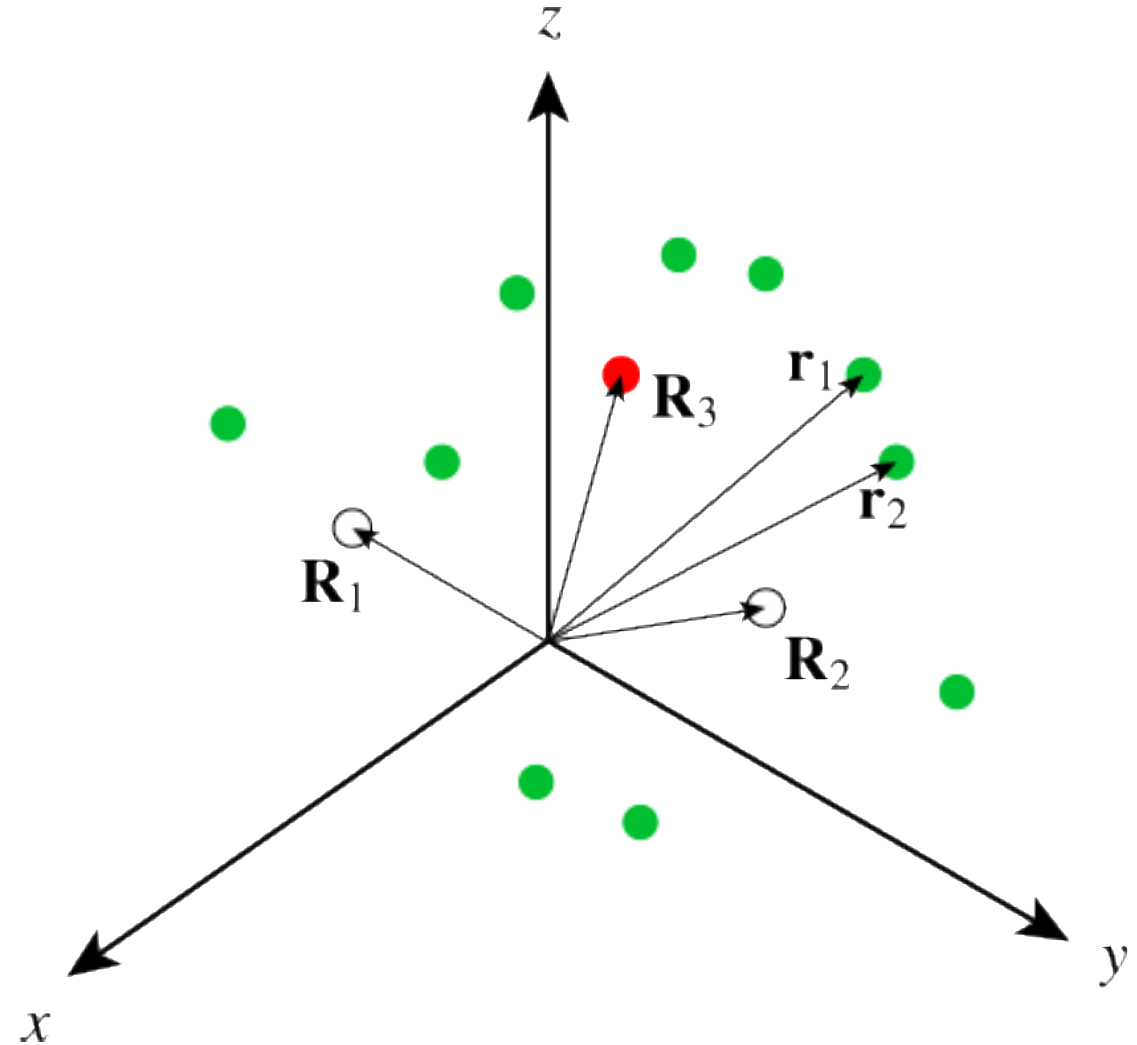
- $N_{nuc}$  kjerner, ladning  $-eZ_a$ , masse  $M_a$

$$R = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_{N_{nuc}})$$

- *Kjernene er tunge*

$$\frac{m_{proton}}{m_e} \approx 1836$$

- De vil bevege seg sakte



# Fastklemt kjerne-tilnærming

- Vi antar først at kjernene ligger i ro
- Kun elektronene er kvantemekaniske

$$\Psi_e = \Psi_e(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

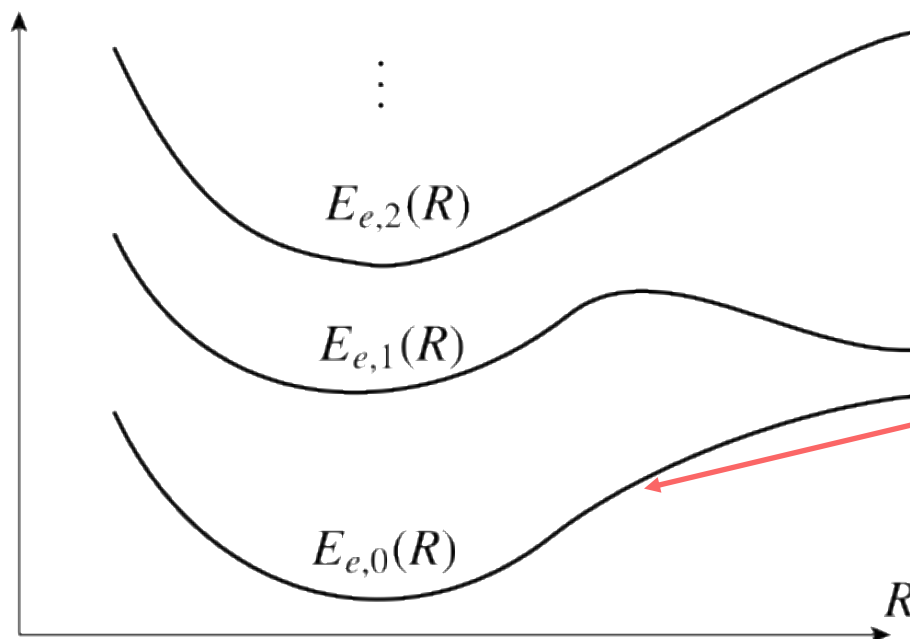
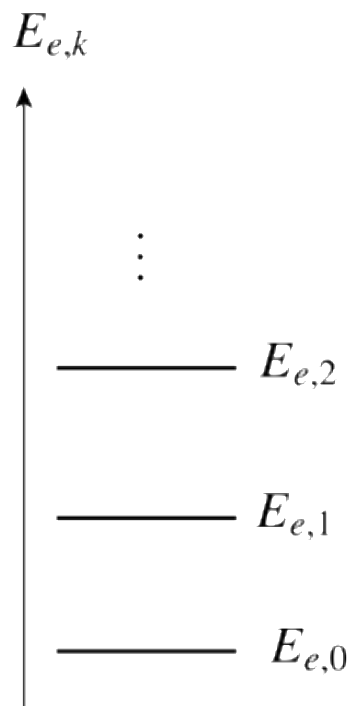
- Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}\hat{H}_e &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^{N_a} \frac{-e^2 Z_a}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_a|} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ &= \hat{T}_e + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{ee}\end{aligned}$$

- Vi løser tidsuavhengig SL:  $\hat{H}_e \Psi_{e,k} = E_{e,k} \Psi_{e,k}. \quad \langle \Psi_{e,k} | \Psi_{e,k} \rangle = \int d^N r |\Psi_{e,k}|^2 = 1$

# Potensialenergiflaten

- Vi løste SL for fiksert  $R$
- Varierer vi  $R$  får vi potensialenergiflater



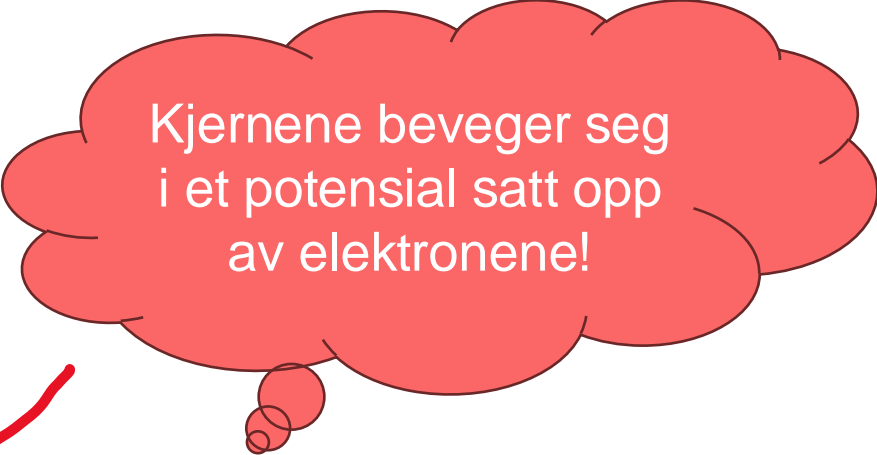
For hvert punkt på kurven har vi også en bølgefunksjon

$$\Psi_{e,0}(R)$$

# Kjernebevegelse i elektronpotensial

- Adiabatisk hypotese: Elektronene er alltid i en egentilstand, siden de beveger seg så utrolig fort!

$$\Psi(R, r) = \Psi_n(R)\Psi_e(r; R),$$
$$\hat{H}_e\Psi_e(r; R) = E_e(R)\Psi_e(r; R).$$



Kjernene beveger seg i et potensial satt opp av elektronene!

- Total Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{tot} = \hat{T}_n + \hat{V}_{nn} + \hat{H}_e$$

- Innsetting i tidsuavhengig SL gir:

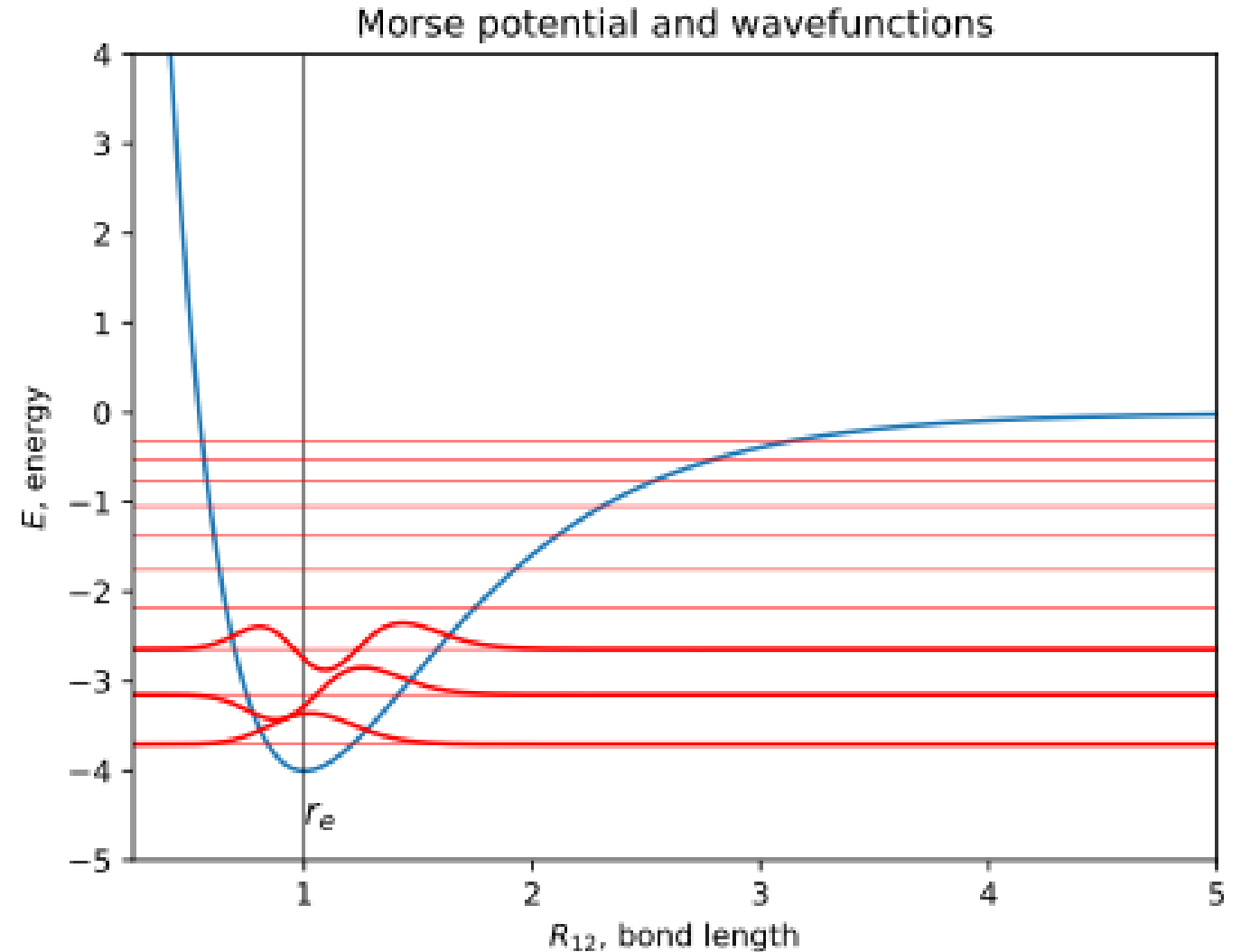
$$[\hat{T}_n + \hat{V}_{nn}(R) + \underbrace{E_e(R)}_{\text{Som regel svært liten!}} + \underline{U(R)}]\Psi_n(R) = E_{tot}\Psi_n(R)$$

# Morse-potensial

- Analytisk løsbar modell for vibrasjoner i toatomige molekyl

$$V(R) = D_e(1 - e^{-\alpha(R-r_e)})^2 - D_e$$

- Kvalitativt korrekt
- Noen egenfunksjoner er vist





# Maxwells bølgelikninger

# Lorentz-kraften

- En klassisk ladet partikkel i et EM-felt opplever en kraft

Lorentz-kraften

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

- **E**: Elektrisk felt, definert overalt i rom og tid
- **B**: Magnetisk felt, definert overalt i rom og tid
- Lorentz forteller hvor ladningene skal bevege seg, gitt EM-feltene
- Vi må gå fra klassisk til kvantemekanisk beskrivelse av kraften
  - Schrödinger!

# Maxwells bølgelikninger

- Bevegelsesloven for EM-felter

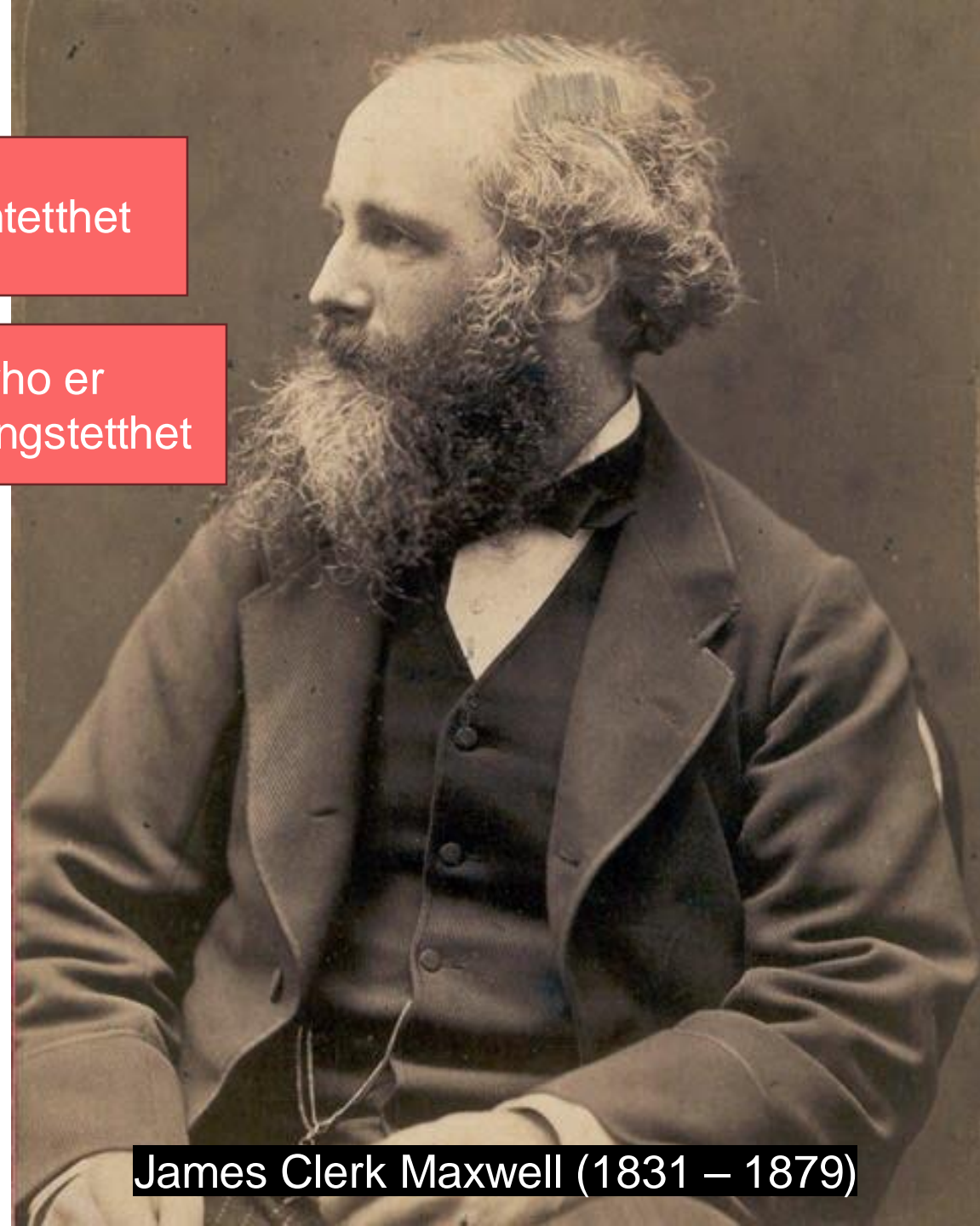
$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \nabla \left( \frac{\rho}{\epsilon_0} \right)$$

J er strømtetthet

rho er  
ladningstetthet

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}$$

- Et par av (inhomogene) bølgelikninger
- Om tetthet og strøm er null, standard ikkedispersiv bølgelikning
- Maxwell forteller hvordan EM-felter utbrer seg, gitt ladningsfordelinger og deres tidsendringer



James Clerk Maxwell (1831 – 1879)

# Planbølger

- Viktige løsnignger:

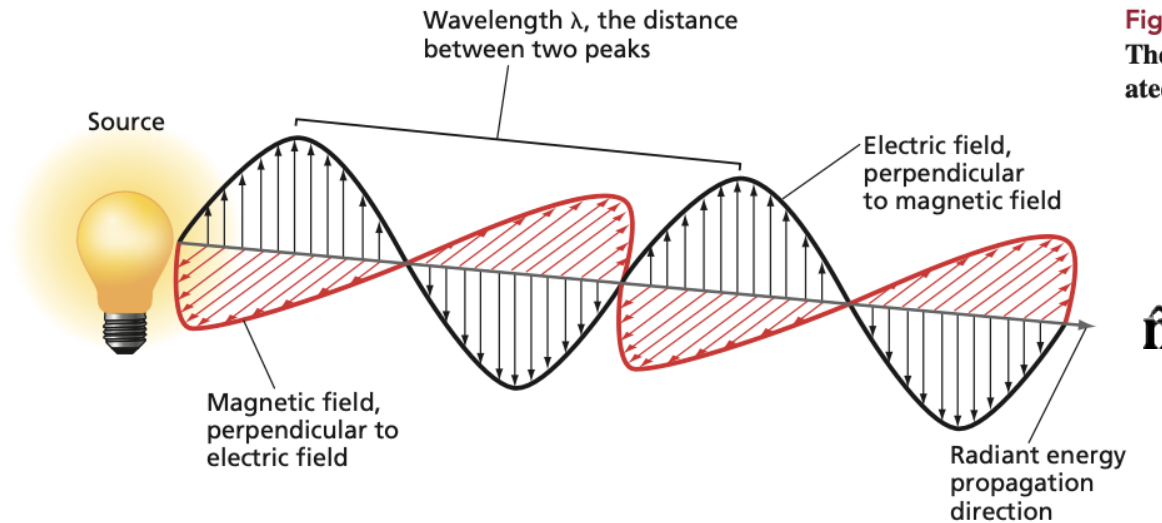
$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

$$|\mathbf{B}| = \frac{|\mathbf{E}|}{c}$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c}(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E})$$

- Feltene ortogonale til utbredelsesretning



**Figure 8.2**

The electric and magnetic fields associated with a traveling light wave.

The background of the slide is a blurred image of a document with Cyrillic text. The text is out of focus, but some words like "средний" (average) and "эффективности" (effectiveness) are partially visible.

# Fra Lorentz til Schrödinger: Vekselvirkning med elektromagnetisk felt



# Dipolapproksimasjonen

- Kvantemekanisk Hamiltonoperator, svake felter med lang bølgelengde:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}$$

$$\hat{\mathbf{d}} = q\mathbf{r}$$

Dipoloperator

- Forteller hvor partikkelen skal gå, gitt eksternt felt.
- For alle partiklene i et molekyl, en dipol per partikkel!

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{d}}_{tot} &= \sum_{i=1}^N e\mathbf{r}_i - \sum_{a=1}^{N_{nuc}} eZ_a \mathbf{R}_a \\ &= \hat{\mathbf{d}}_e(r) + \hat{\mathbf{d}}_n(R), \end{aligned}$$

# Dipoloperator i BO-tilnærming

- Dipoloperator for kjernebevegelse fås ved å integrere ut elektronbevegelse:

$$\int d^N r \Psi_e(r; R)^* \hat{\mathbf{d}}_{tot} \Psi_{tot}(r, R) = \hat{\mathbf{d}}_n(R) \Psi_n(R) + \boldsymbol{\mu}_e(R) \Psi_n(R)$$

$$\boldsymbol{\mu}_e(R) = \langle \Psi_e | \hat{\mathbf{d}}_e | \Psi \rangle = e \sum_{i=1}^N \int d^N |\Psi_e(r; R)|^2 \mathbf{r}_i$$

En slags  
“dipolpotensialflate”

- Hamiltonoperator ved vekselvirkning med felt:

$$\hat{H}(t) = \hat{T}_n + \hat{V}_{nn} + E_e(R) - \hat{\boldsymbol{\mu}}(R) \cdot \mathbf{E}(t)$$

- Teoretisk grunnlag for mye av spektroskopien!

Ekstra term

# Dipoloperator gir dipolmoment

- Dipoloperatoren er observabelen for dipolmoment.
- Dipolmomentet til et molekyl har 2 komponenter:
  - Dipol fra kjernenes ladningsfordeling  $\hat{\mathbf{d}}_{nuc}(R)$
  - Dipol fra elektronenes ladningsfordeling  $\boldsymbol{\mu}_e(\mathbf{R})$

$$\boldsymbol{\mu}_{tot} = \langle \hat{\mathbf{d}}_{tot} \rangle = \langle \Psi_{nuc} | \hat{\mathbf{d}}_{nuc} + \boldsymbol{\mu}_e(\mathbf{R}) | \Psi_{nuc} \rangle$$

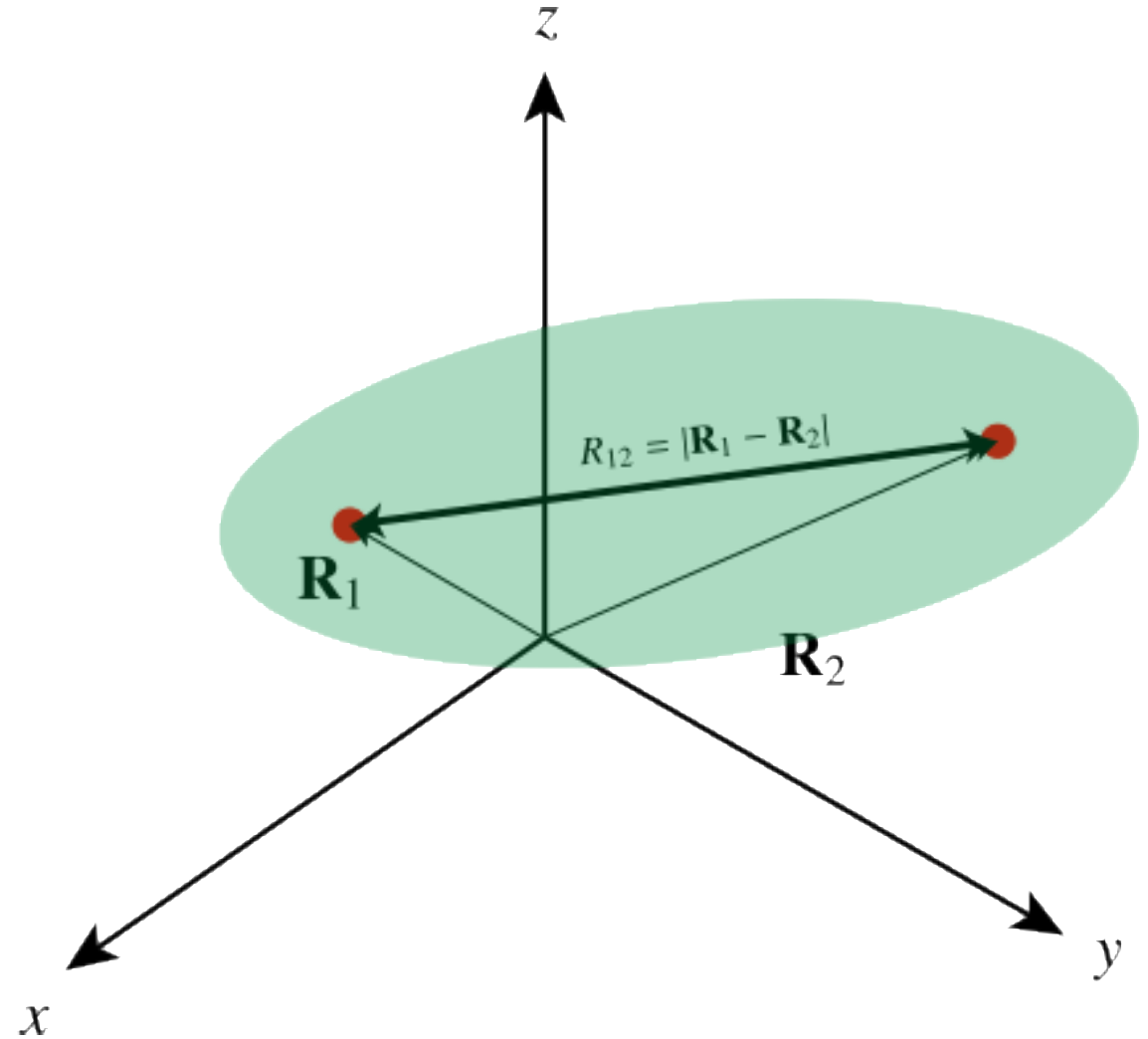
# Homonukleære toatomige molekyl har intet permanent dipolmoment

- Kun avstanden  $R_{12}$  som variabel grunnet symmetri
- Elektrontettheten er symmetrisk fordelt
- Intet elektrondipolmoment

$$\mu_e(R_{12}) = 0 !$$

- Kjernene er også symmetrisk fordelt:

$$\mu_{tot} = \langle \mu_{nuc} \rangle = 0 !$$



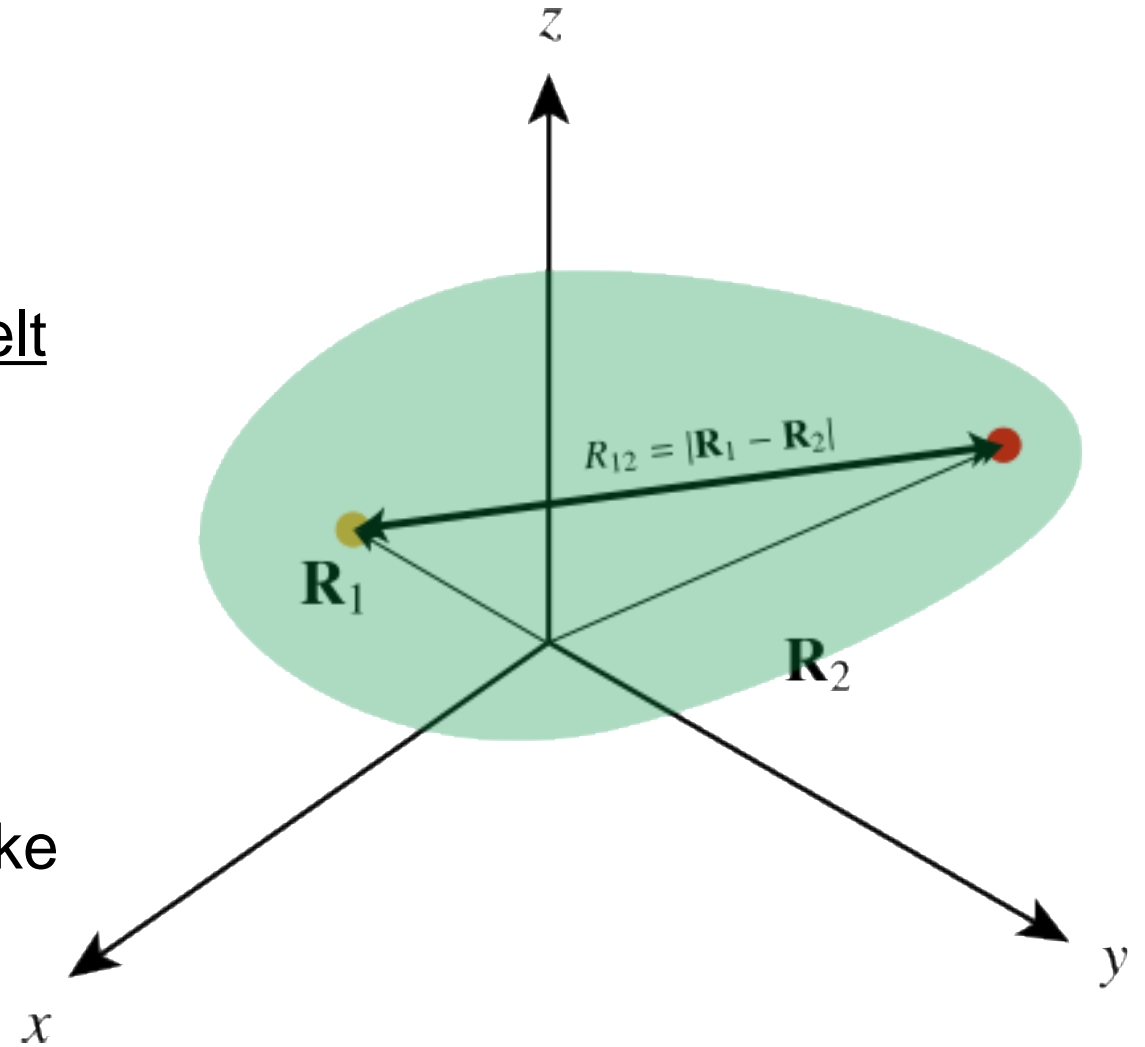
# Heteronukleære toatomige molekyl har permanent dipolmoment

- Kun avstanden  $R_{12}$  som variabel grunnet symmetri
- Elektrontettheten er ikke symmetrisk fordelt
- Elektrondipolmoment

$$\mu_e(R_{12}) \neq 0 !$$

- Kjernenenes ladning kan være symmetrisk (isotopisk substitusjon), men som regel ikke
- Uansett

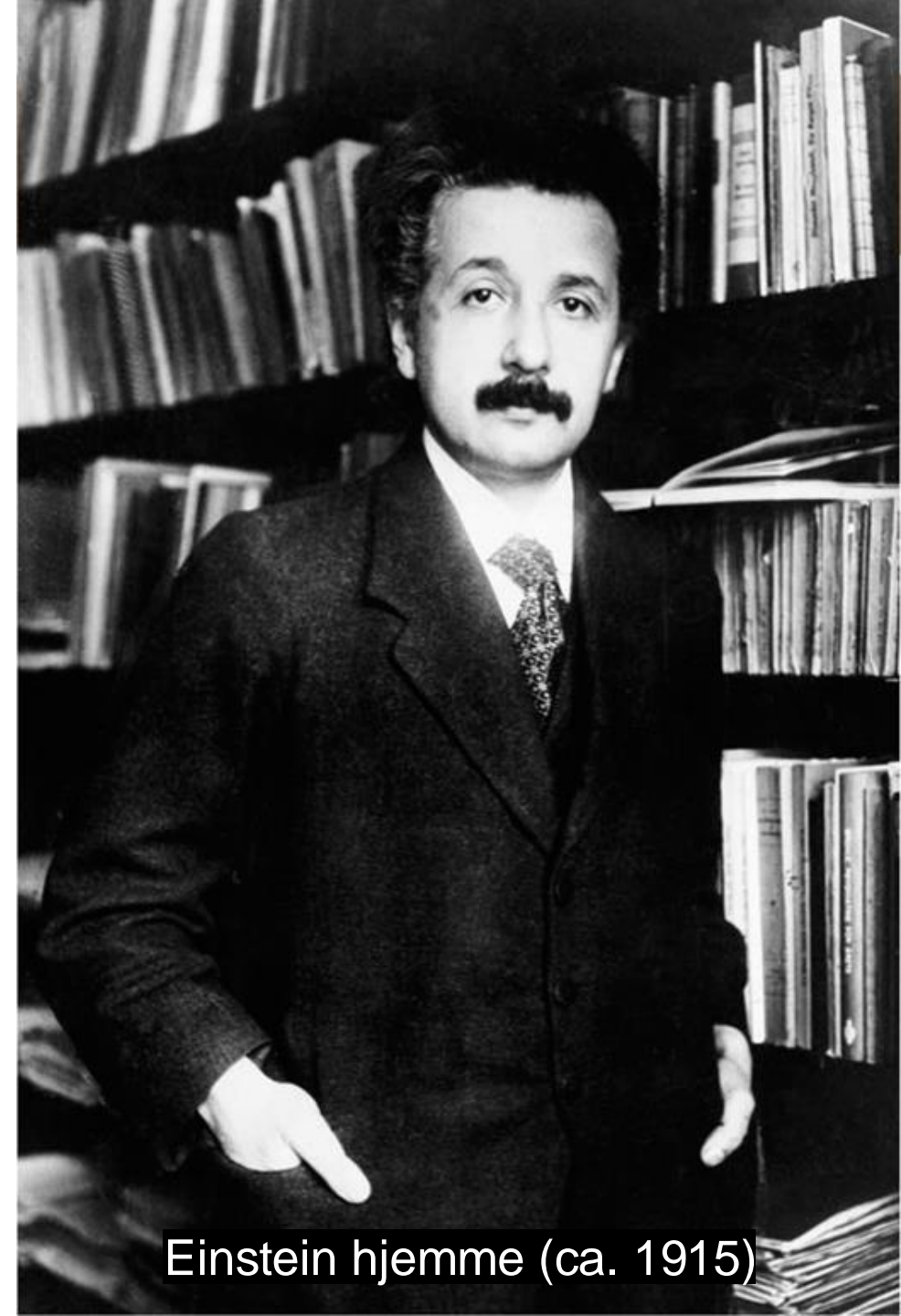
$$\mu_{tot} = \langle \mu_{nuc} \rangle \neq 0 !$$



# Absorbsjon, stimulert emisjon, og spontan emisjon

# Zur Quantentheori der Strahlung

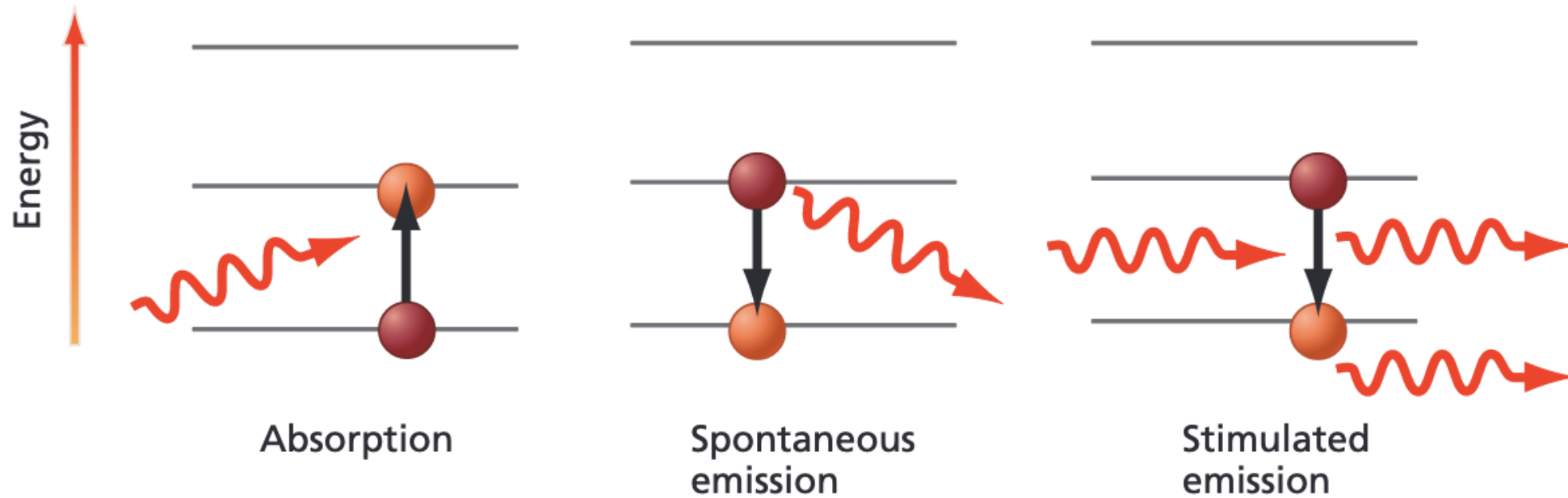
- Klassisk arbeid av Einstein, først publisert i 1916
- Dette var *lenge før Schrödinger*
- Ønsket å utlede Plancks strålingslov
- Stort sett klassiske argumenter
- Introduserer “stasjonære tilstander”
  - Også en sannsynlighetstolkning for atomer
  - Klassisk sett nonsens, siden klassiske elektroner i Bohr-baner skulle sende ut stråling
- [Les en gjennomgang av paperet her!](#)



Einstein hjemme (ca. 1915)



# 3 fundamentale prosesser for foton-assisterte overganger



- Absorpsjon: Et foton "brukes" til å heve energien (fotonet destrueres)
- Spontan emisjon: Et foton sendes ut på et tilfeldig tidspunkt (et foton kreeres)
- Stimulert emisjon: Et foton "spretter" på atomet, får det til å gå ned i energi og sende ut foton (et foton kreeres i tillegg til det gamle)

# Ratelikninger

- Vi ser for oss mange identiske atomer
  - $N_1$ : antall atomer i grunntilstanden
  - $N_2$ : antall atomer i eksitert tilstand
- $A_{21}$ : sannsynlighet per tid for spontan emisjon av foton
- Et foton med  $E=h\nu$  er innkommende:
  - $B_{12}$ : koeffisient for at et foton blir absorbert
  - $B_{21}$ : koeffisient for at et foton blir emittert
  - Total sannsynlighet avhenger også av spektral tetthet

$$\frac{dN_1}{dt} = -B_{12}\rho(\nu)N_1 + B_{21}\rho(\nu)N_2 + A_{21}N_2$$
$$\frac{dN_2}{dt} = B_{12}\rho(\nu)N_1 - B_{21}\rho(\nu)N_2 - A_{21}N_2$$

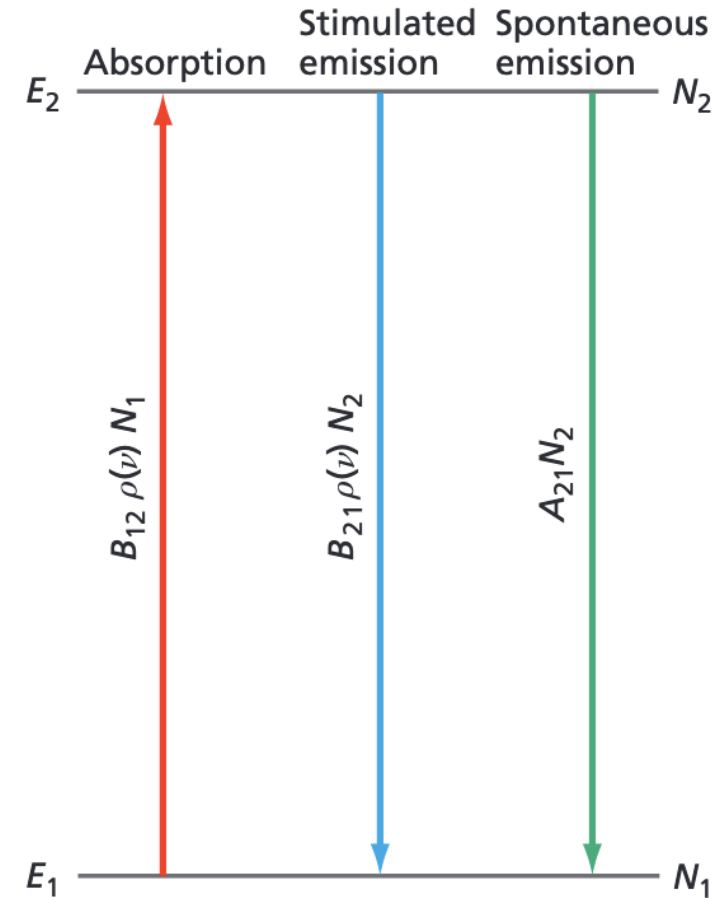


Figure 8.5

# Termisk likevekt

- Termisk likevekt: Ingen endring i populasjonene (steady state)

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{-\Delta E/k_B T} \qquad B_{12}\rho(\nu)N_1 = B_{21}\rho(\nu)N_2 + A_{21}N_2$$

- En kan vise (fra tidsavhengig SL):

$$B_{12} = B_{21}$$

- Ved å anta Plancks lov fant Einstein relasjonen

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{16\pi^2 \hbar \nu^3}{c^3}$$

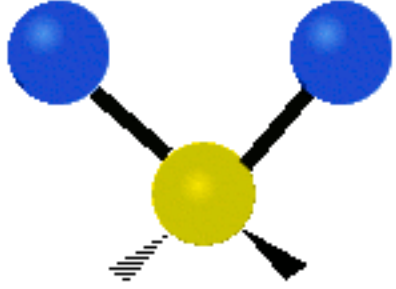
- En kan også vise dette direkte fra kvantefeltteori!

# Vibrasjonsspektroskopi (IR-spektroskopi)

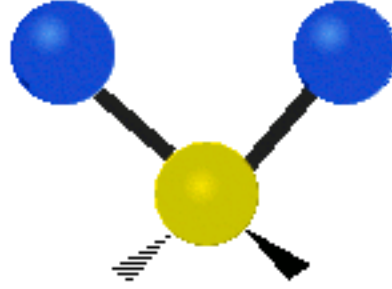
# To grunner til at vibrasjonsspektroskopi har blitt så nyttig

1. Vibrasjonsfrekvensene primært avhengig av identiteten til par eller små grupper av atomer
    - Gruppefrekvenser
  2. Det er bare 1 observerbar frekvens av nevneverdig størrelse assosiert med hver vibrasjonsmode
    - Fra seleksjonsregler og Boltzmann-fordelingen
- Vibrasjonsspektroskopi lar oss - feks:
    - Identifisere funksjonelle grupperes tilstedeværelse
    - Analysere molekylgeometri

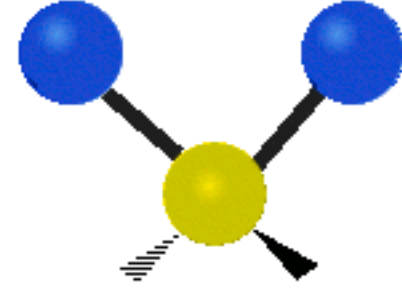
# Karakteristiske vibrasjonelle moder



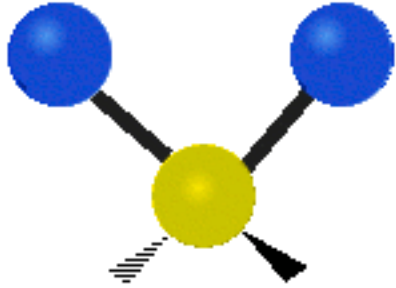
Symmetrisk strekk



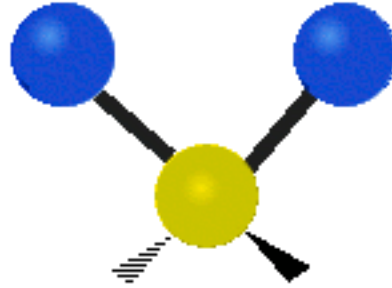
Asymmetrisk strekk



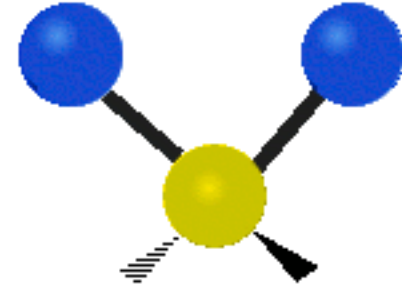
Vridning



Vagging



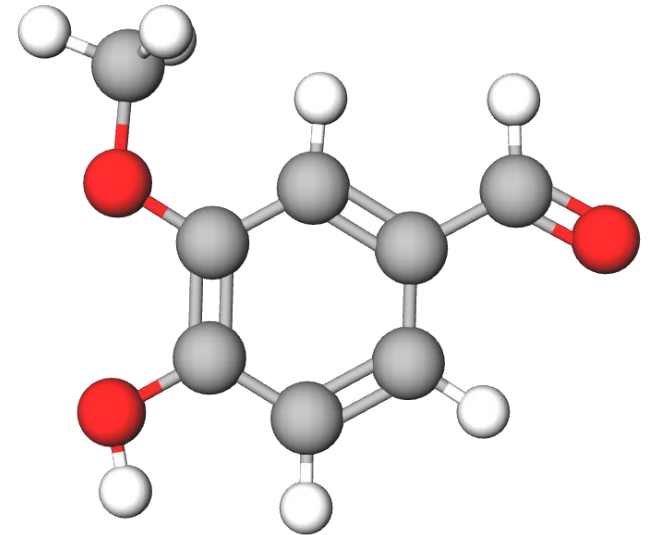
Saksebevegelse



Vipping

# Eksempel

- På ChemTube3D er det mange flotte visualiseringer av molekylære vibrasjoner
- Vi skal se på *vanillin*
  - Aromatisk bestanddel i vanilje
  - Produseres i store mengder som biprodukt fra celluloseindustrien
- Vanillin viser svært tydelig gruppefrekvenser
  - $3784\text{ cm}^{-1}$ : Hydroksyl-gruppe strekk
  - $3263\text{ cm}^{-1}$ : Alken-gruppe symmetrisk strekk
  - $3250\text{ cm}^{-1}$ : Alken-gruppe asymmetrisk strekk
  - $3053\text{ cm}^{-1}$ : Metyl-gruppe symmetrisk strekk
  - $860\text{ cm}^{-1}$ : Alken-gruppe vaggning



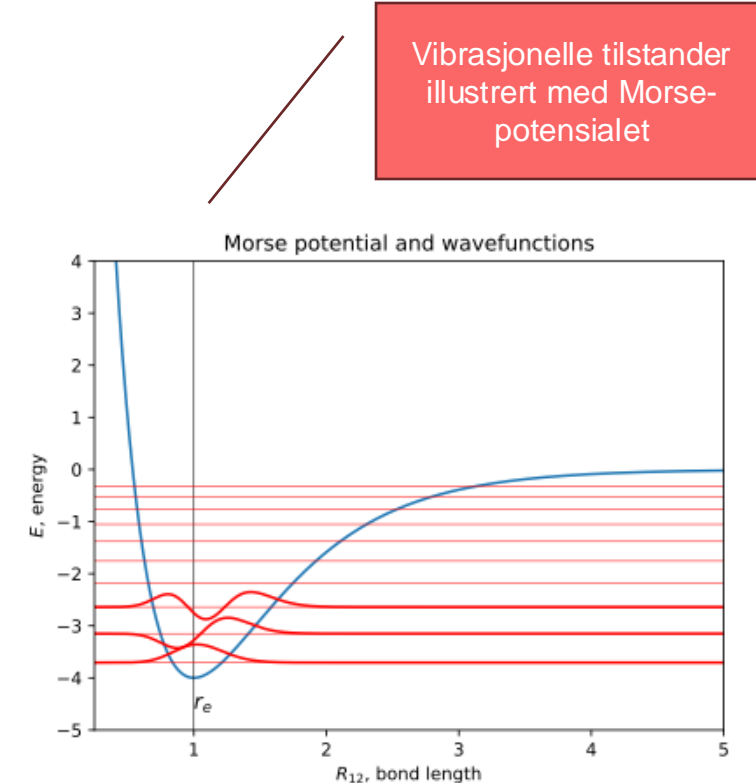


# Populasjoner for vibrasjonelle tilstander ved romtemp.

- For de fleste toatomige molekyler er det kun vibrasjonell grunntilstand som er signifikant populert
- Men overtoner kan også observeres

**TABLE 8.2 Vibrational State Populations for Selected Diatomic Molecules**

Molecule	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\nu$ (s <sup>-1</sup> )	$N_1/N_0$ for 300. K	$N_1/N_0$ for 1000. K
H-H	4400	$1.32 \times 10^{14}$	$6.78 \times 10^{-10}$	$1.78 \times 10^{-3}$
H-F	4138	$1.24 \times 10^{14}$	$2.44 \times 10^{-9}$	$2.60 \times 10^{-3}$
H-Br	2649	$7.94 \times 10^{13}$	$3.05 \times 10^{-6}$	$2.21 \times 10^{-2}$
N-N	2358	$7.07 \times 10^{13}$	$1.23 \times 10^{-5}$	$3.36 \times 10^{-2}$
C-O	2170	$6.51 \times 10^{13}$	$3.01 \times 10^{-5}$	$4.40 \times 10^{-2}$
Br-Br	323	$9.68 \times 10^{12}$	0.213	0.628



# Seleksjonsregler fra dipolmoment

- Kvantemekanisk perturbasjonsteori (om hvordan små forstyrrelser påvirker en tilstand):

- Mulig overgang mellom tilstand  $n$  og  $m$  dersom

$$\mu_{k,l} = \langle \Psi_{n,k} | \hat{\mathbf{d}} | \Psi_{n,k} \rangle \neq 0$$

Overgangsdipolmoment

- Harmonisk approksimasjon + toatomig molekyl:
  - $k - l = \text{oddetall}$
- Vi gjør utledningen på tavla, se Engel 8.4.
- Konklusjon:
  - Overgang fra  $k=0$  til  $l=1$  som er overveldende synlig

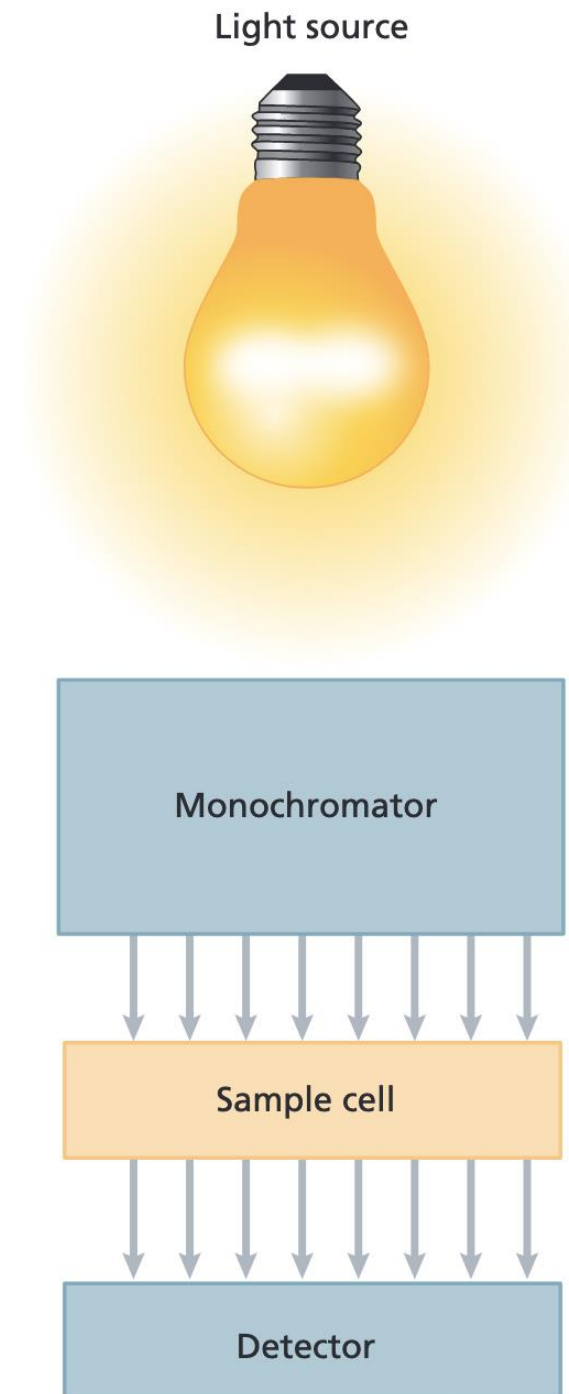
# Dynamisk dipolmoment kreves for overgang

# IR absorpsjonsspektroskopi i "praksis"

- Mål: Beregne absorpsjon som funksjon av frekvens
- Beer-Lambert:

$$I(\lambda) = I_0(\lambda)e^{-\epsilon(\lambda)Ml}$$

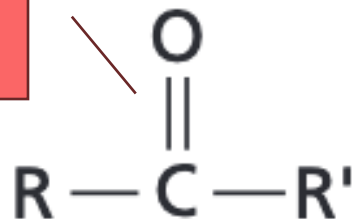
- $\lambda = c/\nu$ , bølgelengde
- $M$  = konsentrasjon av absorbant
- $l$  = lysets veilengde/prøvens lengde
- $I_0(\lambda)$  = innkommende intensitet
- $I(\lambda)$  = utgående intensitet
- $\epsilon(\lambda)$  = molar absorpsjonskoeffisient



# Molar absorpsjonskoeffisient

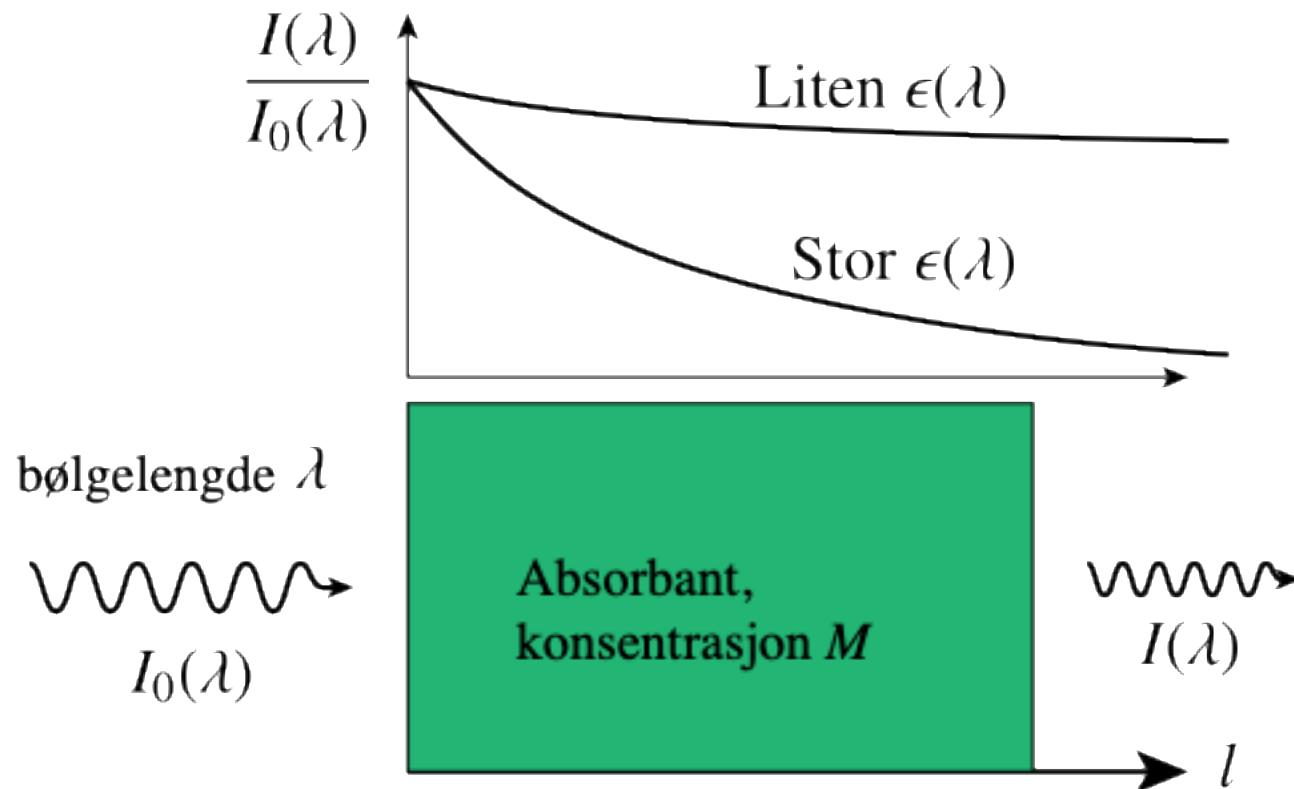
- Absorbant absorberer bølgelengder nær vibrasjonsfrekvenser
- Dersom overgangen endrer dipolmomentet mye: sterkere signal
- Karbonylgruppe:

Tenk på harmonisk oscillator



- Båndet har karakteristisk kraftkonstant

$$\lambda = 2\pi \sqrt{\frac{\mu}{k}}$$

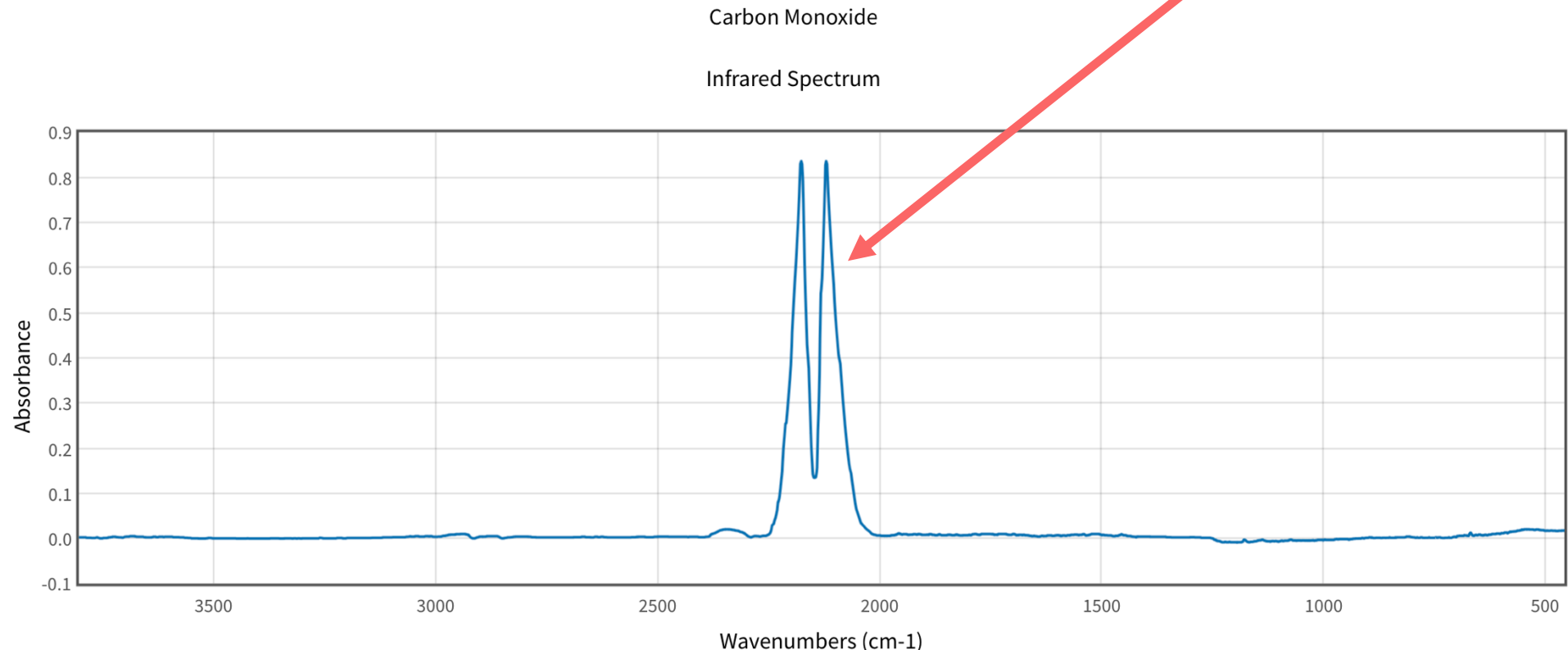


# Fleratomige molekyler: Normalmoder

- Vi har sett at 2-atomige molekyler har 1 forventet frekvens – strekk av bånd
- For fleratomige molekyler ( $N$  atomer):
  - $3N$  totalt antall frihetsgrader
  - 3 translasjonsfrihetsgrader, 3 rotasjonsfrihetsgrader (2 for lineære molekyler)
  - Lineære molekyler:  $3N - 5$  frekvenser
  - Andre molekyler:  $3N - 6$  frekvenser
  - Noen frekvenser er *degenererte*, dvs. identiske
  - Gruppeteori brukes for å forklare dette
  - I prinsippet svinger alle atomene – *normalmoder*
  - Enkelte moder er dominert av karakteristiske grupper og gruppefrekvenser

# Eksempel fra boka

- Hvorfor har ikke CO bare 1 tydelig topp i signalet?
- Rotasjoner er også eksitert
- Vi kommer tilbake til dette: rotasjonsspektroskopi (MW)
- (Kilde: nist.gov)







Rotasjonsspektroskopi

MW-spektroskopi

# Angulærmoment og seleksjon

- Rotasjonsenergier tilsvarer typisk mikrobølgeområdet
- MW-stråling har som regel for lite energi til å eksitere vibrasjoner
- Notasjon for angulærmoment for molekyler:

$$l \longrightarrow J$$

- Seleksjonsregler:

$$\Delta J = J_{slutt} - J_{start} = \pm 1$$

# Eksempel: Overgang fra $J=0$ til $J=1$ og $J=2$

