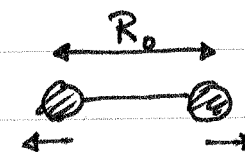
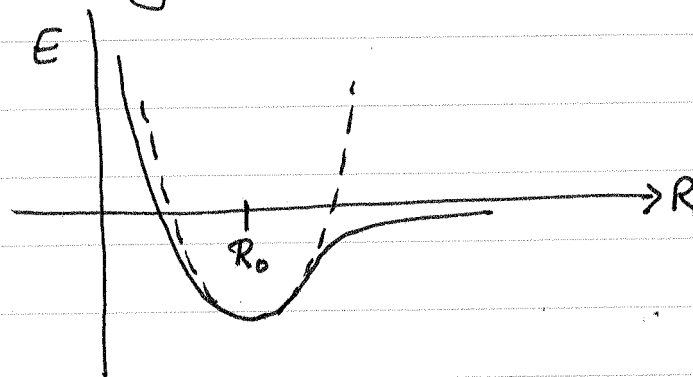


Vibrationsfrekvenser

2-atomig molekyl: ~~diatom~~



⇒ de to atomene bevæger sig i et tilnærmet harmoniske potensial (dvs: kvadratisk) i nærheden af $R = R_0$

(et potensial som bestemmes af ^{elektron til} elektronene i molekylet, i tillegg til kontinuerte funktioner, halve, ganget, solst)

⇒ 1-dim. harmonisk oscillator!

$$V(x) \approx \omega^2 x^2 \Rightarrow \frac{d^2 V}{dx^2} \approx \omega^2 \quad \left(\text{evt. } \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x - x_0)^2 \Rightarrow \omega^2 = \frac{V''(x_0)}{\mu} \right)$$

⇒ ^(oscillation) vibration omkring ligevægtstilstanden R_0 med frekvens

$$f = \frac{\omega}{2\pi} \sim \left(\frac{d^2 V}{dx^2} \right)^{1/2}$$

[dvs prop. med kvadratroten af krumningen til $V(x)$]

Generalisering (uden detaljer) til molekyl med A atomer:

Matrisen J indeholder information om alle mulige vibrations-
bælgelser og tilhørende frekvenser i molekylet.

Diagonalisering af J gir egenverdier prop. med ω_i^2 ;
 $i = 1, 2, \dots, 3A$. 6 stk ω_i er null, vibrerer transl. og rotor
(Lineært molekyl: 5 stk ω er null)