

Molekylrotation

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #molekylfysik #fenomen

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** Masströghetsmoment, Rörelsemängdsmoment, Reducerad massa

En diatomär molekyl kan rotera kring sitt masscentrum, och eftersom det inte finns någon potentiell energi är hela energin kinetisk: $E = K = L^2/2I$. Schrödingerekvationen kvantiserar rörelsemängdsmomentet på samma sätt som för väteatomen, vilket ger diskreta rotationsnivåer med växande avstånd. Övergångarna följer $\Delta l = \pm 1$ och ligger i mikrovågsområdet; $E = 0$ är tillåtet, så rotationen kan frysas ut. Det var så de första bindningsavstånden r_0 mättes.

$$E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I}, \quad I = m_r r_0^2$$

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{E_l}_{\text{bara rörelse-energi}} = \frac{\overbrace{l(l+1)\hbar^2}^{L^2, \text{kvantiserat}}}{2I}$$
$$\underbrace{I}_{\text{tröghetsmoment}} = \underbrace{m_r}_{\text{reducerad massa}} \underbrace{r_0^2}_{\text{bindningsavståndet}^2}$$

Det är den klassiska rörelseenergin $L^2/2I$ med L^2 kvantiserat. Nivåerna växer som $l(l+1)$ och glesnar uppåt, och eftersom I innehåller r_0^2 ger rotationsspektrumet bindningsavståndet.

1. Tröghetsmomentet och den reducerade massan

Vi behandlar molekylerna som två punktmassor m_1 och m_2 på fast avstånd r_0 som roterar kring det gemensamma masscentrum. För att använda formeln i rutan behöver vi **tröghetsmomentet** uttryckt i r_0 .

Masscentrum delar avståndet så att momenten balanserar:

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

$$r_1 + r_2 = r_0$$

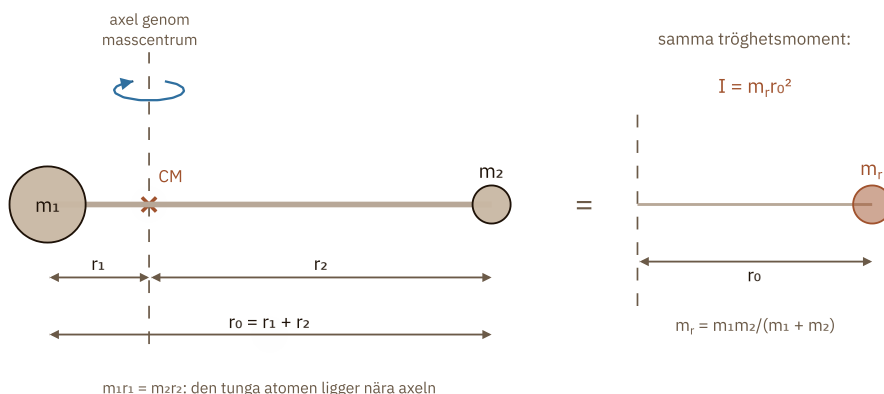
$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r_0, \quad r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r_0$$

Insatt i tröghetsmomentet för två punktmassor:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{m_1 m_2^2 + m_2 m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} r_0^2$$

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r_0^2 = m_r r_0^2$$

Rotationen av två kroppar blir alltså densamma som rotationen av en enda kropp med den **reducerade massan** m_r på avståndet r_0 från axeln. När den ena atomen är mycket lättare, som väte i HCl, blir m_r nästan lika med den lätta massan.



Molekylen som en hantel. Masscentrum ligger nära den tunga atomen, och rotationen kring det har samma tröghetsmoment som en enda kropp med den reducerade massan m_r på avståndet r_0 från axeln.

2. Nivåerna och avståndet mellan dem

All energi är kinetisk, $E = L^2/2I$, och **rörelsemängdsmomentet** är kvantiserat som $L^2 = l(l+1)\hbar^2$. Det ger formeln i rutan. För att slippa skriva bråket kortar vi

$$B = \frac{\hbar^2}{2I} \quad \Rightarrow \quad E_l = l(l+1)B$$

Avståndet mellan två grannivåer:

$$E_l - E_{l-1} = B[l(l+1) - (l-1)l]$$

$$E_l - E_{l-1} = 2lB$$

$$E_l - E_{l-1} = \frac{l\hbar^2}{I}$$

Avståndet växer linjärt med l : nivåerna $0, 2B, 6B, 12B, \dots$ glesnar uppåt. Typiska värden på B är några tiondels till några meV, långt under $kT \approx 26$ meV vid rumstemperatur. Därför är många rotationsnivåer besatta samtidigt i en gas.

3. Urvalsregeln och rotationsspektrumet

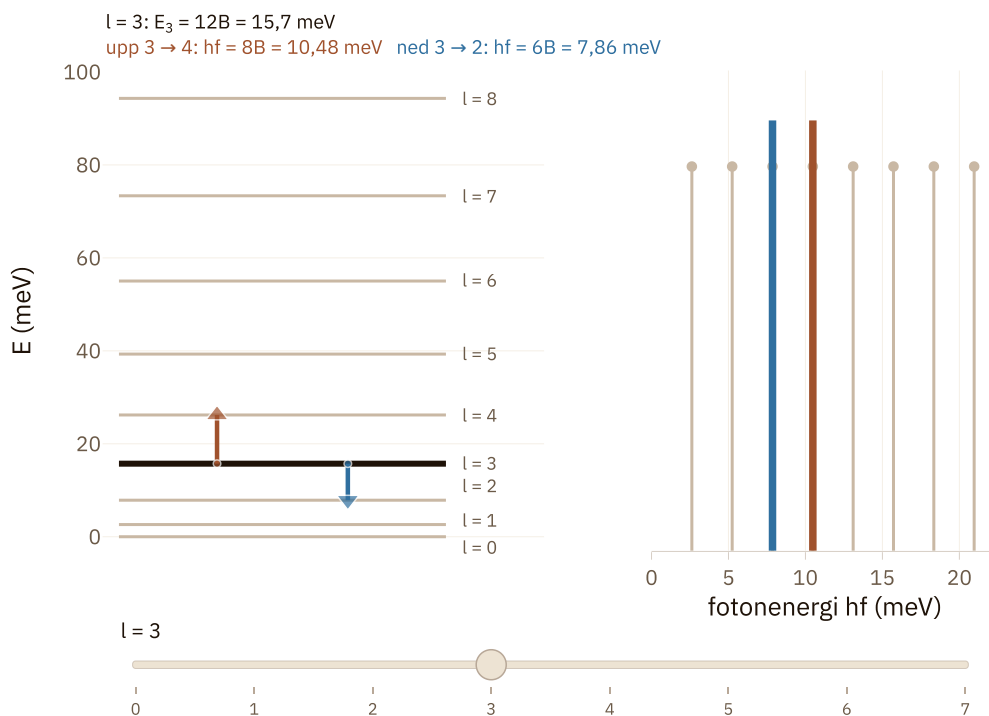
En foton bär rörelsemängdsmomentet $\hbar$, så vid absorption eller emission ändras l med exakt ett steg (se [Urvalsregler](#)):

$$\Delta l = \pm 1$$

Absorption från $l - 1$ till l kräver då fotonenergin

$$hf = E_l - E_{l-1} = 2lB, \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

Det rena rotationsspektrumet är alltså en serie linjer vid $2B, 4B, 6B, \dots$ med **konstant** avstånd $2B = \hbar^2/I$ mellan linjerna, trots att nivåerna glesnar. Fotonenergierna är några meV, vilket motsvarar våglängder från tiondels millimeter och uppåt: fjärr-IR och mikrovåg.



Rotationsnivåerna $E_l = l(l+1)B$ för HCl ($B = 1,31$ meV), med reglage för l . Absorptionen $l \rightarrow l+1$ (orange) och emissionen $l \rightarrow l-1$ (blå) följer $\Delta l = \pm 1$. Nivåerna glesnar uppåt, men linjerna till höger ligger med det konstanta avståndet $2B$.

Molekylen måste ha ett permanent **dipolmoment** för att fältet ska kunna vrida den. HCl och CO har ett rotationsspektrum, men H₂, N₂ och O₂ har det inte.

4. Bindningsavståndet ur spektrumet

Mäter vi den lägsta linjen, övergången $0 \rightarrow 1$, går räkningen baklänges:

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1} = E_1 - E_0 = 2B = \frac{\hbar^2}{I}$$

$$I = \frac{\hbar^2}{\Delta E_{0 \rightarrow 1}}$$

$$m_r r_0^2 = \frac{\hbar^2}{\Delta E_{0 \rightarrow 1}}$$

$$r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_r \Delta E_{0 \rightarrow 1}}}$$

Med $\Delta E_{0 \rightarrow 1} = hf$ räcker en frekvensmätning för att bestämma bindningsavståndet. Linjerna kan mätas med sex-sju värdesiffror, så r_0 blir mycket noggrant bestämt.

Vanliga fel

- **Atommassan i stället för den reducerade massan.** $I = m_r r_0^2$, inte $m_1 r_0^2$ eller $(m_1 + m_2) r_0^2$. För HCl är skillnaden mellan m_r och väteatomens massa bara 3 %, men för CO är m_r knappt hälften av syreatomens massa.
- **l^2 i stället för $l(l+1)$.** Nivån $l = 1$ ligger på $2B$, inte på B .
- **Nivåavståndet tas som konstant.** Nivåerna glesnar ($2lB$). Det är *linjerna* i spektrumet som ligger med konstant avstånd $2B$.
- **Fel övergång läses av.** Frekvensen för $l \rightarrow l+1$ är $(l+1) \cdot 2B/h$. Står det "den tredje linjen" menas övergången $2 \rightarrow 3$, inte $3 \rightarrow 4$.
- **u omvandlas inte till kg.** $1 \text{ u} = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ måste in innan I räknas i SI.

5. Lösta exempel

≡ Exempel – Rotationsnivåer i HCl

HCl-molekylen (^1H : 1,008 u, ^{35}Cl : 34,969 u) har bindningsavståndet 0,1275 nm. Bestäm den reducerade massan, tröghetsmomentet, energin för nivån $l = 1$ och våglängden för övergången $l = 3 \rightarrow 2$.

Lösning

Reducerade massan.

$$m_r = \frac{1,008 \cdot 34,969}{1,008 + 34,969} \text{ u} = 0,980 \text{ u} = 0,980 \cdot 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = \boxed{1,63 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}$$

Fysika: Te

Tröghetsmomentet.

$$I = m_r r_0^2 = 1,627 \cdot 10^{-27} \cdot (0,1275 \cdot 10^{-9})^2 = \boxed{2,64 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2}$$

Energienheten B .

$$B = \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{(1,0546 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 2,645 \cdot 10^{-47}} = 2,10 \cdot 10^{-22} \text{ J} = 1,31 \text{ meV}$$

$$\text{Nivån } l = 1. E_1 = 1 \cdot 2 \cdot B = \boxed{2,62 \text{ meV}}.$$

Övergången $3 \rightarrow 2$. Nivåavståndet är $2lB$ med $l = 3$:

$$\Delta E = 6B = 7,87 \text{ meV}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{7,87 \cdot 10^{-3} \text{ eV}} = 1,58 \cdot 10^5 \text{ nm} = \boxed{158 \mu\text{m}}$$

Våglängden ligger i fjärr-IR, som väntat för en rotationsövergång. Det är tillåtet enligt $\Delta l = -1$, så linjen syns i emission.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

☰ Exempel – Bindningsavståndet i HF

Vätefluorid (^1H : 1,008 u, ^{19}F : 18,998 u) absorberar vid 1,233 THz i övergången $l = 0 \rightarrow 1$. Bestäm molekyllens bindningsavstånd och frekvensen för övergången $l = 1 \rightarrow 2$.

Lösning

Reducerade massan.

$$m_r = \frac{1,008 \cdot 18,998}{1,008 + 18,998} \text{ u} = 0,957 \text{ u} = 1,59 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Energien för $0 \rightarrow 1$.

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1} = hf = 6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 1,233 \cdot 10^{12} = 8,17 \cdot 10^{-22} \text{ J} = 5,10 \text{ meV}$$

Tröghetsmomentet. $\Delta E_{0 \rightarrow 1} = \hbar^2/I$ ger

$$I = \frac{\hbar^2}{\Delta E_{0 \rightarrow 1}} = \frac{(1,0546 \cdot 10^{-34})^2}{8,17 \cdot 10^{-22}} = 1,36 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$$

Bindningsavståndet.

$$r_0 = \sqrt{\frac{I}{m_r}} = \sqrt{\frac{1,36 \cdot 10^{-47}}{1,59 \cdot 10^{-27}}} = 9,25 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \boxed{0,0925 \text{ nm}}$$

Övergången $1 \rightarrow 2$. Linjeenergin är $2IB$, så linjen för $l = 2$ har dubbla energin mot $l = 1$:

$$f_{1 \rightarrow 2} = 2f_{0 \rightarrow 1} = \boxed{2,47 \text{ THz}}$$

Rimlighetskontroll. HF är kortare än HCl (0,1275 nm), vilket stämmer med att fluor är en mindre atom än klor.

Ej kontrollerat mot facit — två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 42.2 Molecular Spectra
