

Shrnutí přednášky č. 3 ze Základů fyzikální chemie (C4660) s tématem **Interakce elektromagnetického záření s molekulami**

1. Elektromagnetické záření se na atomech a molekulách může absorbovat, rozptylovat, lámat, interferovat; někdy mohou látky světlo vyzařovat.
2. Elektromagnetické záření o různých vlnových délkách může reagovat různě - může dojít k excitaci translační, rotační (mikrovlny), vibrační (infračervené záření) či elektronové (UV-Vis).
3. Procesy v mikrosvětě jsou kvantované - probíhají po malých krocích. Bez kvantování nejde vysvětlit fotoelektrický jev, rozložení záření pevných látek ani plynů.
4. Teplota významně ovlivňuje obsazenost hladin podle jejich vzájemné energie.
5. Aby došlo k absorpci musí
 - (a) být splněna (Bohrova) rezonanční podmínka:
$$E = h\nu$$
 - (b) existovat rozdíl v populaci stavů
 - (c) přechod být povolený výběrovými pravidly.
6. Pravděpodobnosti stimulované absorpce a emise jednoho přechodu jsou stejné.
7. Spektrum je závislost na energii. Spektrální čára je charakterizována polohou (informace o energii), intenzitou (povolenost přechodu) a šířkou (vypovídá o dynamice přechodu). Čím kratší je doba přechodu, tím širší musí být spektrální čára dle Heisenbergova principu neurčitosti.
8. Jednotlivé děje probíhají tím rychleji, čím jsou energie stavů k sobě blíže.
9. To je pro "velké" molekuly dobře znázorněno na Jablonského diagramu na kterém je velmi dobře znázornitelná zejména absorpce, fluorescence a fosforescence.

10. Přejchod energeticky vyššího rozdílu bývá doprovázen přechody nižšími. Takže elektronové spektrum bývá pásové kvůli přítomnosti vibračních přechodů a na vibračním spektru v plynné fázi mohou být vidět rotační přechody.
11. Jádra atomů jsou nejméně 1000 krát těžší než je hmotnost elektronu, a proto se jádra pohybují podstatně pomaleji než elektrony. Tento fakt je vyjádřen tzv. Franck-Condonovým principem a je zodpovědný za tzv. vertikální excitace a emise.
12. Energetická degenerace některých stavů může být odstraněna působením vnějšího pole (magnetického).
13. Vlnění může na molekulách či krystalech difraktovat a interpretací difrakčního obrazce se můžeme dozvědět o vzájemných polohách.