

Cvičení č. 3 ze Základů fyzikální chemie (C4660) **zadání**
Interakce elektromagnetického záření s molekulami

1. Ionizační energie atomu vodíku je 13.6 eV. Vyjádři ji v joulech pro jeden mol atomů vodíku.
2. Světlo v barvě indigo má vlnovou délku 420 nm. Jakou energii (v eV) nese příslušný foton?
3. Jaké budou rozdíly energií dvou hladin [J] a jaký bude Boltzmannův faktor pro přechody odpovídající nejnižší elektronové absorpci pro atom vodíku (z 1s do 2s, když $Ry = 13.6$ eV), typické vibrační $\tilde{\nu} = 3000$ cm^{-1} a rotační $\nu = 30$ GHz excitaci při 300 K?
4. Jaké bude obsazení těchto hladin při 1000 K?
5. V návaznosti na předešlý příklad: U kterých ze zmiňovaných absorpčních spektroskopí má snížení teploty (z 1000 K na 100 K) naději významně zlepšit poměr signálu k šumu kvůli zvýšení rozdílu v zastoupeních na diskutovaných hladinách?
6. Jaký je poměr v zastoupení populací při 315° a 415° F, pokud jsou si hladiny energií sobě rovné?
7. Uvažujme dva stavy, každý vykazuje fluorescenci. První z nich má dobu života 200 fs a druhý 7 ps. Který z nich bude mít užší přirozenou šířku emisního pásu?
8. Z relace Heisenbergovy neurčitosti odvoď vztah (daný bez odvození v přednášce) mezi šířkou spektrální linie a dobou života daného stavu. $[\delta\tilde{\nu} = \frac{5.3 \text{ cm}^{-1}}{\delta\tau/\text{ps}}]$
9. Energie potřebná k rozštěpení chemické vazby je řádově ve stovkách kJ mol^{-1} . Převed' na tyto jednotky [J mol^{-1}] typické velikosti rezonančních energií rotací (30 GHz), vibrací (3000 cm^{-1}) a elektronových přechodů (300 nm) a srovnajte s energií vazeb. Jaké excitace mohou způsobit rozrušení slabých (vodíková vazba ca. 21 kJ mol^{-1}) a kovalentních (C-C ca 350 kJ mol^{-1}) vazeb?
10. Doba trvání daného děje se dá odhadnout jako $\tau = 1/\nu$. Pro rezonanční energie v minulém příkladu spočítej typické doby trvání vibrace vazby a rotace molekuly.
11. Uvažujme model pro molekuly, ve kterém považujeme atomy za hmotné bodové (bezrozměrné) objekty a vazby za pevné tyčky (model tuhého setrvačnicku). Necht' molekula rotuje ve třech na seba vzájemně kolmých osách, které procházejí jejím těžištěm. Kolik lze nalést různých momentů setrvačnosti pro molekulu vody, chlórovodíku, kyanovodíku, methanu, iodmethanu, benzenu a fluoridu sírového. Dají se molekuly zařadit do následujících skupin?
 - (a) Kulový (sferický) setrvačnick ($I_c = I_b = I_a$)
 - (b) Lineární setrvačnick ($I_c = I_b > I_a = 0$)
 - (c) Symetrický setrvačnick ($I_c = I_b > I_a \neq 0$ nebo $I_c > I_b = I_a \neq 0$)
 - (d) Asymetrický setrvačnick ($I_c \neq I_b \neq I_a$)

12. Vypočti moment setrvačnosti pro molekulu vody kolem C_2 rotační osy, je-li velikost úhlu HOH $104,5^\circ$ a délka vazby OH je $95,7$ pm.

Konstanty:

Boltzmanova konstanta

$$k_B = 1.380648 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

Planckova konstanta

$$h = 6.626069 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

Rychlost světla ve vakuu

$$c = 299792458 \text{ m s}^{-1}$$

Velikost elementárního náboje

$$e = 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Vztahy:

$$\Delta E = E_p = h\nu = hc\tilde{\nu} = hc/\lambda$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq h/2\pi$$

$$\Delta E \Delta t \geq h/2\pi$$

$$\lambda = 1/\tilde{\nu}$$

Boltzmanův faktor

$$N_n/N_m = e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}$$