

Okruhy ZK otázek z předmětu C9550 Strukturní chemie pro PS 2010/2011:
Část 1 (přednášející a zkoušející Markéta Munzarová)

1. Principy molekulové spektroskopie. Spontánní emise, absorpce, stimulovaná emise, rozptyl záření. Oblasti vlnových délek EM záření a druhy molekulových excitací. Komponenty spektrometru. Přírozená šířka linií, Dopplerovské rozšíření, rozšíření vlivem tlaku, způsoby ovlivnění šířky linií ve spektru. Intenzita linií: populace hladin při spontánní emisi, absorpci, stimulované emisi; stacionární stavů intenzita linií pro absorpci v různých oblastech spektra.
2. Kvantověmechanické základy molekulové spektroskopie I. (Probíraly se a zkoušejí se pouze nutné základy nepokryté kurzy C9920 a C9930.) Postulát o střední hodnotě veličiny, postulát o časově závislé Schrödingerově rovnici. Přesná řešení Schrödingerovy rovnice: částice na kruhu: energie a vlnové funkce, částice na sféře: energie a vlnové funkce, vztah k energii tuhého rotátoru.
3. Kvantověmechanické základy molekulové spektroskopie II. Harmonický oscilátor: princip rekurzivního vzorce, hladiny energie a vlnové funkce. Přibližná řešení Schrödingerovy rovnice - časově závislá poruchová teorie: tvar vlnové funkce jako kombinace základního a excitovaného stavu, pravděpodobnost přechodu v případě periodické poruchy, význam pojmu přechodový moment. Princip výběrových pravidel.
4. Rotační spektra. Rotační hladiny energie, klasifikace rotátorů. Volný lineární rotátor: tuhý rotátor – energiové hladiny a vlastní funkce, rotační konstanta, výběrová pravidla; intenzity linií, využití mikrovlnné spektroskopie. Netuhý rotátor: vztah pro energii.
5. Vibrační spektra. Dvouatomové molekuly: Anharmonický oscilátor, Morseho potenciál. Přibližné řešení Schrödingerovy rovnice s Morseho potenciálem. Základní a vyšší harmonické frekvence. Anharmonický oscilátor-rotátor. Vibrační spektra víceatomových molekul: výpočet lineárních vibrací pro CO₂: formulace úlohy, soustava rovnic k níž úloha vede, výsledné frekvence.
6. Elektronová spektra. Frank-Condonův princip (výběrová pravidla pro elektronové přechody). Intenzita linií v závislosti na překryvu elektronových funkcí základního a excitovaného stavu.
7. Elektronová paramagnetická rezonance. Operátory a vlastní funkce spinu. Spiny v magnetickém poli. Přechody mezi vlastními stavy. Techniky pro seldování přechodů. Hladiny energie v přítomnosti magnetického pole, nepárového elektronu a magnetického jádra. Pojmy spinová hustota a spinová polarizace.