

Okruhy ZK otázek z předmětu C9550 Strukturní chemie pro PS 2011/2012:  
Část 1 (přednášející a zkoušející Markéta Munzarová)

1. **Principy kvantové mechaniky.** Postulát o vlnové funkci. Postulát o operátorech, vlastní funkce operátoru. Postulát o střední hodnotě veličiny. Hermitovské operátory. Postulát o časově závislé Schrödingerově rovnici. Stacionární Schrödingerova rovnice.
2. **Přesná řešení Schrödingerovy rovnice.** Částice na kruhu, částice na sféře, částice v coulombovském poli, harmonický oscilátor: Energie a vlnové funkce.
3. **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. **Principy molekulové spektroskopie.** Spontánní emise, absorpce, stimulovaná emise, rozptyl záření. Oblasti vlnových délek EM záření a druhy molekulových excitací. Komponenty spektrometru. Přirozená 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.
5. **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.
6. **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  $\text{CO}_2$ : formulace úlohy, soustava rovnic k níž úloha vede, výsledné frekvence.
7. **Elektronová spektra.** Born-Oppenheimerova aproximace a tvar vlnové funkce v této aproximaci. Frank-Condonův princip (výběrová pravidla pro elektronové přechody). Intenzita linií v závislosti na překryvu elektronových funkcí základního a excitovaného stavu.
8. **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. g-faktor a hyperjemná štěpící konstanta. Pojmy spinová hustota a spinová polarizace. Souvislosti mezi strukturou a hyperjemným štěpením pro organické radikály.