**ZK C9550, Kvantová chemie a molekulová spektroskopie, 6. února 2017**

1. Pro teploty 25 oC a 1000 oC vypočtěte podíl počtu molekul v typickém rotačním, vibračním a elektronovém excitovaném vztahu vůči počtu molekul v příslušném základním stavu. Excitované stavy leží 30 cm-1, 1 000 cm-1, a 40 000 cm-1 nad příslušným základním stavem rotačním, vibračním, resp. elektronovým. Předpokládejte, že excitovaný rotační stav odpovídá J=4 a že všechny ostatní stavy jsou bez degenerace.

[Ve výpočtech uvažujte následující přesnost: *h*=6.626 x 10-34 J s, *c*=2.998 x 1010 cm s-1, k=1.381 x 10-23 J K-1, T(0 oC) ≡ 273 K.. . Degenerace hladiny s rotačním kvantovým číslem *J* je rovna 2*J*+1. ] (3 body)

1. Princip výběrových pravidel vychází mj. z následujícího vztahu:
2. Jaký je fyzikální význam derivace ? (1 bod)
3. Jak nazýváme oprátor ? S jakou klasickou měřitelnou veličinou tento oprátor souvisí? (2 body)
4. Jaká nutná podmínka vyplývá pro veličinu z odstavce (b) v případě dovoleného rotačního přechodu? (1 bod)
5. Jaká nutná podmínka vyplývá pro veličinu z odstavce (b) v případě dovoleného vibračního přechodu? (1 bod)
6. Na obrázku jsou znázorněny hladiny energie a jejich degenerace pro sférický rotátor.



1. Jaké hodnoty energie v jednotkách *hcB* budou odpovídat dovoleným spektrálním přechodům mezi všemi hladinami, které jsou na obrázku znázorněny ?

(2 body)

1. Jak se nazývá veličina *B* a k čemu ji lze (po spektroskopickém určení) využít?

(2 body)

1. Lze z daného obrázku určit, pro jaké hodnoty J→J´ budeme pozorovat nejintenzívnější spektrální linii? Proč?

(2 body)

1. Který kvantově-mechanický model je reprezentován vlnovými funkcemi na obrázku? Doplňte ke všem vlnovým funkcím odpovídající kvantová čísla.

(3 body)

 

1. Pomocí schématu přechodů mezi energiovými hladinami načrtněte, jak vzniká
2. Rayleighův rozptyl
3. Ramanův rozptyl: Stokesovy a Anti-Stokesovy linie (2 body)
4. Na obrázku je znázorněn tvar Dopplerovsky rozšířené spektrální čáry. Vysvětlete, proč velikost Dopplerovského rozšíření závisí na teplotě kvalitativně tak, jak znázorňuje obrázek. (2 body)
5. Které z následujících molekul mohou vykazovat klasické rotační spektrum?

(a) H2, (b) HCl, (c) CO2 (d) H2O (e) CH4 (f) CH3Cl (3 body)

1. Zformulujte výběrová pravidla pro vibrační spektra v harmonické a anharmonické aproximaci.

Nakreslete strukturu vibračně-rotačního pásu a vysvětlete původ dvou spektrálních větví. (4 body)

8. (a) Vysvětlete, proč znázorněné elektronové přechody na obrázku budou intenzivnější než přechody mezi dvěma elektronovými stavy odpovídajícími stejnému vibračnímu stavu. (2 body)

(b) Vysvělete, proč jsou vůči sobě Morseho křivky pro základní a excitovaný stav typicky posunuty způsobem znázorněným na obrázku. (1 bod)

9. Nakreslete energiové schéma EPR přechodů v případě (a) jednoho nepárového elektronu a

(b) jednoho nepárového elektronu a jednoho magnetického jádra s e spinem ½.

(4 body)

34 bodů maximum

0-16: F, 17-20 E, 21-24 D, 25-27 C, 28-30 B, 31-34A (hodnocení **písemné** části)