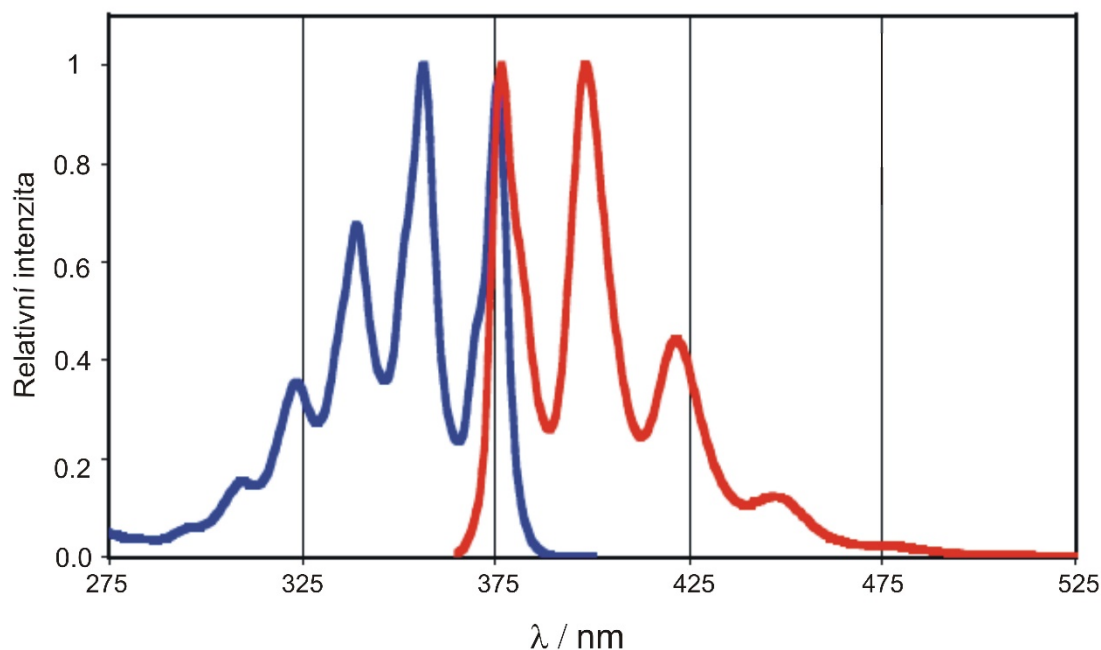


Zápočtový test – Chemická struktura B, opravný termín

1. Popište fyzikální principy infračervené vibrační a Ramanovy vibrační spektroskopie.
2. Sestavte nerelativistický hamiltonián pro molekulu H_3^+ .
3. Přirozená šířka elektronového pásu je 100 cm^{-1} . Odhadněte dobu života excitovaného stavu s použitím Heisenbergova principu neurčitosti.
4. Uvažujme 1 vibrační mód - rozpínání benzenového kruhu. Je aktivní v IČ respektive Ramanově vibrační spektroskopii? Vysvětlete proč. Kolik celkem vibračních normálních módů má molekula benzenu? Zdůvodněte.
5. UV-VIS absorpční a emisní spektrum antracenu rozpuštěném v etanolu je zobrazené na obrázku 1. Které ze spekter odpovídá fluorescenci a které absorpci? Vysvětlete “zrcadlový obraz” obou spekter. Diskutujte, čemu odpovídají jednotlivé pásy.

Obrázek 1:



6. Matematický aparát (vyberte si **dvě** úlohy z nabízených čtyřech)

(a) Ukažte, že $f(x,y) = \sin(kx) + \cos(ky)$ je vlastní funkcí operátoru $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Jaká je vlastní hodnota?

(b) Vypočtete hodnotu výrazu $\frac{1}{w} + \frac{1}{z}$, kde $w = 1 - i$; $z = 1 + i$.

(c) Zkuste najít normovanou funkci $f(x) = \sin^2(ax)$ na intervalu $\langle 0, L \rangle$, tedy takové N_0 , aby platilo $N_0 \int_0^L \sin^2(ax) dx = 1$ (integrace per partes)

(d) Zkuste rozvinout funkci $f(x) = \sin(kx^2)$ v bodě $x = 0$ za použití Taylorova rozvoje do druhého řádu (tedy jako kvadratický polynom)

7. O jakou hodnotu energie od sebe musí být vzdálené dvě energetické hladiny, aby poměr jejich populací byl při pokojové teplotě ($T = 298.15$ K) 9:1; tedy vyšší hladina je populována 10% z celkového množství částic (stavů).
8. Napište a vyčíslete komutační relace (tj. nalezněte hodnotu komutátoru) pro všechny různé dvojice operátorů z množiny $\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{L}_x$.
9. Mějme kovový materiál, ve kterém je ionizační energie elektronů (tedy energie elektronů potřebná k vyražení elektronu z materiálu) $IE = 3$ eV. Jaká je rychlost elektronu (v nerelativistickém přiblížení), který je vyražen z tohoto materiálu zářením o vlnové délce $\lambda = 360$ nm?
10. Spočítejte přechod z hladiny $J = 0$ do $J = 2$ v rotačním spektru molekuly HBr. Rovnovážná délka vazby H-Br je 1.41 \AA . ($E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J + 1)$)

Konstanty: $\hbar = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
 $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
 $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
 $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
atomová hmotnostní jednotka $1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
 $R = 8.31 \text{ J mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
 $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ kg}\cdot\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$