

- S použitím modelu volného elektronu (=částice v krabici) spočtete vlnovou délku a vlnčet nejdouhovlnějšího elektronového přechodu u molekuly dekapentaenu a oktatetraenu. Diskutujte polohu absorpčního pásu v závislosti na délce řetězce. Uvažujte délku C-C vazby, že se rovná 140 pm.
- Ukažte, že pro nabitou částici v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě je absorpční přechod  $2 \leftarrow 1$  dovolený a absorpční přechod  $3 \leftarrow 1$  zakázaný. (Odhadněte ze symetrie integrandu příslušného integrálu)
- Podle Hartreeho-Fockova výpočtu má molekula  $\text{CH}_3\text{F}$  5 nejnižších MO s energiemi -705.49, -302.33, -40.33, -24.32, -16.35 eV. Kolik pásů spjatých s těmito orbitaly bude molekula vykazovat v UPS spektru za použití He výbojky ( $\lambda = 57.7\text{nm}$ )?

Konstanty:

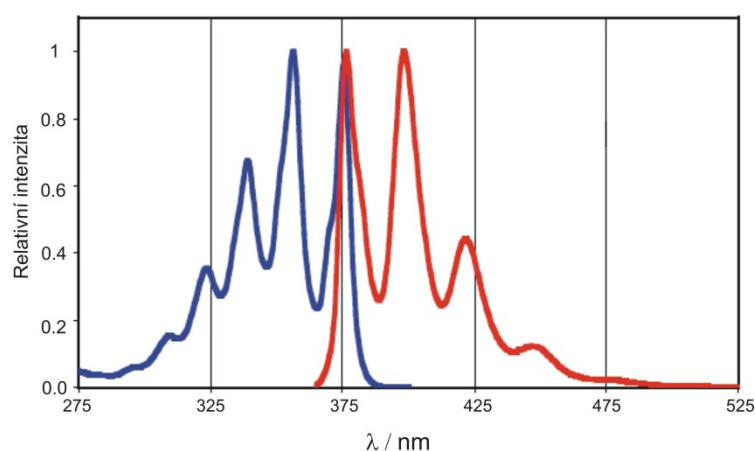
Hmotnost elektronu  $m_e$  :  $9.109 \cdot 10^{-31}$  kg

Rychlost světla  $c$  : 2 997 924 58 m/s

Planckova konstanta  $h$  :  $6.626 \cdot 10^{-34}$  J.s

Náboj elektronu:  $1.602 \cdot 10^{-19}$  C

- Máme systém s dvěma elektrony  $\alpha$ . Ukažte, že excitace systému do stavu s jedním elektrone  $\alpha$  a jedním  $\beta$  (každý v jiném molekulovém orbitalu) je spinově zakázaný proces.
- S použitím symetrie integrandu ve výrazu pro tranzitní dipólový moment vysvětlete, proč jsou elektronové přechody  $d-d$  v komplexech přechodných kovů se středem symetrie zakázané. Přesto, co způsobuje, že bývají (i když s malou intenzitou) pozorovatelné v elektronových spektrech.
- Diskutujte, jak široký bude pás spojený s fosforescencí versus fluorescencí. Udělejte odhad v  $\text{cm}^{-1}$ .
- UV-VIS absorpční a emisní spektrum antracenu rozpuštěném v etanolu je zobrazené na obrázku. Které ze spekter odpovídá fluorescenci a které absorpci? Vysvětlete “zrcadlový obraz” obou spekter. Zkuste diskutovat, čemu odpovídají jednotlivé pásy.



o

Konstanty:

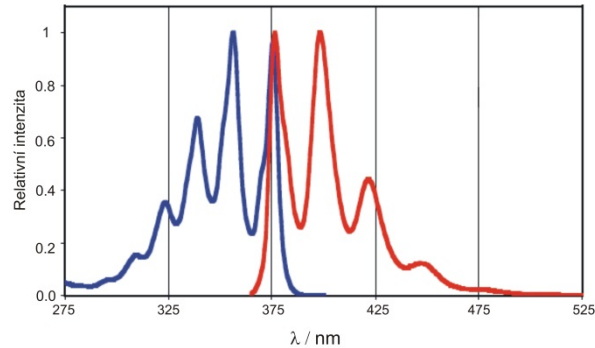
Hmotnost elektronu  $m_e$  :  $9.109 \cdot 10^{-31}$  kg

Rychlost světla  $c$  : 2 997 924 58 m/s

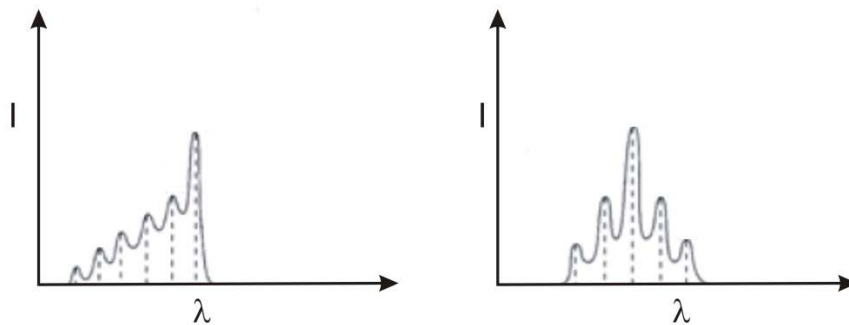
Planckova konstanta  $h$  :  $6.626 \cdot 10^{-34}$  J.s

Náboj elektronu:  $1.602 \cdot 10^{-19}$  C

- Diskutujte, jak široký bude pás spojený s fosforescencí versus fluorescencí. Udělejte odhad v  $\text{cm}^{-1}$ .
- UV-VIS absorpční a emisní spektrum antracenu rozpuštěném v etanolu je zobrazené na obrázku. Které ze spekter odpovídá fluorescenci a které absorpci? Vysvětlete “zrcadlový obraz” obou spekter. Zkuste diskutovat, čemu odpovídají jednotlivé pásy.



- Obrázek znázorňuje dva modelové případy vibronického (tj. vibračně rozlišeného elektronového) pásu. Řešte tyto úkoly:
  - Popište jednotlivé pásy pomocí vibračních kvantových čísel.
  - Co určuje relativní intenzity jednotlivých pásů?
  - V jakém z obou uvedených případů se změní geometrie molekuly při přechodu ze základního do elektronově vzbuzeého stavu?
  - S použitím harmonické aproximace odhadněte vlnocet vibračního módu molekuly v elektronově vzbuzeém stavu, jestliže maxima dvou nejintenzivnějších pásů z levého obrázku jsou od sebe vzdálené 35 nm a první pás je pozorován při 800 nm.



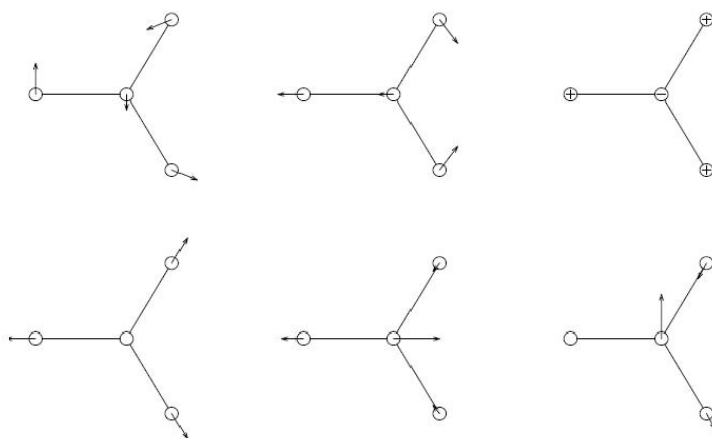
- Absorpční spektrum  $\text{O}_2$  má zřetelnou vibrační strukturu, která přechází při  $56876 \text{ cm}^{-1}$  do kontinua. Odpovídající elektronově excitovaný stav  $\text{O}_2$  disociuje na jeden atom  $\text{O}$  v základním a druhý v excitovaném stavu. Excitační energie druhého atomu odpovídá  $15875 \text{ cm}^{-1}$ . Jaká je disociační energie základního stavu  $\text{O}_2$ ?

Konstanty:

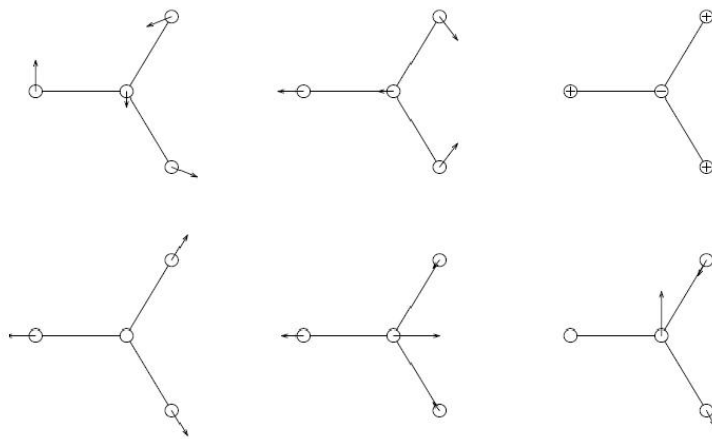
Rychlost světla  $c$  : 2 997 924 58 m/s

Planckova konstanta  $h$  :  $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

- Pro molekulu s vibračním vlnočtem  $1620\text{ cm}^{-1}$  byl při  $300\text{ K}$  pozorován slabý signál odpovídající vibračnímu přechodu  $1 \rightarrow 2$ . Odhadněte kolikrát se zvýší jeho intenzita po zvýšení teploty na  $1000\text{ K}$ . Nápověda: použijte Boltzmannovu distribuci k určení pravděpodobnosti, že se molekula nachází ve vibračním stavu 1.
- Kolik vibračních módů má molekula  $\text{SO}_2$ ?
- Střed větve Q Ramanova spektra molekuly CO má odpovídající vlnovou délku  $579.2\text{ nm}$ , vlnová délka světla použitého laseru byla  $514.5\text{ nm}$ . Jaký je fundamentální vibrační vlnočtet molekuly CO?
- O každém z uvedených vibračních módů molekuly  $\text{BF}_3$  rozhodněte, zda může být viditelný v IČ.



- Která z následujících molekul může mít infračervené spektrum:  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{N}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ?
- Která z následujících molekul může mít Ramanovo vibrační spektrum:  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SF}_6$ ?
- Jak a proč se zvýšením teploty ovlivní intenzita anti-Stokesových pásů v Ramanově spektru.
- Molekula  $\text{AB}_2$  má v IČ spektru dva silné pásy, v Ramanově spektru jeden silný a jina má jen slabé. Je struktura lineární nebo lomená?
- Pozorované vibrační pásy ozonu náležející přechodu ze stavu  $(0\ 0\ 0)$  do stavu  $(0\ 1\ 0)$ ,  $(0\ 0\ 1)$  a  $(1\ 0\ 0)$  leží při  $705$ ,  $1043$  a  $1100\text{ cm}^{-1}$ . Odhadněte vlnočty následujících kombinačních a vrchních harmonických přehodů:  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (0\ 1\ 1)$ ;  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (1\ 1\ 0)$  a  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (2,0,0)$ .
- Střed větve Q Ramanova spektra molekuly CO má odpovídající vlnovou délku  $579.2\text{ nm}$ , vlnová délka světla použitého laseru byla  $514.5\text{ nm}$ . Jaký je fundamentální vibrační vlnočtet molekuly CO?
- O každém z uvedených vibračních módů molekuly  $\text{BF}_3$  rozhodněte, zda může být viditelný v IČ.



- Která z následujících molekul může mít infračervené spektrum:  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{N}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ?
- Která z následujících molekul může mít Ramanovo vibrační spektrum:  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SF}_6$ ?
- Jak a proč se zvýšením teploty ovlivní intenzita anti-Stokesových pásů v Ramanově spektru.
- Molekula  $\text{AB}_2$  má v IČ spektru dva silné pásy, v Ramanově spektru jeden silný a jinak má jen slabé. Je struktura lineární nebo lomená?
- Pozorované vibrační pásy ozonu náležející přechodu ze stavu  $(0\ 0\ 0)$  do stavu  $(0\ 1\ 0)$ ,  $(0\ 0\ 1)$  a  $(1\ 0\ 0)$  leží při  $705$ ,  $1043$  a  $1100\ \text{cm}^{-1}$ . Odhadněte vlnočty následujících kombinačních a vrchních harmonických přehodů:  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (0\ 1\ 1)$ ;  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (1\ 1\ 0)$  a  $(0\ 0\ 0) \rightarrow (2,0,0)$ .
- $^{14}\text{N}$  má jaderný spin 1 a jaderný faktor 0.404. Vypočítejte energie jaderných spinových stavů v magnetickém poli  $11.50\ \text{T}$ .
- Chemický posun protonů  $\text{CH}_3$  v acetaldehydu je  $\delta = 2.20$  a protonu v  $\text{CHO}$   $9.80$ . Jaký je rozdíl mezi lokálními magnetickými poli v obou oblastech molekuly, když vnější magnetické pole je  $1.5\ \text{T}$ .
- Jaká musí být magnetická indukce uvnitř magnetu NMR spektrometru, aby rezonanční frekvence protonů byla  $400\ \text{MHz}$ , když  $g$  faktor protonu je  $5.5856$ .
- Diskutujte chemickou a magnetickou ekvivalenci protonů v molekulách  $\text{CH}_2\text{F}_2$ ,  $\text{H}_2\text{C}=\text{CF}_2$ ,  $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CF}_2$  a  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ . Co to znamená pro NMR spektra?

- Na obrázku je NMR spektrum látky se sumárním vzorcem  $C_3H_6Cl_2$ . O jakou sloučeninu se jedná?

