

Chemická struktura B – zápočtový test

1/ Řešením Schrödingerovy rovnice pro trojrozměrný model částice v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě (model elektronu v 3D krabici) se získají příslušné vlnové funkce popisující částici v různých kvantových stavech a energie těchto stavů:

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2 \right]$$

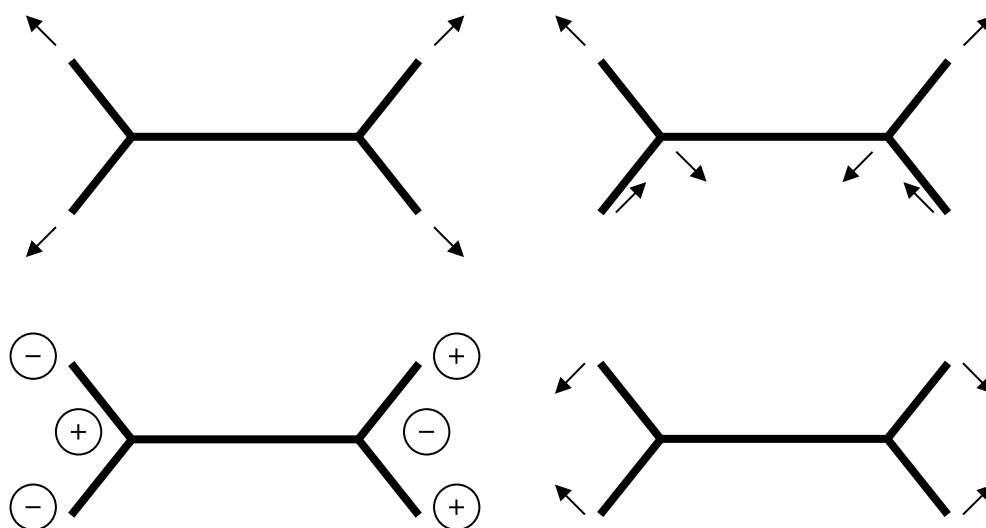
- Vyjádřete vlnovou délku záření, které je třeba na excitaci elektronu z kvantového stavu $(n_x, n_y, n_z) = (1,1,1)$ do $(2,1,1)$ pokud jsou rozměry krabice $L_x=L_y=L_z= 100$ a pak 10 \AA .
- Na základě výsledku a) diskutujte, jaký je vliv velikosti krabice na energii potřebnou k přechodu z jednoho kvantového stavu do druhého.

2/

- Navrhněte strukturu látky s tímto sumárním vzorcem $\text{C}_4\text{H}_8\text{Cl}_2\text{O}$ tak, aby v ^1H NMR spektru byly pozorovatelné pouze dva rozdílné multiplety.
- Určete, o jaké multiplety se jedná a jaké jsou relativní intenzity čar v každém z multipletů.

3/ Na obrázku 1 jsou 4 vybrané vibrační módy molekuly ethylenu. **A.** Celkem kolik vibračních módů má ethylen? **B.** Určete, jestli uvedené módy jsou pozorovatelné v IČ a Ramanově spektru.

Obrázek 1.



4/ Naměřená čára ve vibračním Ramanově spektru $^{14}\text{N}_2$ měla vlnočet 19960.5 cm^{-1} . Zdrojem záření byl kryptonový laser o vlnočtu 17602.5 cm^{-1} . Vypočtete vlnočet a silovou konstantu vibrace.

5/ Energie na ionizaci určitého atomu je $3,44 \times 10^{-18}$ J. Absorpce fotonu s neznámou vlnovou délkou ionizuje atom a vyrazí elektron s rychlostí $1,03 \times 10^6$ ms⁻¹. Jaká je vlnočet použitého záření?

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

(a) Ukažte, že $f(x) = \cos(kx)$ je vlastní funkcí operátoru d^2/dx^2 .

(b) Vypočtete hodnotu výrazu $\frac{w \cdot z}{w+z}$, kde $w = 1 + 2i$; $z = -i$

(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 $f(x) = e^{-ax^2}$ (tzv. gaussián) v bodě $x = 0$ za použití Taylorova rozvoje do druhého řádu (tedy jako kvadratický polynom)

7/ Které operátory spolu komutují či nekomutují? Zdůvodněte (u d a e stačí slovní popis). Co je důsledkem této vlastnosti?

(a) x, p_x

(b) x, p_z

(c) L_x, L_y

(d) L^2, L_z

(e) H, L^2

8/ Sestavte molekulový hamiltonián pro molekulu HF.

9/ Pro tu samou molekulu – HF – spočítejte energii záření (v cm⁻¹) potřebnou k excitaci ze základní vibrační hladiny na hladinu s $v = 5$ (tedy pátou vibračně excitovanou hladinu). Silová konstanta pro molekulu HF je 964 N/m. ($A_r(\text{F}) = 19$).

10/ Mějme dvě energetické hladiny vzdálené v jednom případě o 10 cm⁻¹, ve druhém případě o 100 cm⁻¹. Jaká bude populace těchto hladin v jednom a druhém případě při pokojové teplotě $T = 298,15$ K.

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