

ZK C9550, Kvantová chemie a molekulová spektroskopie

Příklad ZK testu

1. Načrtněte kvalitativní schéma jednotlivých oblastí EM záření od nejdelších vlnových délek po nejkratší a přiřadte těmto vlnovým délkám spektroskopické přechody pozorované v dané oblasti.

(3 body)

2. Který parametr systému je určující pro intenzitu čar při spektroskopickém přechodu mezi dvěma hladinami? Jak se tento parametr při pokojové teplotě kvalitativně mění při přechodu od spektroskopie NMR k spektroskopii elektronové?

(2 body)

3. Pomocí schématu přechodů mezi energiovými hladinami načrtněte, jak vzniká  
(a) Rayleighův rozptyl  
(b) Ramanův rozptyl: Stokesovy a Anti-Stokesovy linie

(3 body)

4. Přirozená šířka linií je důsledkem (vyberte, co platí)  
(a) Neuspořádaného pohybu molekul ve studovaném vzorku  
(b) Mezimolekulových srážek  
(c) Heisenbergových relací neurčitosti

(2 body)

5. Napište, jaký je vztah mezi energií rotace, momentem hybnosti, a momentem setrvačnosti pro lineární a sférický rotátor (vychází stejně)

(3 body)

6. Pomocí schématu energiových hladin načrtněte, jak vzniká struktura vibračně-rotačního pásu, a jak vibračně-rotací pás ve spektru kvalitativně vypadá.

(3 body)

7. Franck-Condonův integrál (faktor) je roven

(a)  $\int \Psi_{vibr,e}^*(R) \Psi_{vibr,g}(R) dR$

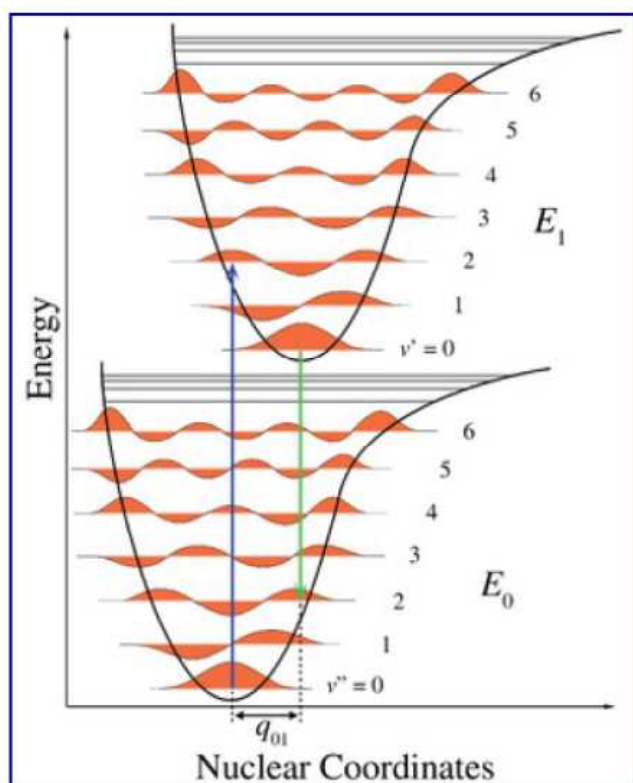
(b)  $\int \Psi_{vibr,e}^*(R) \hat{\mu} \Psi_{vibr,g}(R) dR$

(c)  $\int \Psi_{rot,e}^*(R) \Psi_{rot,g}(R) dR$

(1 body)

8. Načrtněte kvalitativně elektronové spektrum odpovídající systému hladin energie na obrázku. Čím je dána intenzita konkrétního přechodu?

(3 body)

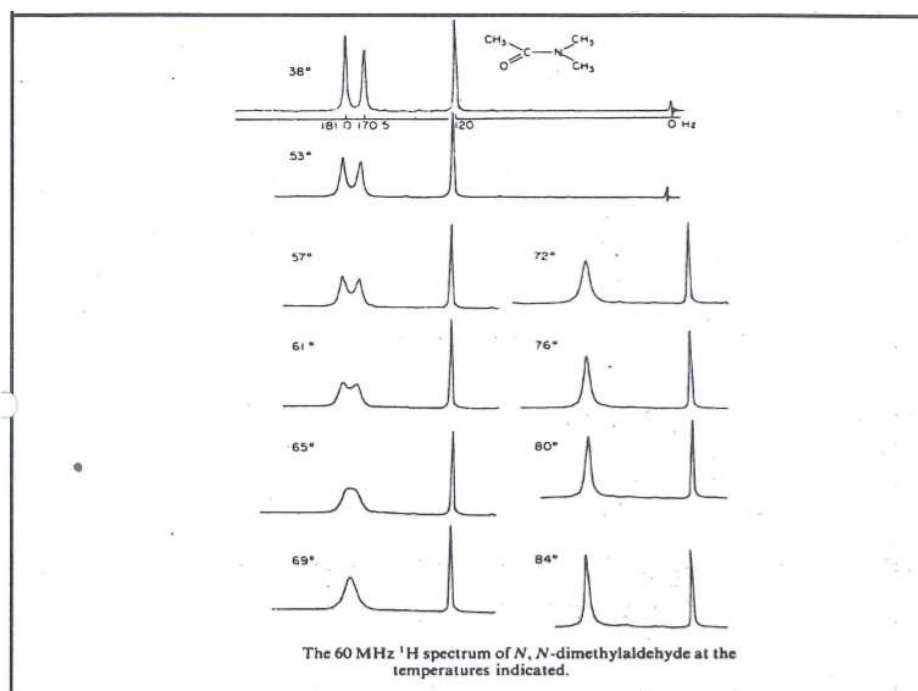


9. Pomocí hladin energie načrtněte, k jakým přechodům dochází během experimentu elektronové paramagnetické rezonance.

(3 body)

10. Vysvětlete, proč se v NMR spektru *N,N* dimethylacetamidu mění s teplotou šířka a počet signálů methylových protonů.

(3 body)



26 bodů maximum

0-12: F, 13-15 E, 16-18 D, 19-21 C, 22-24 B, 25-26 A (hodnocení **písemné** části)