

1. S použitím modelu volného elektronu (=částice v krabici) spočtěte vlnovou délku a vlnočet nejdélnějšího 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.
2. 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)
3. Podle Hartreeho-Fockova výpočtu má molekula CH_3F 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 ($\lambda = 57.7\text{nm}$)?
4. Dva často se vyskytující tvary spektrálních čar jsou Lorentzův (například přirozené rozšíření čar) a Gaussův (například rozšíření v důsledku Dopplerova jevu). V obou případech nalezněte polohu maxima, jeho hodnotu a pološířku (šířku v polovině výšky).

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