

47 zkouškových otázek a okruhů:

U zkoušky dostanete 3 náhodně nakombinované otázky, na které odpovíte písemnou formou.

1. Heisenbergův princip neurčitosti a význam komutačních relací v kvantové mechanice.
2. Vibronické struktury absorpčního a fluorescenčního spektra tvoří zrcadlový obraz. Vysvětlete.
3. Vysvětlete, co je fosforescence a fluorescence. Jaké jsou rozdíly v rychlosti obou procesů. Jaký můžeme očekávat rozdíl v šířce fosforescenčního a fluorescenčního pásu? Vysvětlete.
4. Obecné mechanismy interakce fotonů (záření) s atomem/molekulou (hmotou). Vysvětlete termín stimulovaná emise.
5. Popište princip Försterova rezonančního přenosu energie (tzv. FRET). Popište princip cirkulárního a lineárního dichroismu v elektronové spektroskopii.
6. Popište princip Augerovy spektroskopie, Röntgenové emisní spektroskopie a fotoelektronové spektroskopie.
7. Rozepište operátor potenciální energie molekuly CH_3COOH . Kolik je zahrnuto párových interakcí v dvouelektronovém členu tohoto operátoru?
8. Co je harmonická aproximace? Sestavte Hamiltonián pro jednorozměrný harmonický oscilátor. Co je řešením příslušné Schrödingerovy rovnice.
9. Co je transiční stav a jaký bod na hyperploše potenciální energie mu připadá. Kolik vibračních stupňů volnosti připadá struktuře transičního stavu?
10. Jaká je definice hermitovského operátoru? Proč musí být Hamiltonián hermitovský?
11. Co je Bornova interpretace vlnové funkce. Co je hustota pravděpodobnosti? Jaký je význam normalizace vlnových funkcí?
12. de Broglieho hypotéza; ohyb elektronů na mřížce. Jak lze určit Planckovu konstantu s využitím fotoelektrického jevu.
13. Bornova-Oppenheimerova aproximace a její uplatnění v kvantové chemii (koncept hyperplochy potenciální energie). Jaká skutečnost umožňuje tuto aproximaci používat.

14. Vysvětlete pojem "spinově zakázaný proces". Který z procesů v rámci Jablonského diagramu je spinově zakázaný. Jak je možné, že k tomuto procesu přesto dochází. Čím se jeho "zakázanost" projevuje?
15. Franckův-Condonův princip. Jaký je rozdíl mezi pojmy: vibrační a vibronické spektrum?
16. Rezonanční podmínka. Proč k některým přechodům mezi kvantovými stavy nedochází, ačkoli je rezonanční podmínka splněná? Vysvětlete.
17. Orbitálně a spinově dovolené / zakázané přechody. Z čeho plynou tato kritéria. Rozvedte.
18. Coulombova a výměnná interakce mezi elektrony. Fermiho díra.
19. Pauliho vylučovací princip. Proč není možné, aby dva elektrony se stejně orientovaným spinem obsadily stejný atomový/molekulový orbital?
20. Transitní elektrický dipolový moment a jeho vztah k intenzitě absorpčního pásu. Rozepište operátor dipólového momentu molekuly.
21. Hrubé a specifické výběrové pravidlo v infračervené spektroskopii. Popište, jak se dojde k hrubému výběrovému pravidlu.
22. Hrubé a specifické výběrové pravidlo v mikrovlnné spektroskopii a v rotační Ramanově spektroskopii. Vysvětlete pojem polarizovatelnost molekuly.
23. Hrubé a specifické výběrové pravidlo ve vibrační Ramanově spektroskopii. Popište, jak se dojde k hrubému výběrovému pravidlu.
24. Vysvětlete, proč nejsou v elektronovém spektru vodíku vidět přechody s $\Delta l > \pm 1$. Vysvětlete, co je to atomový orbital. Z čeho plyne?
25. Na modelu nabitě částice v krabici diskutujte kvantové vlastnosti částice. Vyjmenujte tři skutečnosti, které budou odlišovat chování této částice od jejího klasického (nekvantového) popisu.
26. Jablonského diagram. Vysvětlete, co je mezisystémový přechod. Jaký je rozdíl mezi fotofyzikálním a fotochemickým procesem?
27. Horký a fundamentální přechod mají v harmonické aproximaci stejnou energii. Vysvětlete. Po zahrnutí anharmonické korekce lze očekávat posunutí horkého pásu k nižším nebo vyšším vlnovým délkám? Proč? Popište dále, co se myslí pod pojmem "kombinační pás".
28. Diskutujte různé vlivy na šířku spektrálního pásu. Co je to přirozená šířka pásu a jakou informaci nám poskytuje?

29. Vysvětlete princip Ramanova rozptylu. Vysvětlete význam rezonanční Ramanovy spektroskopie. Co je Rayleighův rozptyl? Jaký každodenní jev je spjatý s Rayleighovým rozptylem.
30. Postuláty nerelativistické kvantové mechaniky.
31. Seřazení spektroskopii podle energie použitého záření. Diskutujte, k čemu jednotlivé spektroskopie slouží.
32. Co je to energie nulového vibračního bodu. Vysvětlete jeho vztah k principu neurčitosti.
33. Boltzmanovo rozdělení a vztah k populaci jednotlivých stavů systému.
34. Mějme mikrovlnné spektrum vynesené proti vlnočtům. V tomto spektru jsou jednotlivé rotační pásy zhruba rovnoměrně (ekvidistantně) rozestoupené. Vysvětlete tuto skutečnost. Vysvětlete, proč je v rotační Ramanově spektroskopii rozestoupení dvou sousedních pásů dvojnásobné v porovnání s mikrovlnovou spektroskopií.
35. Co je boson a fermion? Antisymetričnost vlnové funkce popisující stav n fermionů. Slaterův determinant.
36. Co je moment hybnosti. Jak spolu souvisí orientace momentu hybnosti rotující částice (molekuly) a stupněm degenerace jejího rotačního stavu charakterizovaným kvantovým číslem J ?
37. Co je elektronová konfigurace? Z jaké fyzikální skutečnosti plyne první Hundovo pravidlo, podle kterého například 2 elektrony ve dvou degenerovaných molekulových orbitalech (jako např. u O_2) upřednostňují shodnou orientaci jejich spinových momentů hybnosti proti antiparalelnímu uspořádání.
38. V jakém případě platí komplementarita infračervené a vibrační Ramanově spektroskopie? Vibrační pás $O-H$ vazby metanolu měřeného v plynné fázi se posune k vyšším nebo nižším frekvencím/vlnočtům při přechodu do kapalné fáze? Vysvětlete.
39. Vysvětlete, proč je možné řešit kvantové stavy atomu vodíku (případně jakékoli molekuly) s použitím bezčasové (stacionární) Schrödingerovy rovnice. Kdy je nutné se uchýlit k řešení časově závislé Schrödingerovy rovnice?
40. Co je to spinová multiplicita? Co je to degenerace stavů. Kolik degenerovaných stavů zahrnuje molekula se spinovou multiplicitou 1, 3, 5 a 7? Jaký je stupeň degenerace stavu tuhého rotoru charakterizovaného kvantovým číslem J ?
41. Vlnná částice je popsána vlnovou funkcí: $N_1 \exp[i(8\pi^2 m E)^{1/2} / h]$. Určete vlastní hodnotu operátoru hybnosti. Jaký význam má tato hodnota. Dále určete hustotu pravděpodobnosti. Jaké závěry v kontextu Heisenbergova principu neurčitosti plynou z těchto výpočtů.

42. Co jsou to Stokesovy a anti-Stokesovy pásy? V případě vibrační a rotační Ramanovy spektroskopie, které z těchto pásů mají intenzity citlivé na teplotu vzorku a proč? Ve které z uvedených dvou spektroskopii lze očekávat při dané teplotě vyšší intenzity anti-Stokesových pásů vzhledem k jejich Stokesovým protějškům? Vysvětlete.
43. Co je to hyperplocha potenciální energie víceatomového systému. Jaký je rozměr takové hyperplochy? Jaký význam mají minima a sedlové body prvního řádu na této hyperploše?
44. Co je to laplacián. Jak vypadá v kartézském souřadném systému. Vysvětlete, kde se v kvantové mechanice přistupuje k jeho transformaci do sférického souřadného systému a proč.
45. Co je to spektroskopický term. Mějme elektronovou konfiguraci d^1p^1 . Určete všechny termy a seřadte podle energie. Pořadí vysvětlete.
46. Vysvětlete pojmy: spinorbital, atomový orbital, molekulový orbital a Slaterův determinant. Jaký je vztah mezi nimi?
47. Operátory v kvantové mechanice a princip korespondence s klasickou fyzikou.