

## **Otázky z chemické fyziky ke SZZk**

**(pro navazující studijní obor Modelování chemických vlastností nanostruktur a biostruktur)**

### **Absorpce a emise záření**

Nestacionární poruchová teorie, stimulovaná absorpce a emise, tvar a šířka spektrálních čar, rozšíření spektrálních čar, doba života excitovaných stavů.

### **Elektronové, vibrační a rotační stavy dvouatomových molekul**

Pohyby jader ve dvouatomových molekulách, funkce potenciální energie pro dvouatomové molekuly, anharmonicitu, vibračně-rotační interakce a odstředivá distorze. Spektroskopická symbolika pro dvouatomové molekuly.

### **Vibrace víceatomových molekul**

Normální módy, normální vibrace, hladiny vibrační energie. Wilsonova vibrační analýza (GF problém).

### **Spektroskopie NMR**

Magnetické vlastnosti molekuly, spin-spin štěpení, hyperjemná struktura spekter NMR, příklady NMR spekter.

### **Spektroskopie ESR**

ESR spektrum vodíkového atomu, hyperjemná struktura spektra ESR, ESR spektra organických radikálů a iontů přechodných kovů, příklady ESR spekter.

### **Grupy**

Grupové postuláty, třídy konjugovaných prvků, přehled důležitějších bodových grup molekul a jejich určování, izomorfismus a homomorfismus grup.

### **Rerezentace grup**

Reducibilní a ireducibilní reprezentace, základní věty o ireducibilních reprezentacích, rozklad reducibilní reprezentace, direktní součin reprezentací.

### **Symetrie a elektronová struktura molekul**

Symetrie celkových elektronových stavů a spektroskopická symbolika pro víceatomové molekuly, výběrová pravidla pro elektronové přechody, faktorizace sekulárního problému, konstrukce symetricky adaptovaných funkcí.

### **Teorie grup a molekulové vibrace**

Symetrie normálních vibrací, výběrová pravidla pro fundamentální vibrační přechody, vylučovací pravidlo pro IČ a Ramanova spektra, Fermiho rezonance, molekuly s velkými amplitudami vibrací.

### **Symetrie a chemické reakce**

Zachování momentů hybnosti v chemické reakci, Wignerova-Witmerova pravidla, pravidlo nekřížení, zachování orbitalové symetrie v chemických reakcích, teorie hraničních orbitalů.

### **Základní principy statistické termodynamiky**

Soubory soustav ve statistické termodynamice – definice, vlastnosti. Postuláty statistické termodynamiky.

### **Partiční funkce**

Partiční funkce monoatomického ideálního plynu. Partiční funkce dvouatomového plynu.