

- 1) Selitä seuraavat käsitteet fluoresenssi, fosforenssi, ja Frank-Condon efekti. Kuvaile kvalitatiivisesti miltä molekyylin fluoresenssi spektri näyttää, kun perus- ja viritetyn tilan sidospituudet poikkeavat toisistaan. Perustele spektrin rakenne.
- 2) Tunneloituminen on puhtaasti kvanttimekaaninen ilmiö. Selitä mistä on kyse. Arvioi elektronin tunneloitumista liuoksesta olevasta ionista elektrodiin. Etäisyys on 4 \AA , elektronin energia on 1 eV ja vallin korkeus 2.0 eV .
- 3) Miten kvanttimekaanisesti voidaan kuvata molekyylivärähtelyjä. Mikä on yksinkertaisin malli ja miten sitä voidaan parantaa. Kuvaile kaasumaisen HF molekyylin adsorptiospektiä spektrin rakennetta huoneen lämpötilassa. Minkä tilojen välille spektri syntyy. Perustele miksi. Millä aaltoluvulla piikit esiintyvät. Perustele adsorptiopiikkien lukumäärä. Jousivakio on $n. 966 \text{ N/m}$, rotaativvakio $hcB=20.956 \text{ cm}^{-1}$.
- 4) Mitä tarkoittaa hybridiorbitaali ja miten se liittyy atomiorbitaaleihin? Selitä eteenin ja eteenin elektronirakenne. Minkälainen sidos on hiilen ja vedyn välissä. Entä miltä eri hiilihiili sidokset näyttävät. Entä mikä on niiden kertaluokka. Voiko eteenin C-C sidosta kiertää.
- 5) Huckelin teoria on hyödyllinen molekyylien tarkastelussa. Selitä minkälaisesta mallista on kyse ja sovelle sitä bentseeniin ja HF molekyyliin. Bentseenin yhtälöitä ei tarvitse ratkaista, mutta laske HF:n elektronirakenne kun ionisaatioenergiat ovat -13.1 eV (H) ja -16.8 eV (F). Vuorovaikutus energia on -1 eV . Mitä ovat molekyylin energia ja aaltofunktiot. Miten varaus on jakautunut H:n ja F:n ympärille. Onko sidos kovalettinen vai ioninen? (Vihje: laske energia Huckelin determinantista ja aaltofunktiot täydentävien kaavojen avulla)

Vakioita:

$m_e = 9.10938 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, $\text{amu} = 1.66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, $h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$, $\hbar = h/2\pi$, $4\pi\epsilon_0 = 1.11265 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2/\text{Jm}$, $N_A = 6.02214 \cdot 10^{23}$, $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}$, $e = 1.602176 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $k = 1.38065 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$, $R = 8.31447 \text{ J/Kmol}$, $a_0 = 5.29177 \cdot 10^{-11} \text{ m}$.

Muunnoksia:

$1 \text{ eV} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 96.485 \text{ kJ/mol}$, $1 \text{ kJ/mol} = 1.6605 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, $1 \text{ cm}^{-1} = 1.9864 \cdot 10^{-23} \text{ J} = 1.43877 \text{ K}$, $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$.

Kaavakokoelma on ohessa. Huom. kun tehtävissä kysytään/tarvitaan kaavoja ei riitä että kaavan vain siirtää tehtäväpaperiin. Pitää myös selittää mitä termit tarkoittavat.

Täydentäviä kaavoja: $\alpha = c_1/c_2 = (E-h)/(H_{11}-E)$, $c_1^2 + c_2^2 = 1$.