**Kvantová chemie, domácí cvičení 8**

**Jméno a příjmení**:

1. Gyromagnetický poměr pro jádro 13C má hodnotu 1,40482. Vypočítejte vlnovou délku záření, při které bude docházet k rezonanci, pokud toto jádro umístíme do magnetického pole o intenzitě *B* = 1,2 T. Jádro 12C žádný signál nevykazuje. Proč?
2. Jaké atomové termy nalezneme u atomu s konfigurací p1d1? Seřaďte je s použitím Hundových pravidel dle jejich energií.

1. Nalezněte elektronový term, který odpovídá základnímu stavu atomu kyslíku. Uvědomte si, že a) plně zaplněné slupky mají nulový moment hybnosti (spinový i orbitální) b) s elektronovými dírami můžeme zacházet jako s elektrony (například konfigurace typu p5 má stejný moment hybnosti jako konfigurace p1).
2. Spektroskopie zavádí pojem „výběrová pravidla“. Ta nám říkají, že přechody mezi určitými stavy jsou „povolené“ (tj. mají nenulovou intenzitu ve spektru) a jiné jsou zakázané. V atomové spektroskopii se dají odvodit pravidla:

.

Atom uhlíku v konfiguraci 1s22s22p2 má následující hladiny:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| hladina | 3P0 | 3P1 | 3P2 | 1D2 | 1S0 |
| (*E*/*hc*) [cm-1] | 0,0 | 16,4 | 43,4 | 10192,6 | 21648,0 |

a pro konfigurace 1s22s12p3

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 5S2 | 3D3 | 3D1 | 3D2 | 3P1 | 3P2 | 3P0 | 1D2 | 3S1 | 1P1 |
| 33735,2 | 64086,9 | 64089,8 | 64090,9 | 75254,0 | 75255,3 | 75256,1 | 97878 | 105798.7 | 119878 |

1. Nalezněte přechody, které jsou možné mezi základní stavem 3P0 a libovolným ze zbylých stavů.
2. Jsou u atomu uhlíku splněna Hundova pravidla?
3. \*\*\*Bonus\*\*\* První ionizační energie argonu má hodnotu 15,76 eV. Odhadněte efektivní náboj, který cítí elektron v p orbitalu atomu argonu, a pokuste se s použitím vhodných předpokladů odhadnout druhý ionizační energiil argonu.