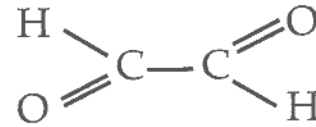


SALLITUT VÄLINEET

- Lunttilappu, eli yksi A4 kokoinen arkki johon saa itse etukäteen kirjoittaa mitä haluaa. Lunttilapun lukemisen apuvälineitä ei sallita (suurennuslasi tms.)
- Funktiolaskin ilman grafiikkaa
- Matemaattinen taulukkirja (MAOL, Pentikäinen tai muu vastaava)

1. Kuvassa näkyvä s-trans glyoksaali kuuluu C_{2h} pisteryhmään.



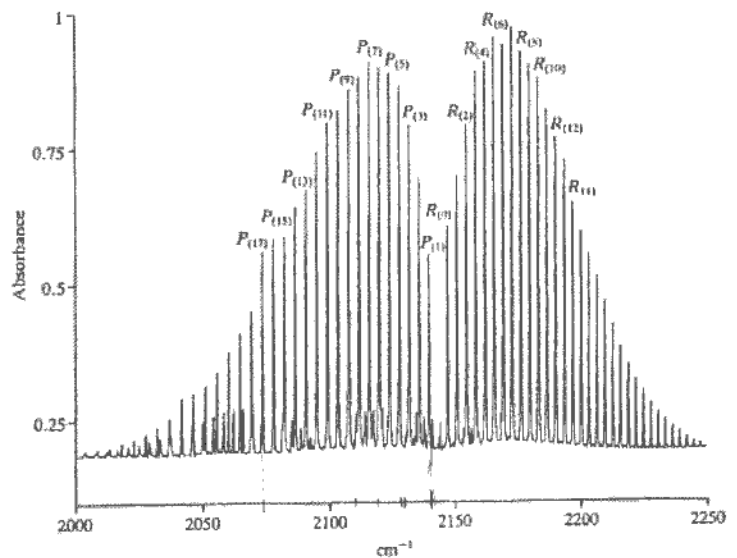
- a. Kuinka monta normaalivibraatiomuotoa on tällä molekyylillä?
- b. Symmetrian perusteella voidaan ilmaista yksi välttämätön ja riittävä ehto sille, että tämän molekyylin jokin tietty vibraatiotransitio on IR-aktiivinen. Mikä tämä ehto on? Entä ehto Raman-aktiivisuudelle? Perustelee.

Table A.22

C_{2h}	I	C_2	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
B_g	1	-1	1	-1	R_y, R_y	α_{xz}, α_{yz}
A_u	1	1	-1	-1	T_z	
B_u	1	-1	-1	1	T_x, T_y	

- c. Hahmottele piirtämällä yksi esimerkki jokaiselle pisteryhmän symmetrialajille kuuluvalla normaalivibraatiolle.

2. Kuva esittää CO-molekyylin vibraatiotitaatioospektriä. Laske spektrin avulla, mikä on ollut häikäasun lämpötila mittaushetkellä?
3. Selitä, miten kaksiatomisen molekyylin dissosiaatioenergia voidaan määrittää
- vibraatiospektroskopian avulla,
 - elektronispektroskopian avulla.
- Kummalla menetelmällä saadaan tarkempi tulos?
4. Neonatomin (Ne, $Z=10$) peruskonfiguraatio on $K2s^22p^6$.



- Mikä on perustila?
 - Tarkastele virittyntä konfiguraatiota $K2s^22p^53d^1$. Mihin tämän konfiguraation tiloihin on sallittu optinen transitio perustilasta? Perustelee vastauksesi.
5. NO-molekyylin elektroniperustilassa ($^2\Pi$) on $B_e = 1,7046 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha = 0,0178 \text{ cm}^{-1}$. Ensimmäisen viritystilan ($^2\Sigma^+$) viritysenergia $\nu_{00} = 44078,3 \text{ cm}^{-1}$ ja tässä tilassa $B_e = 1,9952 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha = 0,0164 \text{ cm}^{-1}$.
- Piirrä periaatekaavio, jossa näkyvät mainittujen elektronitilojen potentiaalikäyrät, näiden tilojen muuttamat alimmat vibraatiotilat sekä vibronitransitioita $\gamma(0,0)$, $\gamma(1,0)$ ja $\gamma(2,0)$ kuvaavat nuolet (merkintä $\gamma(v',v'')$).
 - Onko $\gamma(0,0)$ – vyön vyöraja P- vai R-haarassa?
 - Laske vyörajan aaltoluku vyölle $\gamma(0,0)$.

FYSIIKAN VAKIOITA

Vuoden 1986 kansainvälisen suosituksen mukaan
Lähde: Physics Today Elokuu 1991

Alkeisvaraus	e	$1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Elektronin lepomassa	m_e	$9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Protonin lepomassa	m_p	$1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Atomimassayksikkö	u	$1.661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Protonin ja elektronin massojen suhde	m_p/m_e	1836
Valon nopeus tyhjiössä	c	$2.998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$
Tyhjön permittiivisyys	ϵ_0	$8.854 \cdot 10^{-12} \text{ AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$
Tyhjön permeabiliteetti	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7} = 1.257 \cdot 10^{-6} \text{ VsA}^{-1}\text{m}^{-1}$
Rydbergin vakio	R	$1.097 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$
Planckin vakio	h	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ $4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$
Boltzmannin vakio	k k/e k/hc	$1.381 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ $8.617 \cdot 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$ $0.6950 \text{ cm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Ideaalikaasun moolitilavuus (NTP)	V_m	$22.414 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3\text{mol}^{-1}$
Avogadron luku	N_A	$6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Yleinen kaasuvakio	$R=N_A \times k$	$8.315 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$
Stefan-Boltzmannin vakio	σ	$5.671 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$
C_1	$2\pi hc^2$	$3.742 \cdot 10^{-16} \text{ Wm}^2$
C_2	hc/k	$1.4388 \cdot 10^{-2} \text{ mK}$
Yksi ilmakehä	1 atm	$1.013 \cdot 10^5 \text{ Nm}^{-2}$
Painovoiman kiihtyvyys	g	9.80665 ms^{-2}