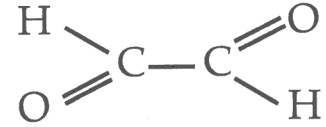


SALLITUT VÄLINEET

- Lunttilappu, eli yksi A4 kokoinen arkki johon saa itse etukäteen kirjoittaa mitä haluaa. Lunttilapun lukemisen apuvälineitä ei sallita (suurennuslasi tms.)
- Funktiolaskin ilman grafiikkaa
- Matemaattinen taulukkokirja (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.
- c. Hahmottele piirtämällä yksi esimerkki jokaiselle pisteryhmän symmetrialajille kuuluvalla normaalivibraatiolle.

Table A.22

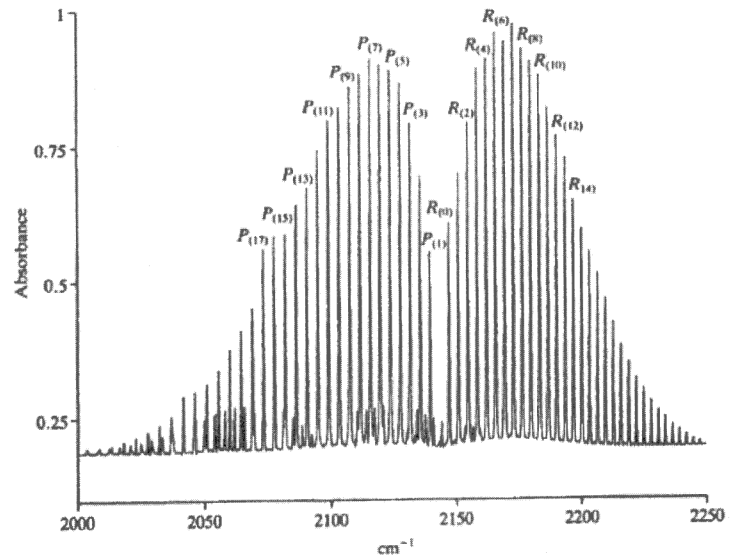
C_{2h}	I	C_2	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
B_g	1	-1	1	-1	R_x, R_y	α_{xz}, α_{yz}
A_u	1	1	-1	-1	T_z	
B_u	1	-1	-1	1	T_x, T_y	

2. Kuva esittää CO-molekyylin vibraatorotaatiokeskettä. Laske spektrin avulla, mikä on ollut häikäkkaasun lämpötila mittaushetkellä?

3. Selitä, miten kaksiatomisen molekyylin dissosiaatioenergia voidaan määrittää
- vibraatiokeskettä avulla,
 - elektronikeskettä avulla.
- Kummalla menetelmällä saadaan tarkempi tulos?

4. Neonatomin (Ne, $Z=10$) peruskonfiguraatio on $K2s^22p^6$.

- Mikä on perustila?
- Tarkastele virittyneitä konfiguraatioita $K2s^22p^53d^1$. 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 viritystilän (${}^2\Sigma^+$) viritysenenergia $\nu_{00} = 44078,3 \text{ cm}^{-1}$ 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 muutamia 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 $\gamma(0,0)$.