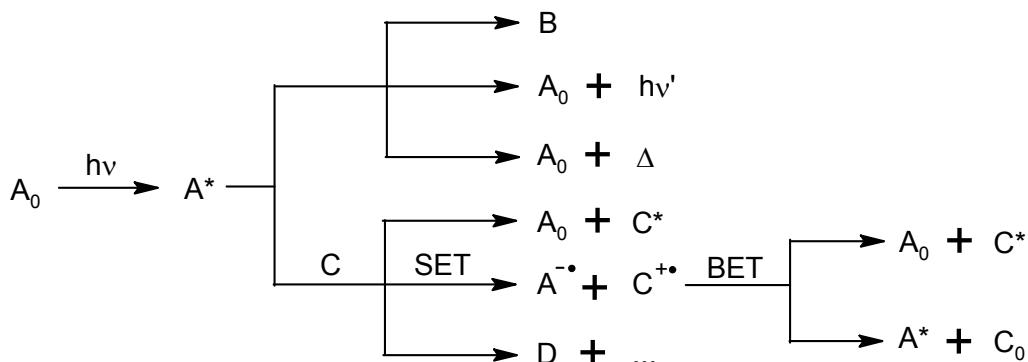


Dezaktivačné procesy elektrónovo excitovanej molekuly (Deactivation processes of electronically excited molecule)



V chémii atmosféry je dôležité diskutovať, čo sa s danou molekulou deje potom, ako prejde do excitovaného stavu prijatím fotónu. Excitácia je dej, kedy prechádza elektrón z pôvodného obsadeného molekulového orbitálu (MO) do neobsadeného MO s vyššou energiou. Najčastejšie sa molekuly po excitácii vyskytujú v singletovom (bez inverzie spinu pri prechode elektrónu) alebo tripletovom stave (inverzia spinu pri prechode elektrónu).

Takto excitovaná molekula po prijatí kvanta žiarenia môže podliehať fotochemickej transformačnej reakcii za vzniku produktu B. Ďalej môže prebehnúť jej prechod do stavu základného za súčasného vyžiarovania energie v podobe žiarenia (žiarivý prechod), pričom platí, že toto žiarenie bude mať vyššiu vlnovú dĺžku, a teda nižšiu energiu. Ak bude látka v singletovom elektrónovo excitovanom stave budeme pozorovať fluorescenciu a pri prechode z tripletového stavu budeme sledovať fosforescenciu. K vyžiarovaniu energie môže dôjsť aj v podobe tepla (nežiarivý prechod). Interakciou s molekulou C môže dôjsť k prenosu energie, teda k zhasaniu alebo senzibilizácii (viď Fotodynamický efekt). Môže však dôjsť aj k jedoelektrónovému prenosu (SET) za vzniku radikálového aniónu akceptora a radikálového kationu donora. Po tomto procese môže dôjsť aj k spätnému prechodu elektrónu (BET) za vzniku akceptora v základnom stave a donora v stave excitovanom alebo naopak. Elektrónovo excitovaná molekula A^* môže reagovať s molekulou C aj za vzniku rôzneho/rôznych produktov.

Poznámka:

Presnú vlnovú dĺžku, pri ktorej dochádza k excitácii môžeme zistiť pomocou UV-VIS spektier.

Podľa uvedenej rovnice platí, že žiarenie s vyššou vlnovou dĺžkou musí mať nižšiu energiu:

$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

kde E je energia žiarenia, h je Planckova konštanta, ν je frekvencia žiarenia, c je rýchlosť svetla vo vákuu a λ je vlnová dĺžka.

Prousek J.: *Chémia atmosféry. 1.vyd. SCHK, Bratislava, 2013, s. 21-22.*

ISBN 978-80-89597-15-4.

<http://lukoh.eu/chemistry.html>

14.3.2016