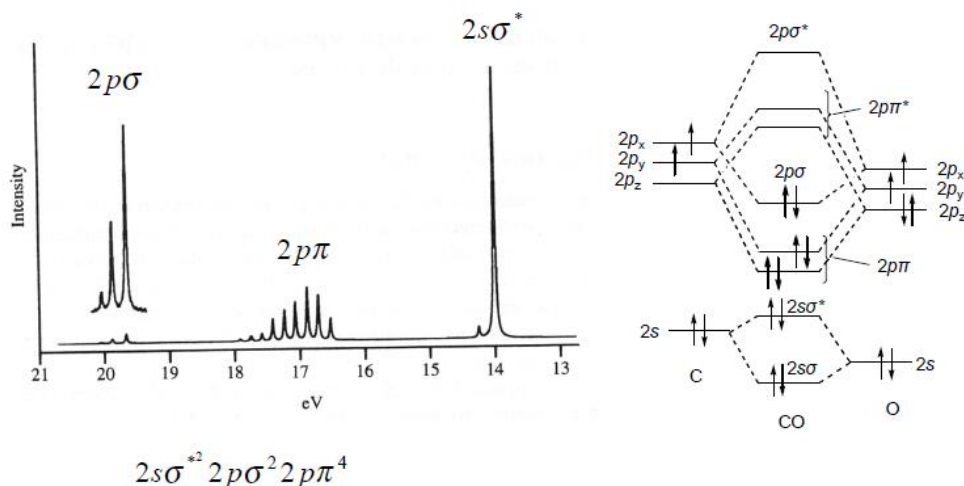


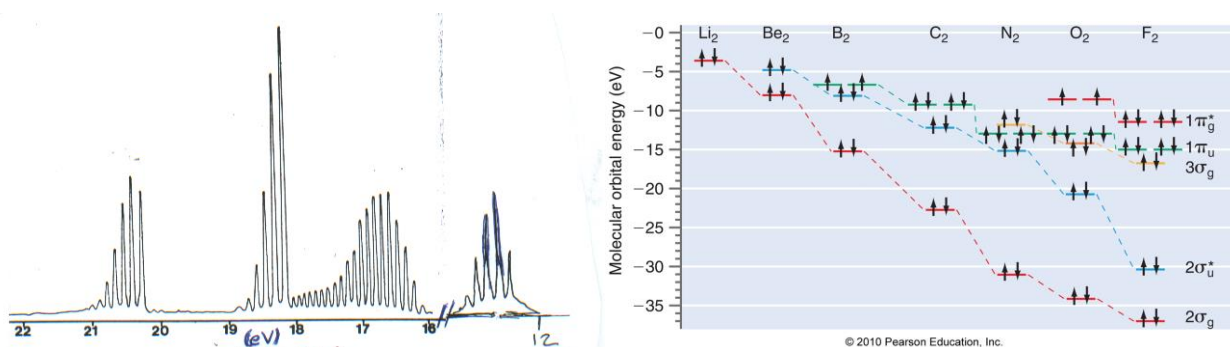
5. Να παρουσιάσετε το ενεργειακό διάγραμμα μοριακών τροχιακών του CO στη σωστή κλίμακα ενέργειας με βάση το φάσμα φωτοηλεκτρονίων που παρουσιάζεται κατωτέρω. Να συμπεριλάβετε και τα ατομικά τροχιακά 2s και 2p των ατόμων C και O στις σωστές ενέργειες. Είναι κατανοητό ότι μόνο για τα τρία μοριακά τροχιακά του CO που υποδεικνύονται στο φάσμα μπορείτε να αντλήσετε την τιμή ενέργειας δέσμευσης.

Τι μπορείτε να προτείνετε για την ενέργεια του δεσμικού τροχιακού 2s;

Να παρουσιάσετε σχηματικά τα μοριακά τροχιακά του CO (βλ. D.C. Harris, M.D. Bertolucci, 'Symmetry and Spectroscopy' 1978).



6. Στην περίπτωση του CO, από το προφίλ Franck-Condon της ταινίας στην περιοχή 16-18 eV του φάσματος φωτοηλεκτρονίων να εξαγάγετε τις ποσότητες, που σας επιτρέπουν να παραστήσετε γραφικά την καμπύλη Morse του κατιόντος CO⁺ και να δώσετε τη σχετική γραφική παράσταση.
7. Με βάση την ηλεκτρονική δομή του O₂ να ερμηνεύσετε το φάσμα φωτοηλεκτρονίων. Να συγκρίνετε τα πειραματικά αποτελέσματα με τις τιμές ενέργειας που δίδονται στο ενεργειακό διάγραμμα μοριακών τροχιακών. Να αναζητήσετε στη βιβλιογραφία στοιχεία σχετικά με το ιόν του O₂ (μήκος δεσμού, συχνότητα δόνησης) κατ' αντιστοιχία αυτών που παρουσιάζονται (στη σχετική διαφάνεια) για το N₂.



8. Στην ιστοσελίδα: <http://www.xpsfitting.com/search/label/Neon>, να αναζητήσετε τις τιμές ενέργειας ιοντισμού ηλεκτρονίου από την εξωτερική υποστιβάδα np των ευγενών αερίων. Να σχολιάσετε το μέγεθος της σχάσης λόγω σύζευξης spin τροχιακής στροφορμής και να παραστήσετε γραφικά την εξάρτηση της από τον ατομικό αριθμό των αερίων.