

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (XHM-048)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Εξέταση μαθήματος: Παρασκευή 17/01/2025, ώρα 13:00 -16:00, Αμφιθέατρα Α1, Α2, Α3

1. Γενικές πληροφορίες σχετικά με το τελικό διαγώνισμα

Η εξέταση στο μάθημα Φυσικοχημεία-Ι (XHM-048) κατά την εξεταστική περίοδο Ιανουαρίου του ακαδημαϊκού έτους 2024-2025, θα διεξαχθεί γραπτώς με φυσική παρουσία στο κτήριο του Τμήματος Χημείας (Αμφιθέατρα Α1, Α2, Α3) και θα έχει διάρκεια 150 λεπτά της ώρας (απαντήσεις σε 5 θέματα επιλεγόμενα από σύνολο 6).

Στην εξέταση είναι απαραίτητο να έχετε μαζί σας¹ :

- α) στυλό, μολύβι, γόμα,
- β) υπολογιστή τσέπης (απαγορεύεται αυστηρά η χρήση κινητού τηλεφώνου),
- γ) φοιτητική ή αστυνομική ταυτότητα.

Το περιεχόμενο των θεμάτων ανταποκρίνεται στα διδαχθέντα στο μάθημα, όπως αυτά περιγράφονται στις σημειώσεις των διαλέξεων και τις ασκήσεις, που είναι διαθέσιμες στη σχετική ιστοσελίδα του μαθήματος στην πλατφόρμα E-class (ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ-Ι (XHM-048), <https://www.chemistry.uoc.gr/eclass/courses/CHEM-UNDER123/>).

Η εξεταστέα ύλη παρατίθεται στην Ενότητα 2 της παρούσας ανακοίνωσης.

Τυπικό θέμα δίδεται ως υπόδειγμα στην Ενότητα 3. Περισσότερα θέματα (με απαντήσεις) παρατίθενται αναλυτικά στα σεντ των Ασκήσεων.

Κατά την ώρα της εξέτασης θα έχετε τη δυνατότητα να συμβουλευτείτε (έχετε μαζί σας εκτυπωμένα)

- α) τον περιοδικό πίνακα των στοιχείων,
- β) το τυπολόγιο που παρατίθεται στην Ενότητα 4
- γ) τον αλγόριθμο προσδιορισμού ομάδας συμμετρίας μορίων.

Επίσης θα είναι χρήσιμο να έχετε μαζί σας τους Πίνακες χαρακτήρων των Ομάδων συμμετρίας σημείου (https://www.cup.gr/wp-content/uploads/2020/07/Pinakes_Theorias_omadon_low.pdf)

Συμμετοχή στην εξέταση

Δικαίωμα συμμετοχής στην εξέταση έχουν όσοι/ες φοιτητές/φοιτήτριες είναι εγγεγραμμένοι/ες στο μάθημα.

Παρακαλείσθε θερμά να μεταβείτε στο [ΣΥΝΔΕΣΜΟ](#) και να απαντήσετε, μέχρι την **13.01.2025**, στο μοναδικό Ερώτημα, με ΝΑΙ ή ΟΧΙ, δηλώνοντας την πρόθεση ή μη συμμετοχής σας στην εξέταση του μαθήματος. Εφ' όσον εκτιμάτε ότι η πιθανότητα συμμετοχής σας υπερβαίνει το 50% παρακαλείσθε να επιλέξετε την απάντηση ΝΑΙ.

Ο μόνος λόγος για την παρούσα καταγραφή είναι η καλύτερη προετοιμασία της εξέτασης και η αποφυγή εκτύπωσης υπέρμετρου αριθμού αντιτύπων του διαγωνίσματος (εξοικονόμηση πόρων και αποφυγή σπατάλης χαρτιού).

Ωρες γραφείου (για ερωτήσεις, απορίες): 10, 14, 15/01/2025 (11:00 – 14:00), Γ-214

Για καλύτερο προγραμματισμό συναντήσεων παρακαλείσθε να επικοινωνείτε εκ των προτέρων μέσω e-mail με τον διδάσκοντα.

Ευχές σε όλες και όλους για
την καινούρια χρονιά.
Καλή πρόοδο στις σπουδές σας.
Όμορφα ταξίδια και εμπειρίες
στην επιστήμη
μα πιό πολύ στη ζωή σας.

¹ Χρήσιμο (όχι απαραίτητο) να έχετε ρολόι χειρός

2. Εξεταστέα ύλη

Το περιεχόμενο των θεμάτων ανταποκρίνεται στα διδαχθέντα κατά το χειμερινό εξάμηνο 2024-25, όπως αυτά περιγράφονται στις σημειώσεις των διαλέξεων και το υπόλοιπο υλικό και ασκήσεις, που είναι διαθέσιμες στη σχετική ιστοσελίδα του μαθήματος στην πλατφόρμα E-class.

Σημειώνεται ότι βασικές γνώσεις από το εργαστήριο Φυσικοχημείας-Ι (π.χ. φάσματα εκπομπής ατόμων και απορρόφησης χρωστικών, δράση λέιζερ καθώς και σχετική οργανολογία φασματοσκοπίας) θεωρούνται εντός της εξεταστέας ύλης.

Στον πίνακα, που ακολουθεί, υποδεικνύονται τα κεφάλαια, που αντιστοιχούν στη διδαχθείσα ύλη, στο κύριο βοήθημα του μαθήματος ('Φυσικοχημεία' P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler, ΠΕΚ 2020 'Φυσικοχημεία' P.W. Atkins, J. de Paula, ΠΕΚ 2014).

	'Φυσικοχημεία' (AtFX)	'Φυσικοχημεία' (AtFX-2014)
Γενικά περί μοριακής φασματοσκοπίας	Κεφ. 11Α	Κεφ. 12.1, 12.2, E12.1, Κεφ. 13.1 Περαιτέρω πληροφ. 12.1 (εκτός 12.1γ), 12.2 Κεφ. 13.4(α) Κεφ. 9.6
Εξαναγκασμένες και αυθόρμητες διεργασίες Διαπλάτυνση		
Ανασκόπηση Κβαντικής Μηχανικής Λύσεις, εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger	Κεφ. 7 (εκτός 7Δ.4)	Κεφ.7, Κεφ. 8 Κεφ. 7 – Μαθημ. Υπόβαθρο 3
Ηλεκτρονική Δομή Ατόμων Ατομική φασματοσκοπία	Κεφ. 8	Κεφ. 9
Μοριακή Δομή, Μοριακά Τροχιακά	Εισαγωγή (Born Oppenheimer) Κεφ. 9 (εκτός 9Ε) Εργαλειοθήκη 24 (Πίνακες)	Born-Oppenheimer, Κεφ. 10.1 Θεωρία VB, Κεφ. 10.2 Θεωρία MT, Κεφ. 10.3, 10.4, 10.5(α) Κεφ. 10 - Μαθημ. Υπόβαθρο 6
Μοριακή συμμετρία - Θεωρία ομάδων	Κεφ. 10	Κεφ. 11
Περιστροφική φασματοσκοπία διατομικών	Κεφ. 7ΣΤ, Κεφ. 11Β1 (με έμφαση στα διατομικά), 11Β2 Κεφ. 11Β3 (όχι 11Β4) Κεφ. 7Ε Κεφ. 11Γ, 11Δ, 11Ε	Κεφ. 12.3 - 12.6, εκτός 12.4(δ)
Περιστροφική φασματοσκοπία Raman Δονητική (-περιστροφική) φασματοσκοπία (IR, Raman)		Κεφ. 12.8 - 12.15, μέχρι πριν το 12.15(α), 12.16
Ηλεκτρονική φασματοσκοπία	Κεφ. 11Ζ.1, 11Ζ.3 (+ η σχετική ύλη από το Εργ. ΦΧ-Ι, φασματοσκοπία οργανικών χρωστικών).	Κεφ. 13.1, 13.4, 13.6(α)

3. Υπόδειγμα θέματος

ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ-Ι (ΧΗΜ-048)

Περίοδος Σεπτεμβρίου 2023

ΘΕΜΑ 5 [20 μονάδες – ισοδύναμα ερωτήματα]

Μοριακή συμμετρία. Ομάδες συμμετρίας σημείου α) (i) Να δώσετε τη δομή στο χώρο των μορίων: βενζόλιο (C_6H_6) ακετυλένιο (C_2H_2) 1,1-διχλωρο-αιθένιο ($C_2H_2Cl_2$) διχλωρομεθάνιο (CH_2Cl_2)

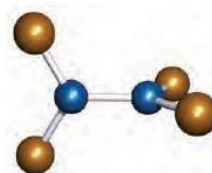
(ii) Να σημειώσετε εκείνα που

- ΔΕΝ διαθέτουν κέντρο συμμετρίας, i,
- διαθέτουν άξονα περιστροφής 2^{ης} τάξης, C_2 ,
- διαθέτουν άξονα περιστροφής 3^{ης} τάξης, C_3 .

β) Να σημειώσετε την ομάδα συμμετρίας σημείου στα παρακάτω μόρια και να προσδιορίσετε τον αριθμό κανονικών τρόπων ταλάντωσης.



CO₂



(Br₂B-BBr₂)

Συμμετρία μοριακών ταλαντώσεων. Δονητική φασματοσκοπία

γ) Με δεδομένο ότι τόσο στα φάσματα υπερύθρου όσο και στα φάσματα Raman της φωσφίνης, PH₃, εμφανίζονται 4 ταινίες (2421, 2327, 1121, 991 cm⁻¹) να συμπεράνετε αν η γεωμετρία του μορίου είναι επίπεδη ή πυραμιδική.

Δίνεται Γ_{3N} (πυραμιδικό) = $3A_1 + A_2 + 4E$ και Γ_{3N} (επίπεδο) = $A_1' + A_2' + 3E' + 2A_2'' + E''$. Υπόδειξη:

Να προσδιορίσετε τις Γ_{vib} για τις δύο περιπτώσεις.

δ) Αντικατάσταση όλων των ατόμων H με D παράγει την πλήρως δευτεριωμένη φωσφίνη, PD₃. Σε ποια συχνότητα αναμένετε να μετατοπίζεται η ταλάντωση στα 1121 cm⁻¹; Με ποια κύρια παραδοχή οδηγήσετε στο αποτέλεσμα που δίνετε;

C ₂	E	C ₂		
A	1	1	z, R _z	x ² , y ² , z ² , xy
B	1	-1	x, y, R _x , R _y	yz, xz

C _{2v}	E	C ₂	σ _v (xz)	σ _{v'} (yz)		
A ₁	1	1	1	1	z	x ² , y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	xy
B ₁	1	-1	1	-1	x, R _y	xz
B ₂	1	-1	-1	1	y, R _x	yz

D ₂	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)						
A	1	1	1	1		x ² ,y ² ,z ²				
B ₁	1	1	-1	-1	z,R _z	xy				
B ₂	1	-1	1	-1	y,R _y	xz				
B ₃	1	-1	-1	1	x,R _x	yz				
D _{2h}	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)	i	σ(xy)	σ(xz)	σ(yz)		
A _g	1	1	1	1	1	1	1	1		x ² ,y ² ,z ²
B _{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R _z	xy
B _{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R _y	xz
B _{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R _x	yz
A _u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B _{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B _{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

4. Βασικές σχέσεις, σταθερές

Να μεριμνήσετε ώστε να έχετε ταχεία πρόσβαση στους **Πίνακες Χαρακτήρων**

Ενέργεια σωματιδίου σε μονο-διάστατο φρέαρ δυναμικού μήκους L : $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$ Κυματοσυνάρτηση : $\Psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$																															
Ενέργεια σωματιδίου σε περιφέρεια κύκλου ακτίνας r : $E_{m_\ell} = \frac{\hbar^2}{2I} m_\ell^2$, $I = mr^2$: ροπή αδράνειας,																															
Στροφορμή : $L_z = \hbar m_\ell$, $m_\ell : 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$		Κυματοσυνάρτηση : $\Phi_{m_\ell}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im_\ell \varphi)$																													
Ενέργεια σωματιδίου σε επιφάνεια σφαίρας ακτίνας r : $E_\ell = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell + 1)$, $\ell : 0, 1, 2, 3$																															
Στροφορμή : $L = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1)}$, Προβολή στροφορμής : $L_z = \hbar m_\ell$, $m_\ell : 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$																															
Κυματοσυνάρτηση : $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$: σφαιρικές αρμονικές συναρτήσεις																															
Σφαιρικές αρμονικές																															
$l=0 \quad Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$l=1 \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}$ $l=2 \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2}$$Y_{2,\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2}$$Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right)^2$																															
Πίνακας 9.1 Υδρογονοειδείς ακτινικές κυματοσυναρτήσεις <table><tr><th>Τροχιακό</th><th>n</th><th>l</th><th>$R_{n,l}$</th></tr><tr><td>1s</td><td>1</td><td>0</td><td>$2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$</td></tr><tr><td>2s</td><td>2</td><td>0</td><td>$\frac{1}{8^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$</td></tr><tr><td>2p</td><td>2</td><td>1</td><td>$\frac{1}{24^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}$</td></tr><tr><td>3s</td><td>3</td><td>0</td><td>$\frac{1}{243^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2}$</td></tr><tr><td>3p</td><td>3</td><td>1</td><td>$\frac{1}{486^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (4 - \rho) \rho e^{-\rho/2}$</td></tr><tr><td>3d</td><td>3</td><td>2</td><td>$\frac{1}{2430^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$</td></tr></table> $\rho = (2Z/na)r$ με $a = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / \mu e^2$. Για έναν απείρως βαρύ πυρήνα (ή για έναν που μπορεί να υποθεθεί ως τέτοιος), $\mu = m_e$ και $a = a_0$, η ακτίνα του Bohr. Η πλήρης κυματοσυνάρτηση λαμβάνεται με πολλαπλασιασμό του R με την κατάλληλη Y από τον Πίνακα 8.2.				Τροχιακό	n	l	$R_{n,l}$	1s	1	0	$2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$	2s	2	0	$\frac{1}{8^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$	2p	2	1	$\frac{1}{24^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}$	3s	3	0	$\frac{1}{243^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2}$	3p	3	1	$\frac{1}{486^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (4 - \rho) \rho e^{-\rho/2}$	3d	3	2	$\frac{1}{2430^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$
Τροχιακό	n	l	$R_{n,l}$																												
1s	1	0	$2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$																												
2s	2	0	$\frac{1}{8^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$																												
2p	2	1	$\frac{1}{24^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}$																												
3s	3	0	$\frac{1}{243^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2}$																												
3p	3	1	$\frac{1}{486^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (4 - \rho) \rho e^{-\rho/2}$																												
3d	3	2	$\frac{1}{2430^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$																												
Άτομο υδρογόνου H ($Z=1$) ή υδρογονοειδείς ιόν: $E_n = - \left[\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right] \frac{1}{n^2} = - \frac{Z^2 R_H}{n^2}$, Ακτίνα Bohr : $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = 52,9 \text{ pm}$, $\rho = \frac{2Z}{na_0} r$																															
Ακτινική κυματοσυνάρτηση H ($Z=1$) ή υδρογονοειδούς ιόντος : $R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) e^{-(\rho/2)}$																															
Ενέργεια αλληλεπίδρασης τροχιακής στροφορμής-spin: $E_{\ell,s,j} = (1/2)A[j(j+1)- \ell(\ell+1) -s(s+1)]$																															
Δονητική και περιστροφική ενέργεια διατομικού : $\frac{E_{v,J}}{hc} = \tilde{\nu}_e \left[v + \frac{1}{2} \right] - \tilde{\nu}_e x_e \left[v + \frac{1}{2} \right]^2 + B_e J(J+1) - D_e J^2(J+1)^2 - \alpha_e \left[v + \frac{1}{2} \right] J(J+1)$																															
Περιστροφική σταθερά : $B = (\hbar^2/2I)$, $I = \mu r^2$		$B(\text{cm}^{-1}) = \frac{16,8576 \text{cm}^{-1}}{I(\text{amu} \cdot \text{\AA}^2)}$	$B(\text{MHz}) = \frac{505379,07 \text{MHz}}{I(\text{amu} \cdot \text{\AA}^2)}$																												
(I: ροπή αδράνειας, $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, ανηγμένη μάζα). Ισχύει επίσης :																															
Συχνότητα αρμονικού ταλαντωτή : $\tilde{\nu}_o = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $\tilde{\nu}_o(\text{cm}^{-1}) \cong 130 \sqrt{\frac{k(N/m)}{\mu(\text{amu})}}$ Σχέση Kratzer : $D_J(\text{cm}^{-1}) = 4B_e^3 / \tilde{\nu}_e^2$																															
Κυματοσυναρτήσεις : $\Psi_v(x) = N_v H_v(a^{1/2} x) e^{-ax^2/2}$ $v = 0, 1, 2, 3 \dots$ $a = \left(\frac{k\mu}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $N_v = (a\sqrt{\pi} 2^v v!)^{-1/2}$																															
Πολύωνυμα Hermite : $H_0 = 1$, $H_1 = 2a^{1/2}x$, $H_2 = 4ax^2 - 2$, $H_3 = 8a^{3/2}x^3 - 12a^{1/2}x$, $H_4 = 16a^2x^4 - 48ax^2 + 12$.																															

Δυναμικό Morse : $V(q) = D_e(1 - e^{-\beta q})^2$, Συχνότητα αναρμονικού ταλαντωτή : $\tilde{\nu}_e = \frac{\beta}{2\pi c} \sqrt{\frac{2D_e}{\mu}}$ Ισχύει επίσης : $\chi_e = \frac{\tilde{\nu}_e}{4D_e(\text{cm}^{-1})}$	
Πληθυσμιακή κατανομή Boltzmann στα ενεργειακά επίπεδα συστήματος : $N_i = N \frac{g_i e^{-E_i/k_B T}}{\sum_i g_i e^{-E_i/k_B T}}$ N_i : Πληθυσμός στο ενεργειακό επίπεδο i, E_i : Ενέργεια του επιπέδου i, g_i : (Εκφυλισμός (αριθμός μικροκαταστάσεων) του επιπέδου i Λόγος πληθυσμών μεταξύ 2 ενεργειακών επιπέδων, 1 και 2 : $\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2 e^{-E_2/k_B T}}{g_1 e^{-E_1/k_B T}} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2 - E_1)/k_B T}$	
Πληθυσμιακή κατανομή Boltzmann στα ενεργειακά επίπεδα μη ελαστικού στροφέα : $N_J \propto (2J+1)e^{-BJ(J+1)/k_B T}$	$J_{\max} = \sqrt{\frac{k_B T}{2B}} - \frac{1}{2}$, $k_B = 0,69500 \text{ cm}^{-1}/\text{K}$
Φυσική διαπλάτυνση : $\delta\tilde{\nu} \approx \frac{5,31 \text{ cm}^{-1}}{\tau \text{ (ps)}}$ τ : χρόνος ζωής κατάστασης	Διαπλάτυνση Doppler : $\delta\nu_D = 7,16 \times 10^{-7} \nu_o \sqrt{\frac{T}{M}}$ (Hz ή cm^{-1})
Κανόνες επιλογής ηλεκτρονιακών μεταβάσεων στα διατομικά μόρια : $\Sigma \leftrightarrow \Sigma$, $\Pi \leftrightarrow \Sigma$, $\Delta \leftrightarrow \Pi$, $+$ $\leftrightarrow$ $+$ $-$ $\leftrightarrow$ $-$ $g \leftrightarrow u$ $\Delta S = 0$	

$$c = 2,9979 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Ατομική μάζα (amu) : H=1, D=2, ^7Li =7.0, ^9Be =9.0, ^{10}B =10.0, ^{11}B =11.0, ^{12}C =12.0, ^{13}C =13.0, ^{14}C =13.0, ^{14}N =14.00, ^{16}O =15.995, ^{19}F =19.0, ^{23}Na =22.99, ^{27}Al =26.98, ^{28}Si =27.98, ^{31}P =30.97, ^{32}S =32.07, ^{35}Cl =35.0, ^{37}Cl =37.0, ^{40}Ar =39.96, ^{39}K =38.964, ^{41}K =40.96, ^{40}Ca =39.963, ^{79}Br =7.9, ^{81}Br =80.9, ^{84}Kr =83.9, ^{107}Ag =106.95, ^{127}I =126.90

$$1\text{amu} = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$$

$$1\text{eV} = 8065.54 \text{ cm}^{-1} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \text{ (96.485 kJ/mol} = 23.06 \text{ kcal/mol)}$$

$$k_B = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$$

$$k_B = 0.6950 \text{ cm}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$e = 2.71828$$

$$e^{-1} = 0.36788$$