

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (ΧΗΜ-048)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Εξέταση 2^{ης} Προόδου : Πέμπτη 11/12/2025, Αμφιθέατρο Α1

Πληροφορίες σχετικά με το διαγώνισμα προόδου

Το διαγώνισμα προόδου θα περιλαμβάνει 20 ερωτήματα τύπου πολλαπλής επιλογής απαντήσεων, η διαχείριση των οποίων απαιτεί αριθμητικούς υπολογισμούς και ανάγνωση διαγραμμάτων, φασμάτων.

Η διάρκεια της εξέτασης είναι 45 λεπτά της ώρας και θα πραγματοποιηθεί σε ομάδες, βάσει ΑΜ, σύμφωνα με το ακόλουθο πρόγραμμα :

ΑΜ	3580 - 3431	3430 - 3191	3190 - 3101	3100 - 1000
Ωρα	16:10 – 17:00	17:05 – 17:55	18:00-18:50	19:00 – 19:50

Το περιεχόμενο των θεμάτων ανταποκρίνεται στα διδαχθέντα μέχρι και 04/12/2025, όπως αυτά περιγράφονται στις σημειώσεις των διαλέξεων και τις ασκήσεις, που είναι διαθέσιμες στη σχετική σελίδα του μαθήματος στην πλατφόρμα E-class.

Η εξεταστέα ύλη αναφέρεται στο Περίγραμμα του μαθήματος και αφορά τις ενότητες: *Εισαγωγή στη Μοριακή Δομή, Περιστροφική Φασματοσκοπία και Δονητική Φασματοσκοπία.*

Στο τέλος της παρούσας ανακοίνωσης παρατίθενται **πίνακας-τυπολόγιο** στον οποίο συγκεντρώνονται βασικές σχέσεις, τιμές φυσικών σταθερών και σχέσεις μονάδων, που θα χρειαστείτε κατά τη διάρκεια της εξέτασης και επιτρέπεται να τον έχετε μαζί σας σε έντυπη μορφή.

Στην εξέταση είναι απαραίτητο να έχετε μαζί σας :

- δύο (2) μολύβια και γόμα,
- υπολογιστή τσέπης (απαγορεύεται αυστηρά η οποιαδήποτε χρήση κινητού τηλεφώνου),
- φοιτητική ταυτότητα (απαραίτητη).

Σημείωση

Φοιτητές/Φοιτήτριες, σε έτος πέραν του 4^{ου}, που έχουν αδυναμία παρουσίας στην εξέταση λόγω μόνιμης διαμονής εκτός Ηρακλείου παρακαλούνται να ενημερώσουν τον διδάσκοντα μέχρι την Τετάρτη 10/12/2025. Στην παρούσα φάση δεν υπάρχει δυνατότητα συμμετοχής στην εξέταση προόδου εξ αποστάσεως. Θα οργανωθεί όμως ειδική συμπληρωματική εξέταση εντός της εξεταστικής περιόδου του Ιανουαρίου 2026, σε ημερομηνία που θα ανακοινωθεί όταν γίνει γνωστό το πρόγραμμα της εξεταστικής.

Ενδεικτικά ερωτήματα

- Να σημειώσετε ποιο από τα ακόλουθα μόρια ΔΕΝ παρουσιάζει φάσμα απορρόφησης μικροκυμάτων (περιστροφής)
Α (χλωροφόρμιο) CHCl_3
Β (φαινόλη) $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$
Γ (μεθάνιο) CH_4
Δ NBr
 $\theta = 166^\circ\text{C}$, ο πληθυσμός του επιπέδου $u = 1$ ως προς το θεμελιώδες είναι :
Α $3(1/e)^2$
Β $4e$
Γ $3/e$
Δ $(1/e)^2$
- Στο περιστροφικό φάσμα απορρόφησης του $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$ η διαφορά συχνότητας μεταξύ διαδοχικών κορυφών είναι 21429 MHz. Η ενέργεια του επιπέδου με κβαντικό αριθμό $J = 7$ είναι περίπου (εκφρασμένη σε cm^{-1})
Α 29 cm^{-1}
Β 14 cm^{-1}
Γ 20 cm^{-1}
Δ 10 cm^{-1}
Διατομικό μόριο Α-Β ευρίσκεται στο ενεργειακό επίπεδο $u = 0, J = 4$ (αρχική κατάσταση) και διεγείρεται δονητικο-περιστροφικά απορροφώντας ακτινοβολία στο υπέρυθρο. Σύμφωνα με τους κανόνες επιλογής των δονητικο-περιστροφικών μεταβάσεων, η τελική κατάσταση στον κλάδο Ρ της θεμελιώδους ταινίας απορρόφησης είναι :
Α $u=0, J=5$
Β $u=1, J=5$
Γ $u=2, J=4$
Δ $u=1, J=3$
- Στο μόριο IF (φθορίδιο του ιωδίου, $^{127}\text{I}^{19}\text{F}$) η θεμελιώδης δονητική συχνότητα είναι $\tilde{\nu}_0 = 610 \text{ cm}^{-1}$ και το μόριο συμπεριφέρεται ως αρμονικός ταλαντωτής. Σε θερμοκρασία

Βασικές σχέσεις, σταθερές

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			
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	$\frac{1}{2.430^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$
$\rho = (2Z/na)r$ 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.			
Άτομο υδρογόνου $H (Z=1)$ ή υδρογονοειδές 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: $E_{l,s,j} = (1/2)A[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$			
Δονητική και περιστροφική ενέργεια διατομικού : $\frac{E_{v,J}}{\hbar c} = \tilde{\nu}_e \left[v + \frac{1}{2} \right] - \tilde{\nu}_e x_e \left[v + \frac{1}{2} \right]^2 + B_e J(J+1) - D_J J^2 (J+1)^2 - \alpha_e \left[v + \frac{1}{2} \right] J(J+1)$			
Περιστροφική σταθερά : $B = (\hbar^2/2I)$, $I = \mu r^2$ (I: ροπή αδράνειας, $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, ανηγμένη μάζα). Ισχύει επίσης : $B(\text{cm}^{-1}) = \frac{16,8576 \text{ cm}^{-1}}{I(\text{amu} \cdot \text{\AA}^2)}$ $B(\text{MHz}) = \frac{505379,07 \text{ MHz}}{I(\text{amu} \cdot \text{\AA}^2)}$			
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 : $\Psi_v(x) = N_v H_v(a^{1/2} x) e^{-ax^2/2}$ $v = 0, 1, 2, 3, \dots$ $a = \left(\frac{k\mu}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $N_v = (a\sqrt{\pi} 2^v v!)^{-1/2}$			
Πολυώνυμα Hermite : $H_0 = 1$, $H_1 = 2ax$, $H_2 = 4ax^2 - 2$, $H_3 = 8a^{3/2}x^3 - 12a^{1/2}x$, $H_4 = 16a^2x^4 - 48ax^2 + 12$,			

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 : $\Sigma \leftrightarrow \Sigma, \Pi \leftrightarrow \Sigma, \Delta \leftrightarrow \Pi, \quad + \leftrightarrow + \quad - \leftrightarrow - \quad g \leftrightarrow u \quad \Delta S = 0$	

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$e = 2.71828$$

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