ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ
ΕΞΕΤΑΣΕΙΣ
10/6/96

---

1. (2)

   Να βρεθεί η διαφορική εξίσωση για ένα σωματίδιο μάζας m που κινείται πάνω σε δακτύλιο ακτίνας a και έχει ως λύσεις τις συναρτήσεις

   $$\psi(\theta) = A\exp(in\theta),$$

   όπου, $n = (2IE)^{1/2}/\hbar$, E οι ιδιοενέργειες, $I = ma^2$ η ροπή αδρανείας, και θ η γωνία που περιγράφει τη θέση του σωματιδίου πάνω στο δακτύλιο.

   Να υπολογισθεί ο συντελεστής κανονικοποίησης, A.

---

2. (2)

   Η Χαμιλτονιανή ενός συστήματος, και επομένως και οι ιδιοτιμές της ενέργειας, E_n, είναι συναρτήσεις μιας παραμέτρου λ. Δείξτε ότι

   $$< \psi_n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|\psi_n >= \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}.$$

---

3. (2)

   Δείξτε ότι οι κυματοσυναρτήσεις

   $$\phi_1 = |1s\overline{1s}|$$

   $$\phi_2 = |1s\overline{2s}| - |\overline{1s}2s|$$

   είναι ορθογώνιες μεταξύ τους όταν $< 1s|2s > \neq 0$;

---

4. (2)

   Περιγράψτε με μοριακά τροχιακά το χημικό δεσμό του μορίου HeH^+. Ποιά προβλέπετε ότι θα είναι τα προϊόντα διάσπασης, He^+, H, ή He, H^+;

   Τα δυναμικά ιονισμού του ηλίου και υδρογόνου είναι 24.6 eV και 13.6 eV αντίστοιχα.

---

5. (2)

   Υπολογίστε τις ενέργειες των μοριακών τροχιακών π του αιθυλενίου, θεωρώντας όμως, ότι το ολοκλήρωμα επικάλυψης μεταξύ των δύο p_z τροχιακών δεν είναι μηδέν, $S \neq 0$.

---

6. (2)

   Να υπολογισθούν τα μοριακά τροχιακά π και οι αντίστοιχες ενέργειες της φορμαλδεΰδης κάνοντας τις προσεγγίσεις Hückel.

   Θεωρούμε ότι, τα ολοκληρώματα Coulomb και συντονισμού για το οξυγόνο και το δεσμό άνθρακα-οξυγόνου αντίστοιχα, συνδέονται με αυτά του άνθρακα με τις σχέσεις

$$\alpha_O = \alpha + 2\beta, \quad \beta_{C-O} = \sqrt{2}\beta.$$

---

7. (2)

   Να υπολογίσετε τις μικρότερες ενέργειες ιονισμού και διέγερσης της αλλυλικής ρίζας.

ΠΡΟΣΟΧΗ

Όσοι θα διατηρήσουν τη βαθμολογία της προόδου πρέπει να λύσουν τα προβλήματα 3 έως 7.

Εκείνοι που θα βαθμολογιθούν μόνο από το παρόν διαγώνισμα πρέπει να λύσουν τα προβλήματα 1 και 2, και τρία από τα προβλήματα 3 έως 7.