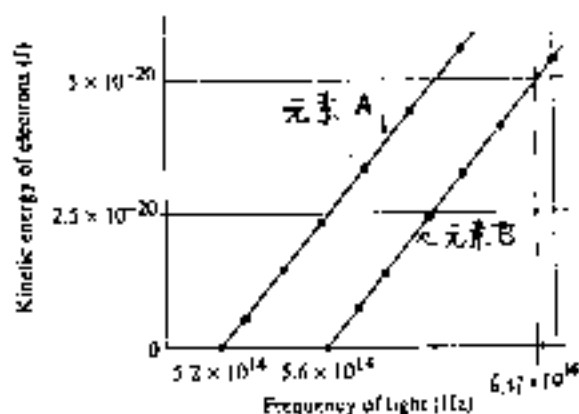


1. Estimate the entropy change (ΔS) on mixing two moles of A molecule and one mole of B molecule at 300 K. (10%)
2. The vapor pressure of a liquid is 25 Torr at 300 K but raises to 250 Torr at 343 K, estimate $\Delta_{\text{vap}}H$ of this liquid. (10%)
3. What is the Clausius inequality? Try to prove it. (10%)
4. Describe the definition of seven crystal systems. (10%)
5. Describe the basic theory and application of (a) nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, or (b) Scanning electron microscopy (SEM). (10%)
6. 已知氫原子由 $n=3$ 電子態降至 $n=1$ 電子態時放出的光的波長為 102.57 nm。試計算該原子的電子由 $n=6$ 電子態降至 $n=2$ 電子態時所放出的光的波長。(4%)

7. 某人做了光電效應實驗，數據作圖如右。
 (a) 若 Planck 常數之值為 6.63×10^{-34} Js, 請估計 A 和 B 兩元素對電子的束敷能。
 (b) 若已知一元素為 Na, 另一為 Cs, 則 A, B 兩者中，何者為 Na? (c) 請由圖中數據估計 Planck 常數之值。(6%)



8. 有三個電子組態：(a) $1s^2 2s^2$, (b) $1s^2 3s^1$, 及 (c) $[\text{Ne}] 3s^2$ 。有 10 種原子或離子： He^- , Li , Li^+ , Be , B , B^+ , Na , Na^+ , Mg , Mg^{2+} 。請問上述三個電子組態分別能代表十種原子或離子中的那些個？ (5%)

八十六學年度材料科學工程研究所(系) 三 組碩士班研究生入學考試
 科目 物理化學(I) 科號 2302 共 2 頁第 2 頁 *請在試卷【答案卷】內作答

9. 分子軌域理論可將軌域分成三種類型：(a) 鍵結型，(b) 非鍵結型及 (c) 反鍵結型。請說明這三種類型的性質。(6%)
10. O_2 的分子軌域可以依能量高低排成能階圖如下：
 圖中表示出的是：由O原子提供出來的軌域僅有 $1s, 2s$ 及 $2p$ 。(19%)
 (請在答案卷上作答)
- (a) 請將圖中各能階標上符號，以顯示
- 鍵結類型： σ 或 π
 - 鍵結類型：鍵結，非鍵結，及反鍵結
 - 量子數 n, l ：用 s, p, d, f 表示

- (b) 請將 O_2 所具有的電子依由低能至高能的次序填入能階。
- (c) 計算 O_2 的 bond order.
- (d) O_2 是順磁性的分子嗎？“是”或“不是”，都請說明理由。此
- (e) 若將 O_2 最高能量的電子游離，得 O_2^+
- O_2^+ 的 bond order 為何？
 - O_2^+ 的鍵長比 O_2 的要長些或是短些？說明之。
- (f) 若在圖中的能階中發生的 $\pi \rightarrow \pi^*$ 躍遷，此時
- 激發態 O_2 的 bond order 為何？
 - 激發態 O_2 的鍵長比基態 O_2 的要長些或是短些？



11. 振動轉動光譜之躍遷位置常用波數 cm^{-1} 表示。所以計算一個具振動量子數 v ，轉動量子數 J 的能階的能量亦常用 cm^{-1} 為單位。下列公式即可表示 (v, J) 能階的能量計算：(10%)

$$\bar{E}_{v,J} = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + B_e J(J+1) - DJ^2(J+1)^2 - \alpha(v + \frac{1}{2})J(J+1)$$

請說明式右中 ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , D , 及 α 分別代表什麼物理意義以及它們在數值上大小的比較 (針對每一個常數，給一個大小 order 範圍)。