

elektronin potentiaali- ja liike-energioiden summa ja perustilan

$$(1s, \psi_{1s} = [1/(\pi a_0^3)^{1/2}] e^{-r/a_0})$$

missä  $a_0 = 52,918 \cdot 10^{-12}$  m "Bohrin säde") kokonaisenergia on

$$-13,6 \text{ eV} = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}.$$

- Mikä on todennäköisyys sille, että perustilalla oleva elektroni on alueella, jossa sen potentiaalienergia on suurempi\* kuin vetyatomin kokonaisenergia (pallomainen tilavuuselementti on  $r^2 \sin\theta d\phi d\theta dr$ ).
- Onko a-kohdan tilanne mahdollinen klassisen mekaniikan mukaan? Osaatko perustella vastauksesi?
- Mikä kvanttimekaniikan ilmiö on kyseessä?

*\* Huomaa, että energiat ovat negatiivisia, joten "suurempi" tarkoittaa lähempänä nollaa olevaa.*

4.

Fluorivety molekyylin sidospituus on 0,0917 nm, perusvärähdyksen taajuus  $4138,3 \text{ cm}^{-1}$  ja rotaatiovakio  $20,956 \text{ cm}^{-1}$ . Laske

- molekyylin hitausmomentti
- sidoksen voimavakio
- rotaatio-spektriviivojen viivaväli ja
- piirrä kvalitatiivinen kuva fluorivedyn puhtaasta rotaatio-spektristä.

5.

Typyikaasun Ramanspektriä mitataan käyttäen herätesäteilynä  $\text{Ar}^+$ -laserin 540,8 nm viivaa. Millä aallonpituuksilla havaitaan Stokes'in ja anti-Stokes'in vibraatio-Ramanviivat? Kumman viivan intensiteetti on suurempi ja miksi?

(Ohje: Oletetaan, että typyikaasu sisältää vain  $^{14}\text{N}_2$ , jonka perusvärähdyksen taajuus on  $2330 \text{ cm}^{-1}$ ).