

1. 有一個立方體的盒子，三個邊長都是  $L$ ，所有邊界的位能都是無限大，盒子內部的位能都是零。現在盒中有一粒子質量為  $m$ ，能量是  $\frac{6h^2}{8mL^2}$ ，請寫出它的三種  $(n_x, n_y, n_z)$  簡併態 (degenerate states)。 (10 分)
2. 請畫出  $N_2$  的分子軌域 (要標明清楚如  $\sigma_{g1s}$  等)，然後填入電子，並以此說明  $N_2$  是順磁性還是逆磁性。 (20 分)
3. 請推演出  $[x, \hat{p}_x]$  的結果。 (15 分)
4. 請證明  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$ 。 (10 分)
5. 反應速率常數  $k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$ ，則如何做一直線求得活化能  $E_a$ ？請把圖畫出來，而這條直線的斜率和截距各是什麼？ (10 分)
6.  $A \rightarrow P$  是一步完成的一級反應，現在準備  $0.2M$  的反應物  $A$ ，結果發現反應半衰期是 40 秒，求反應的速率常數  $k$  (要寫單位)。 (10 分)
7. 一莫耳理想氣體在某絕對溫度  $T$  時由  $(P_1, V_1)$  進行等溫可逆膨脹至  $(P_2, V_2)$ ，求這過程的  $\Delta E$ (內能變化)、 $q$ 、 $w$  及  $\Delta H$ 。(請注意，不管是  $q$  或  $w$  都是以系統得到能量為正，系統失去能量為負) (15 分)
8. 何謂 state functions，上題  $E$ 、 $q$ 、 $w$  及  $H$  中那一個或那一些是 state functions？ (10 分)