

9

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Kursus Semasa Cuti Panjang
Sidang Akademik 2003/2004

April 2004

KFT 331 – Kimia Fizik III

Masa: 3 jam

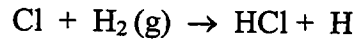
Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi ENAM muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab sebarang LIMA soalan.

Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

Lampiran: Pemalar Asas Dalam Kimia Fizik dilampirkan.

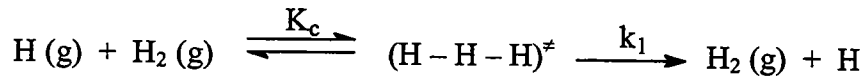
1. (a) Dengan menggunakan teori pelanggaran, ramalkan nilai faktor pra-eksponen, A, pada 350 K bagi tindak balas



Diberi garispusat, σ , bagi Cl dan H_2 masing-masing ialah 0.20 nm dan 0.15 nm. Jika nilai eksperimen bagi $\log A$ ialah 10.08 di antara 250 K hingga 450 K, kiralah faktor sterik, p.

(10 markah)

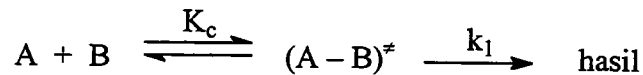
- (b) Untuk tindak balas



tenaga pengaktifan, $E_a = 23 \text{ kJ mol}^{-1}$ dan faktor pra-eksponen, $A = 1.5 \times 10^{10} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ pada 298 K. Tentukan perubahan entalpi, ΔH^{\ddagger} dan perubahan entropi, ΔS^{\ddagger} bagi pembentukan kompleks yang diaktifkan daripada bahan tindak balas.

(10 markah)

2. (a) Tindak balas asas yang terlibat di dalam teori keadaan peralihan ialah



Simbol \ddagger merujuk kepada keadaan peralihan (atau kompleks yang diaktifkan). Bincangkan dengan ringkas bilangan darjah kebebasan untuk setiap spesies.

(8 markah)

- (b) Tunjukkan bahawa teori peralihan mendapat persamaan untuk pemalar kadar, k, yang sama dengan teori pelanggaran apabila ia digunakan untuk tindak balas di antara dua molekul sfera yang tegar.

Diberi fungsi sekatan

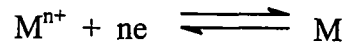
$$q_t = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V$$

$$q_r = \frac{8\pi^2 IkT}{h^2}$$

$$q_v = \frac{1}{1 - e^{-hv/kT}}$$

(12 markah)

3. (a) Dengan menimbang aspek elektrokimia dan kinetik bagi tindak balas elektrod berikut:



Terbitkan persamaan Butler-Volmer.

(10 markah)

- (b) Terang dan tunjukkan bagaimana plot Tafel boleh didapati daripada persamaan Butler-Volmer.

(10 markah)

4. Pertimbangkan sistem zarah-di-dalam-kotak dua dimensi dengan empat segi yang sama. Pada suatu suhu tertentu, nisbah populasi dalam paras tenaga asas dengan paras tenaga yang kedua adalah 0.5. Kirakan:

- (a) Fungsi partisi zarah melalui penjumlahan eksplisit hingga paras tenaga yang ketiga.

(12 markah)

- (b) Fungsi partisi zarah jika suhu ditingkatkan sebanyak dua kali ganda.

(4 markah)

- (c) Nisbah populasi dalam paras tenaga ketiga dengan paras tenaga asas.

(4 markah)

$$[\text{Tenaga yang dibenarkan} = \frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2 + n_y^2)].$$

5. (a) Bermula dari persamaan $S = k \ln \Omega$ dan diberikan

$$E = NkT^2 \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v,$$

tunjukkan bahawa entropi bagi zarah-zarah terkenalbezakan diberi dengan persamaan

$$S = Nk \left[T \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v + \ln q \right].$$

(10 markah)

- (b) Dengan menggunakan keputusan dari (a), tunjukkan bahawa entropi molar yang disumbangkan oleh putaran diberi dengan persamaan

$$\bar{S}_r = R (\ln q_r + 1)$$

$$\text{dengan } q_r = \frac{8\pi^2 I k T}{\sigma h^2}$$

(5 markah)

- (c) Kirakan beza entropi putaran molar bagi molekul dwiatom AC dan BB. Kedua-dua gas adalah pada suhu yang sama tetapi AC mempunyai momen inersia sebanyak dua kali ganda BB.

(5 markah)

6. (a) Dengan menggunakan takrifan asal bagi operator momentum dan bentuk klasik bagi tenaga kinetik, tunjukkan bahawa operator tenaga kinetik satu dimensi adalah

$$\hat{K} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

(4 markah)

-5-

- (b) Suatu operator \hat{R} ditakrifkan sebagai operator Hermitian jika ia mematuhi persamaan

$$\int \Psi_m^* \hat{R} \Psi_n d\tau = \int \Psi_n (\hat{R} \Psi_m)^* d\tau$$

dengan Ψ_m dan Ψ_n adalah fungsi yang berkelakuan baik.

Tunjukkan bahawa operator tenaga kinetik \hat{K} adalah operator Hermitian.

(8 markah)

- (c) Apakah syarat-syarat untuk suatu fungsi diterima sebagai fungsi yang berkelakuan baik? Berikan contoh untuk menjelaskan syarat-syarat itu.

(8 markah)

7. Satu zarah berjisim m bergerak di dalam sebuah kotak satu dimensi. Tenaga keupayaan $U = 0$ bila $0 \leq x \leq a$ dan $U = \infty$ di tempat lain. Fungsi gelombang yang dibenarkan adalah

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} \right)$$

dengan n merupakan nombor kuantum.

- (a) Tunjukkan bahawa momentum zarah itu tidak dapat diketahui dengan tepat. Tentukan nilai purata bagi momentum zarah itu.

(10 markah)

- (b) Jika zarah itu adalah elektron dan dimensi kotak adalah 1 nm, tentukan nilai tenaga kinetik yang paling rendah bagi zarah itu.

(10 markah)

-0000000-

.../6-

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA
Pusat Pengajian Sains Kimia

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

<u>Simbol</u>	<u>Keterangan</u>	<u>Nilai</u>
N_A	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
F	Pemalar Faraday	96,500 C mol ⁻¹ , atau coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	4.80×10^{-10} esu 1.60×10^{-19} C atau coulomb
m_e	Jisim elektron	9.11×10^{-28} g 9.11×10^{-31} kg
m_p	Jisim proton	1.67×10^{-24} g 1.67×10^{-27} kg
h	Pemalar Planck	6.626×10^{-27} erg s 6.626×10^{-34} J s
c	Halaju cahaya	3.0×10^{10} cm s ⁻¹ 3.0×10^8 m s ⁻¹
R	Pemalar gas	8.314×10^7 erg K ⁻¹ mol ⁻¹ 8.314 J K ⁻¹ mol ⁻¹ 0.082 l atm K ⁻¹ mol ⁻¹ 1.987 cal K ⁻¹ mol ⁻¹
k	Pemalar Boltzmann	1.380×10^{-16} erg K ⁻¹ molekul ⁻¹ 1.380×10^{-23} J K ⁻¹ molekul ⁻¹
g		981 cm s ⁻² 9.81 m s ⁻²
1 atm		76 cmHg 1.013×10^6 dyne cm ⁻² 101,325 N m ⁻²
$2.303 \frac{RT}{F}$		0.0591 V, atau volt, pada 25 °C

Berat Atom yang Berguna

H = 1.0	C = 12.0	I = 126.9	Fe = 55.8	As = 74.9
Br = 79.9	Cl = 35.5	Ag = 107.9	Pb = 207.0	Xe = 131.1
Na = 23.0	K = 39.1	N = 14.0	Cu = 63.5	F = 19.0
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	Mg = 24.0
Sn = 118.7	Cs = 132.9	W = 183.85	He = 2.016	