

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 1999/2000

September 1999

KFT 331 – Kimia Fizik III

(Masa : 3 jam)

Jawab sebarang LIMA soalan.

Hanya LIMA jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi TUJUH soalan dan lampiran (6 muka surat).

1. (a) Suatu operator ditakrifkan sebagai operator hermitian jika ia mematuhi persamaan

$$\int \psi_m^* \hat{R} \psi_n d\tau = \int \psi_n (\hat{R} \psi_m)^* d\tau$$

di mana  $\psi_m$  dan  $\psi_n$  adalah fungsi yang berkelakuan baik.

Tunjukkan bahawa nilai eigen bagi operator hermitian adalah nyata.

(8 markah)

- (b) Jika  $\mathcal{H}$  adalah suatu operator hermitian dengan nilai eigen  $E$  supaya  $\mathcal{H}\psi = E\psi$ , tunjukkan bahawa untuk sebarang operator  $\hat{A}$ ,

$$\int \psi^* (\mathcal{H} \hat{A} - \hat{A} \mathcal{H}) \psi d\tau = 0$$

(8 markah)

- (c) Carilah komutator bagi operator  $x^3$  dan  $\frac{d^2}{dx^2}$ .

(4 markah)

2. (a) Pertimbangkan suatu zarah yang jisimnya  $m$  bergerak di dalam sebuah kotak satu dimensi. Tenaga keupayaan  $U(x) = 0$  bila  $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$  dan  $U = \infty$  di tempat lain. Fungsi gelombang bagi keadaan asas adalah

$$\psi = A \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

di mana  $A$  adalah pemalar penormalan. Carilah  $A$ .

Adakah  $\psi$  fungsi eigen bagi operator momentum,  $-\hbar \frac{d}{dx}$ ? Jika ya, berikan nilai eigennya. Jika tidak, berikan sebab.

(10 markah)

- (b) Bagi satu zarah di dalam sebuah kotak yang berdimensi  $a$ ,  $b$  dan  $c$  dengan  $a \neq b = c$ , sediakan satu jadual yang menunjukkan nombor kuantum  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$ , paras tenaga dan kedegeneratan bagi paras tenaga untuk nombor kuantum dari 1 hingga 3.

Kenapa nombor kuantum sifar tidak dibenarkan? Cuba terangkan dari sudut Prinsip Ketidakpastian Heisenberg.

$$\text{Tenaga yang dibenarkan} = \frac{\hbar^2}{8m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

(10 markah)

3. (a) Jarak antaranukleus bagi  $N_2$  adalah 0.1095 nm. Tentukan fungsi partisi putaran bagi  $N_2$  pada 300 K.

(8 markah)

- (b) Bermula dari persamaan

$$\bar{E} = RT^2 \left( \frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_V$$

tunjukkan bahawa muatan haba molar pada tekanan tetap bagi gas unggul diberi oleh persamaan berikut:

$$\bar{C}_p = R + R \frac{\partial}{\partial T} \left[ T^2 \left( \frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_V \right]_P$$

Kiralah sumbangan anjakalih dan putaran kepada  $\bar{C}_p$  bagi  $O_2(g)$  pada 298.15 K.

(12 markah)

$$\left[ q_t = \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V ; q_r = \frac{8\pi^2 IkT}{\sigma h^2} \right]$$

4. (a) Pertimbangkan sistem zarah dalam satu kotak satu dimensi. Pada suatu suhu tertentu, nisbah populasi di dalam paras  $n = 2$  dengan paras  $n = 1$  adalah 0.421. Kiralah

- (i) Fungsi partisi molekul melalui penjumlahan eksplisit (abaikan sumbangan dari paras  $n \geq 6$ ).
- (ii) Nisbah populasi di dalam paras  $n = 3$  dengan paras  $n = 1$ .
- (iii) Nisbah populasi di dalam paras  $n = 3$  dengan paras  $n = 1$  jika suhu ditingkatkan sebanyak dua kali ganda.

$$\left( \text{Tenaga yang dibenarkan} = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \right)$$

(10 markah)

(b) Berikan keterangan bagi sebarang dua tajuk berikut:

- (i) Sel bahan api.
- (ii) Mekanisme pemusnahan ozon di stratosfera.
- (iii) Kesan kinetik isotop.

(10 markah)

5. (a) Bandingkan kebaikan dan keburukan untuk teori pelanggaran dan teori keadaan peralihan bagi kadar tindak balas.

(10 markah)

(b) Dalam syarat yang tertentu, dua teori tersebut dalam (a) menghasilkan ungkapan kadar yang sama. Apakah syarat itu? Tunjukkan kesamaan yang dimaksudkan.

(10 markah)

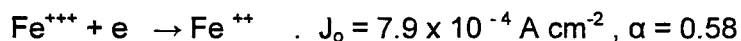
6. (a) Persamaan Butler-Volmer boleh ditulis dalam bentuk berikut:

$$J = J_a - J_c = J_0 \{ e^{-(1-\alpha) f \eta} - e^{-\alpha f \eta} \}$$

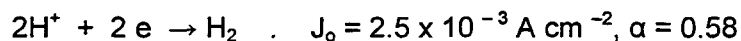
yang mana  $f = F / RT$ . Namakan dan terangkan semua simbol dalam persamaan tersebut. Gunakan gambarajah-gambarajah untuk keterangan anda jika sesuai.

(10 markah)

(b) Untuk tindak balas penurunan pada elektrod Pt berikut:



tindak balas pelepasan gas hidrogen



mungkin berlaku secara pertandingan.

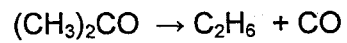
Terangkan apakah syarat diperlukan supaya  $\text{Fe}^{+++}$  dapat diturunkan dan bukan pelepasan gas hidrogen.

(10 markah)

7. (a) Dengan menggunakan gambarajah yang sesuai, terangkan apakah proses-proses intramolekul yang mungkin berlaku apabila suatu molekul diujakan.

(8 markah)

- (b) Hasil kuantum bagi tindak balas fotolisis aseton



pada 300 nm adalah 0.2. Berapakah bilangan mol per saat CO dibentuk jika keamatan sinaran 300 nm yang diserapi ialah  $10^{-2} \text{ J s}^{-1}$ ?

(12 markah)

ooo0ooo

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 <sup>-1</sup> , atau coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10}$ esu $1.60 \times 10^{-19}$ C atau coulomb
$m_e$	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28}$ g $9.11 \times 10^{-31}$ kg
$m_p$	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24}$ g $1.67 \times 10^{-27}$ kg
h	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-27}$ erg s $6.626 \times 10^{-34}$ J s
c	Halaju cahaya	$3.0 \times 10^{10}$ cm s <sup>-1</sup> $3.0 \times 10^8$ m s <sup>-1</sup>
R	Pemalar gas	$8.314 \times 10^7$ erg K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> $8.314$ J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> $0.082$ l atm K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> $1.987$ cal K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>
k	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-16}$ erg K <sup>-1</sup> molekul <sup>-1</sup> $1.380 \times 10^{-23}$ J K <sup>-1</sup> molekul <sup>-1</sup>
g		981 cm s <sup>-2</sup> 9.81 m s <sup>-2</sup>
1 atm		76 cmHg $1.013 \times 10^6$ dyne cm <sup>-2</sup> 101,325 N m <sup>-2</sup>
$2.303 \frac{RT}{F}$		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		