

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2000/2001

September/Oktober 2000

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 (5 muka surat)

1. (a) Jika ϕ_1 dan ϕ_2 menghuraikan dua keadaan degenerat dan mereka adalah fungsi eigen bagi operator Hamiltonian dengan nilai eigen E , buktikan bahawa sebarang kombinasi linear ($C_1 \phi_1 + C_2 \phi_2$) adalah juga fungsi eigen.

(4 markah)

- (b) Buktikan bahawa fungsi-fungsi eigen bagi satu operator Hermitian \hat{R} yang nilai eigennya berbeza adalah ortogonal.

Deduksikan bahawa sebarang dua fungsi gelombang untuk sistem zarah di dalam kotak satu dimensi adalah ortogonal.

(8 markah)

- (c) Terdapat dua zarah yang tidak berinteraksi di antara satu sama lain di dalam sebuah kotak satu dimensi yang panjangnya L . Tuliskan operator Hamiltonian dan ungkapan tenaga bagi sistem ini.

(8 markah)

2. Operator Hamiltonian bagi pengayun harmonik adalah

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

Salah satu fungsi eigen bagi operator \mathcal{H} berbentuk $\Psi_1(x) = N(x+c)e^{-Bx^2}$ di mana N adalah pemalar penormalan dan $B = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{km}$.

(a) Diberikan bahawa fungsi gelombang $\Psi_1(x)$ dan $\Psi_0(x) = \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{1/4} e^{-Bx^2}$ adalah ortogonal, tentukan c di dalam $\Psi_1(x)$.

(5 markah)

(b) Tunjukkan bahawa c juga dapat ditentukan dengan menggunakan hakikat bahawa $\Psi_1(x)$ adalah ganjil.

(4 markah)

(c) Tunjukkan bahawa $\Psi_1(x)$ adalah fungsi eigen bagi \mathcal{H} dan tentukan nilai eigennya.

(6 markah)

(d) Tentukan pemalar penormalan N .

(5 markah)

Formula berguna : $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \quad (a > 0)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = 2x \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

3. (a) Dua sistem adalah serba sama kecuali molekul-molekul di dalam satu sistem itu adalah terkenalbezakan manakala molekul-molekul di dalam sistem yang lain itu adalah tidak terkenalbezakan. Bermula dari persamaan $S = k \ln \Omega$, carilah bezanya entropi molar di antara kedua-dua sistem itu.

(10 markah)

- (b) Molekul CO mempunyai momen inersia sejumlah $1.45 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$ dan frekuensi getarannya adalah $6.50 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, kiralah sumbangan putaran dan getaran kepada entropi molar pada 25°C .

$$\left[\begin{array}{l} q_r = \frac{8\pi^2 I k T}{\sigma h^2} \quad , \quad q_v = \frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}} \end{array} \right]$$

(10 markah)

4. (a) Suatu sistem mengandungi 1 mol molekul yang tidak terenalbezakan dan tidak berinteraksi. Setiap molekul mempunyai hanya tiga paras tenaga dengan tenaga dan kedegeneratan seperti berikut:

$\epsilon_1 = 0$, $g_1 = 1$, $\epsilon_2 = 100 \text{ k}$, $g_2 = 3$ dan $\epsilon_3 = 300 \text{ k}$, $g_3 = 5$ di mana k adalah pemalar Boltzmann.

- (i) Kiralah fungsi partisi q pada 200 K .
 (ii) Kiralah bilangan molekul purata di dalam paras pertama dan kedua pada 200 K dan dalam had $T \rightarrow \infty$.

(10 markah)

- (b) Ulaskan : Kakisan adalah suatu proses elektrokimia yang boleh dikawalkan.

(10 markah)

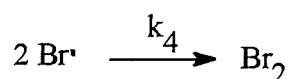
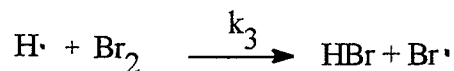
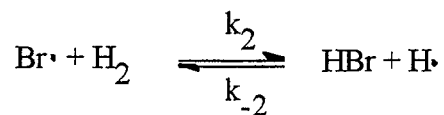
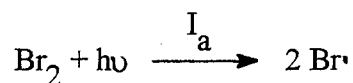
5. (a) Bincangkan kepentingan tenaga bebas Gibbs, entalpi, entropi dan tenaga pengaktifan bagi sesuatu tindak balas dan dapatkan hubungan-hubungan di antara kuantiti-kuantiti itu.

(10 markah)

- (b) Bagi suatu tindak balas bimolekul, nilai pra-eksponen dan tenaga pengaktifannya masing-masing ialah $1.24 \times 10^6 \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ dan 180 kJ mol^{-1} . Kirakan entalpi, entropi dan tenaga bebas Gibbs pengaktifan tindak balas itu.

(10 markah)

6. (a) Bagi tindak balas fotokimia di antara H_2 dan Br_2 , mekanisme berantai berikut dicadangkan:



Dapatkan ungkapan kadar bagi tindak balas tersebut dengan sebutan kepekatan H_2 , Br_2 dan HBr serta I_a dan pemalar-pemalar kadar.

(10 markah)

- (b) Terangkan mekanisme bagaimana kehadiran sebatian organik yang mengandungi klorin mengganggu keadaan mantap ozon di stratosfera.

(10 markah)

7. (a) Terangkan sebutan-sebutan berikut:

- (i) Keupayaan elektrokimia
- (ii) Keupayaan lebihan, dan
- (iii) Ketumpatan arus penghadan.

(10 markah)

- (b) (i) Terangkan kelebihan sel bahan api dan
 (ii) Lukiskan rajah skematik suatu jenis sel bahan api dan terangkan operasi sel itu untuk menghasilkan keupayaan elektrokimia.

(10 markah)

ooo000ooo

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		

