
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2002/2003

September 2002

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 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) Tunjukkan bahawa bagi tindak balas bimolekul di antara dua atom, teori keadaan peralihan memberi ungkapan kadar yang sama dengan ungkapan kadar berdasarkan teori pelanggaran.
(10 markah)
- (b) Berdasarkan keputusan dari (a) di atas, berikan makna bagi faktor sterik dari teori pelanggaran dan ungunannya dengan sebutan fungsi-fungsi sekatan.
(5 markah)
- (c) Kirakan nilai faktor sterik bagi suatu tindak balas bimolekul di antara satu molekul triatom yang berbentuk tak linear dan satu molekul dwiatom.
(5 markah)

2. (a) (i) Nyatakan prinsip-prinsip fotokimia dan
(ii) Takrifkan hasil kuantum primer dan hasil kuantum keseluruhan bagi sesuatu tindak balas fotokimia. (7 markah)
- (b) Terangkan, bersama dengan gambarajah yang sesuai, proses-proses intra-molekul fotokimia. (6 markah)
- (c) Dalam suatu tindak balas pemfotobrominan, 80% daripada sinaran 435 nm dengan keamatan asal $1.4 \times 10^{-3} \text{ J s}^{-1}$ diserapi oleh 1 L larutan tersebut apabila disinarkan selama 1105 s. Kepekatan Br_2 diturunkan sebanyak $7.5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$. Kirakan hasil kuantum tindak balas itu. (7 markah)
3. (a) Terangkan ketumpatan-ketumpatan arus katod, arus anod, arus net dan arus pertukaran. (5 markah)
- (b) Terbitkan persamaan Butler-Volmer. Persamaan ini boleh disederhanakan pada had keupayaan lampau yang rendah. Dapatkan ungkapan pada had itu. (10 markah)
- (c) Berikan satu contoh sel bahanapi dan nyatakan tindak balas katod dan anod yang berlaku. (5 markah)
4. (a) Jawab sebarang **dua** soalan berikut:
- (i) Salah satu kaedah pencegahan kakisan ialah dengan menggunakan anod korban (sacrificial anode). Terangkan prinsip kaedah itu.
- (ii) Terangkan kesan kinetik isotop.

- (iii) Terangkan, dengan gambarajah yang sesuai, permukaan tenaga keupayaan bagi suatu tindak balas di antara satu atom dengan satu molekul dwiatom.

(10 markah)

- (b) Dapatkan suatu ungkapan bagi pemalar keseimbangan, K , bagi tindak balas $\text{H}_2(\text{g}) + \text{D}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{HD}(\text{g})$ dalam sebutan frekuensi asas, momen inersia, jisim dan suhu.

$$\text{(Diberikan: } q_r = \frac{8\pi^2 I kT}{\sigma h^2} ; q_v = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/kT}} \text{)}$$

(10 markah)

5. (a) Suatu sistem terdiri daripada 1 mol molekul yang serbasama, tidak berinteraksi dan tidak terkenalbezakan. Setiap molekul mempunyai keadaan asas takdegenerat dengan tenaga $\epsilon_1 = 0$, tiga keadaan teruja yang pertama dengan tenaga $\epsilon_2 = 100 \text{ k}$ dan lima keadaan teruja yang kedua dengan tenaga $\epsilon_3 = 300 \text{ k}$ (k adalah pemalar Boltzmann).

- (i) Kiralah fungsi partisi pada suhu 200 K.
 (ii) Kiralah bilangan purata molekul dalam setiap paras pada suhu 200 K.

(10 markah)

- (b) Terdapat 1 mol $\text{H}_2(\text{g})$ pada 300 K di dalam sebuah kotak kubik yang panjangnya 0.2000 m. Jika molekul itu tidak berinteraksi, tenaga anjakan keadaan asas diberikan dengan

$$E_0 = \frac{3h^2}{8ma^2}$$

dengan m adalah jisim H_2 dan a adalah panjang sisi kotak.

- (i) Kiralah bilangan molekul $\text{H}_2(\text{g})$ dalam keadaan asas anjakan dengan menggunakan taburan Boltzmann.
 (ii) Adakah perkiraan tersebut bermakna? Bincangkan.

$$\text{(Diberikan } q_t = (2\pi mkT/h^2)^{3/2} V \text{)}$$

(10 markah)

.. /4-

-4-

6. Satu zarah berjisim m bergerak di dalam sebuah kotak tiga dimensi. Tenaga keupayaan $U = 0$ apabila $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$ dan $0 \leq z \leq c$. Tenaga keupayaan $U = \infty$ di tempat lain. Fungsi gelombang yang dibenarkan adalah

$$\varphi = \left(\frac{8}{abc} \right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$$

dengan n_x , n_y dan n_z adalah nombor kuantum.

- (a) Diberikan bahawa Hamiltonian bagi sistem ini adalah

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right),$$

tentukan ungkapan bagi tenaga sistem ini.

(10 markah)

- (b) Satu molekul nitrogen dihadkan di dalam sebuah kotak kubik dengan isipadunya 1.00 m^3 . Dengan menganggap bahawa molekul itu mempunyai tenaga sebanyak $\frac{3}{2}kT$ pada $T = 300 \text{ K}$, apakah nilai $n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{1/2}$ bagi molekul ini? Apakah pemisahan tenaga di antara keadaan asas dengan keadaan teruja yang pertama?

(10 markah)

7. (a) Suatu operator \hat{R} ditakrifkan sebagai operator Hermitian jika ia mematuhi persamaan

$$\int \varphi_m^* \hat{R} \varphi_n \, d\tau = \int \varphi_n (\hat{R} \varphi_m)^* \, d\tau$$

Tunjukkan bahawa hasil jumlah dua operator Hermitian adalah juga operator Hermitian.

(10 markah)

.../5-

-5-

- (b) Satu zarah berada dalam keadaan yang diuraikan dengan fungsi gelombang

$$\varphi(x) = \sqrt{2a} \exp(-ax)$$

dengan a adalah suatu pemalar dan $0 \leq x \leq \infty$. Tentukan nilai jangkaan bagi komutator operator kedudukan dan operator momentum.

(10 markah)

-oooOooo-

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		