
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA
Peperiksaan Semester Pertama
Peperiksaan Sidang Akademik 2005/2006

November 2005

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.

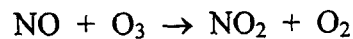
Jawab LIMA soalan sahaja.

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 teori keadaan peralihan menghasilkan keputusan yang sama dengan teori pelanggaran apabila ia digunakan dalam tindak balas di antara dua molekul sfera tegar. (10 markah)

- (b) Pertimbangkan tindak balas pelanggaran bimolekul pada 500 K,



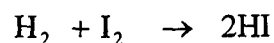
Nilai garis pusat, σ bagi NO dan O₃ masing-masing ialah 0.14 nm dan 0.20 nm. Tentukan nilai faktor pra-eksponen, A, untuk tindak balas ini. Jika nilai A eksperimen bagi tindak balas ini ialah $8 \times 10^{11} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, kirakan faktor sterik, p. (10 markah)

2. (a) Mengikut teori keadaan peralihan, pemalar kadar, k_r , boleh ditulis sebagai

$$k_r = \frac{kT}{h} K^\ddagger$$

Di sini K^\ddagger ialah pemalar keseimbangan, k ialah pemalar Boltzmann dan h , pemalar Planck. Terbitkan satu hubungan di antara entalpi pengaktifan, ΔH^\ddagger , dengan tenaga pengaktifan eksperimen, E_a , bagi suatu tindak balas. (10 markah)

- (b) Tindak balas fasa gas

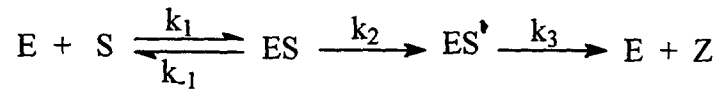


adalah bertertib kedua. Pemalar kadar dan tenaga pengaktifan pada 400 °C masing-masing ialah $2.34 \times 10^{-2} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ dan 150 kJ mol^{-1} . Kirakan

- (i) tenaga pengaktifan Gibbs, ΔG^\ddagger ,
- (ii) entropi pengaktifan, ΔS^\ddagger ,
- (iii) entalpi pengaktifan, ΔH^\ddagger , dan
- (iv) faktor pra-eksponen, A.

(10 markah)

3. (a) Pertimbangkan mekanisme yang berikut untuk tindak balas pemangkinan enzim.



Anggapkan bahawa ES dan ES^{\ddagger} berada dalam keadaan mantap dan $[S] \gg [E]$.

- (i) Terbitkan persamaan kadar awalnya.
 (ii) Ungkapkan pemalar pemangkinan, K_c , dan pemalar Michaelis, K_m , dalam sebutan k_1 , k_{-1} , k_2 dan k_3 .
 (10 markah)

- (b) Kadar, v , berikut diperoleh untuk suatu tindak balas pemangkinan enzim pada beberapa kepekatan substrat, S:

$10^3 [S] / \text{mol dm}^{-3}$	2.0	4.0	8.0	12.0	16.0	20.0
$10^5 v / \text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$	13	20	29	33	36	38

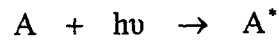
Kepekatan enzim dan jisim molekul relatif masing-masing ialah 2.0 g dm^{-3} dan 50,000. Kirakan

- (i) pemalar Michaelis, K_m ,
 (ii) kadar penghadan, v_m , dan
 (iii) pemalar pemangkinan, K_c .

(10 markah)

-4-

4. (a) Pertimbangkan mekanisme berikut untuk tindak balas fotokimia:



- (i) Nyatakan apa yang berlaku bagi setiap langkah.
- (ii) Terbitkan kadar pembentukan dimer bagi tindak balas ini.
- (iii) Takrif dan tentukan satu ungkapan untuk kecekapan kuantum, ϕ , bagi tindak balas fotokimia ini.

(10 markah)

- (b) Pertimbangkan suatu molekul mempunyai dua paras tenaga yang diasingkan dengan ε . Paras asas berkedegeneratan 2 manakala paras teruja berkedegeneratan 3.

- (i) Terbitkan ungkapan bagi fungsi partisi pada suhu T.
- (ii) Apakah populasi pecahan bagi dua paras itu pada suhu T?
- (iii) Apakah tenaga per molekul pada suhu T?

(10 markah)

5. Tunjukkan entropi bagi gas unggul monoatom yang tidak terkenalbezakan diberi dengan persamaan

$$S = Nk \left[T \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v + \ln \frac{q}{N} + 1 \right]$$

Seterusnya, terbitkan persamaan Sackur-Tetrode.

Kirakan entropi molar bagi helium pada 25 °C dan tekanan 1 bar. Anggap $q_e = 1$.

Diberikan: $E = NkT^2 \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v$; $q_t = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V$

(20 markah)

...5/-

6. (a) Terangkan erti “fungsi gelombang yang berkelakuan baik” dan berikan contoh yang sesuai. (5 markah)
- (b) Andaikan bahawa fungsi nyata ϕ_1 , ϕ_2 dan ϕ_3 adalah ternormal dan ortogonal antara satu sama lain. Carikan pemalar penormalan, N , bagi fungsi yang berikut:
- (i) $N(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$
- (ii) $N(\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_3)$ (10 markah)
- (c) Operator bagi kuasadua kedudukan adalah x^2 , tentukan sama ada operator ini Hermitian atau tidak. (5 markah)

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

7. Fungsi gelombang bagi sistem zarah di dalam kotak satu dimensi adalah

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

- (a) Tunjukkan bahawa nilai purata momentum bagi zarah adalah sifar. Terangkan. (6 markah)
- (b) Terbitkan ungkapan bagi tenaga sistem ini. (6 markah)
- (c) Molekul $\text{H}_2\text{C} = \text{CH} - (\text{CH}=\text{CH})_2 - \text{CH} = \text{CH}_2$ dapat dianggap sebagai sebuah kotak satu dimensi untuk elektron π . Jika panjang setiap ikatan C-C adalah 0.15 nm dan panjang ikatan C-H di hujung diabaikan, tentukan nombor gelombang penyerapan bagi peralihan yang paling rendah. Nyatakan andaian yang dibuat. (8 markah)

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 = 4.0	