

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 1998/99

Ogos/September 1998

KFT 434 - Kimia Fizik IV

Masa : (3 jam)

---

Jawab sebarang LIMA soalan sahaja.

Hanya LIMA jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi TUJUH soalan semuanya (5 muka surat).

---

1. (a) Mengikut teori kuantum, operator bagi tenaga adalah

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt}$$

di mana  $t$  adalah masa.

- (i) Apakah kesandaran masa bagi fungsi gelombang akibat persamaan nilai eigen berikut.

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \psi(t) = E\psi(t) \quad (1)$$

di mana pemalar  $E$  adalah tenaga?

- (ii) Kiralah ketumpatan kebarangkalian  $|\Psi|^2$  bagi fungsi eigen tenaga daripada Persamaan (1). Apakah kepentingan keputusan itu bagi ilmu kimia?

(10 markah)

- (b) Operator  $\hat{R}$  dan  $\hat{S}$  bertukarertib. Jika  $\Psi_R$  adalah fungsi eigen bagi operator  $\hat{R}$  dengan nilai eigen  $R$ , buktikan  $\Psi_R$  juga adalah fungsi eigen bagi  $\hat{S}$ . Andaikan bahawa tiada kedegeneratan. Bolehkah kedudukan dan momentum suatu zarah dalam kotak satu dimensi ditentukan secara serentak dengan persisnya?

(10 markah)

2. (a) Apakah yang dimaksudkan dengan fungsi yang berkelakuan baik? Yang manakah di antara fungsi berikut yang merupakan fungsi berkelakuan baik:

(i)  $e^{-2x}$  bagi  $-\infty \leq x \leq \infty$

(ii)  $\cos x$  bagi  $-\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2}$

(iii)  $x^2$  bagi  $-\infty \leq x \leq \infty$

(6 markah)

- (b) Pertimbangkan sebuah kotak dengan dimensi L yang mengandungi dua zarah yang tidak berinteraksi di antara satu sama lain, tuliskan operator Hamiltonian dan persamaan Schrödinger bagi sistem ini.

(6 markah)

- (c) Satu operator  $\hat{R}$  adalah operator Hermitian jika

$$\int \phi_m^* \hat{R} \phi_n d\tau = \int \phi_n (\hat{R} \phi_m)^* d\tau$$

Buktikan bahawa operator  $\hat{R}^2$  adalah operator Hermitian jika  $\hat{R}$  Hermitian. Deduksikan bahawa Hamiltonian bagi sistem zarah dalam kotak satu dimensi adalah operator Hermitian.

(8 markah)

3. Diberikan bahawa Hamiltonian bagi satu zarah yang berjisim m dalam sebuah kotak dua dimensi adalah

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

dan fungsi gelombang yang dibenarkan bagi sistem ini adalah

$$\Psi_{n_x, n_y} = \left( \frac{4}{ab} \right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b}$$

di mana  $n_x$  dan  $n_y$  adalah nombor kuantum dan 'a' dan 'b' adalah dimensi kotak ini.

- (a) Dapatkan tenaga yang dibenarkan bagi sistem ini.

(8 markah)

- (b) Benzena boleh dianggap sebagai satu kotak dua dimensi dengan panjangnya 0.35 nm yang mengandungi 6 elektron  $\pi$ . Apakah jarakgelombang cahaya yang diperlukan untuk mengalihkan satu elektron dari keadaan asas ke keadaan teruja yang pertama?

(Hanya dua elektron boleh menduduki setiap paras tenaga).

(12 markah)

4. Suatu molekul dwiatom dengan momen inersia  $I$  boleh mempunyai lima paras tenaga bagi gerakan putaran seperti berikut:

$$E_\ell = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, \dots, 4 \quad (2)$$

- (a) Lakarkan skema paras tenaga dan tunjukkan peralihan-peralihan putaran yang mungkin bagi molekul itu dalam penyerapan jika peraturan pemilihan nombor kuantum  $\ell$  bagi peralihan putaran adalah  $\Delta\ell = \pm 1$  dan  $\pm 3$ .

(7 markah)

- (b) Berikan frekuensi-frekuensi sepadan yang dapat diperhatikan dalam spektrum penyerapan.

(5 markah)

- (c) Bagi suatu gas unggul yang terdiri daripada banyak molekul dwiatom serbasama yang berputar secara bebas, iaitu mereka tidak berinteraksi antara satu sama lain, skema paras tenaga adalah sama seperti (a). Namun, setiap paras tenaga hanya boleh diduduki oleh  $\ell(\ell+1)$  molekul. Tenaga termal bagi molekul-molekul itu adalah  $kT$ . Mengikut hukum Boltzmann, kebarangkalian untuk mendapati zarah yang bertenaga  $E_\ell$  diberikan dengan

$$p = \exp\left(-\frac{E_\ell}{kT}\right)$$

Berikan satu ungkapan umum untuk populasi purata  $P_\ell$  bagi paras-paras tenaga  $E_\ell$  daripada Persamaan (2). Apakah paras tenaga yang mempunyai populasi purata yang paling tinggi pada suhu bilik jika kita mengandaikan

$$kT = 4.14 \times 10^{-21} \text{ J} \text{ dan } \hbar^2/2I = 0.92 \times 10^{-21} \text{ J} ?$$

Apakah frekuensi yang anda kirakan dalam (b) yang merupakan garisan yang paling amat dalam spektrum penyerapan? Kiralah frekuensi ini.

(8 markah)

5. Tenaga keupayaan bagi getaran suatu molekul dwiatom boleh dihampirkan dengan keupayaan Morse.

$$V(r) = A \left[ 1 - e^{-B(r-r_0)} \right]^2 \quad (3)$$

di mana  $r$  adalah jarak antara nukleus yang membentuk molekul itu dan  $A, B > 0$  adalah pemalar yang mencirikan molekul itu.

- (a) Tunjukkan bahawa fungsi  $V(r)$  mempunyai satu minima pada  $r = r_0$ . Lakarkan fungsi  $V(r)$  dan tandakan tenaga penceraian keseimbangan,  $D_e$ , dan tenaga penceraian dari keadaan asas,  $D_0$ .

(8 markah)

- (b) Hitungkan tenaga penceraian keseimbangan,  $D_e$ , bagi molekul itu dalam sebutan  $A, B$  dan  $r_0$ .

(4 markah)

- (c) Andaikan bahawa tenaga keupayaan bagi satu pengayun harmonik adalah

$$V = \frac{1}{2} k (r - r_0)^2 \quad (4)$$

dan frekuensinya  $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

di mana  $\mu$  adalah jisim reda molekul dan  $k$  adalah pemalar daya. Kiralah frekuensi  $\nu$  dalam sebutan  $A, B$  dan  $r_0$  dengan mengaproksimasikan Persamaan (3) kepada perhubungan parabolik (4).

(4 markah)

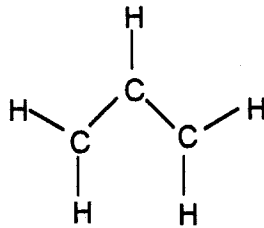
- (d) Kiralah tenaga penceraian dari keadaan asas,  $D_0$ , dalam sebutan  $A$  dan  $B$ .

(4 markah)

6. (a) Jelaskan prinsip teori variasi yang membolehkan ia digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger secara penghampiran.

(10 markah)

- (b) Gunakan kaedah variasi dan Orbital Molekul Hückel untuk mendapatkan tenaga elektron- $\pi$  yang dibenarkan dalam kumpulan allil yang ditunjukkan di bawah. Berikan jawapan anda dalam sebutan kamiran coulomb  $\alpha$  dan kamiran resonan  $\beta$ . Seterusnya dapatkan eigenfungsi ternormal.

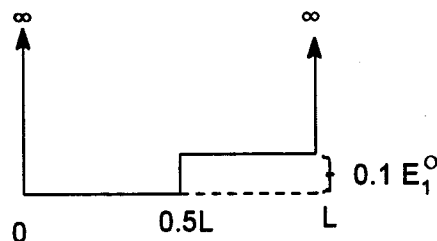


(10 markah)

7. (a) Persamaan Schrödinger bagi sistem banyak elektron tidak boleh diselesaikan dengan tepat. Jelaskan mengapa demikian dan seterusnya huraikan langkah-langkah yang boleh digunakan untuk menyelesaikan persamaan itu secara penghampiran bagi kedua-dua sistem atom dan molekul.

(12 markah)

- (b) Satu zarah dalam kotak 1-dimensi berjisim  $m$  dan panjang  $L$  yang mempunyai keupayaan sifar sepanjang julat  $0 \leq x \leq L$  dan berkeupayaan infiniti di kawasan lain telah diganggu dengan keupayaan  $0.1E_1^0$  dari julat  $L/2 \leq x \leq L$  seperti dalam rajah di bawah.



Gunakan teori gangguan untuk menentukan pembetulan tertib pertama kepada tenaga zarah akibat dari gangguan tersebut. Diberi tenaga zarah dalam kotak 1-dimensi tanpa gangguan sebagai

$$E_n^0 = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}; n = 1, 2, 3, \dots$$

(8 markah)

oooo0ooo

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> $0.082$ / 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			