
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Kursus Semasa Cuti Panjang
Sidang Akademik 2006/2007

Jun 2007

KFT 331 – Kimia Fizik III

Masa : 3 jam

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab **LIMA** soalan.

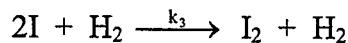
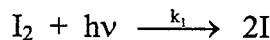
Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan diberi markah.

Lampiran: Pemalar Asas Dalam Kimia Fizik.

...2/-

- 2 -

1. Mekanisme yang dicadangkan bagi tindak balas fotokimia di antara gas hidrogen dan wap iodin pada 480 K ialah



- (a) Anggapkan bahawa kadar pembentukan atom I dalam tindak balas ialah $2I_a$, bagi I_a ialah keamatian cahaya terserap dan $k_4 \ll k_3$, dapatkan satu persamaan untuk kadar keseluruhan dalam sebutan I_a .

(12 markah)

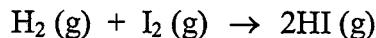
- (b) Data eksperimen bagi tindak balas itu diberi seperti berikut:

$\frac{d[HI]}{dt} / 2I_a$	5.7	4.0	3.0	2.4	2.0
(unit sebarang)					
$[I_2]/[H_2]$	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10

Tentukan nisbah k_2/k_3 daripada persamaan keseluruhan dalam (a).

(8 markah)

2. (a) Bagi tindak balas pada 700 K,



nilai garis pusat, $\sigma = 2 \times 10^{-10}$ m dan tenaga pengaktifan ialah 167 kJ mol^{-1} . Kirakan pemalar kadar dengan menggunakan teori pelanggaran. Anggapkan bahawa faktor sterik, $p = 1$.

(10 markah)

- (b) Pemalar kadar untuk tindak balas bertertib pertama ialah $7.40 \times 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ pada 25°C . Tenaga pengaktifan ialah $112.0 \text{ kJ mol}^{-1}$. Pada 25°C , kirakan $\Delta H^{\circ*}$, $\Delta G^{\circ*}$ dan $\Delta S^{\circ*}$ bagi tindak balas ini.

(10 markah)

...3/-

- 3 -

3. (a) Berdasarkan teori keadaan peralihan, kirakan faktor pra-eksponen, A, pada 300 K bagi tindak balas gas berikut:

- (i) Tindak balas bimolekul di antara satu atom dengan satu molekul dwiatom dan kompleks yang diaktifkan terbentuk adalah linear.
- (ii) Tindak balas bimolekul di antara dua molekul dwiatom dan kompleks yang diaktifkan terbentuk adalah tak linear dengan satu darjah putaran terhad.

Diberikan:

$$f_t^3 = 10^{33} \text{ m}^{-3}, f_r = 10, f_r(\text{terhad}) = 10, f_v = 1$$

(10 markah)

- (b) Kajian teori peralihan bagi tindak balas



memperolehi maklumat berikut pada 600 K.

Zat tindak balas

$$\text{O} \quad q_t = 1.767 \times 10^{32} \text{ m}^{-3} \quad (\text{untuk 3 darjah kebebasan})$$

$$\text{HCl} \quad q_t = 6.084 \times 10^{32} \text{ m}^{-3} \quad (\text{untuk 3 darjah kebebasan})$$

$$q_r = 39.40 \quad (\text{untuk 2 darjah kebebasan})$$

$$\bar{v}_r = 2991.0 \text{ cm}^{-1}$$

Keadaan peralihan (bengkok)

$$q_t = 1.050 \times 10^{33} \text{ m}^{-3} \quad (\text{untuk 3 darjah kebebasan})$$

$$q_r = 1730 \quad (\text{untuk 3 darjah kebebasan})$$

$$\bar{v}_1 = 1407.9 \text{ cm}^{-1}$$

$$\bar{v}_2 = 266.8 \text{ cm}^{-1}$$

Nilai E_0 ialah $38.097 \text{ kJ mol}^{-1}$. Kirakan pemalar kadar pada 600 K.

...4/-

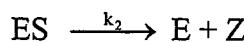
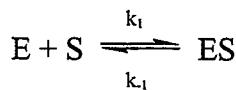
- 4 -

Diberi

$$q_v = \frac{1}{1 - \exp(-hv/kT)}$$

(10 markah)

4. (a) Data berikut diperolehi untuk tindak balas yang dimangkinkan oleh enzim,



$[S]/\text{mol dm}^{-3}$	2.5×10^{-4}	5.0×10^{-3}
kadar, $v/\text{mol dm}^{-3}\text{s}^{-1}$	2.3×10^{-4}	7.8×10^{-4}

Kepekatan bagi enzim ialah 2 g dm^{-3} dan jisim molekul relatif ialah 50,000. Dengan menganggapkan bahawa persamaan Michaelis – Menten digunakan, kirakan pemalar Michaelis, K_m , kadar penghadan, v_m dan pemalar pemangkinan, k_c .

(10 markah)

- (b) Bermula daripada Taburan Boltzmann dan takrifan bagi fungsi partisi, tunjukkan bahawa

$$C_v = Nk \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v \right]$$

(10 markah)

5. (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. Tentukan bezanya entropi molar di antara kedua-dua sistem dengan menggunakan persamaan $S = k \ln \Omega$ dan

$$E = NkT^2 \left(\frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v$$

(10 markah)

...5/-

- 5 -

- (b) (i) Tunjukkan bahawa entropi putaran molar diberi oleh persamaan

$$\bar{S}_r = R(1 + \ln q_r)$$

$$\text{dengan } q_r = \frac{8\pi^2 I k T}{\sigma h^2}$$

- (ii) Molekul CO mempunyai momen inersia sejumlah $1.45 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$, kirakan sumbangan putaran kepada entropi molar pada 25°C .

(10 markah)

6. (a) Fungsi ψ_1 dan ψ_2 menghuraikan dua keadaan degenerat dan kedua-duanya juga adalah fungsi eigen bagi operator \hat{R} dengan nilai eigen R . Tunjukkan bahawa sebarang kombinasi linear $C_1\psi_1 + C_2\psi_2$ juga adalah fungsi eigen bagi \hat{R} .

(5 markah)

- (b) Diberikan operator $\hat{P} = \frac{d}{dx}$ dan $\hat{Q} = x$, tentukan

$$(i) \quad \hat{P}\hat{Q}f(x) \text{ dan } \hat{Q}\hat{P}f(x),$$

$$(ii) \quad \text{Komutator } \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}.$$

(5 markah)

- (c) Buktikan bahawa jika wujudnya satu set fungsi eigen lengkap yang umum bagi dua operator linear, maka operator-operator itu bertukar tertib.

(10 markah)

7. Pertimbangkan suatu zarah dalam sebuah kotak satu dimensi. Tenaga keupayaan $U(x) = 0$ di dalam kawasan $0 \leq x \leq a$ dan $U = \infty$ di kawasan lain. Dengan memilih fungsi $\phi = N(x^2 - ax)$ sebagai fungsi gelombang kasar bagi keadaan asas sistem ini, tentukan

...6/-

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA
PUSAT PENGAJIAN SAINS MALAYSIA
PEMALAR ASAS DALAM KIMIA FIZIK

Simbol	Keterangan	Nilai
N_A	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
F	Pemalar Faraday	$96,500 \text{ C mol}^{-1}$
e	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$
m_e	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
m_p	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
h	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	Halaju cahaya	$3 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
R	Pemalar Gas	$8.3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.08206 \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
k	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
g	Graviti pergerakan piawai	9.807 m s^{-2}
1 atm		101.325 kPa 760 Torr
1 bar		10^5 Pa
2.303 RT/F		0.0591 V pada 25°C

Jisim Atom

Al	26.98	C	12.01	Fe	55.85	P	30.97
Sb	121.76	Cs	132.92	Kr	83.80	K	39.098
Ar	39.95	Cl	35.45	Pb	207.2	Ag	107.87
As	74.92	Cr	51.996	Li	6.941	Na	22.99
Ba	137.33	Co	58.93	Mg	24.31	S	32.066
Be	9.012	Cu	63.55	Mn	54.94	Sn	118.71
Bi	208.98	F	18.998	Hg	200.59	W	183.84
B	10.81	Au	196.97	Ne	20.18	Xe	131.29
Br	79.90	He	4.002	Ni	58.69	Zn	65.39
Cd	112.41	H	1.008	N	14.01		
Ca	40.078	I	126.90	O	15.999		

-ooooOooo-