
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2004/2005

Oktober 2004

KFT 331 – Kimia Fizik III

Masa : 3 jam

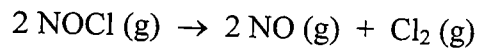
Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab LIMA soalan.

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

Lampiran: Pemalar Asas Dalam Kimia Fizik dilampirkan.

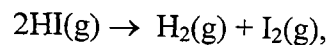
1. (a) Pertimbangkan perlanggaran bimolekul yang berikut:



Nilai garis pusat, $\sigma = 0.35 \text{ nm}$. Tentukan nilai faktor pra-eksponen, A , untuk tindak balas ini sebagai fungsi T . Jika nilai yang diperhatikan diberi sebagai $\log (A / T^{1/2}) = 9.51$, kiralah nilai faktor sterik.

(12 markah)

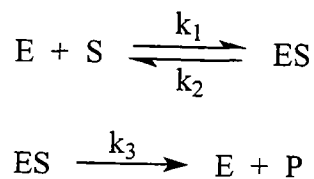
- (b) Bagi perlanggaran bimolekul



tenaga pengaktifan, $E_a = 183 \text{ kJ mol}^{-1}$, garis pusat, $\sigma = 0.35 \text{ nm}$ dan faktor sterik, $p = 0.44$ pada $427 \text{ }^\circ\text{C}$. Kiralah pemalar kadar, k , bagi tindak balas ini.

(8 markah)

2. (a) Berdasarkan mekanisme Michaelis-Menten untuk tindak balas pemangkinan enzim yang melibatkan satu substrat,



Terbitkan persamaan kadar awalnya. Seterusnya dapatkan persamaan Lineweaver-Burk.

(10 markah)

- (b) Kadar, v , berikut diperolehi untuk suatu tindak balas yang dimangkinkan oleh enzim pada beberapa kepekatan substrat, S :

| | | | | | | | |
|---------------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|
| $10^3[\text{S}]/\text{mol dm}^{-3}$ | 0.4 | 0.6 | 1.0 | 1.5 | 3.0 | 5.0 | 10.0 |
| $v/\text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ | 2.41 | 3.33 | 4.78 | 6.17 | 8.70 | 10.5 | 12.5 |

Tentukan pemalar Michaelis, K_m .

(10 markah)

...3/-

3. (a) Ungkapan pemalar kadar, k_r , mengikut teori keadaan peralihan boleh ditulis sebagai

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

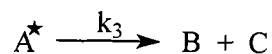
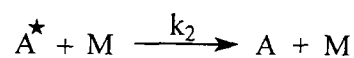
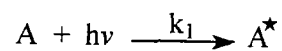
Di sini K^\ddagger itu merupakan satu pemalar keseimbangan, k ialah pemalar Boltzmann, dan h , pemalar Planck. Dapatkan satu hubungan di antara entalpi pengaktifan, ΔH^\ddagger dengan tenaga pengaktifan eksperimen, E_a bagi suatu tindak balas.

(10 markah)

- (b) Penguraian gas propilena oksida ialah tindak balas tertib pertama. Nilai entalpi pengaktifan, $\Delta H^\ddagger = 238.1 \text{ kJ mol}^{-1}$ dan entropi pengaktifan, $\Delta S^\ddagger = 25 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ pada suhu 558 K. Berdasarkan teori keadaan peralihan, kirakan faktor pra-eksponen dan pemalar kadar bagi tindak balas ini pada suhu 558 K.

(10 markah)

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



- (i) Takrifkan sebutan kecekapan kuantum, ϕ .
 (ii) Tentukan satu ungkapan untuk kecekapan kuantum, ϕ , bagi tindak balas fotokimia itu.

(10 markah)

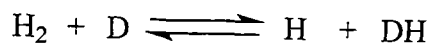
- (b) Suatu sistem mengandung 1 mol molekul yang serba sama, tidak berinteraksi dan takterkenalbezakan. Setiap molekul mempunyai tiga paras tenaga dengan tenaga dan kedegeneratan seperti berikut:

$$\varepsilon_1 = 0, \quad g_1 = 1, \quad \varepsilon_2 = 100 \text{ k}, \quad g_2 = 3, \quad \varepsilon_3 = 300 \text{ k}, \quad g_3 = 5.$$

- (i) Kirakan fungsi partisi molekul pada 200 K.
- (ii) Kirakan bilangan molekul purata dalam setiap paras pada 200 K.
- (iii) Kirakan bilangan molekul purata dalam setiap paras pada had suhu $\rightarrow \infty$.

(10 markah)

5. Pertimbangkan tindak balas pertukaran isotop



- (a) Terbitkan suatu ungkapan bagi pemalar keseimbangan, K , dalam sebutan frekuensi asas, momen inersia, jisim dan suhu.

(10 markah)

- (b) Kirakan pemalar keseimbangan, K , pada 25 °C dengan menganggap bahawa jarak antara nukleus dan pemalar daya adalah sama bagi H_2 dan DH .

Diberikan: jisim atom relatif $\text{H} = 1.0078$ dan $\text{D} = 2.014$; nombor gelombang getaran asas bagi $\text{H}_2 = 4371 \text{ cm}^{-1}$, $\text{HD} = 3786 \text{ cm}^{-1}$.

$$\left[q_t = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V; \quad q_r = \frac{8\pi^2 IkT}{\sigma h^2}; \quad q_v = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/kT}} \right] \quad (10 \text{ markah})$$

6. (a) Suatu zarah yang bergerak pada suatu bulatan mempunyai fungsi gelombang $\psi = e^{im\phi}$ dengan $0 \leq \phi \leq 2\pi$ dan m adalah pemalar.
- (i) Normalkan fungsi gelombang itu.
 - (ii) Kirakan kebarangkalian untuk zarah itu berada dalam julat sudut $0 \leq \phi \leq \frac{2}{3}\pi$.
 - (iii) Tunjukkan bahawa m mestilah bernilai integer untuk fungsi ψ bernilai tunggal.

(10 markah)

- (b) Fungsi gelombang bagi sistem zarah di dalam kotak satu dimensi adalah

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi x}{\ell}$$

- (i) Tentukan sama ada fungsi ψ adalah fungsi eigen bagi operator kedudukan \hat{x} , operator momentum \hat{p}_x dan operator Hamiltonian \mathcal{H} masing-masing.
- (ii) Bagi kes di mana ψ bukan fungsi eigen bagi operator itu, terangkan sebabnya.
- (iii) Tentukan nilai jangkaan bagi momentum.

(10 markah)

-6-

7. Fungsi gelombang yang dibenarkan bagi sistem zarah di dalam kotak yang berdimensi a dan b adalah

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

- (a) Diberikan bahawa Hamiltonian bagi sistem ini adalah

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

terbitkan ungkapan bagi tenaga sistem ini.

(10 markah)

- (b) Sebagai satu penghampiran, molekul benzena dapat dianggap sebagai sebuah kotak segiempat sama yang panjang sisinya 0.28 nm. Andaikan bahawa hanya elektron π yang terlibat, lakarkan keadaan asas bagi sistem ini. Tentukan panjang gelombang bagi peralihan dari keadaan asas ke keadaan teruja yang pertama bagi benzena.

(10 markah)

-oooOooo-

...7/-

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 | | |