

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1995/96

Mei/Jun 1996

JIK 413 - Kimia Kuantum dan Teori Kumpulan

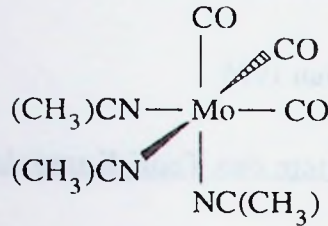
Masa : [3 jam]

ARAHAN KEPADA CALON:

- Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi LAPAN muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.
 - Jawab mana-mana LIMA soalan. Setiap soalan bernilai 20 markah dan markah subsoalan diperlihatkan di penghujung subsoalan itu.
 - Setiap jawapan mesti dijawab di dalam buku jawapan yang disediakan.
 - Soalan 1 - 3 adalah dari Bahagian Kimia Kuantum.
Soalan 4 - 6 adalah dari Bahagian Teori Kumpulan.
-

...2/-

1. (a) Bagi kompleks $\text{Mo}(\text{CO})_3(\text{NC}(\text{CH}_3))_3$ dengan struktur di bawah, jawab soalan-soalan berikut:



- (i) Berikan kumpulan titik bagi kompleks di atas.
- (ii) Dengan menggunakan fungsi dasar ikatan $\text{Mo}-\text{CO}$, $\Gamma_{\text{Mo}-\text{CO}}$, dapatkan perwakilan takterturunkan.
- (iii) Berikan bilangan jalur getaran bagi spektrum *inframerah* dan *Raman* yang terdapat pada molekul tersebut.

(15 markah)

- (b) Berpandukan molekul yang sesuai, dapatkan perwakilan-perwakilan Γ_{px} , Γ_{py} dan Γ_{pz} bagi kumpulan titik C_{2v} .

(5 markah)

2. Pertimbangkan sebatian *trans*-1,2-dikloroetilena, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$.

- (i) Berikan semua operasi simetri molekul tersebut.
- (ii) Berikan kumpulan titik sebatian tersebut.
- (iii) Dengan menggunakan Jadual Karakter yang bersesuaian, dapatkan perwakilan terturunkan bagi *trans*-1,2-dikloroetilena, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ dengan menggunakan $2N$ sebagai fungsi dasar.
- (iv) Dapatkan perwakilan takterturunkan bagi perwakilan Γ_{3N} di dalam bahagian (iii).
- (v) Berikan perwakilan-perwakilan yang menunjukkan aktif inframerah dan/atau Raman.

(20 markah)

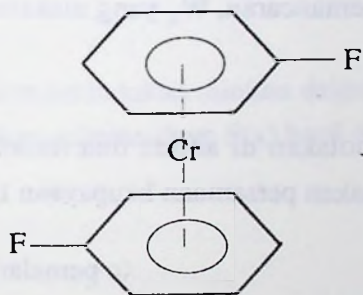
3. (a) Lukiskan struktur bagi satu molekul yang mempunyai setiap kumpulan titik berikut.

- (i) D_{4h}
- (ii) C_{4v}
- (iii) C_3
- (iv) D_{2h}
- (v) C_s

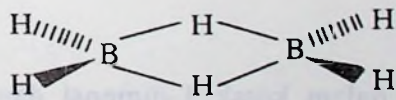
(5 markah)

(b) Berikan kumpulan titik bagi setiap molekul berikut:

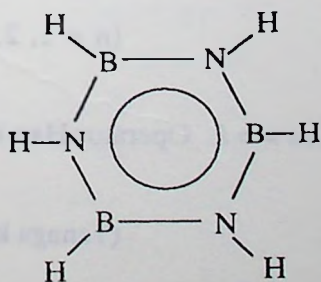
(i)



(ii)



(iii)



(iv) $N \equiv N$

(v) PF_5

(5 markah)

...4/-

- (c) Dapatkan set orbital hibrid bagi suatu atom pusat yang sesuai untuk pembentukan suatu set ikatan σ satah persegi. Gunalah jadual karakter D_{4h} .

(10 markah)

4. (a) Pemalar Wien, $A = 2.8979 \times 10^6 \text{ nm K}$

- (i) Kira pemalar Stefan-Boltzman, σ . Jika suatu jasad hitam pada suhu 800°K mempunyai kuasa pemancaran $W_o = 23.22 \text{ kWm}^{-2}$.

(6 markah)

- (ii) Untuk jasad hitam di atas, berapakah panjang gelombang sinaran, (λ_m (nm)) pada kuasa pemancaran, W_λ yang maksimum.

(8 markah)

- (iii) Tenaga keupayaan penolakan di antara dua molekul, jarak r boleh dikira dengan menggunakan persamaan keupayaan Lennard-Jones

$$V(r) = \frac{c}{r^{12}} \quad (\text{c pemalar})$$

Terbitkan Daya penolakan, $F(r)$ untuk dua molekul tersebut.

(6 markah)

5. Suatu zarah yang terkekang dalam kotak 1-dimensi dan panjang sisi ℓ , mempunyai satu set fungsi gelombang bebas masa yang diberi sebagai

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{\ell}\right)^{1/2} \sin(n\pi x/\ell) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Koordinat x terubah di antara $x = 0$ dan $x = \ell$. Operator Hamiltonian juga diberi sebagai

$$\hat{H} = -\left(\frac{h^2}{8\pi^2m}\right)\frac{d}{dx^2} \quad (\text{Tenaga keupayaan} = 0)$$

Buktikan $\psi_n(x)$ adalah eigen fungsi kepada \hat{H} dan dapatkan nilai eigen untuk tenaga, E_n .

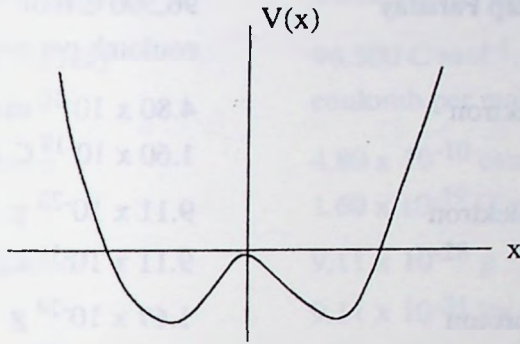
(20 markah)

...5/-

6. Fungsi tenaga keupayaan pemutar tegar dubel (double oscillator) diberi sebagai

$$V(x) = (\hbar^2/m)(8a^2x^6 - 6ax^2) \text{ dan}$$

mempunyai bentuk



- (i) dapatkan kedudukan minima dalam keluk $V(x)$
- (ii) dapatkan sebutan daya $F(x)$ hasil daripada $V(x)$

(20 markah)

Angkatap Asas dalam Kimia Fizik

| Simbol | Keterangan | Nilai |
|----------------------|--------------------|---|
| N_A | Nombor Avogadro | $6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ |
| F | Angkatap 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 |
| R | Angkatap gas | $8.314 \text{ kPa dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $82.05 \text{ cm}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.0821 \text{ liter.atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ |
| k | Angkatap Boltzmann | $1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ 981 cm s^{-2} 9.81 m s^{-2} |
| 1 atm | | 101.325 kPa 76 cmHg $1.013 \times 10^6 \text{ dyn cm}^{-2}$ $101,325 \text{ N m}^{-2}$ |
| $2.303 \frac{RT}{F}$ | | 0.0591 V, atau volt, pada 25°C |
| | 760 torr = | 101.325 kPA |
| | 1 Å = | 10^{-8} cm |
| | pico = | 10^{-12} |

Pemalar Asas Kimia

| Simbol | Keterangan | Nilai |
|----------------------|-------------------|---|
| N_A | Nombor Avogadro | $6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ |
| F | Pemalar Faraday | $96,500 \text{ C mol}^{-1}$, atau coulomb per mol, elektron |
| e | Cas elektron | $4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ atau coulomb |
| 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 | $6.626 \times 10^{-27} \text{ kg erg s}$ $6.262 \times 10^{-34} \text{ J s}$ |
| c | Halaju cahaya | $3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ |
| R | Pemalar gas | $8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $82.05 \text{ cm}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.0821 \text{ liter atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ |
| k | Pemalar Boltzmann | $1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ |
| g | | 981 cm s^{-2} 9.81 m s^{-2} |
| 1 atm | | 760 mm Hg |
| 1 torr | | 1 mm Hg |
| $2.303 \frac{RT}{F}$ | | 0.0591 V, atau volt, pada 25°C |

Berat Atom yang Berguna

| | | | |
|-----------|-----------|------------|------------|
| H = 1.0 | C = 12.0 | I = 126.9 | Fe = 55.8 |
| Br = 79.9 | Cl = 35.5 | Ag = 107.9 | Pb = 207.0 |
| Mn = 23.0 | K = 39.1 | N = 14.0 | Cu = 63.5 |
| O = 16.0 | S = 32.0 | He = 4.00 | |

- 0000000 -