

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 1997/98

September 1997

KFT 434 - Kimia Fizik IV

Masa : (3 jam)

---

Jawab sebarang LIMA soalan.

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) Apakah yang dimaksudkan dengan fungsi yang berkelakuan baik?

Pertimbangkan operator  $\hat{R} = -\frac{d^2}{dx^2}$  dan persamaan nilai eigen  $\hat{R}\psi = \alpha\psi$ ,

terbitkan fungsi eigen yang mungkin di bawah kes  $\alpha < 0$ ,  $\alpha = 0$  dan  $\alpha > 0$ .

(10 markah)

- (b) Jika  $\hat{P}$  dan  $\hat{Q}$  adalah operator Hermitian, tunjukkan bahawa

$$\int \phi_1^* \hat{P} \hat{Q} \phi_2 \, d\tau = \int \phi_2 \left( \hat{Q} \hat{P} \phi_1 \right)^* \, d\tau$$

$$\left( \text{Operator } \hat{R} \text{ Hermitian jika } \int \phi_m^* \hat{R} \phi_n \, d\tau = \int \phi_n \left( \hat{R} \phi_m \right)^* \, d\tau \right)$$

(10 markah)

2. (a) Jika  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  dan  $\phi_3$  adalah fungsi ortonormal, carilah pemalar penormalan  $N$  bagi fungsi-fungsi yang berikut:

(i)  $N(\phi_1 + \phi_2)$ .

(ii)  $N\left(\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \sqrt{\frac{3}{2}}\phi_3\right)$

(10 markah)

- (b) Diberikan fungsi  $\psi = N \exp(-\alpha x^2)$ . Bagi  $\psi$  itu,  $N$  dan  $\alpha$  adalah pemalar. Carilah satu ungkapan bagi  $\alpha$  yang sesuai supaya  $\psi$  adalah fungsi eigen bagi operator

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2.$$

(10 markah)

3. (a) Satu zarah kuantum yang jisimnya  $m$  di dalam sebuah kotak satu dimensi dengan panjangnya  $a$  hanya boleh mempunyai tenaga yang tertentu. Kiralah jarak gelombang zarah itu yang sepadan dengan tiga paras tenaga yang paling rendah. Lakarkan fungsi-fungsi gelombang di dalam kotak itu. Kesahihan manakah di antara perhubungan asas yang anda mesti andaikan untuk menyelesaikan persoalan ini?

(10 markah)

- (b) Kiralah secara amnya beza tenaga di antara paras tenaga yang kedua paling rendah dengan keadaan asas bagi satu molekul  $H_2$  di dalam sebuah kotak kiubik dengan panjangnya  $a$ . Carilah tertib magnitud panjang  $a$  bagi kotak itu supaya kita dapat memperhatikan peralihan di antara paras-paras translasi bagi  $H_2$  di dalam lingkungan inframerah jauh ( $\nu \approx 6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ).

(10 markah)

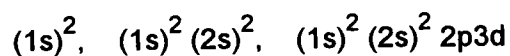
4. (a) Spektrum mikrogelombang bagi radikal CN menunjukkan satu siri garisan dengan pemisahan yang hampir tetap dan berjarak  $3.798 \text{ cm}^{-1}$ . Carilah panjang ikatan CN.

(10 markah)

- (b) Spektrum inframerah resolusi rendah bagi radikal CN menunjukkan bahawa jalur penyerapan yang paling kuat berpusat pada  $2074 \text{ cm}^{-1}$ . Apakah pemalar daya bagi molekul itu?

(10 markah)

5. (a) Berikan kedegeneratan bagi konfigurasi elektron yang berikut:



(7 markah)

- (b) Carilah sebutan  $^{2S+1}L$  untuk konfigurasi  $2p3d$  (elektron takekuivalen).

(7 markah)

- (c) Berikan paras-paras  $^{2S+1}L_J$  bagi sebutan  $^3D$ .

(6 markah)

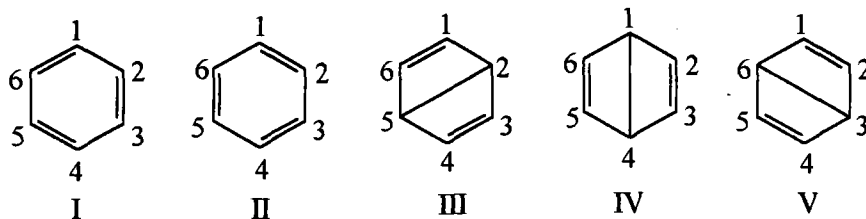
6. (a) Huraikan secara ringkas pendekatan-pendekatan penghampiran asas yang digunakan dalam penyelesaian persamaan Schrödinger bagi atom-banyak-elektron dan sistem-sistem molekul.

(10 markah)

- (b) Dengan menggunakan teori Hückel, tentukan tenaga elektron- $\pi$  dalam molekul etena, dalam sebutan kamiran coulomb dan kamiran resonan. Lakarkan gambarajah paras tenaga elektron- $\pi$  itu dan tuliskan fungsi gelombang bagi setiap paras tenaga itu.

(10 markah)

7. (a) 80% daripada tenaga penstabilan benzena terbit dari sumbangan dua struktur Kekule benzena I dan II manakala 20% lagi terbit dari sumbangan tiga struktur Dewar III, IV dan V.



- (i) Tuliskan fungsi gelombang ikatan valens bagi struktur-struktur ini. Tandakan ia sebagai  $\psi_I$ ,  $\psi_{II}$  .....  $\psi_V$ .
- (ii) Fungsi gelombang bagi keseluruhan molekul boleh ditulis sebagai kombinasi linear  $\psi_I$  hingga  $\psi_V$ . Tuliskan fungsi gelombang keseluruhan bagi molekul ini.

(10 markah)

(b) Di dalam kompleks satah empat segi,  $\text{PtCl}_4^{2-}$ , empat ligannya terletak di setiap penjuru satah tersebut dan ion logamnya terletak di pusat satah. Katakanlah empat orbital ligan  $\sigma$  ( $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ ) diletak di  $+x, -x, +y$  dan  $-y$  dengan ion logamnya terletak di origin koordinat. Tuliskan kombinasi orbital-orbital ligan yang akan menerbitkan pertindihan positif dengan

- (i) orbital  $4s$ ,
- (ii) orbital  $3d_{x^2-y^2}$ ,
- (iii) orbital  $4p_x$ ,
- (iv) orbital  $4p_y$ .

Yang manakah di antara orbital-orbital ini degenerat?

(10 markah)

ooo0ooo

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<br>coulomb per mol, elektron   |
| e                    | Cas elektron      | $4.80 \times 10^{-10}$ esu<br>$1.60 \times 10^{-19}$ C atau coulomb  |
| $m_e$                | Jisim elektron    | $9.11 \times 10^{-28}$ g<br>$9.11 \times 10^{-31}$ kg  |
| $m_p$                | Jisim proton      | $1.67 \times 10^{-24}$ g<br>$1.67 \times 10^{-27}$ kg  |
| h                    | Pemalar Planck    | $6.626 \times 10^{-27}$ erg s<br>$6.626 \times 10^{-34}$ J s   |
| c                    | Halaju cahaya     | $3.0 \times 10^{10}$ cm s <sup>-1</sup><br>$3.0 \times 10^8$ m s <sup>-1</sup>   |
| R                    | Pemalar gas       | $8.314 \times 10^7$ erg K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup><br>$8.314$ J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup><br>$0.082$ / atm K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup><br>$1.987$ 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><br>$1.380 \times 10^{-23}$ J K <sup>-1</sup> molekul <sup>-1</sup>   |
| g                    |                   | 981 cm s <sup>-2</sup><br>9.81 m s <sup>-2</sup>   |
| 1 atm                |                   | 76 cmHg<br>$1.013 \times 10^6$ dyne cm <sup>-2</sup><br>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 | W = 183.85 |            |            |