

# NORGES TEKNISK- NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET INSTITUTT FOR KJEMI

TKJ4160 FYSIKALSK KJEMI GK, VÅREN 2006

Fredag 19. mai 2006 Tid: 9.00-13.00

Faglig kontakt under eksamen: Førsteamanuensis Claire Chassagne, tlf. 99368176

Hjelpemidler: Typegodkjent lommekalkulator med tomt minne

Aylward og Findlay: SI Chemical Data

Rothman

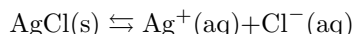
Vedlagt formelsamling

Oppgavene veies slik: Oppgave nr 1:2:3 =3:3:4

## Oppgave 1

Vi ønsker å bestemme løselighetsproduktet til AgCl ved hjelp av en elektrokjemisk celle.

a) Foreslå to halvcellereaksjoner som gir oss likevekten



Beregn  $E^0$  for cellen.

b) Beregn likevektskonstanten (løselighetsproduktet) og løseligheten.

Bruk  $E^0 = -0.60$  V hvis du ikke fant svaret i a). Anta ideell løsning.

c) Hvordan vil du bestemme løselighetsproduktet ved ledningsevne målinger?

## Oppgave 2

Vi betrakter en harmonisk oscillator med Schrödingerligning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{1}{2} m (2\pi\nu)^2 x^2 \Psi(x) = \Psi(x) E$$

Her er  $m$  partikkelens masse og  $\nu$  er frekvensen.

a) Gitt bølgefunksjonen

$$\Psi(x) = \left( \frac{2m\nu}{\hbar} \right)^{1/4} \exp\left( -\frac{m\pi\nu}{\hbar} x^2 \right)$$

Vis at denne funksjonen er en løsning til den ovenstående Schrödingerligningen og bestem energien  $E$ .

b) Vi betrakter nå  $N$  gassmolekyler ved temperaturen  $T$  og antar at Boltzmanns fordeling gjelder, dvs

$$\frac{n_i}{N} = \frac{\exp(-\varepsilon_i/kT)}{\sum_i \exp(-\varepsilon_i/kT)}$$

Bestem et uttrykk for forholdet  $n_k/n_m$  mellom okkupasjonen (befolkningen) av disse to energinivåer, og vis at dette er uavhengig av partisjonsfunksjonen og avhengig av energiforskjellen  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_k - \varepsilon_m$ .

c) Vi antar nå at det finnes bare 2 mulige tilstander for molekylet:  $\varepsilon_1$  og  $\varepsilon_2$ , slik at  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 > 0$ . Finn et uttrykk for  $n_2/N$  som funksjon av  $\Delta\varepsilon$  og plott denne som funksjon av  $kT$ . Diskuter de to grensene  $kT = 0$  og  $kT = \infty$ , og beskriv systemets tilstander i disse to grensene.

### Oppgave 3

a) Betrakt et system med to komponenter. Fasediagrammet er vist i figur. Beskriv systemets tilstand i A og B i diagrammet.

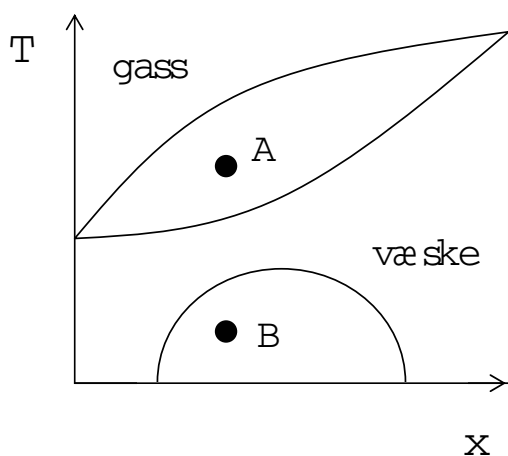
b) Vi antar at gassblandingen i diagrammet er ideell slik at kjemisk potensial av komponent 1 og 2 er:

$$\mu_{\text{gass},i} = \mu_{\text{gass},i}^0(T) + RT \ln p_i/p^0 \quad (1)$$

Her er  $p_i$  er partialtrykket av  $i$  ( $i = 1, 2$ ) og  $p^0$  er standard trykk. Standardtilstanden  $\mu_i^0$  er en funksjon av  $T$ . Vis at Gibbs energi for blanding av to rene komponenter ( $n_1$  mol av komponent 1 og  $n_2$  mol av komponent 2) til en ideell væskeblanding er:

$$\Delta_{\text{mix}}G = RT \left[ n_1 \ln \frac{n_1}{n_1 + n_2} + n_2 \ln \frac{n_2}{n_1 + n_2} \right] \quad (2)$$

Hva er endringene i blandingsvolum  $\Delta_{\text{mix}}V$  og entalpi  $\Delta_{\text{mix}}H$  for blandingen? Forklar hva svarene betyr.



c) Betrakt nå en reell oppløsning med Gibbs blandingsenergi:

$$\Delta_{\text{mix}}G = RT \left[ n_1 \ln \frac{n_1}{n_1 + n_2} + n_2 \ln \frac{n_2}{n_1 + n_2} \right] + A \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} \quad (3)$$

Her er  $A$  en positiv eller negativ parameter som er avhengig av de kjemiske egenskapene til komponentene, men uavhengig av temperaturen. Forklar med ord hva leddet som inneholder  $A$  beskriver. Vis at

$$\begin{aligned} p_1 &= x_1 p_1^0 \exp\left(\frac{Ax_2^2}{RT}\right) \\ p_2 &= x_2 p_2^0 \exp\left(\frac{Ax_1^2}{RT}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

Her er  $x_i = n_i/(n_1 + n_2)$  molfraksjonen av komponent  $i$ , mens  $R$  og  $T$  har sin vanlige betydning.

d) Definer aktiviteten og aktivitetskoeffisienten til komponentene. To studenter bestemmer på laboratoriet at aktivitetskoeffisienten  $\gamma_1$  til komponent 1 er 2,0 ved temperaturen  $T = 25^\circ\text{C}$  for  $x_1 = 0,4$ . Hvilken verdi vil det gi for  $A$ ?

Skisser  $p_1$  som funksjon av  $x_2$  for  $A < 0$ ,  $A = 0$  og  $A > 0$  (Hjelp: bestem vinkelkoeffisienten til kurven i  $x_2 = 0$  og  $x_2 = 1$ ). Er komponent 1 og 2 fullstendig blandbare ved alle temperaturer?