

NORGES TEKNISK- NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET  
INSTITUTT FOR KJEMI  
TKJ4160 FYSIKALSK KJEMI GK, KONTINUASJONSEKSAMEN 2009  
Onsdag 12. august 2009 Tid: 15.00 – 19.00  
Faglig kontakt under eksamen: Førsteamanuensis Morten Helbæk, tlf. 926 54 567

Hjelpemidler: Typegodkjent lommekalkulator med tomt minne  
Aylward og Findlay: SI Chemical Data  
Rothman  
Vedlagt formelsamling

Alle de 11 delspørsmålene veies likt.

### Oppgave 1

- a)
- Beregn entropiendring når 5 mol ideell monoatomisk gass varmes opp fra 0 °C til 100 °C ved konstant volum lik 20 liter.
  - Beregn entropiendring når 3 mol ideell gass ekspanderer fra volumet 500 liter til 1 500 liter ved en konstant temperatur lik 25 °C.

b) For en kjemisk forbindelse har man målt følgende sammenheng mellom varmekapasitet og temperatur:

$T / \text{K}$	5	10	20	30	40	60	100	140	180	200
$C_{p,m} / (\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1})$	1,15	5,20	18,6	32,1	44,0	61,8	88,0	107,8	124,2	134,0

Finn på grunnlag av disse opplysningene forbindelsens molare entropi ved 200 K. (Det kreves ikke nøyaktig svar.)

- c) Beregn endring i Gibbs' energi for et mol ideell gass som komprimeres fra 3 bar til 12 bar ved en konstant temperatur på 100 °C.
- d) Hva er standard entalpiendring for reaksjonen  $A = B$  når likevektskonstanten fordobles ved en temperaturøkning fra 300 K til 400 K?

### Oppgave 2

a) En gassblanding består av  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2$  og  $\text{NH}_3$ . For hvert av de følgende tilfellene skal du finne antall frihetsgrader og gi eksempel på uavhengige intensive variable som er tilstrekkelig for å beskrive systemet.

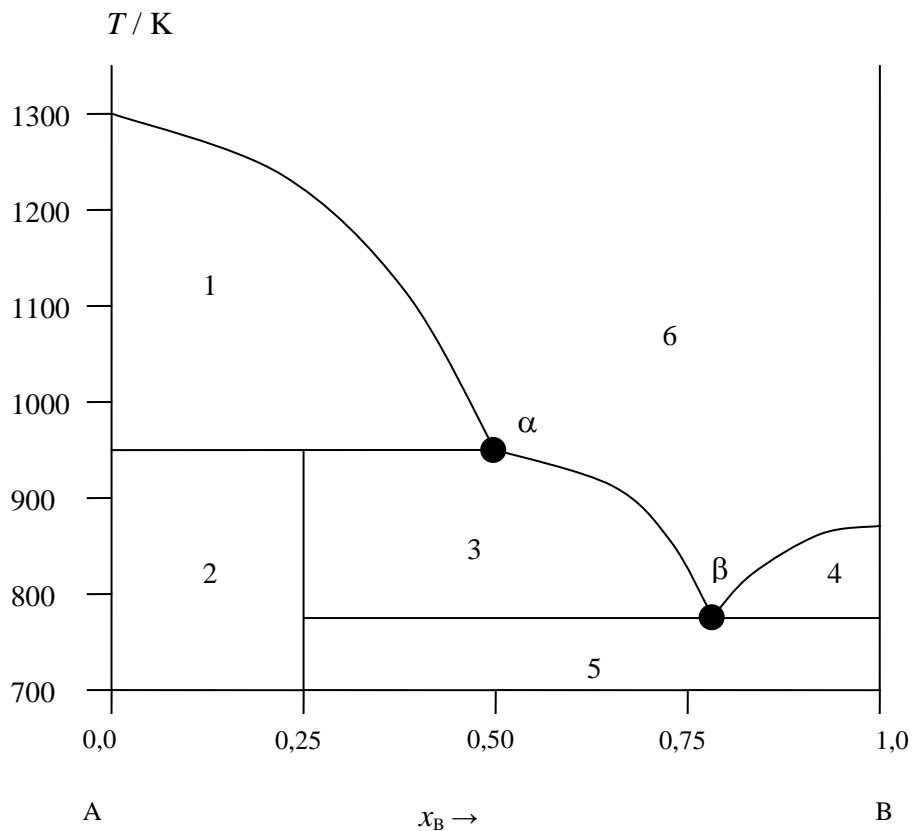
- En blanding der likevekten  $\text{N}_2 + \text{H}_2 = \text{NH}_3$  er innstilt.
- En blanding der det ikke har skjedd noen reaksjon mellom komponentene.
- En blanding der kun  $\text{NH}_3$  var til stede i utgangspunktet og der likevekten  $\text{N}_2 + \text{H}_2 = \text{NH}_3$  er innstilt.

b) En væske koker ved 58 °C når trykket er 0,01 bar og ved 120 °C når trykket er 1,00 bar. Beregn molar fordampningsvarme for væsken.

c) Fasediagrammet for systemet A – B er gitt nedenfor, der A og B er metaller.

(i) Beskriv sammensetningene i områdene 1 – 5.

(ii) Beskriv egenskapene for systemet i punktene  $\alpha$  og  $\beta$ .



### Oppgave 3.

I denne oppgaven skal symmetri og utvalgsregler for dipoloverganger for en partikkel i en endimensjonal boks bestemmes. Vi har følgende velkjente uttrykk for egenfunksjoner og tilhørende egenverdi.

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

hvor  $x \in [0, L]$ .

a) Vis at egenfunksjonene kan skrives på formen

$$\Psi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \cos\left(\frac{n\pi}{L}\right) + \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)$$

hvor  $y \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]$ , som dermed er symmetrisk rundt origo.

b) Bestemt de verdier av  $n$  som gir like egenfunksjoner ( $\Psi_n(-y) = \Psi_n(y)$ ) og de verdier av  $n$  som gir ulike egenfunksjoner ( $\Psi_n(-y) = -\Psi_n(y)$ ).

c) Sannsynligheten for en eksitasjon mellom tilstandene  $n$  og  $m$  er proporsjonal med overgangsmomentkvadratet

$$\left| \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_n(y)^* y \Psi_m(y) dy \right|^2$$

Bestem de verdiene for  $n$  og  $m$  som gir null for denne sannsynligheten. (Hint: finn ut om  $\Psi_n(y)^* y \Psi_m(y)$  er lik eller ulik).

d) Inversjonsoperatoren  $\hat{I}$  har følgende virkning på en bølgefunksjon:  $\hat{I}\Psi(y) = \Psi(-y)$ . Vis at inversjonsoperatoren kommuterer med Hamiltonoperatoren for en partikkel i en boks (dvs.  $[\hat{H}, \hat{I}]\Psi(y) = 0$ ). Bestemt mulige egenverdier for inversjonsoperatoren. Hva betyr disse resultatene?