NORGES TEKNISK- NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET INSTITUTT FOR KJEMI

TKJ4160 Fysikalsk kjemi GK, våren 2007

Lørdag 2. juni 2006 Tid: 9.00-13.00

Faglig kontakt under eksamen: Halvard Hårklau, mobiltlf. 92281516

Hjelpemidler:

Typegodkjent lommekalkulator med tomt minne. Aylward og Findlay: SI Chemical Data. Rothmans tabeller. Vedlagte formelsamling.

Alle 10 delspørsmål teller likt og kan besvares uavhengig av hverandre. **Bokmål**

Oppgave 1

Denne oppgaven gjelder et mol énatomig ideell gass. Ved temperatur 25 °C og trykk 1 bar er standard dannelsesentalpi $\Delta_f H^0 = 61.32$ kJ/mol og standard entropi er $S^0 = 175.0$ J/mol K.

a) Verdiene for standard dannelsesentalpi og entropi er tatt fra SI Chemical data. De gjelder en av følgende tre komponenter: Ar, Hg eller H₂. Hvilken gass er det snakk om?

Beregn verdien av standard dannelsesenergi $\Delta_f U^0$ og standard dannelsesentalpi $\Delta_f H^0$ ved 100 °C.

b) Bruk termodynamikkens første og andre lov til å utlede at temperatur- og volumvariasjon til entropien av et mol gass er gitt av

$$dS_m = \frac{3}{2T}RdT + \frac{R}{V}dV \tag{1}$$

c) Dette uttrykket er matematisk sett et totalt differensial. Hva betyr det fysisk sett at entropien er et totalt differensial i T og V? Beregn verdien av S_m ved 100 o C og 2 bar.

d) Bruk sammenhengen

$$dG_m = V_m dp - S_m dT (2)$$

til å vise nr formelen for kjemiske potensial (Gibbs molare energi) er lik

$$G_m = G_m^0 + RT \ln \frac{p}{n^0} \tag{3}$$

der p er trykket av gassen, og $p^0 = 1$ bar. Hva er G_m^0 ved 25 °C?

Oppgave 2

Saltet K_2SO_4 er løst i 1000 g vann ved 298 K. Molaliteten er m. Det partielle molare volumet av K_2SO_4 , V_2 , med dimensjon cm³/mol, er funnet å være

$$V_2 = 32.280 + 18.216\sqrt{m} + 0.0222m \tag{4}$$

a) Finn det partielle molare volumet av vann som funksjon av m.

Oppgave 3

Det er et problem i utviklingen av brenselceller at hydrogen må kunne lagres trygt. Ammoniakk, $NH_3(g)$, har vært vurdert som eksplosjons-ufarlig lagringsmedium for hydrogen. Ammoniakk kan fremstilles elektrolytisk fra hydrogen og nitrogen etter totalreaksjonen

$$\frac{1}{2}N_2(g) + \frac{3}{2}H_2(g) \to NH_3(g)$$
 (5)

Elektrolytten er en saltsmelte. Ladningsbærer er N^{3-} fra katode til anode. Når hydrogen skal brukes i brenselcellen, må reaksjonen kjøres motsatt vei.

- a) Foreslå elektrodereaksjoner. Beregn cellespenningen (emf) ved 600 K og 1 bar trykk.
- b) Cellespenningen er relativt lav. Vurder ideen om amoniakk som lagringsmedium for hydrogen,

Oppgave 4

- a) Hva vil det si at en bølgefunksjon er normert? Hva betyr det at en bølgefunksjon er en egenfunksjon for systemets Hamiltonoperator H? Forklar Borns fortolkningsregel.
- b) Vi ser på en partikkel i en 2-dimensjonal boks. Skriv energiuttrykket for en partikkel i boks med dimensjon a og b. Når a = b opptrer det et fenomen som heter degenerasjon. Forklar dette. Bestem energien til de 3 første degenerte nivå.
- c) Denne deloppgaven handler om den harmoniske oscillator. Skriv Schrödingerligningen for en partikkel med masse m og en harmonisk kraftkonstant k. Angi de energinivå som er mulige. Hva er verdien av $\Delta p \Delta x$?