

แนวข้อสอบปลายภาค
วิชา 01403343 เคมีเชิงฟิสิกส์ IV

คะแนน

--

ชื่อ-สกุล _____ เลขประจำตัว _____

คณะ/ชั้น ปี _____

ปติ ตรีสุกอล

ตอนที่ 1 จงตอบคำถามพื้นฐาน

- จงคำนวณหา น้ำหนักและปริมาตร ของตัวถูกละลาย ตัวทำละลาย และ ความเข้มข้นของสารละลายในหน่วยต่าง ๆ
 - สารละลาย 1.5 L ประกอบด้วย NaCl 20 g และ H₂O 1,500 mL
 - สารละลาย 0.5 M NaOH ปริมาตร 1 L และมีความหนาแน่น 1.1 g/mL
- จงคำนวณหาจำนวน อิเล็กตรอน นิวตรอน โปรตอน และ นิวเคลียส ของ NH₃

ตอนที่ 2 เลือกตัวเลือกที่ถูกต้องที่สุดและกาลลงในช่องคำตอบด้านล่าง

ข้อ	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	
ก																					
ข																					
ค																					
ง																					
จ																					

- ข้อใดไม่ใช่ Freely Rotating molecule
- การโพลาไรซ์เนื่องจากสนามภายนอกแบบใดที่เกิดจากการหมุนของโมเลกุล
- ข้อใดไม่ถูกต้องเกี่ยวกับ Induced dipole
- หากสนามภายนอกมีความถี่สูงมาก โมเลกุลจะเกิดการโพลาไรซ์แบบใดได้
- หากสนามภายนอกมีความถี่ต่ำ โมเลกุลจะเกิดการโพลาไรซ์แบบใด
- ถ้าโมเลกุล H₂O อยู่ในสนามไฟฟ้า \vec{E} ข้อใดผิด
- จากสมการ $E(\theta) = -\mu \cdot E \cos\theta$ ค่า θ คืออะไร
- ไดโพลของ CO ทำมุมเท่าใดกับสนามไฟฟ้าจึงจะมีพลังงานต่ำที่สุด
- สมการ $V = -\frac{1}{r^6} \left(\frac{\mu_d^2 \alpha_i}{4\pi\epsilon_0} \right)$ ใช้อธิบายอันตรกิริยาแบบใด
- ข้อใดถูกต้องเกี่ยวกับ $V = -\frac{a}{r^{12}}$ ถ้า a มีค่าเป็นบวก
- ถ้าอนุภาคอยู่ในสนามพลังงานศักย์ซึ่งมีสมการเป็น $V = 3x^2 + 5x$ แรงที่เกิดกับอนุภาคนี้มีค่าเท่ากับเท่าไร
- ถ้าอนุภาคอยู่ในสนามพลังงานศักย์ซึ่งมีสมการเป็น $V = 3x^2 + 5x$ โดยอนุภาคนี้อยู่ที่ตำแหน่ง $x=5$ แรงกระทำที่มีต่ออนุภาคเนื่องจากสนามพลังงานศักย์จะมีทิศทางอย่างไร
- ข้อใดผิดเกี่ยวกับแรงระยะสั้น (Short-Range Interaction)
- ข้อใดไม่ถูกต้องเกี่ยวกับแรงดึงดูด (Attractive Force)

15. ในสมการ $K = \frac{q_P}{q_R} e^{-\Delta_r E_0 / kT}$ ตัวแปร K คืออะไร และมีหน่วยอะไร
16. ปฏิกิริยา $A_2 \rightleftharpoons 2A$ มีค่า $\Delta H = -15 \text{ kJ/mol}$ $\Delta G = -250 \text{ kJ/mol}$ $K = 2.5$ ข้อใดสรุปผิด
17. ข้อใดไม่ถูกต้องเกี่ยวกับค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยาเคมี
18. ข้อใดไม่ถูกต้องเกี่ยวกับวิธี Molecular Dynamics
19. ข้อใดไม่ถูกต้องเกี่ยวกับวิธี Monte Carlo
20. ตัวแปรหลักที่ทำให้อนุภาคมีการเปลี่ยนแปลงสภาวะคืออะไร

ตอนที่ 3 จงตอบคำถามต่อไปนี้

1. จงบอกความหมายของตัวแปรหรือสัญลักษณ์ต่อไปนี้โดยละเอียด

$$K = \left\{ \prod_J \left(\frac{q_{J,m}^\circ}{N_A} \right)^{\nu_J} \right\} e^{-\Delta_r E_0 / RT}$$

K คือ _____

$\Delta_r E_0$ คือ _____

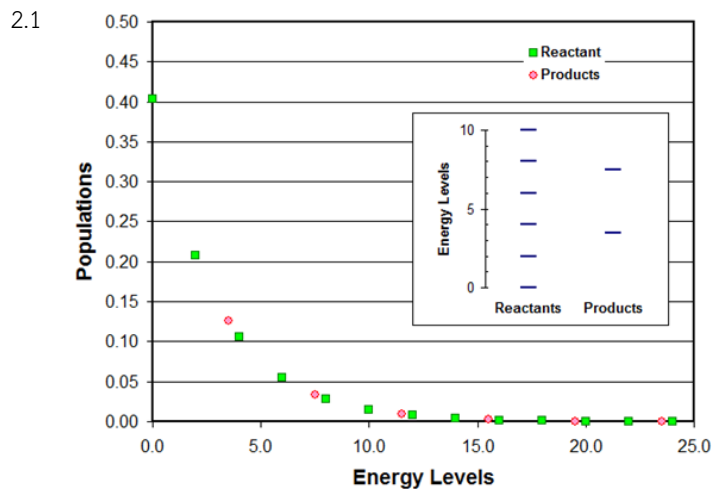
Π คือ _____

$$V = \frac{\mu_1 \mu_2 f(\theta)}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

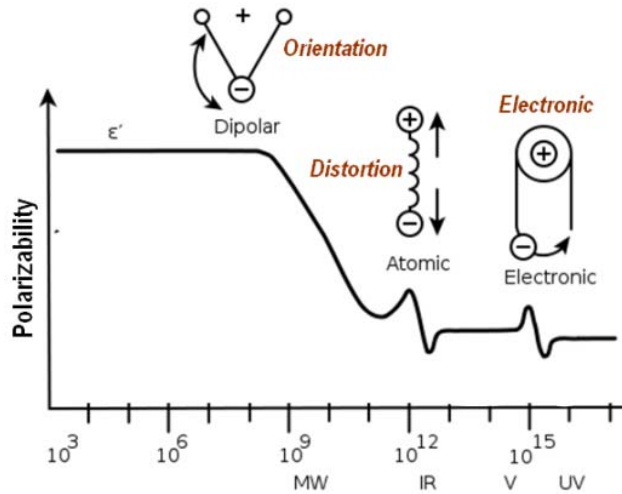
V คือ _____

$f(\theta)$ คือ _____

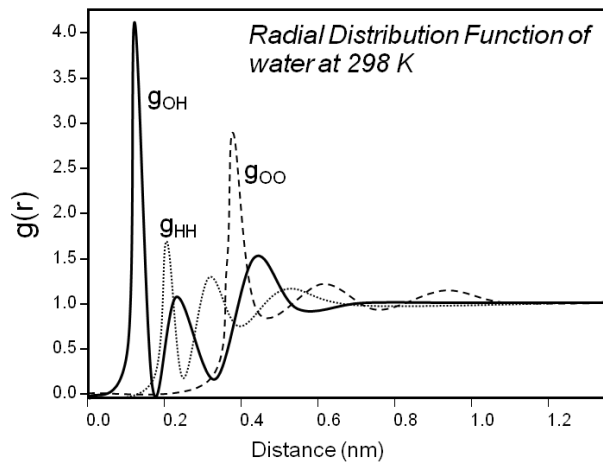
2. อธิบายกราฟด้านล่าง ว่าให้ข้อมูลอะไรบ้าง โดยระบุเป็นข้อ ๆ



2.2



2.3



3. จงเลือกอธิบายความหมายของคำต่อไปนี้ 3 คำเท่านั้น พร้อมยกตัวอย่างประกอบ
- 1) Freely rotation molecule
 - 2) Polarizability
 - 3) Radial distribution function
 - 4) Microcanonical Ensemble
 - 5) Monte Carlo Simulation
 - 6) Maxwell Relation
 - 7) Lennard Jones Potential
 - 8) Long-range Interaction
4. ปฏิกิริยา Isomerization จาก $A \rightleftharpoons B$ มีระดับพลังงานดังแสดงในตารางด้านล่าง ถ้าเริ่มต้นด้วยสาร A 1,000,000 โมเลกุล ที่สมดุลจะมีสาร A และ B อย่างละกี่โมเลกุล และมีค่าคงที่สมดุลเท่าใด ที่อุณหภูมิ 1,000 K

สถานะ	1	2	3	4
A	3.5×10^{-20}	4.5×10^{-20}	5.5×10^{-20}	-
B	1×10^{-20}	3×10^{-20}	5×10^{-20}	7×10^{-20}

5. จงคำนวณหาค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยา $2Na(g) \rightleftharpoons Na_2(g)$ ที่ 1000 K

เมื่อกำหนดให้ Na มีค่า $g_0 = 2$ และ Na_2 มีค่า $B = 0.1547 \text{ cm}^{-1}$ $\bar{V} = 159.2 \text{ cm}^{-1}$ $D_0 = 70.4 \text{ kJ/mol}$ $\sigma = 2$

(แสดงวิธีคำนวณในที่ว่างของแต่ละข้อ และนำคำตอบมาเติมในช่องที่เว้นไว้)

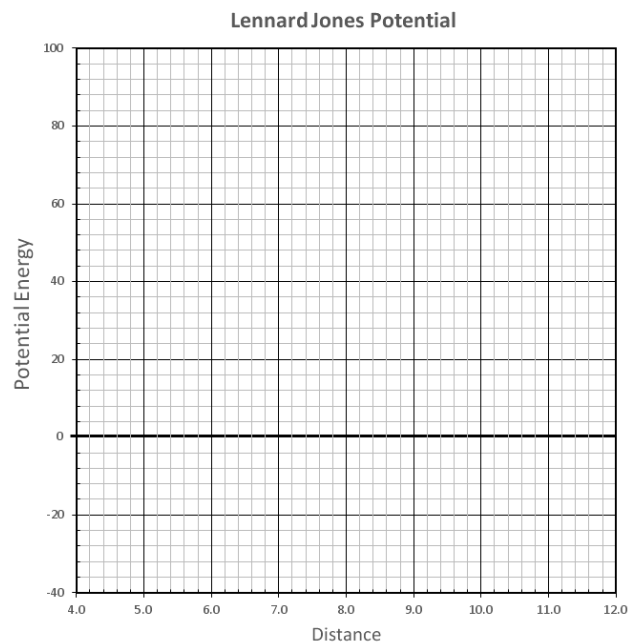
5.1 ค่า $\frac{q_{Na,m}}{N_A}$ เท่ากับ _____ หน่วย _____

- 5.2 ค่า $\frac{q_{Na_2,m}}{N_A}$ เท่ากับ _____ หน่วย _____
- 5.3 ค่า K เท่ากับ _____ หน่วย _____
- 5.4 จากค่า K ที่ได้ สรุปว่าอย่างไร
6. โมเลกุลมีขั้วอยู่ในสนามไฟฟ้าขนาด 5.0 โดยไดโพลของโมเลกุลสามารถทำมุม θ เทียบกับสนาม ได้ 5 ค่า กำหนดให้ μ ของโมเลกุลเท่ากับ 0.2 และค่า $\beta = 0.5$ และระบบประกอบด้วยโมเลกุล 200 โมเลกุล

θ	$\cos(\theta)$	$\mu_z(\theta)$	$E(\theta)$	$\epsilon(\theta)$	$e^{-\beta\epsilon}$	$p(\theta)$	$n(\theta)$		
0°	1.00	0.20	-1.00	0.00	1.00	0.410			
45°	0.71	0.14	-0.71	0.29	0.75	0.307			
90°	0.00	0.00	0.00	1.00	0.37	0.152			
135°	-0.71	-0.14	0.71	1.71	0.18	0.074			
180°	-1.00	-0.20	1.00	2.00	0.14	0.057			

- 6.1 partition function ของไดโพลในสนามนี้ = _____
- 6.2 โมเลกุลจะหมุนไดโพลไปในทิศทางใดมากที่สุด _____ อธิบายเหตุผลประกอบ
- 6.3 จงแสดงการคำนวณหาค่า $\epsilon(\theta)$ และ $p(\theta)$ เมื่อ $\theta=45^\circ$
- 6.4 จำนวนโมเลกุลที่หันไดโพลไปในทิศทาง $\theta=45^\circ$ เท่ากับ = _____
- 6.5 ค่าเฉลี่ยของไดโพลในแนวแกน z (μ_z) = _____
- 6.6 ค่าพลังงานไดโพลรวมของทั้งระบบ = _____
7. แรงระหว่างโมเลกุลขึ้นกับตัวแปรใดบ้าง และกรณีที่มีโมเลกุลจำนวนมาก สถิติช่วยให้การคำนวณง่ายขึ้นได้อย่างไร
8. พิจารณา Lennard-Jones potential ระหว่างสองโมเลกุล ซึ่งประกอบด้วยเทอม A และ B โดยใช้ข้อมูลในตารางพล็อตกราฟตามที่ได้เรียนมา และตอบคำถามด้านล่าง

r	A	B	C
4.50	356.2	-133.5	
4.75	186.2	-96.5	
5.00	100.6	-70.9	
5.25	56.0	-52.9	
5.50	32.1	-40.0	
5.75	18.8	-30.7	
6.00	11.3	-23.8	
6.25	6.9	-18.6	
6.50	4.3	-14.7	
6.75	2.7	-11.7	
7.00	1.8	-9.4	
7.25	1.2	-7.6	
7.50	0.8	-6.2	
7.75	0.5	-5.1	
8.00	0.4	-4.2	
8.25	0.2	-3.5	
8.50	0.2	-2.9	
8.75	0.1	-2.5	
9.00	0.1	-2.1	



- 8.1 กราฟ A มีสูตรทั่วไปว่าอย่างไร และอธิบายเพิ่มเติมว่าเกิดเนื่องจากแรงดึงดูดหรือแรงผลัก และเป็นแรงระยะไกลหรือแรงระยะใกล้
- 8.2 กราฟ B มีสูตรทั่วไปว่าอย่างไร และอธิบายเพิ่มเติมว่าเกิดเนื่องจากแรงดึงดูดหรือแรงผลัก และเป็นแรงระยะไกลหรือแรงระยะใกล้
- 8.3 อธิบายจากกราฟว่าโมเลกุลสองโมเลกุลนี้จะมีระยะห่างเท่าไรที่ทำให้เสถียรที่สุด
9. จงอธิบายความแตกต่างระหว่าง Molecular dynamic และ Monte Carlo ในประเด็นต่อไปนี้
 - 9.1 ขั้นตอนการคำนวณ
 - 9.2 การนำไปใช้ประโยชน์
 - 9.3 หากต้องการจำลองการสั่นในโมเลกุล N_2 ควรใช้วิธีใด เนื่องจากเหตุผลอะไร
10. จงอธิบายหลักสำคัญของวิชา Statistical Thermodynamics
11. จงอธิบายประโยชน์หรือการนำวิชาอุณหพลศาสตร์เชิงสถิติไปใช้