

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 2004/2005

Oktober 2004

**KAA 506 – Komputer Dalam Kimia**

Masa : 3 jam

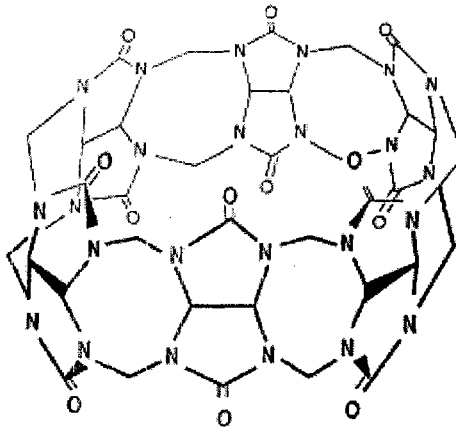
---

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab LIMA soalan.

Jika calon jawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

1. Cucurbituril, lihat Rajah 1, merupakan satu molekul perumah tegar yang mempunyai ruang hidrofobik. Pada setiap kemasukan ke dalam kaviti, terdapat enam kumpulan karbonil polar. Keadaan ini sesuai bagi pengkompleksan molekul organik dengan cucurbituril. Satu kajian permodelan molekul melibatkan pengkompleksan molekul organik oleh cucurbituril dengan itu dicadangkan.



Rajah 1: Cucurbituril

- (i) Apakah kaedah yang paling kerap digunakan untuk mengkaji masalah yang dinyatakan diatas. Nyatakan alasan anda.
- (ii) Nyatakan langkah-langkah yang terlibat didalam satu kajian permodelan molekul.
- (iii) Tuliskan arahan untuk menjalankan proses pengoptimuman geometri, menggunakan kaedah (i)
- (iv) Tulis struktur  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  dalam format Z-matriks.
- (v) Berikan 3 contoh pengiraan lain yang boleh dijalankan.

(20 markah)

2. (a) (i) Terangkan fungsi dan tuliskan arahan dalam format Excel bagi STEYX, LINEST dan STDEV  
(ii) Tulis persamaan dalam format Excel bagi

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \text{dan} \quad y = \sqrt{\frac{15}{16\pi} \cos 2\phi}$$

(10 markah)

...3/-

- (b) Nilai dalam sel B8:B21 dan C8:C21, Jadual 1, mewakili kepekatan A dalam bentuk kamiran bagi hukum kadar. Tuliskan formula yang bersesuaian dan formula tersebut dalam format Excel.

Jadual 1

A	B	C	D	E
1	1st order $d[A]/dt = k[A]$	2nd order $d[A]/dt = k[A]^2$		
2				
3	$k_1$	0.01		
4	$k_2$	0.01		
5	$A_0$	1		
6		1st order	2nd order	
7	t,s	[A], M	[A],M	
8	10	0.90483742	0.909091	
9	20	0.81873075	0.833333	
10	30	0.74081822	0.769231	
11	40	0.67032005	0.714286	
12	50	0.60653066	0.666667	
13	60	0.54881164	0.625	
14	70	0.4965853	0.588235	
15	80	0.44932896	0.555556	
16	90	0.40656966	0.526316	
17	100	0.36787944	0.5	
18	110	0.33287108	0.47619	
19	120	0.30119421	0.454545	
20	130	0.27253179	0.434783	
21	140	0.24659696	0.416667	

3. Perkembangkan satu fungsi MATLAB untuk mengira punca satu persamaan polinomial dengan menggunakan kaedah Newton Raphson. Kirakan isipadu spesifik bagi gas tulen, *n*-butana pada suhu dan tekanan tertentu dengan menggunakan persamaan keadaan Soave-Redlich-Kwong:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{V(V+b)}$$

Diberi

$$a = \frac{0.4278R^2T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0.0867RT_c}{P_c}$$

dimana  $T_c$  dan  $P_c$  adalah suhu dan tekanan kritikal masing-masing. Pembolehubah  $\alpha$  adalah fungsi empirik kepada suhu:

$$\alpha = \left[ 1 + S \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2$$

Nilai  $S$  adalah fungsi dari  $\omega$  dalam bentuk :

$$S = 0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2$$

Diberi bahawa sifat-sifat fizikal *n*-butana adalah:

$$T_c = 425.2\text{K} \quad P_c = 3797\text{ kPa} \quad \omega = 0.1931$$

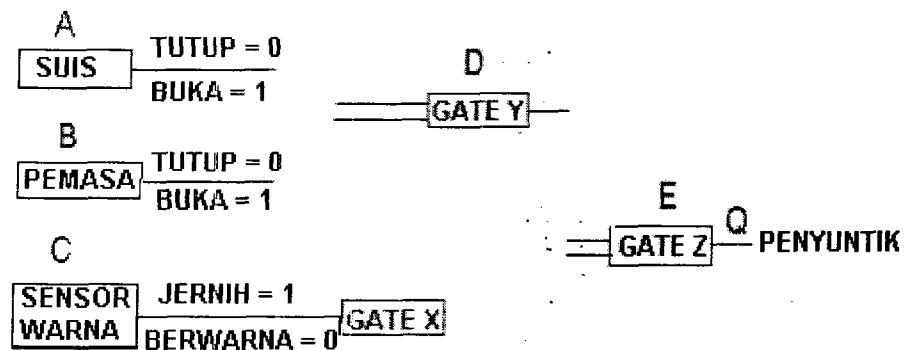
dan pemalar gas,  $R = 8.3145\text{ J mol}^{-1}\text{ K}^{-1}$

(20 markah)

...5/-

4. Seorang pereka-bentuk pengawalan proses mencipta suatu sistem untuk pengawalan penyuntikan bahan-bahan kimia kedalam suatu aliran cecair. Penyuntikan bahan-bahan kimia tersebut boleh dilakukan secara manual, atau menggunakan pemasa, selagi sensor mengesan perubahan cecair tersebut.

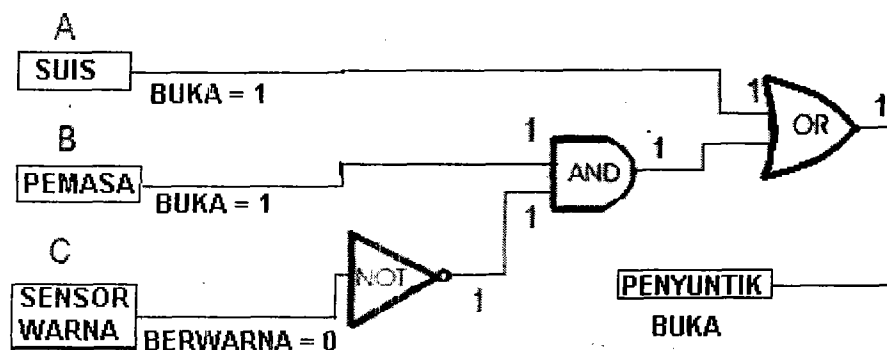
(a) Di bawah ialah litar logik yang tidak lengkap untuk pengawalan sistem tersebut. Lukis semula litar logik menggunakan "logik gate" yang betul. Nota: output sensor warna ialah '0' (tidak benar, rendah, tutup) apabila warna berubah. Bahan kimia mesti disuntik apabila warna berubah.



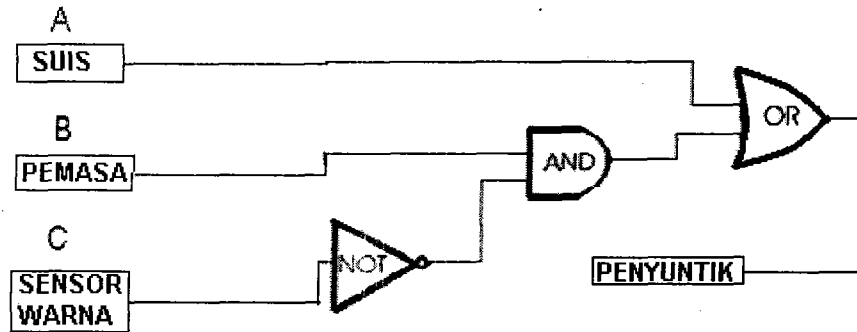
Namakan gate logik yang anda gunakan

(3 markah)

(b) Di bawah ialah litar logik yang menunjukkan keadaan logik input dan output daripada kesemua gate apabila penyuntik dibuka



Atas litar logik di bawah, tuliskan keadaan kesemua input dan output dan nyatakan sama ada di bawah keadaan berikut, cecair berwarna, suis manual ditutup dan pemasa dibuka, adakah penyuntik dibuka atau ditutup?



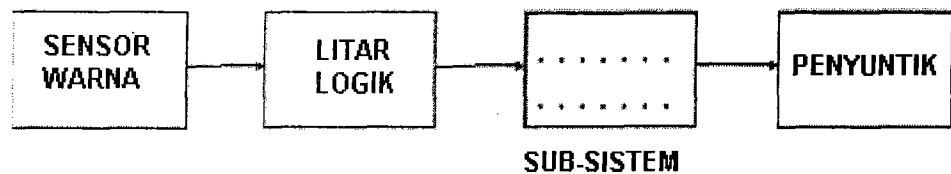
(6 markah)

- (c) Lengkapkan jadual benar untuk litar logik yang mengawal sistem penyuntikan.

INPUT					OUTPUT
A	B	C	D	E	Q
0	0	0	1	0	0
0	0	1	0	0	0
0	1	0	1	1	1
0	1	1			
1	0	0			
1	0	1			
1	1	0			
1	1	1			

(8 markah)

- (d) Biasanya suatu litar logik seperti yang digunakan untuk pengawalan penyuntikan tidak boleh menghidupkan penyuntik. Namakan sub-sistem dalam ruang yang dinyatakan.



(3 markah)

5. (a) Pengautomatikan penganalisis kimia boleh memberikan hasil analisis yang baik dari segi presisi dan ketepatan. Sistem ini boleh digunakan secara talian terus atau pun dalam talian untuk proses pengawalan kualiti penghasilan produk.
- (i) Apakah maknanya pengawalan kualiti talian terus?
  - (ii) Apakah maknanya proses pengawalan dalam talian?
  - (iii) Namakan tiga penyukatan analisis yang boleh dibuat secara dalam talian.

(9 markah)

- (b) Lukis suatu carta alir untuk pentitratan spektrofotometri asid/bes dan penentuan takat setaranya. Namakan kesemua asesoris yang diperlukan untuk melakukan tugas di atas.

(11 markah)

6. (a) Suatu amplifiler operasi boleh memainkan peranan yang penting dalam mengubah-suai isyarat sebelum proses pengambilan data. Lukis suatu litar untuk mencapai setiap satu perkara di bawah.
- (i) Pengandaan isyarat 50 kali daripada 0.001 V.
  - (ii) Membuat penjumlahan daripada tiga punca isyarat yang berbeza.
  - (iii) Mengkerbeda isyarat masuk.
  - (iv) Mengkamir isyarat masuk

(12 markah)

- (b) Berilah cadangan dan justifikasi anda untuk suatu pengalatan analisis untuk melakukan

- (i) analisis pantas dalam makmal klinikal, dan
- (ii) analisis talian terus bagi sepsis berwarna dalam suatu larutan.

(8 markah)