
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2005/2006

November 2005

KAA 506 – Komputer Dalam Kimia

Masa : 3 jam

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi **SEPULUH** 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. (a) Tulis carta alir suatu prosedur pengoptimuman geometri SCF yang lazim.
(7 markah)
- (b) Berikan DUA algoritma yang lazim digunakan dalam prosedur pengoptimuman geometri Tanpa menggunakan persamaan matematik, perihalkan teknik tersebut dan nyatakan kelebihan dan kekurangan teknik tersebut.
(10 markah)
- (c) Lakarkan suatu plot permukaan tenaga keupayaan dan tandakan semua titik pegun. Jelaskan bagaimana suatu minima dibezakan daripada struktur keadaan peralihan (daripada sudut pengkomputan).
(3 markah)
2. (a) Kirakan bilangan fungsi basis bagi sodium laktat, $(\text{NaOOC}(\text{CH}_3)\text{CHOH})$, menggunakan;
- (i) set basis minimal,
 - (ii) set basis *split valence*, dan
 - (iii) set basis dengan kedua-dua fungsi polarisasi dan pembaur.
- Nyatakan set basis yang digunakan.
(6 markah)
- (b) Dengan menggunakan penskelan formal prosedur Hartree Fock, anggarkan masa yang diperlukan untuk pengiraan titik tunggal bagi $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ menggunakan set basis 3-21G**. Bandingkan tempoh tersebut terhadap SiH_4 .
(4 markah)
- (c) Dengan menggunakan kaedah dan set basis yang bersesuaian, tuliskan fail input lengkap bagi CH_3COCH_3 .
(10 markah)

3. (a) Bagi permasalahan berikut, pilih kaedah permodelan yang sesuai dan berikan alasan anda.

- (i) Mengganggu tenaga pengikatan bebas perencat drug Chk1- kinase
- (ii) Memahami mekanisme trimerisasi etilena oleh mangkin kromium.
- (iii) Mengkaji mekanisme pengesanan nitrogen dioksida oleh rebennano stanum dioksida.
- (iv) Meramalkan kestabilan kompleks inklusi drug-siklodextrin.

(10 markah)

(b) Tuliskan satu ekspresi sebutan tenaga total mekanik molekul. Terangkan setiap ungkapan dan secara ringkas nyatakan asas fizik setiap ungkapan tersebut.

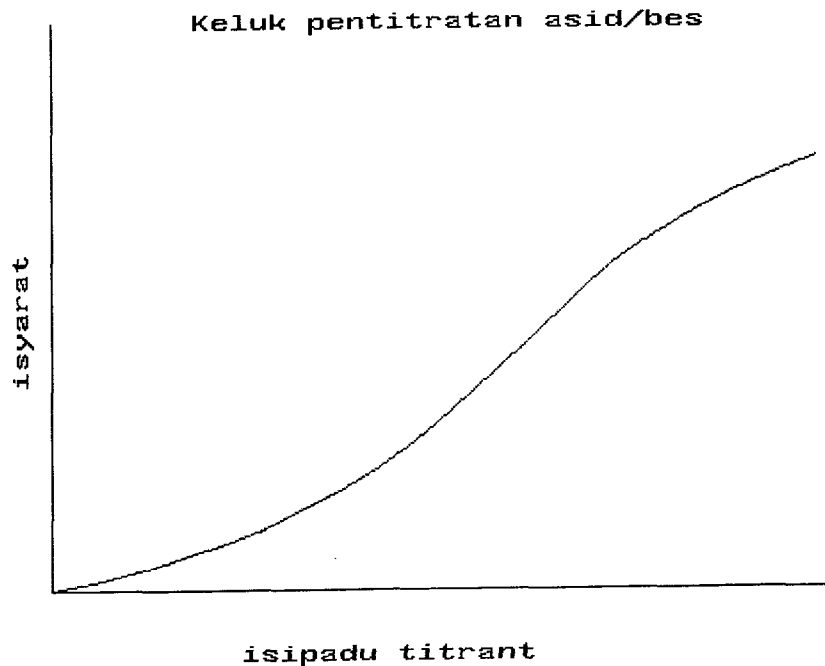
(10 markah)

4. Buatlah suatu rekabentuk litar "logic gate" bagi setiap proses berikut:

- (a) Pengawalan suhu pemanas dalam tangki cecair.
- (b) Pelarasan pH untuk reagen dalam industri kimia.
- (c) Pengawalan kualiti kehadiran kotoran dalam hasil pembuatan.
- (d) Pemisahan multikomponen dalam suatu kromatografi turus.

(20 markah)

5. (a) Cadangkan dan rekabentukkan suatu teknik elektronik untuk mendapatkan suatu takat kesetaraan yang tepat bagi pentitratan asid/bes dimana keluknya seperti di bawah.



(10 markah)

- (b) Lukislah carta alir yang lengkap untuk pengambilan data dan penentuan takat kesetaraan bagi sistem pentitratan di atas.

(10 markah)

6. (a) Jelaskan kepentingan perkara-perkara di bawah merujuk kepada pengautomatikan teknik analisis.

- (i) Amplifier operasi.
- (ii) Input dan output digital.
- (iii) Penukar Analog ke digital.
- (iv) Lukisan carta alir.

(10 markah)

....5/-

- (b) Apakah output jika input ialah 0111 bagi
- (i) Gate AND diikuti dengan gate NAND,
 - (ii) Gate NOT diikuti dengan gate XOR,
 - (iii) Gate AND diikuti dengan gate XOR dan
 - (iv) Gate XOR diikuti dengan gate NAND.

(10 markah)