

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 2004/2005

Oktober 2004

**KFE 331 - Tajuk-Tajuk Kini Dalam Kimia Fizik**

Masa : 3 jam

---

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

Anda perlu menjawab SEMUA soalan daripada Bahagian A dan sebarang TIGA soalan daripada Bahagian B.

Jawab LIMA soalan semuanya. Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

**BAHAGIAN A****Jawab semua soalan**

1. (a) Nyatakan perbezaan antara set basis minimal dan set basis *split valence*.  
(4 markah)
  - (b) Tentukan bilangan fungsi basis bagi  $F_3PO$  dan  $(CH_3)_2SO_3$  menggunakan set basis minimal, set basis 3-21G\*\* dan set basis 6-31G\*\*.  
(12 markah)
  - (c) Terangkan modus operasi algoritma Newton Raphson.  
(4 markah)
- 
2. (a) Tuliskan koordinat molekul asid asetik,  $CH_3COOH$  menggunakan format Z-matriks. Lukis projeksi Newman bagi sistem ini.  
(10 markah)
  - (b) Ramalkan dan lukis graf permukaan tenaga keupayaan (PES) bagi hidrazin,  $N_2H_4$ .  
(5 markah)
  - (c) Tulis dalam bentuk carta alir, semua langkah yang terlibat dalam satu proses permodelan molekul.  
(5 markah)

**BAHAGIAN B****Jawab sebarang tiga soalan**

3. (a) Suatu pepejal polimer yang mempunyai panjang 200 mm dan luas keratan rentas 10 mm x 2 mm dikenakan pemanjangan tensil sebanyak 4 mm. Polimer tersebut ditetapkan pada pemanjangan ini dan daya diukur dengan masa. Keputusannya diberikan dalam jadual di bawah;

Masa / s	0	100	1,000	10,000	50,000	100,000
Daya / N	81.6	80.8	73.8	30.1	0.59	0.044

Selepas 200,000 s, daya didapati malar pada 0.04 N. Sekiranya kelakuan polimer tersebut diwakili oleh tiga unsur model 'spring' dan daspot, iaitu satu spring berada selari dengan unit Maxwell, tentukan nilai pemalar-pemalar bagi model tersebut.

(14 markah)

- (b) Suatu model mengandungi dua unsur iaitu 'spring' yang mempunyai modulus,  $E = 8 \times 10^8 \text{ N m}^{-2}$  dan daspot dengan kelikatan,  $\eta = 4 \times 10^{12} \text{ N s m}^{-2}$  disusun secara selari. Terikan ( $f$ ), (stress) yang dikenakan pada model ini adalah  $1000 \text{ N m}^{-2}$ .

- (i) Kirakan masa perencatan bagi model ini.  
 (ii) Tentukan tegasan (strain) bagi model ini pada masa perencatan itu.  
 (iii) Kirakan komplain rayap (creep compliance) pada masa perencatan itu.

(6 markah)

4. (a) Suatu monomer dapat dipolimerkan secara pempolimeran rantai berasaskan penjanaan radikal bebas. Terangkan dengan menggunakan contoh yang sesuai kaedah-kaedah yang digunakan untuk menjana radikal bebas.

(10 markah)

(b) Metil metakrilat dengan kepekatan jisim sebanyak  $200 \text{ g dm}^{-3}$  di dalam toluena telah dipolimerkan dengan menggunakan AIBN sebagai pemula dengan kepekatan jisim  $1.64 \times 10^{-2} \text{ g dm}^{-3}$  pada suhu  $60^\circ\text{C}$ .

(i) Kiralah kadar pempolimeran ( $R_p$ ) bagi poli(metil metakrilate) yang dihasilkan dengan menanggapi sebarang tindak balas pemindahan rantai TIDAK berlaku.

(ii) Seterusnya tentukan nilai masa hayat radikal ( $\tau$ ) tersebut.

Diberikan pemalar kadar bagi pemulaan,  $k_i = 8.5 \times 10^{-6} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , perambatan,  $k_p = 367 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$  dan penamatan,  $k_t = 9.3 \times 10^6 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

(10 markah)

5. Pertimbangkan suatu acuan rerambut (capillary die) dengan diameter 4 mm dan panjang 20 mm.

(a) Kirakan penurunan tekanan (pressure drop) apabila suatu bendalir yang menurut hukum kuasa mengalir melaluinya pada kadar  $60 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ .

Diberikan:

$$\text{Pemalar hukum-kuasa} = 1 \times 10^4 \text{ N s}^{0.45} \text{ m}^{-2}$$

$$\text{Indeks hukum-kuasa} = 0.45$$

(8 markah)

(b) Jika panjang acuan itu disetengahkan, berapakah penurunan tekanan bagi kadar aliran yang sama? Adakah perubahan penurunan tekanan ini dijangkakan sewaktu ujikaji dijalankan? Beri alasan anda.

(12 markah)

6. (a) Takrifkan suhu lebur keseimbangan,  $T_m^0$ , apabila ia digunakan pada polimer separa hablur.

(3 markah)

- (b) Tunjukkan bahawa perhubungan antara ketebalan hablur,  $l$ , dengan suhu lebur,  $T_m$ , untuk hablur polimer dapat diberikan dengan persamaan berikut.

$$T_m = T_m^0 - \frac{2\gamma_e T_m^0}{l\Delta H_v}$$

dengan  $T_m^0$  adalah suhu lebur keseimbangan,  $\gamma_e$  adalah tenaga permukaan lipatan dan  $\Delta H_v$  adalah entalpi per unit isipadu bebas bagi hablur.

(10 markah)

- (c) Pola pembelauan sinar-X diperoleh dari sampel polietilena yang tak diorientasikan dengan menggunakan sinaran Cu  $K_\alpha$  pada jarak gelombang 0.154 nm. Pola pembelauan pada filem menunjukkan tiga gelang yang mempunyai jejari 22.2, 36.6 dan 19.7 mm. Kirakan  $d$  pada satah yang memberi pemantulan ini sekiranya jarak antara sampel dengan filem adalah 50 mm.

(7 markah)

7. (a) Dengan melukis plot umum konsep isipadu bebas, buktikan pecahan isipadu bebas adalah

$$f = f_g + (T - T_g)\alpha_f$$

( $f_g$  adalah pecahan isipadu bebas dibawah  $T_g$ ,  $T$  adalah suhu,  $T_g$  adalah suhu peralihan kaca dan  $\alpha_f$  adalah pekali pengembangan bagi isipadu bebas)

(8 markah)

- (b) Terbitkan satu persamaan, kelikatan suatu bendalir Newtonian yang boleh diperoleh melalui data dengan menggunakan alat viskometer kon dan plat. Nyatakan kesemua andaian yang digunakan.

(12 markah)