

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2003/2004

September/Oktober 2003

KFE 331 – Tajuk-Tajuk Kini Dalam Kimia Fizik

Masa: 3 jam

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

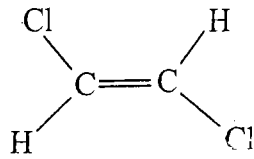
Jawab semua soalan dari **Bahagian A** dan sebarang **TIGA** soalan dari **Bahagian B**.

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

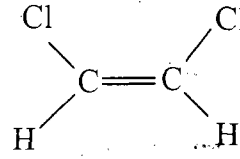
BAHAGIAN A

Jawab SEMUA soalan.

1. Pengiraan Fungsi Teori Densiti (DFT) dijalankan ke atas dikloroetana, CH_2CCl_2 , menggunakan set basis 3-21G**.
 - (a) Tentukan bilangan fungsi basis bagi dikloroetana. Tunjukkan jalan kerja dengan lengkap. (8 markah)
 - (b) Struktur I dan II adalah dua konformasi yang mungkin bagi dikloroetana. Dengan memilih mana-mana satu struktur tersebut, tulislah satu fail input yang lengkap untuk pengoptimuman geometri menggunakan kaedah B3LYP dan set basis yang disebut di atas.



I



II

Diberi d_{C-H} , d_{C-Cl} dan $d_{C=C}$ masing-masing adalah 1.08 Å, 1.72 Å dan 1.33 Å.

(12 markah)

2. (a) Terangkan perbezaan antara kelas set basis berikut. Berikan contoh dimana perlu.

- (i) Set basis minimal
- (ii) Set basis "split valence"
- (iii) Set basis dengan fungsi polarisasi
- (iv) Set basis dengan fungsi membaaur

(10 markah)

- (b) Nyatakan kaedah yang sesuai digunakan untuk mengkaji permasalahan berikut dan berikan alasan anda.

- (i) "Protein folding".
- (ii) Pengiraan tepat permukaan tenaga keupayaan (PES) untuk O_3 .
- (iii) Struktur keseimbangan bagi molekul yang terdiri dari 40 atom bukan logam.
- (iv) Struktur keadaan peralihan (TS) bagi tindak balas bermangkin Pt dengan $CH_2=CH_2$.

(10 markah)

BAHAGIAN B

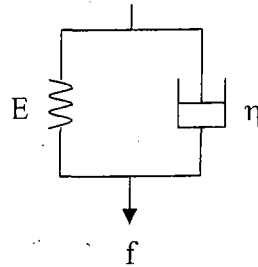
Jawab mana-mana TIGA soalan.

3. (a) Dalam polimer separa hablur (semi-crystalline), darjah penghabluran berubah dari 10 hingga 90. Nyatakan tiga kaedah untuk menentukan darjah penghabluran ini. (3 markah)
- (b) Tunjukkan melalui persamaan-persamaan tertentu, darjah penghabluran dapat ditentukan dengan menggunakan kaedah penyukatan ketumpatan. (10 markah)
- (c) Kirakan pecahan jisim hablur dan pecahan isipadu hablur pada suatu sampel polietilena linear dengan ketumpatan 960 kg m^{-3} dan polietilena berjaringan dengan ketumpatan 907 kg m^{-3} .
Diberi ketumpatan polietilena adalah 855 kg m^{-3} dan hablur polietilena adalah 986 kg m^{-3} . (7 markah)
4. (a) Takrifkan konsep isipadu bebas (free volume concept). (4 markah)
- (b) Dengan melukis gambarajah umum konsep isipadu bebas, buktikan pecahan isipadu bebas (fraction of free volume) adalah
- $$f = f_g + (T - T_g) \alpha_f$$
- dimana f_g adalah pecahan isipadu bebas di bawah suhu peralihan kaca, T adalah suhu, T_g adalah suhu peralihan kaca, dan α_f adalah pekali pengembangan (expansion coefficient) bagi isipadu bebas. (10 markah)
- (c) Dengan menggunakan konsep isipadu bebas, terangkan dengan ringkas keadaan suhu peralihan kaca apabila
- (i) polimer mengandungi berat molekul yang tinggi,
 - (ii) suhu diturunkan, dan
 - (iii) jaringannya ditingkatkan. (6 markah)

5. (a) Takrifkan kelakuan kelikatkenyalan (viscoelasticity behaviour) suatu bahan polimer.

(3 markah)

- (b) Gambarajah menunjukkan satu modul Voigt mengandungi dua unsur iaitu spring yang mempunyai modulus, $E = 5 \times 10^8 \text{ Nm}^{-2}$ dan Dashpot dengan kelikatan, $\eta = 2 \times 10^{12} \text{ Nsm}^{-2}$ disusun secara selari. Terikan (stress) dikenakan sebanyak $f = 1000 \text{ Nm}^{-2}$.



Kira masa perencatan (retardation time) bagi model Voigt.

- (i) Tentukan tegasan (strain) bagi model Voigt tersebut pada masa perencatan itu.
- (ii) Kira komplians rayap (creep compliance) pada masa perencatan itu.
- (iii) Tentukan tegasan maksima (maximum strain) bagi model ini.

(12 markah)

- (c) Suatu spring dengan modulus $E = 2 \times 10^6 \text{ Nm}$ dan dashpot dengan kelikatan $\eta = 4 \times 10^{13} \text{ Nsm}^{-2}$ ditambah secara bersiri pada model Voigt itu untuk membina 4-unsur model. Berapakah tegasan bagi model tersebut jika terikan 1000 Nm^{-2} digunakan selama 50 minit?

(5 markah)

6. (a) Propelina mengalami pempolimeran radikal bebas melalui beberapa langkah tindak balas. Tunjukkan mekanisme langkah-langkah tindak balas tersebut. (6 markah)
- (b) Tanpa menggunakan agen pemindahan, tunjukkan bahawa tindak balas pempolimeran polipropelina adalah bertertib pertama terhadap kepekatan monomer. (10 markah)
- (c) Sebutkan empat kaedah untuk menjana radikal bebas. (4 markah)
7. (a) (i) Takrifkan suhu peralihan kaca. Sebutkan dua kaedah ujikaji untuk menentukan suhu peralihan kaca bagi suatu bahan.
- (ii) Didapati suhu peralihan kaca bagi suatu polimer adalah $-55\text{ }^{\circ}\text{C}$ apabila diukur secara dinamik pada frekuensi 5 Hz. Tanpa maklumat lain, anggarkan suhu peralihan kaca sekiranya frekuensi ditingkatkan kepada 40 Hz.
- Seterusnya anda diberikan tenaga pengaktifan ketara 220 kJ mol^{-1} bagi suhu peralihan kaca polimer tersebut, kirakan semula suhu peralihan kaca polimer ini pada 40 Hz. (15 markah)
- (b) Satu model yang mempunyai unsur spring dan dashpot disusun secara bersiri yang masing-masing mempunyai modulus, $E = 2 \times 10^9\text{ Nm}^{-2}$ dan kelikatan, $\eta = 5 \times 10^3\text{ Nsm}^{-2}$ dengan terikan (stress), f .



-6-

- (i) Apakah nama umum bagi model ini?
- (ii) Kira masa pengenduran (relaxation time) bagi sistem ini.
- (iii) Sekiranya model ini diberikan tegasan sebanyak 5 %, kira terikan, f , pada masa pengenduran di (ii).

(5 markah)

-oooOooo-