



UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Final Examination  
2016/2017 Academic Session

May/June 2017

**JIK 420 – Advanced Physical Chemistry**  
*[Kimia Fizik Lanjutan]*

Duration : 3 hours  
[Masa : 3 jam]

Please ensure that this examination paper contains **EIGHT** printed pages before you begin the examination.

Answer **FIVE** questions. Answer the questions in English. You may also answer the questions in Bahasa Malaysia, but not a mix of both languages.

All answers must be written in the answer booklet provided.

Each question is worth 20 marks and the mark for each sub question is given at the end of that question.

In the event of any discrepancies in the exam questions, the English version shall be used.

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

*Jawab **LIMA** soalan. Jawab soalan-soalan dalam Bahasa Inggeris. Anda juga dibenarkan menjawab soalan dalam Bahasa Malaysia, tetapi campuran antara kedua-dua bahasa ini tidak dibenarkan.*

*Setiap jawapan mesti dijawab di dalam buku jawapan yang disediakan.*

*Setiap soalan bernilai 20 markah dan markah subsoalan diperlihatkan di penghujung subsoalan itu.*

*Sekiranya terdapat sebarang percanggahan pada soalan peperiksaan, versi Bahasa Inggeris hendaklah diguna pakai.*

Answer **FIVE** questions.

Jawab **LIMA** soalan.

1. (a) Calculate the values of molecular number ( $M_n$ ), molecular weight ( $M_w$ ) and polydispersity index (PDI) for a polymer mixture having equivalent moles of two polymers with molecular weights 2.0 kDa and 10 kDa.

*Kirakan nilai nombor molekul ( $M_n$ ), berat molekul ( $M_w$ ) dan indeks kepolisebaran (PDI) untuk campuran polimer yang mempunyai nilai mol yang bersamaan dengan dua polimer dengan berat molekul sebanyak 2.0 kDa dan 10 kDa.*

(6 marks/markah)

- (b) Given that  $\Delta H = -73 \text{ kJ mol}^{-1}$  and  $\Delta S = -0.104 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ . Would this polymerisation be thermodynamically favourable at  $-78 \text{ }^\circ\text{C}$ ? Show your calculations.

*Diberikan bahawa  $\Delta H = -73 \text{ kJ mol}^{-1}$  and  $\Delta S = -0.104 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ . Adakah pempolimeran ini tersesuaikan secara termodinamik pada  $-78 \text{ }^\circ\text{C}$ ? Tunjukkan pengiraan anda.*

(4 marks/markah)

- (c) A type of polyethylene has an average degree of polymerisation of 10,000. What is its average molecular weight?

*Sejenis polietilena mempunyai darjah pempolimeran purata sebanyak 10,000. Berapakah berat molekul puratanya?*

(4 marks/markah)

- (d) Draw the isotactic, syndiotactic and atactic structures of poly(vinyl chloride).

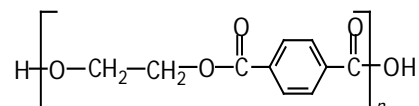
*Lukiskan struktur isotaktik, sindiotaktik dan ataktik bagi sturuktur poli(vinil klorida).*

(6 marks/markah)

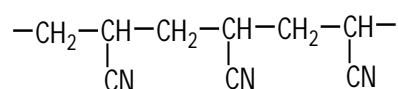
2. (a) Draw the structures of all the **monomers** and **repeating unit** of the following polymers:

*Lukiskan struktur bagi kesemua monomer dan unit ulangan polimer-polimer berikut:*

- (i) Polyester



- (ii) Poly(acrylonitrile)



(10 marks/markah)

- (b) Explain the higher strength of poly(vinyl chloride) as compared to polyethylene.

*Jelaskan kekuatan yang lebih tinggi bagi poli(vinil klorida) berbanding polietilena.*

(2 marks/markah)

- (c) How does the amount of crystallinity within a thermoplastic material affect

- (i) its strength
- (ii) its tensile modulus of elasticity, and
- (iii) its density?

*Bagaimanakah jumlah penghabluran dalam bahan termoplastik mempengaruhi*

- (i) kekuatannya
- (ii) modulus tegangan keanjalannya, dan
- (iii) ketumpatannya?

(6 marks/markah)

- (d) Describe the general deformation behaviour of a thermoplastic plastic above and below its glass transition temperature.

*Terangkan sifat deformasi umum plastik termoplastik di atas dan di bawah suhu peralihan kaca.*

(2 marks/markah)

3. (a) Currently most of the crystal structures solved by X-ray crystallography are solved at 100 K. What is the advantage of data collection at low temperature?

*Ketika ini, kebanyakan struktur hablur diselesaikan dengan X-ray kristalografi pada suhu 100 K. Apakah kelebihan pengumpulan data pada suhu yang rendah?*

(4 marks/markah)

- (b) Discuss the various methods to generate X-rays. Show your answer with related figures.

*Bincangkan pelbagai kaedah bagi penghasilan sinar-X. Tunjukkan jawapan anda dengan gambar rajah yang berkaitan.*

(6 marks/markah)

- (c) In data collection using X-ray diffractometer, discuss the type of diffraction data of the polycrystalline sample.

*Di dalam pengumpulan data menggunakan kaedah pembelauan sinar-X, bincangkan jenis data pembelauan yang diperolehi jika sampel polihabluran digunakan.*

(4 marks/markah)

- (d) Structure of the chemical compounds can be determined by electron density data. Explain this statement.

*Struktur untuk suatu sebatian kimia boleh ditentukan dari data ketumpatan elektron. Jelaskan pernyataan ini.*

(6 marks/markah)

4. (a) In X-ray crystallography structure determination, what are the  $I$  and  $\sigma(I)$ ? Why these values are important in determination of crystal structure.

*Dalam penentuan struktur kristalografi sinar-X, apakah  $I$  dan  $\sigma(I)$ ? Mengapakah nilai ini penting di dalam menentukan struktur sesuatu hablur?*

(4 marks/markah)

- (b) Discuss two factors that affecting X-ray intensities.

*Bincangkan dua faktor yang mempengaruhi keamatan sinar-X.*

(4 marks/markah)

- (c) State and explain the steps in the data collection of X-ray diffraction data using a single crystal X-ray diffractometer.

*Nyatakan dan jelaskan langkah-langkah di dalam pengumpulan data pembelauan sinar-X dengan menggunakan alat pembelauan sinar-X hablur tunggal.*

(12 marks/markah)

5. (a) The following data were obtained in an experiment on the photoelectric effect using potassium:

Kinetic energy ( $10^{-19}$ J)	4.49	3.09	1.89	1.34	0.700	0.311
Wavelength (nm)	250	300	350	400	450	500

By plotting an appropriate graph, obtain the values for the **work function of potassium** and **Planck's constant**.

*Berikut adalah data yang diperolehi daripada eksperimen kesan fotoelektrik menggunakan kalium:*

<i>Tenaga kinetik (<math>10^{-19}</math> J)</i>	<i>4.49</i>	<i>3.09</i>	<i>1.89</i>	<i>1.34</i>	<i>0.700</i>	<i>0.311</i>
<i>Panjang gelombang (nm)</i>	<i>250</i>	<i>300</i>	<i>350</i>	<i>400</i>	<i>450</i>	<i>500</i>

*Dengan memplot graf yang bersesuaian, dapatkan nilai-nilai fungsi kerja kalium dan pemalar Planck.*

(11 marks/markah)

- (b) Assume that water absorbs light of wavelength 420 nm with 100 % efficiency. How many photons are required to raise the temperature of 5.75 g of water by 1.0 K at this wavelength?

Given that the heat capacity of water is  $75.3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .

*Andaikan bahawa air menyerap cahaya pada panjang gelombang 420 nm dengan kecekapan 100 %. Berapakah foton yang diperlukan untuk meningkatkan suhu sebanyak 1.0 K bagi air berjisim 5.75 g pada panjang gelombang ini?*

*Diberikan muatan haba untuk air ialah  $75.3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .*

(5 marks/markah)

- (c) Calculate the de Broglie wavelength of
- (i) a mass of 1.0 g travelling at  $1.0 \text{ cm s}^{-1}$ ,
  - (ii) a mass of 1.0 g travelling at 95 % of the speed of light (ignore relativistic effect).

*Kirakan panjang gelombang de Broglie bagi*

- (i) *1.0 g jisim bergerak pada  $1.0 \text{ cm s}^{-1}$ ,*
- (ii) *1.0 g jisim bergerak pada 95 % daripada kelajuan cahaya (abaikan kesan kerelatifan).*

(4 marks/markah)

6. (a) Consider a quantum particle of mass  $m$  that is completely free to travel in one-dimension, with  $V(x) = 0$ .

*Pertimbangkan suatu zarah kuantum dengan jisim  $m$  yang bebas bergerak dalam satu dimensi, dengan  $V(x) = 0$ .*

- (i) Write out the full expression for the time independent Schrödinger equation for the system.

*Tuliskan ungkapan penuh persamaan Schrödinger tak bersandarkan masa untuk sistem tersebut.*

- (ii) Show that  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  is a general solution to the free particle with mass  $m$ , where  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  and  $E$  is the total energy of the system.  $A$  and  $B$  are constants.

*Tunjukkan bahawa  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  merupakan penyelesaian umum kepada zarah bebas tersebut dengan jisim  $m$ , di mana*

*$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  dan  $E$  adalah jumlah tenaga sistem tersebut.  $A$  dan  $B$  adalah pemalar.*

- (iii) Consider the two cases where  $A = 0$  and  $B = 0$ . Determine if these wavefunctions are (separately) eigenfunctions of the momentum operator and if so, what are the eigenvalues.

*Pertimbangkan dua kes di mana  $A = 0$  dan  $B = 0$ . Tentukan sama ada fungsi-fungsi gelombang ini adalah (secara berasingan) fungsi eigen untuk operator momentum dan jika ya, apakah nilai-nilai eigen tersebut.*

(10 marks/markah)

- (b) The function  $\psi(x) = A\left(\frac{x}{L}\right)^2\left[1 - \left(\frac{x}{L}\right)\right]$  is an acceptable wavefunction for the particle in a one-dimensional infinitely deep box of length  $L$ . Calculate the normalization constant  $A$ .

*Fungsi  $\psi(x) = A\left(\frac{x}{L}\right)^2\left[1 - \left(\frac{x}{L}\right)\right]$  merupakan fungsi gelombang yang boleh diterima untuk suatu zarah di dalam kotak satu dimensi berkedalaman tidakterhingga dengan berpanjang  $L$ . Kirakan pemalar penormalan  $A$ .*

(5 marks/markah)

- (c) For a particle in a one-dimensional infinite depth box of length  $L$ , the first excited state wavefunction is  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$ . What is the probability

that the particle will be found in the range of  $\frac{L}{3} \leq X \leq \frac{2L}{3}$ ?

*Untuk suatu zarah di dalam kotak satu dimensi berkedalaman tidakterhingga dengan panjang  $L$ , fungsi gelombang pada keadaan teruja pertama adalah*

*$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$ . Apakah kebarangkalian bahawa zarah tersebut akan*

*dijumpai di antara  $\frac{L}{3} \leq X \leq \frac{2L}{3}$ ?*

(5 marks/markah)