
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 2002/2003

Februari/Mac 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.

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

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

BAHAGIAN A

- (a) Jelaskan apakah yang dimaksudkan dengan polimer? Polimer biasanya boleh dikelaskan kepada tiga kelas yang utama. Nyatakan. (3 markah)
- (b) Pempolimeran radikal bebas dari vinil monomer merangkumi langkah-langkah pemula, perambatan dan penamatan, tunjukkan persamaan kadar pempolimeran dapat diberikan sebagai

$$R_p = k_p \left[\frac{2k_i}{k_t} \right]^{\frac{1}{2}} [M] [I]^{\frac{1}{2}}$$

.../2-

-2-

dimana; R_p = kadar pempolimeran
 $[M]$ = kepekatan monomer
 $[I]$ = kepekatan pemula

dan k_i , k_p dan k_t masing-masing adalah pemalar kadar bagi langkah pemulaan, perambatan dan penamatan. Andaian-andaian yang dibuat mestilah diberikan dalam jawapan anda.

(Anda juga perlu menunjukkan secara ringkas tindak balas kimia bagi setiap langkah pempolimeran tersebut)

(15 markah)

- (c) Apakah yang akan berlaku terhadap kadar pempolimeran jika kepekatan monomer ditingkatkan dan suhu diturunkan

(2 markah)

2. (a) Pengiraan SCF Hartree Fock ke atas klorometana, CH_3Cl , telah dijalankan menggunakan *basis set* (i) STO-3G (ii) 3-21G dan (iii) 3-21G**. Tentukan bilangan fungsi *basis set* bagi setiap kes. Tunjukkan jalan kerja dengan lengkap.

(9 markah)

- (b) Lukis struktur molekul berdasarkan format Z-matriks di bawah.

C1						
C2	1	1.54				
H3	2	1.09	1	120.0		
H4	1	1.09	2	109.5	3	180.0
H5	1	1.09	2	109.5	3	-60.0
H6	1	1.09	2	109.5	3	60.0
O7	2	1.23	1	120.0	4	0.0

(Label setiap atom dan tunjukkan kedudukan atom dengan jelas)

(7 markah)

- (c) Andaikan satu molekul mempunyai (i) 4 dan (ii) 5 elektron dalam orbital yang berlainan. Berikan nilai jumlah nombor spin kuantum, S dan kegandaan spin (spin multiplicity) yang mungkin bagi setiap kes.

(4 markah)

.../3-

BAHAGIAN B.

Jawab hanya TIGA soalan sahaja.

3. (a) Jelaskan dengan ringkas proses penghabluran dan peleburan dalam polimer separa hablur.

(4 markah)

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

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

bagi T_m^0 adalah suhu lebur keseimbangan (equilibrium melting temperature), γ_e tenaga permukaan lipatan, l ketebalan hablur dan ΔH_v entalpi peleburan per unit isipadu bagi hablur.

(12 markah)

- (c) Satu sampel hablur polimer dengan ketebalan hablur 6 nm mempunyai suhu lebur 39 °C. Satu lagi sampel polimer yang sama dengan ketebalan hablur 18 nm didapati melebur pada suhu 64 °C. Dengan menggunakan kertas graf, tentukan suhu lebur keseimbangan bagi polimer ini.

(4 markah)

4. (a) Bincangkan dengan terperinci dan lakarkan gambar bagi menerangkan mana-mana **EMPAT** istilah berikut:

- (i) Titik pelana,
- (ii) Pengoptimuman geometri,
- (iii) Kedudukan struktur peralihan,
- (iv) Gradien,
- (v) Pengiraan titik tunggal, dan
- (vi) Titik pegun.

(8 markah)

.../4

- (b) Nyatakan bukti yang digunakan untuk mengenalpasti struktur adalah struktur keadaan peralihan (transition state structure) dan bukannya struktur bertenaga minimum.

(3 markah)

- (c) (i) Berikan dua kaedah pengoptimuman geometri yang biasa digunakan.
 (ii) Bincangkan perbezaan antara kaedah tersebut dalam menentukan struktur minima global (global minimum).

(9 markah)

5. (a) Lakarkan gambarajah untuk menunjukkan bahawa Pembelauan Sinar-X (XRD) boleh digunakan untuk mengenalpastikan terdapatnya hablur di dalam suatu sampel polimer.

(4 markah)

- (b) Dua faktor utama yang mempengaruhi suhu lebur bagi polimer ialah faktor kimia dan fizik. Dengan memilih SALAH SATU faktor utama tersebut terangkan dengan contoh yang sesuai, bagaimanakah ia mempengaruhi suhu lebur.

(12 markah)

- (c) Sampel homopolimer telah dihablurkan daripada keadaan leburan dengan suhu penghabluran (T_c) berada dari 270 K hingga 330 K. Dengan menggunakan Kalorimetri Imbasan Pembezaan (DSC), suhu lebur (T_m) bagi homopolimer tersebut diberikan dalam jadual berikut:

T_c / K	T_m / K
270	300.0
280	306.5
290	312.5
300	319.0
310	325.0
320	331.0
330	337.5

Dengan menggunakan graf, tentukan nilai suhu lebur keseimbangan T_m^0 bagi homopolimer tersebut.

(4 markah)

6. (a) Takrifkan suhu peralihan kaca (T_g) bagi suatu polimer. Terangkan dengan ringkas faktor yang menyebabkan terjadinya suhu peralihan kaca bagi molekul *n*-butana. (5 markah)
- (b) Bincangkan dengan terperinci bagaimanakah faktor berikut boleh mempengaruhi suhu peralihan kaca (T_g) bagi suatu polimer:
- (i) Keterlenturan rantai utama (main chain flexibility)
 - (ii) Kepukalan kumpulan sisi (bulkiness of side group)
 - (iii) Peningkatan panjang kumpulan sisi (increased length of side group)
 - (iv) Halangan sterik (steric hindrance)
 - (v) Simetri kumpulan sisi (symmetry of side group)
- (10 markah)
- (c) Terangkan konsep isipadu bebas (free volume concept) dalam polimer. Bincangkan dengan ringkas konsep tersebut bagi menentukan suhu peralihan kaca (T_g) terhadap
- (i) berat molekul (molecular weight),
 - (ii) cabangan (branching) dan
 - (iii) berangkai silang (crosslinking).
- (5 markah)
7. (a) Apabila suatu polimer mengalami ujian mekanik (tegasan dan terikan), kelakuan mekanik itu bergantung kepada jenis polimer. Lakarkan tegasan melawan terikan (stress vs strain) bagi menunjukkan kelakuan mekanik terhadap
- (i) polimer bergentian (fibrous polymer),
 - (ii) polimer berkaca (glassy polymer),
 - (iii) polimer separa hablur (semicrystalline polymer) dan
 - (iv) elastomer.

(4 markah)

-6-

- (b) Salah satu sifat mekanik sesuatu polimer yang penting dan lazim digunakan untuk menentukan kekuatan polimer tersebut adalah modulus, E, (stiffness). Dengan menggunakan prinsip L.Treloar, tunjukkan persamaan modulus, E, adalah

$$E = \frac{l \sin \frac{\theta}{2}}{A} \left[\frac{\sin^2 \frac{\theta}{2}}{k_l} + \frac{l^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{4k_\theta} \right]$$

bagi, l = panjang
 A = luas permukaan
 θ = sudut ikatan
 k_l = pemalar daya
 k_θ = daya angular deformasi

(13 markah)

- (c) Takrifkan komposit. Beri contoh bahan semulajadi yang boleh dikelaskan sebagai bahan komposit.

(3 markah)

-oooOooo-