

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua  
Sidang Akademik 1996/97

April 1997

ZSC 548/4 - Analisis Struktur melalui Kaedah Sinar-X

Masa: [3 jam]

---

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

Jawab kesemua EMPAT soalan. Kesemuanya wajib dijawab dalam Bahasa Malaysia.

1. (a) Berikan unsur-unsur simetri unik bagi setiap tujuh sistem hablur. (25/100)
  - (b) Terbitkan ketidakan sistematik yang dihasilkan oleh paksi skru  $2_1$  di dalam kumpulan ruang  $P_{2_1}$ . (25/1000)
  - (c) Terbitkan Hukum Friedel. (25/100)
  - (d) Berikan secara teliti ketidakan sistematik bagi kumpulan ruang yang berikut:
    - (i)  $C_{2/c}$
    - (ii)  $I_{bca}$ , dan
    - (iii)  $P_{2_12_12_1}$(25/100)
2. (a) Dengan menggunakan pembinaan Ewald, tunjukkan bahawa  $\nabla\bar{k} = \bar{G}$  di mana
$$\nabla\bar{k} = \bar{k}' - \bar{k}$$
dan
$$\bar{k}' = \text{vektor gelombang keluar}$$
$$\bar{k} = \text{vektor gelombang datang}$$
$$\bar{G} = \text{adalah suatu vektor kekisi resiprokal}$$
adalah setara dengan  $2 d\sin\theta = \lambda$ . (25/100)

- (b) Terangkan secara teliti prinsip kamera Weissenberg. Bandingkan kebaikan dan keburukan teknik-teknik Weissenberg, Liukan Buerger dan de-Jong Bouman untuk merekodkan kekisi resiprokal  
(50/100)
- (c) Suatu foto paksi-kon diambil semasa pengambilan foto Liukan Buerger paras sifar. Sinaran  $\text{MoK}_\alpha$  ( $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ) digunakan dan hablur tunggal diorientasikan dengan paksi-b selaras terhadap bim sinar-x mendatang. Sudut condongan ialah  $20^\circ$ .

Data-data foto paksi-kon dijadualkan berikut:-

Paras n	Jejari kon (mm)
0	14.25
1	24.50
2	33.75
3	44.00

Dapatkan nilai pemalar sel b.

(25/100)

3. (a) Pertimbangkan hablur tunggal 1-D dengan kala a. Ketumpatan elektron boleh dituliskan sebagai

$$\rho(x) = \frac{1}{a} \sum_{-\infty}^{\infty} G(h) e^{-i \frac{2\pi hx}{a}}$$

Struktur faktor tertib h adalah

$$F(h) = \int_0^a \rho(x) e^{i \frac{2\pi hx}{a}} dx$$

Tunjukkan bahawa sebenarnya

$$G(h) = F(h)$$

(25/100)

...3/-

- (b) Bagi hablur hakiki iaitu hablur 3-D

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} F(hk\ell) e^{-i2\pi(hx+ky+\ell z)}$$

dan

$$F(hk\ell) = \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_{-c/2}^{c/2} \rho(x, y, z) e^{i2\pi(hx+ky+\ell z)} dx dy dz$$

Terangkan prinsip menentukan struktur hablur tunggal melalui kedua-dua persamaan diatas.

(25/100)

- (c) Berkaitan dengan penentuan struktur hablur tunggal, jelaskan:-

- (i) penurunan data
- (ii) kaedah terus
- (iii) kaedah atom berat, dan
- (iv) penghalusan

(50/100)

4. (a) Jelaskan prinsip kamera Debye-Scherrer, kamera Seemann-Bohlin dan kamera Guinier.

(50/100)

- (b) Terangkan dengan jelas langkah-langkah yang patut diambil bila mengumpulkan data dengan sebuah difraktometer serbuk sinar-x untuk menjalankan analisa Rietveld.

(25/100)

- (c) Apakah analisa Rietveld?  
Bincangkan.

(25/100)