

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination  
Academic Session 2004/2005

October 2004

**ZSC 548/4 - X-Ray Structure Analysis**  
*[Analisis Struktur melalui Kaedah Sinar-X]*

Duration : 3 hours  
*[Masa : 3 jam]*

---

Please check that this examination paper consists of **FOUR** pages of printed material before you begin the examination.

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

**Instructions:** Answer all **FOUR** (4) questions. Students are allowed to answer all questions in Bahasa Malaysia or in English.

**Arahan:** *Jawab kesemua **EMPAT** (4) soalan. Pelajar dibenarkan menjawab semua soalan sama ada dalam Bahasa Malaysia atau Bahasa Inggeris.]*

...2/-

1. (a) Discuss the unique symmetry elements and give the values/relationships for  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$  in each of the seven crystal systems.  
 [(a) *Jelaskan unsur-unsur simetri unik dan berikan nilai/perhubungan diantara  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  dan  $\gamma$  bagi setiap sistem di dalam tujuh sistem hablur.*]  
 (30/100)
- (b) What are the symmetry elements for point groups? Draw the stereograms for the following point groups:-  
 [(b) *Nyatakan unsur-unsur simetri yang terdapat pada kumpulan titik. Lukiskan stereogram bagi kumpulan titik yang berikut:-*
- (i)  $mmm$ ,  
 (ii)  $4mm$ , and/*dan*  
 (iii)  $622$
- (30/100)
- (c) What extra symmetry elements that are present in space groups but not in point groups? Draw the space group representations for:-  
 [(c) *Apakah unsur simetri tambahan yang terdapat pada kumpulan ruang tetapi tidak wujud di dalam kumpulan titik? Lukiskan perwakilan kumpulan ruang bagi:-*]
- (i)  $P \frac{2}{m}$   
 (ii)  $P \frac{2_1}{c}$ , and/*dan*  
 (iii)  $C \frac{2}{m}$
- (40/100)
2. (a) Give the expression for structure factor. Derive the systematic absences resulting from  
 [(a) *Berikan ungkapan bagi faktor struktur. Terbitkan ketidakhadiran sistematik yang terhasil daripada*
- (i) body-centering,  
 [(i) *pemusatan jasad,*]  
 (ii)  $2_1$  screw axis, and  
 [(ii) *paksi skrew,  $2_1$ , dan*]  
 (iii) c-glide plane.  
 [(iii) *satah gelongsong-c.*]
- (60/100)

...3/-

- (b) Derive Friedel's Law. What are the systematic absences present in the following space groups:-  
 [(b) *Terbitkan Hukum Friedel. Nyatakan ketidakhadiran sistematik yang wujud di dalam kumpulan ruang yang berikut:-*]

- (i)  $C \frac{2}{c}$   
 (ii)  $I_{bca}$ , and/dan  
 (iii)  $F_{ddd}$

(40/100)

3. (a) What is a reciprocal lattice? Derive the diffraction condition  
 [(a) *Terangkan konsep kekisi resiprokal. Terbitkan syarat belauan*]

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

where  $\Delta \vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$   
 [yang mana]

and  $\vec{k}' =$  outgoing wave-vector  
 [dan  $\vec{k}' =$  vektor gelombang keluar]  
 $\vec{k} =$  incoming wave-vector  
 [ $\vec{k} =$  vektor gelombang datang]  
 $\vec{G} =$  reciprocal lattice vector  
 [ $\vec{G} =$  vektor kekisi resiprokal.]

Using Ewald's construction, prove that  $\Delta \vec{k} = \vec{G}$  is equivalent to  $2d \sin \theta = \lambda$ . How is diffraction interpreted using the concept of Ewald construction.

[Dengan menggunakan pembinaan Ewald, tunjukkan  $\Delta \vec{k} = \vec{G}$  adalah setara dengan  $2d \sin \theta = \lambda$ . Terangkan bagaimana belauan diinterpretasikan dengan menggunakan konsep pembinaan Ewald.]

(50/100)

- (b) Explain in detail the principle of the Weissenberg camera technique. Using Weissenberg, Buerger precession and de-Jong Bouman techniques, explain how the reciprocal lattice of a single crystal can be mapped. Discuss the advantages and disadvantages of each method.

[(b) *Terangkan secara teliti prinsip teknik kamera Weissenberg. Dengan menggunakan ketiga-tiga teknik kamera, iaitu Weissenberg, liukan Buerger dan de-Jong Bouman, jelaskan bagaimana kekisi resiprokal sesuatu hablur tunggal dapat dipetakan. Bincangkan kelebihan dan kekurangan setiap teknik.*]

(50/100)

...4/-

4. (a) For a 1-D crystal, the electron density,  $\rho(x)$ , and the structure factor,  $F(h)$ , are given as follows:-  
 [(a) Bagi hablur 1-D, ketumpatan elektron,  $\rho(x)$ , dan faktor struktur,  $F(h)$ , adalah seperti berikut:-]

$$\rho(x) = \frac{1}{a} \sum_{-\infty}^{\infty} G(h) e^{\frac{i2\pi x}{a}}$$

$$F(h) = \int_0^a \rho(x) e^{\frac{i2\pi x}{a}} dx$$

Prove that  $G(h) = F(h)$  or in other words,  $\rho(x)$  and  $F(h)$  are Fourier transforms of one another.

[Buktikan  $G(h) = F(h)$  atau dengan perkataan lain,  $\rho(x)$  dan  $F(h)$  adalah gelmaan Fourier antara satu dengan lain.]

(25/100)

- (b) Using the results from (a), write down the expressions of electron density,  $\rho(x,y,z)$ , and structure factor,  $F(hk\ell)$ , for a 3-D crystal. Using these expressions for  $\rho(x,y,z)$  and  $F(hk\ell)$ , explain the principle of single crystal structure determination.  
 [(b) Dengan menggunakan keputusan daripada bahagian (a), tuliskan ketumpatan elektron,  $\rho(x,y,z)$ , dan faktor struktur,  $F(hk\ell)$ , bagi satu hablur 3-D. Dengan menggunakan ekspresi bagi  $\rho(x,y,z)$  dan  $F(hk\ell)$ , terangkan prinsip penentuan struktur hablur tunggal.]

(25/100)

- (c) Write down the expression for Patterson function. Explain how it can be used to solve the structure of a single crystal, provided the structure has at least one heavy atom. Compare this method with the Direct Method.  
 [(c) Tuliskan ungkapan bagi fungsi Patterson. Terangkan bagaimana fungsi ini digunakan untuk menentukan struktur hablur tunggal, tertakluk struktur mempunyai sekurang-kurangnya satu atom berat. Bandingkan kaedah ini dengan kaedah terus.]

(50/100)