

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1994/95

April 1995

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) Bincangkan penyerakan Thomson dan penyerakan Compton sinar-X oleh suatu elektron.

Terbitkan faktor struktur dan rumusannya terhadap ketidakan sistematik bagi:

- (i) Kekisi berpusat-C
- (ii) Kekisi berpusat-I
- (iii) Kekisi berpusat-F
- (iv) Unsur simetri paksi-skru, dan
- (v) Unsur simetri satah-gelangsar.

(50 markah)

- (b) NaCl mempunyai struktur FCC dengan $a = 5.689\text{\AA}$. Kedudukan atom-atom di dalam sel unitnya adalah:

| | | | | |
|----|-------------------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Na | 000 | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ | $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ | $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ |
| Cl | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ | $00\frac{1}{2}$ | $0\frac{1}{2}0$ | $\frac{1}{2}00$ |

Hitungkan struktur faktor NaCl. Andaikan faktor penyerakan atom bagi Na dan Cl adalah f_{Na} dan f_{Cl} berturut-turut.

(50 markah)

2. (a) Bincangkan faktor-faktor yang mempengaruhi keamatan garis-garis pantulan spektrum serbuk sinar-X.

(40 markah)

...2/-

- (b) Tungsten (W) mempunyai struktur BCC dengan $a = 3,1648 \text{ \AA}$. Ramalkan corak spektrum serbuk sinar-X bagi Tungsten yang didapati dengan alat difraktometer yang mempunyai geometri Bragg-Brentano. (Jadual-jadual berkaitan dengan faktor penyerakan atom dan kegandaan dibekalkan).

(60 markah)

3. (a) Tuliskan perhubungan di antara vektor-vektor kekisi-terus, \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} , dengan vektor-vektor kekisi-salingan, \vec{a}^* , \vec{b}^* dan \vec{c}^* .

Tunjukkan pembinaan Ewald dan ertinya di dalam konsep pantulan Bragg.

Terangkan konsep fotografi ayunan dan seterusnya konsep fotografi Weissenberg bagi hablur tunggal.

(50 markah)

- (b) Fotografi ayunan am bagi sesuatu hablur ortorombik yang diputarakan terhadap paksi a , b dan c , satu demi satu, mempunyai perulangan garis-lapisan di antara paras $n=-2$ dan paras $n=2$ yang bernilai 34.93 mm, 19.25 mm dan 21.10 mm berturut-turut.

Jika $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ dan garis-pusat kamera Weissenberg, $D = 57.30 \text{ mm}$, hitungkan nilai a , b dan c bagi sel-unit ortorombik itu.

Apakah simetri yang boleh didapati daripada tiga foto ayunan itu?

Adakah simetri yang didapati memastikan hablur ini jenis ortorombik? Jelaskan.

(50 markah)

4. (a) Ketumpatan elektron bagi sesuatu hablur boleh ditulis sebagai:

$$\rho(x,y,z) = \frac{1}{V_c} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hk\ell)| \cos [2\pi(hx + ky + \ell z) - \phi(hk\ell)]$$

Bandingkan sebutan ini dengan fungsi Patterson tiga-dimensi. Terangkan penggunaan fungsi Patterson di dalam penentuan struktur.

(30 markah)

...3/-

- (b) Terangkan langkah demi langkah penentuan struktur melalui kaedah hablur tunggal. Titik-beratkan tentang kaedah terus dan kaedah atom-berat.

(70 markah)

- oooOooo -