

---

# UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination  
Academic Session 2008/2009

November 2008

## EBB 202/3 – Crystallography & Bonding In Solids *[Kristalografi & Ikatan Dalam Pepejal]*

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

---

Please ensure that this examination paper contains NINE printed pages and ONE page APPENDIX before you begin the examination.

*[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi SEMBILAN muka surat yang bercetak dan SATU muka surat LAMPIRAN sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]*

This paper contains SEVEN questions. ONE question from PART A, THREE questions from PART B and THREE questions from PART C.

*[Kertas soalan ini mengandungi TUJUH soalan. SATU soalan dari BAHAGIAN A, TIGA soalan dari BAHAGIAN B dan TIGA soalan dari BAHAGIAN C.]*

**Instruction:** Answer **FIVE** questions. Answer **ALL** questions from PART A, **TWO** questions from PART B, and **TWO** questions from PART C. If candidate answers more than five questions only the first five questions answered in the answer script would be examined.

**Arahan:** Jawab **LIMA** soalan. Jawab **SEMUA** soalan dari BAHAGIAN A, **DUA** soalan dari BAHAGIAN B, dan **DUA** soalan dari BAHAGIAN C. Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.]

Answer to any question must start on a new page.

*[Mulakan jawapan anda untuk setiap soalan pada muka surat yang baru.]*

You may answer a question either in Bahasa Malaysia or in English.

*[Anda dibenarkan menjawab soalan sama ada dalam Bahasa Malaysia atau Bahasa Inggeris.]*

**PART A / BAHAGIAN A**

1. [a] Does crystallinity and atomic internal arrangement in materials affect these properties:
- (i) elastic modulus
  - (ii) tensile strength
  - (iii) thermal expansion

Explain. If your answer is no to any of the above properties, suggest what is the factor affecting the said property.

*Adakah kehabluran dan susunan dalaman atom di dalam bahan mempengaruhi sifat-sifat berikut:*

- (i) modulus keelastikan*
- (ii) kekuatan tegangan*
- (iii) pengembangan terma*

*Terangkan. Sekiranya anda menjawab tidak bagi mana-mana sifat di atas, cadangkan apakah faktor yang mempengaruhi sifat tersebut.*

**(50 marks/markah)**

- [b] (i) Draw hexagonal crystal structure.

*Lukiskan struktur kristal heksagon.*

(15 marks/markah)

- (ii) Give axial length and interaxial angle for hexagonal crystal structure.

*Berikan panjang paksi dan sudut antara paksi bagi struktur kristal heksagon.*

(10 marks/markah)

- (iii) Calculate the volume of the zinc crystal structure unit cell by using the following data: pure zinc has the hexagonal closed packed (HCP) crystal structure with lattice constant  $a = 0.2665$  nm and  $c = 0.4947$  nm.

*Kirakan isipadu sel unit struktur kristal zink menggunakan data berikut: Zink tulen mempunyai struktur kristal heksagon tertutup rapat (HCP) dengan pemalar kekisi  $a = 0.2665$  nm dan  $c = 0.4947$  nm.*

(25 marks/markah)

**PART B / BAHAGIAN B**

2. [a] Explain about these topics:
- (i) the concept of atomic orbitals
  - (ii) the concept of crystal and non-crystal
  - (iii) the Schrödinger wave equation and what does the equation resulted to?
  - (iv) the Hermann-Mauguin system to represent the 32 point group symmetry
  - (v) with appropriate examples, how symmetry groups can be used to relate crystals, their symmetry and their properties (anisotropy, electrical, physical, magnetic, optical, etc).

*Terangkan mengenai topik-topik berikut:*

- (i) *konsep orbital atom*
- (ii) *konsep hablur dan bukan hablur*
- (iii) *persamaan gelombang Schrödinger dan apakah hasil keputusan persamaan tersebut?*
- (iv) *sistem Hermann-Mauguin untuk mewakili 32 kumpulan simetri titik*
- (v) *dengan contoh-contoh sesuai, bagaimana kumpulan-kumpulan simetri boleh digunakan untuk mengaitkan hablur, simetri and sifat-sifatnya (anisotropi, elektrik, fizikal magnetik, optikal dan sebagainya).*

(60 marks/markah)

- [b] Explain, with appropriate example(s), the use or applications of stereographic projection.

*Terangkan, dengan contoh (atau contoh-contoh) yang sesuai, kegunaan atau aplikasi-aplikasi unjuran stereografik.*

(40 marks/markah)

3. [a] Combination of the symmetry elements of rotational axis and inversion resulted in two different point group symmetry operations. Explain, with appropriate diagram or stereographic projection, about both combinations.

Note: the stereographic projection has to show how the combinations are done.

*Kombinasi elemen-elemen simetri paksi putaran dan songsangan menghasilkan dua operasi kumpulan simetri titik yang berbeza. Terangkan, dengan rajah atau unjuran stereografik yang sesuai, mengenai kedua-dua kombinasi.*

*Nota: unjuran stereografik perlu menunjukkan bagaimana kedua-dua kombinasi dihasilkan.*

(40 marks/markah)

- [b] Identify all the symmetry elements that each of the crystal given in APPENDIX 1 have. Suggest the point group symmetry that each crystal belongs to.

*Kenalpasti semua elemen simetri yang dipunyai oleh setiap hablur yang diberikan dalam LAMPIRAN 1. Cadangkan kumpulan simetri titik yang mana setiap hablur tersebut tergolong.*

(60 marks/markah)

4. [a] Explain about the combination of proper and improper axes, and list all the possible combinations. Draw the stereographic projection of at least 3 of them.

*Terangkan mengenai kombinasi paksi-paksi wajar dan tak wajar, dan senaraikan semua kombinasi yang mungkin. Lukiskan unjuran stereografik bagi sekurang-kurangnya 3 dari kombinasi tersebut.*

(50 marks/markah)

- [b] Explain, with the help of appropriate diagram, about the development of space group symmetry and why are they limited to only 230. Why do we need space group symmetry when we have already developed the 32 point group symmetry?

*Terangkan, dengan bantuan rajah yang sesuai, mengenai pembangunan kumpulan simetri ruang dan mengapakah mereka dihadkan kepada hanya 230. Mengapakah kita memerlukan kumpulan simetri ruang sedangkan kita sudahpun membangunkan 32 kumpulan simetri titik?*

(50 marks/markah)

**PART C / BAHAGIAN C**

5. [a] Why X-rays spectrum is suitable for crystal structure characterization?

*Kenapa spektrum sinar-X sesuai untuk pencirian struktur kristal?*

(30 marks/markah)

- [b] Is it possible to use continuous spectrum as the X-rays sources? Discuss this and support your argument with appropriate diagram.

*Bolehkah spektrum berterusan digunakan sebagai sumber sinar-X? Bincangkan ini dan sokong alasan anda dengan menggunakan diagram tertentu.*

(70 marks/markah)

6. [a] Prove, with appropriate drawings Laue equation.

*Buktikan dengan menggunakan lakaran tertentu persamaan Laue.*

(50 marks/markah)

- [b] Figure 1 shows X-rays diffraction spectra for (a) indium tin oxide (ITO) glass only and (b) zinc oxide (ZnO) film on ITO glass. Based on this result, calculate the d-spacing for ZnO peaks. Given that ZnO is hexagonal structural with  $a = 0.32458$  nm and  $c = 0.52006$  nm.

*Rajah 1 menunjukkan corak pembelauan untuk (a) gelas indium timah oksida (ITO) sahaja dan (b) filem zink oksida di atas gelas ITO. Berdasarkan keputusan ini, kirakan jarak-d untuk puncak-puncak ZnO. Diberikan ZnO adalah berstruktur heksagon dengan  $a = 0.32458$  nm dan  $c = 0.52006$  nm.*

(50 marks/markah)

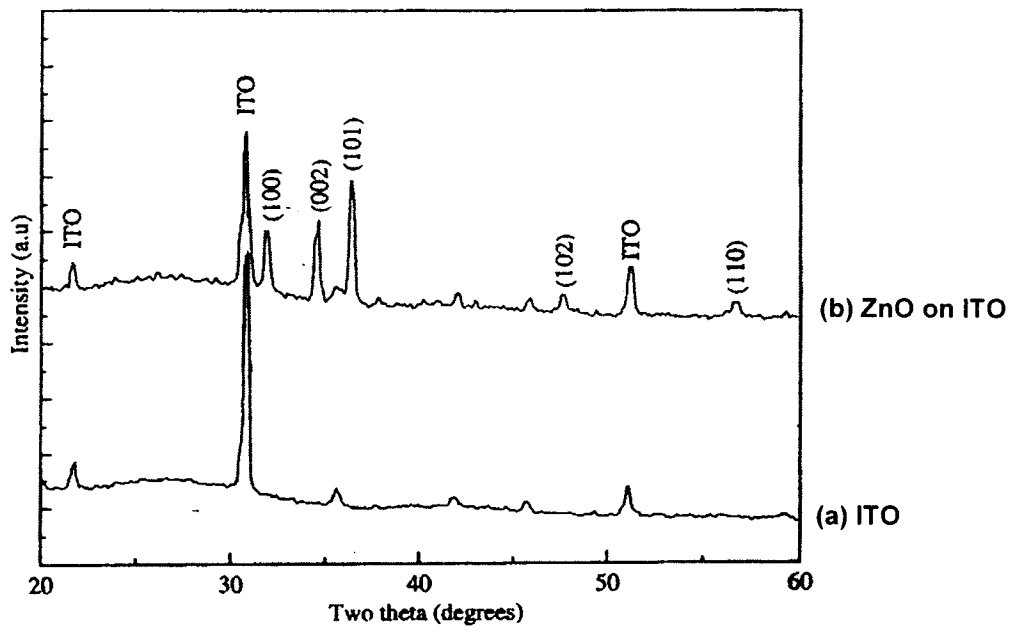


Figure 1 / Rajah 1



7. For a primitive cubic lattice composed of only one type of atom:

*Untuk kekisi kiub primitif ia mempunyai satu jenis atom sahaja.*

- [a] What are the positions of each of the atoms in the unit cell (using the standard setting with positions in fractional coordinates)?

*Apakah posisi setiap atom-atom dalam unit sel (dengan menggunakan aturan piawaian posisi dalam pecahan koordinat)?*

(20 marks/markah)

- [b] What fraction of each atom is contained within the unit cell?

*Apakah pecahan setiap atom yang terdapat di dalam unit sel ini?*

(10 marks/markah)

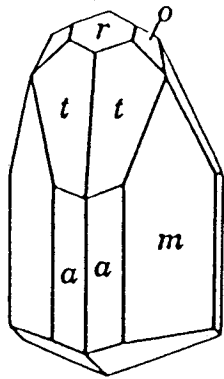
- [c] Using the information from (a) and (b), calculate the value of a general structure factor,  $F(hkl)$ , for this structure in terms of the atomic scattering factor  $f_{atom}$ . Remember that:  $\exp(i\theta) = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$ .

*Menggunakan informasi dari (a) dan (b), kira nilai faktor struktur umum,  $F(hkl)$ , untuk struktur ini dalam terma-terma faktor pancaran atom  $F_{atom}$ . Di ingatkan  $\exp(i\theta) = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$ .*

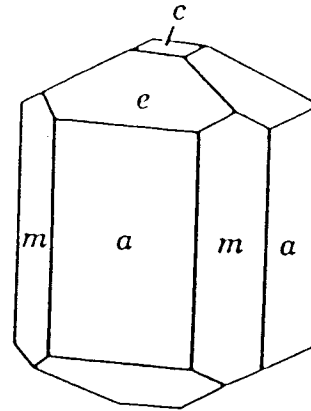
(70 marks/markah)

Angka Giliran: \_\_\_\_\_

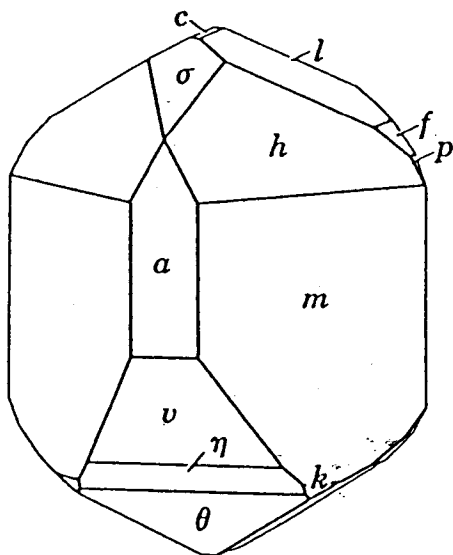
APPENDIX / LAMPIRAN



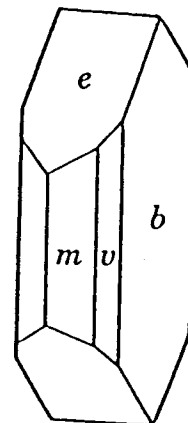
(i) Tourmaline



(ii) Vesuvianite



(iii) Azurite



(iv) Marcasite