

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 2003/2004

September - Oktober 2003

**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) Nyatakan unsur-unsur simetri yang terdapat di dalam kumpulan titik. Untuk perkembangan kumpulan titik kepada kumpulan ruang, apakah unsur-unsur simetri tambahan yang diperlukan?  
(30/100)
- (b) Nyatakan takrifan bagi faktor struktur dan berikan rumusannya. Melalui rumusan faktor struktur, terbitkan Hukum Freidel.  
(30/100)
- (c) Terbitkan ketidakan sistematik yang dihasilkan oleh pemusatan muka A.  
(20/100)
- (d) Berikan secara teliti ketidakan sistematik bagi kumpulan ruang yang berikut:-
  - (i)  $P_{2_1/c}$
  - (ii)  $P_{bca}$  dan
  - (iii)  $I_{bca}$  
(20/100)

2. (a) Berikan perhubungan matematik diantara kekisi resiprokal dan kekisi terus.  
(20/100)
- (b) Melalui pembinaan Ewald, terbitkan syarat pembelauan membina,  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  di mana

$$\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$$

- dan  $\vec{k}' =$  vektor gelombang keluar  
 $\vec{k} =$  vektor gelombang datang  
 $\vec{G} =$  vektor kekisi resiprokal.

Tunjukkan  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  adalah setara dengan Hukum Bragg, iaitu  $2d\sin\theta = \lambda$ .  
(30/100)

- (b) Bandingkan keuntungan dan kerugian merekodkan kekisi resiprokal dengan kamera Weissenberg, kamera Liukan Buerger dan kamera de-Jong Boumann.  
(30/100)
- (c) Semasa pengambilan foto Liukan Buerger paras sifar, suatu foto paksi-kon juga diambil. Sinaran yang digunakan adalah  $M\alpha_1$  ( $\lambda = 0.7173\text{\AA}$ ). Hablur tunggal adalah diorientasikan dengan paksi-c selari terhadap bim sinar-x mendatang dan sudut condongan kamera ialah  $20^\circ$ .

Data-data foto paksi-kon yang terdapat dijadualkan seperti berikut:-

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

Dapatkan nilai pemalar sel c hablur ini.

(20/100)

3. (a) Bagi hablur tunggal hakiki iaitu hablur tunggal 3-D

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

dan

$$\bar{F}(hkl) = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/2}^{1/2} \rho(x, y, z) e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dx dy dz$$

di mana simbol-simbol mempunyai erti-erti biasa.

Terangkan prinsip menentukan struktur hablur tunggal dengan menggunakan kedua-dua persamaan di atas.

(50/100)

- (b) Berkaitan penentuan struktur hablur tunggal, jelaskan

- (i) penurunan data, dan  
(ii) penghalusan

(50/100)

4. (a) Terangkan dengan teliti langkah demi langkah bagaimana anda melakukan penentuan struktur melalui kaedah hablur tunggal.

(80/100)

- (b) Bandingkan kaedah terus dengan kaedah atom berat (kaedah Patterson) bagi penentuan struktur hablur tunggal.

(20/100)