
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.]*

1. (a) Discuss the unique symmetry elements and give the values/relationships for a , b , c , α , β and γ in each of the seven crystal systems.
 [(a) *Jelaskan unsur-unsur simetri unik dan berikan nilai/perhubungan diantara a , b , c , α , β dan γ 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)

- (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. (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)