

SULIT



First Semester Examination
2024/2025 Academic Session

February 2025

EBB202 – Crystallography and Bonding in Solids
[Kristalografi dan Ikatan Dalam Pepejal]

Duration : 3 hours
[Masa : 3 jam]

Please check that this examination paper consists of NINE (9) printed pages before you begin the examination.

[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi SEMBILAN (9) muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]

Instructions : Answer **FIVE (5)** questions. **Part A is COMPULSORY**. Answer **TWO (2)** questions from PART B.

Arahan : Jawab **LIMA (5)** soalan. **Bahagian A WAJIB dijawab**. Jawab **DUA (2)** soalan dari BAHAGIAN B.

In the event of any discrepancies, the English version shall be used.

[Sekiranya terdapat sebarang percanggahan pada soalan peperiksaan, versi Bahasa Inggeris hendaklah digunapakai].

...2/-

SULIT

PART A / BAHAGIAN A

- (1). (a). Explain the problem in the Bohr model.

Terangkan masalah dalam model Bohr.

(5 marks/markah)

- (b). By providing appropriate schematic diagrams and electronic configuration, demonstrate the chemical bonding forms of the following materials:

Dengan menyediakan gambar rajah skematik dan konfigurasi elektronik yang sesuai, tunjukkan ikatan kimia yang terbentuk bagi bahan-bahan berikut:

- (i) Magnesium oxide/ *Magnesium oksida*, MgO
- (ii). Magnesium hydroxide/ *Magnesium hidroksida*, $Mg(OH)_2$
- (iii). Pure Magnesium/ *Magnesium Tulen*, Mg

Given the atomic number of $Mg = 12$, $O = 8$ and $H = 1$

Diberikan nombor atom $Mg = 12$, $O = 8$ dan $H = 1$

(15 marks/markah)

- (2). (a). Turquoise is a phosphate mineral with a triclinic crystal system. It is well-known for its blue-green colour and is often used as a gemstone. Illustrate the crystal system and write the lattice parameters for this mineral.

Batu Firuz ialah mineral fosfat dengan sistem hablur triklinik. Ia terkenal dengan warna biru-hijau dan sering digunakan sebagai batu permata. Ilustrasikan sistem hablur dan tuliskan parameter kekisi bagi mineral ini.

(5 marks/markah)

...3/-

(b). Draw the following symmetrical operation:

Lukiskan operasi simetri berikut:

- (i). 6
- (ii). $\bar{6}$ (6 bar)
- (iii). 6/m
- (iv). 32
- (v). 622

(15 marks/markah)

(3). A single crystal of a cubic material is examined using Laue's method with X-rays of wavelength ranging continuously from 0.2 Å to 2.0 Å. A prominent diffraction spot is observed corresponding to a plane with Miller indices (hkl) = (1 1 1). The angle between the incident beam and this plane's normal is measured as 35°. Calculate the range of wavelengths that satisfy the diffraction condition for this spot using Laue's equation. Then, explain how this information helps in identifying the crystal orientation. Given $a = 4.0 \text{ Å}$.

Hablur tunggal bahan padu diperiksa menggunakan kaedah Laue dengan sinar-X panjang gelombang secara berterusan antara 0.2 Å hingga 2.0 Å. Tempat pembelauan yang menonjol diperhatikan sepadan dengan satah dengan indeks Miller (hkl) = (1 1 1). Sudut antara insiden rasuk dan normal satah ini diukur sebagai 35°. Kira julat panjang gelombang yang memenuhi keadaan pembelauan untuk tempat ini menggunakan persamaan Laue. Kemudian, terangkan bagaimana maklumat ini membantu dalam mengenal pasti orientasi kristal. Diberi $a = 4.0 \text{ Å}$.

(10 Marks/markah)

...4/-

- (b). An unknown polycrystalline sample is subjected to X-ray diffraction using a monochromatic X-ray source with a wavelength of $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$. A strong diffraction peak is observed at a 2θ angle of 44.5° . Calculate the interplanar spacing (d) for this peak using Bragg's law. If this peak corresponds to the (110) plane of a body-centered cubic (BCC) crystal structure, determine the lattice parameter (a) of the crystal.

Sampel polihabluran yang tidak diketahui tertakluk kepada pembelauan sinar-X menggunakan sumber sinar-X monokromatik dengan panjang gelombang $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$. Puncak pembelauan yang kuat diperhatikan pada sudut $2\theta/44.5^\circ$. Kira jarak interplanar (d) untuk puncak ini menggunakan hukum Bragg. Jika puncak ini sepadan dengan satah (110) struktur kristal padu berpusat badan (BCC), tentukan parameter kekisi (a) kristal.

(10 marks/markah)

...5/-

PART B / BAHAGIAN B

- (4). (a). Differentiate between atom, ion, molecule, and crystal by giving appropriate examples.

Dengan memberikan contoh yang sesuai, bezakan antara atom, ion, molekul dan hablur.

(8 marks/markah)

- (b). Discuss the chemical bonding forms in single-crystal silicon and binary semiconductor compound, gallium nitride. Provide the electronic configuration of the element/ compound involved in the semiconductor bonding.

Bincangkan ikatan kimia yang terbentuk dalam semikonduktor kristal tunggal silikon dan sebatian semikonduktor binari, galium nitrida. Sediakan konfigurasi elektronik unsur/sebatian yang terlibat dalam ikatan semikonduktor.

Given the atomic number of Si= 14, Ga= 31 and N= 7.

Diberikan nombor atom Si= 14, Ga= 31 dan N= 7.

(12 marks/markah)

- (5). (a). Describe the direct and converse piezoelectric effect by providing appropriate schematic diagrams.

Huraikan kesan piezoelektrik langsung dan terbalik dengan menyediakan gambarajah skematik yang sesuai.

(8 marks/markah)

- (b). Barium titanate, BaTiO_3 is a known ferroelectric material. By providing appropriate diagrams, explain the properties of BaTiO_3 at varying temperatures in relation to the crystal structure.

Barium titanat, BaTiO_3 dikenali sebagai bahan feroelektrik yang dikenali. Dengan memberikan gambar rajah yang sesuai, terangkan sifat BaTiO_3 pada suhu yang berbeza-beza berhubung dengan struktur hablur.

(12 marks/markah)

- (6). (a). Figure 1 shows diffraction patterns from the same sample on two different diffractometers set up. The observed peak broadening results solely from instrumentation differences, highlighting the need to consider instrumental effects in XRD data interpretation.

In a different setup, explain how crystallite size influences peak broadening in powder XRD patterns. Using the Scherrer equation, calculate the crystallite size for a sample if the full width at half maximum (FWHM) of a selected peak at $2\theta = 30^\circ$ is 0.3° (in 2θ scale). Assume a wavelength $\lambda = 0.154 \text{ nm}$ and a shape factor $K = 0.9$. Discuss the limitations of the Scherrer equation in accurately determining crystallite size.

Rajah 1 menunjukkan corak pembelauan daripada sampel yang sama pada dua pembelauan berbeza yang disediakan. Peluasan puncak yang diperhatikan terhasil semata-mata daripada perbezaan instrumentasi, menyerlahkan keperluan untuk mempertimbangkan kesan instrumental dalam tafsiran data XRD.

Dalam persediaan yang berbeza, terangkan bagaimana saiz hablur mempengaruhi pelebaran puncak dalam corak XRD serbuk. Menggunakan persamaan Scherrer, hitung saiz hablur untuk sampel jika lebar penuh pada separuh maksimum (FWHM) puncak yang dipilih pada $2\theta = 30^\circ$ ialah 0.3° (dalam skala 2θ). Andaikan panjang gelombang $\lambda = 0.154 \text{ nm}$ dan

...7/-

faktor bentuk $K = 0.9$. Bincangkan batasan persamaan Scherrer dalam menentukan saiz hablur dengan tepat.

(10 marks/markah)

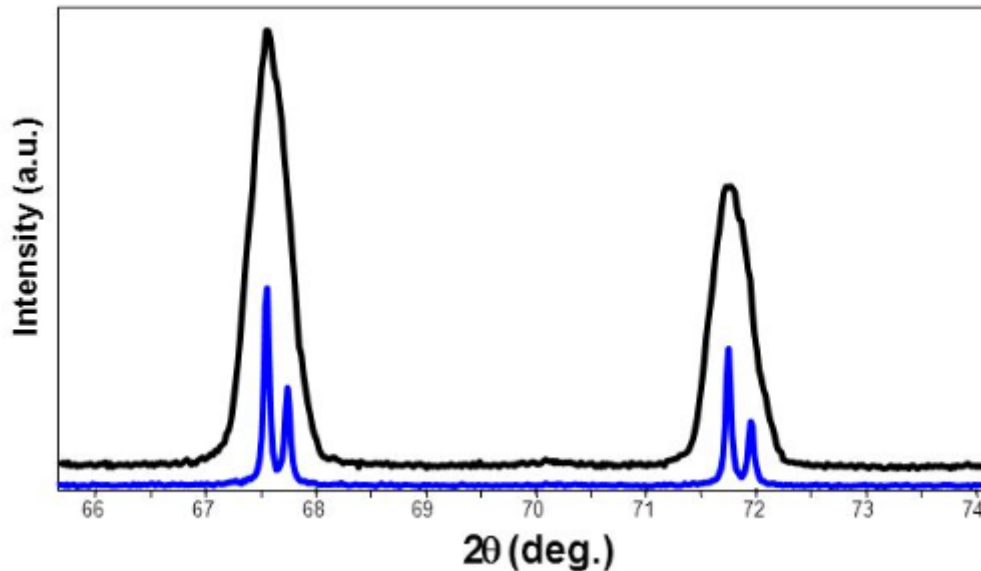


Figure 1: Diffraction patterns from the same sample on two diffractometers

Rajah 1: Corak pembelauan daripada sampel yang sama pada dua difraktometer

- (b). Compare the differences between crystallite size and particle size in the context of powder diffraction. Why is it necessary to use additional techniques such as SEM or TEM to confirm particle size? Discuss how discrepancies between XRD-derived crystallite size and SEM-derived particle size can indicate the presence of polycrystalline particles. Provide an example calculation illustrating this concept.

Bandingkan perbezaan antara saiz hablur dan saiz zarah dalam konteks pembelauan serbuk. Mengapa perlu menggunakan teknik tambahan seperti SEM atau TEM untuk mengesahkan saiz zarah? Bincangkan bagaimana percanggahan antara saiz hablur terbitan XRD dan saiz zarah terbitan SEM boleh menunjukkan kehadiran zarah polihablur. Sediakan contoh pengiraan yang menggambarkan konsep ini.

(10 marks/markah)

...8/-

- (7). (a). Analyze how sample thickness and surface flatness influence XRD measurements, particularly in thin-film and powder samples. Use relevant equations to explain how variations in sample thickness impact absorption and peak intensity, and propose solutions to address sample preparation challenges for accurate intensity measurements.

Berikan analisa bagaimana ketebalan sampel dan kerataan permukaan mempengaruhi pengukuran XRD, terutamanya dalam sampel filem nipis dan serbuk. Gunakan persamaan yang sesuai untuk menerangkan bagaimana variasi dalam ketebalan sampel memberikan kesan kepada penyerapan dan keamatan puncak, dan cadangkan penyelesaian untuk menangani cabaran penyediaan sampel bagi pengukuran keamatan yang tepat.

(10 marks/markah)

- (b). Describe the importance of particle size reduction and homogenization for obtaining accurate XRD patterns. Given a coarse sample, as shown in the image on the left (Figure 2), outline the steps you would take to prepare this sample for XRD analysis. Include a discussion on the potential effects of insufficient grinding and homogenization on the XRD results.

Terangkan kepentingan pengurangan saiz zarah dan homogenisasi untuk mendapatkan corak XRD yang tepat. Memandangkan sampel kasar, seperti yang ditunjukkan dalam imej di sebelah kiri (Rajah 2), gariskan langkah-langkah yang akan anda ambil untuk menyediakan sampel ini untuk analisis XRD. Sertakan perbincangan tentang potensi kesan pengisaran dan homogenisasi yang tidak mencukupi pada keputusan XRD.

(10 marks/markah)



Figure 2: Starting from the left, the samples progress from coarse to medium and finally to fine.

Figure 2: Bermula dari kiri, sampel beralih daripada kasar ke sederhana dan akhirnya kepada halus.

-oooOooo-