

Regnetrening TFY4175

Krystallografi

Enkel struktur

KRAH 1

Cuprit - et kopperoxid – har disse gitterparametrene:

$$a = b = c = 4.2696 \text{ \AA}; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Atomene ligger i disse posisjonene:

$$\text{Cu: } 0 \ 0 \ 0, \ 1/2 \ 1/2 \ 0, \ 1/2 \ 0 \ 1/2, \ 0 \ 1/2 \ 1/2$$

$$\text{O: } 1/4 \ 1/4 \ 1/4, \ 3/4 \ 3/4 \ 3/4$$

- Tegn I) en projeksjon av strukturen ned på (0 0 1) planet, og II) et romlig bilde av strukturen.
- Gi kjemisk formel for forbindelsen. Hva er antall formelenheter Z pr. elementarcelle?
- Beregn den korteste Cu – O avstanden.
- Beregn tettheten ρ [kg/m³] av cuprit.

$$\text{Masse i elementarcella: } m = \frac{Z \cdot M}{N_A} \quad \text{der } M = \text{formelvekt,}$$

$$N_A \text{ (Avogadros tall)} = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ molek./mol.}$$

KRAH 2

For en krystall av AlB_2 er disse gitterkonstantene funnet:

$$a = b = 3.0054(2) \text{ \AA}, \ c = 3.2528(2) \text{ \AA}; \alpha = \beta = 90^\circ, \ \gamma = 120^\circ$$

Atomposisjonene: Al: 0 0 0; B: 1/3 2/3 1/2, 2/3 1/3 1/2

- Tegn en projeksjon av innholdet i 4 elementarceller ned på planet (0 0 1).
- Beregn den korteste Al – B avstanden.
- Beregn tettheten ρ [kg/m³] av forbindelsen.

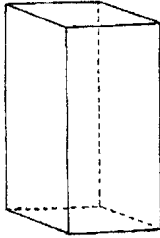
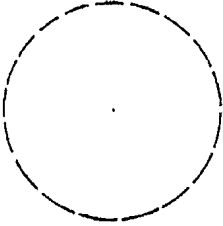
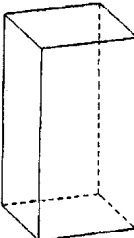
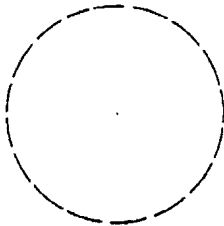
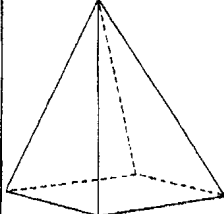
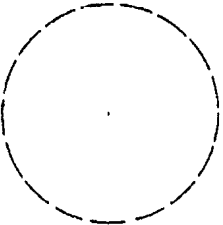
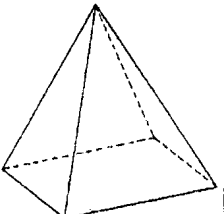
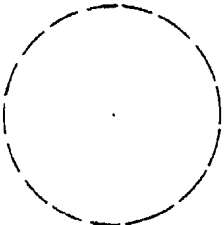
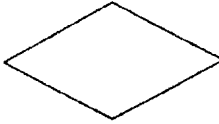
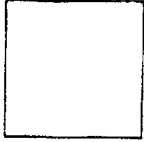
Stenografisk projeksjon

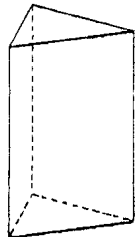
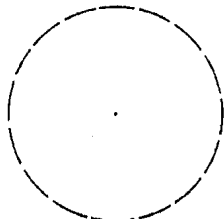
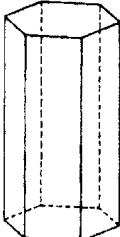
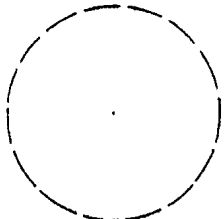
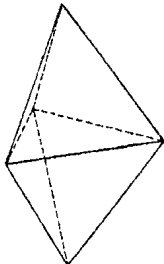
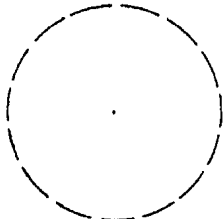
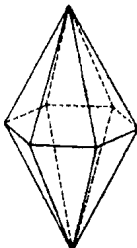
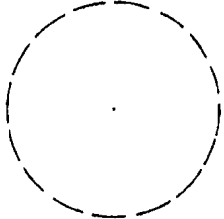
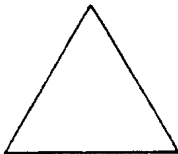
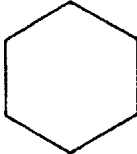
KRAH 3

Hvordan lages en stereografisk projeksjon?

KRAH 4

Trekk poler til flatene i figurene nedenfor og vis resultatet i stereografiske projeksjoner. Prismer og pyramider står vertikalt (normalt på projeksjonsplanet). Grunnflate eller tverrsnitt av polyedre er vist under hvert sett av fire figurer.

	Rombisk		Tetragonal	
Prisme		 1		 3
Pyramide		 2		 4
Grunnflate eller tverrsnitt av polyeder	 Rombe		 Kvadrat	

	Trigonal		Hexagonal	
Prisme		5 		7 
Dipyramide		6 		8 
Grunnflate eller tverrsnitt av polyeder	 Likesidet trekant		 Regelmessig sekskant	

Symmetrielementer

KRAH 5

La inversjonsaksene \bar{n} for $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$ og 10 virke på polen for ei generell flate og tegn opp de tilhørende stereografiske projeksjonene av polene.

KRAH 6

- Hvilke av inversjonsaksene ovenfor kan beskrives ved andre symmetrielementer?
- Hvilke av aksene inneholder et inversjonssentrum?

KRAH 7

Hva er det som begrenser talligheten av akser i krystaller? Utled de mulige tallighetene.

KRAH 8

Hva menes med symmorfe og ikkesymmorfe symmetrielementer?

KRAH 9

Vis i stereografisk projeksjon disse punktgruppene: $2/m$, $\bar{4}$, $3m$, $2/m\ 2/m\ 2/m$, $\bar{4}2m$

Rotasjonsmatriser

KRAH 10

Anta at det er to ortogonale 2-tallige rotasjonsakser $\parallel [1\ 0\ 0]$ og $\parallel [0\ 1\ 0]$. Kombiner disse akseoperasjonene vha. matrisemultiplikasjon. Hvilken symmetrioperasjon er ekvivalent med kombinasjonen av de to?

KRAH 11

Anta at det i et hexagonalt gitter er en 3-tallig rotasjonsakse $\parallel [0\ 0\ 1]$ og en 2-tallig akse $\parallel [1\ 0\ 0]$. Finn ved matrisemultiplikasjon symmetrioperasjonen som tilsvare produktet $\{2_{[100]}\}\{3_{[001]}\}$, dvs. først 3-tallig rotasjon, deretter den 2-tallige. Hvilken enkelt symmetrioperasjon tilsvare de to operasjonene brukt i motsatt rekkefølge. (Bruk Appendix 1 i Krystallografi-kompendiet)
Vis de to kombinerte operasjonene i en figur.

Punktgrupper og krystallklasser

KRAH 12

Hvordan framkommer punktgruppene?

KRAH 13

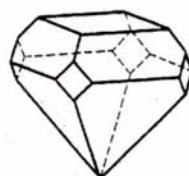
Hvilke symmetrielementer finner du i de fire krystallformene vist nedenfor? Forsøk å gi det fulle punktgruppesymbolet for disse tilfellene.



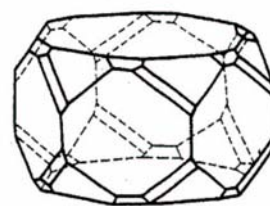
β -svovel



Trifenylmethan
 $\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$



Pentaerytritol
 $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}_4$

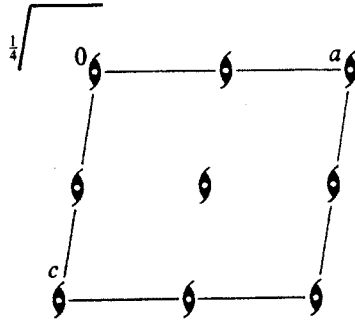


Apatitt
 $\text{Ca}_5[\text{OH,Cl,F}]/(\text{PO}_4)_3$

Romgrupper og plangrupper

KRAH 14

- a) En krystallstruktur tilhører romgruppe $P2_1/m$, eller fullt utskrevet $P12_1/m1$. Hvilke opplysninger om strukturen gir romgruppesymbolet? Hvilket krystallsystem tilhører denne romgruppen?
- b) Hvordan kan denne romgruppen identifiseres fra diffraksjonsopptak?



- c) En projeksjon av $P2_1/m$ langs $[0\ 1\ 0]$ er vist i figuren. Vis i en tilsvarende projeksjon de generelle, ekvivalente posisjonene. Gi koordinater og tallighet for disse.
- d) Hvilken plangrupperesymmetri har projeksjonen langs $[0\ 1\ 0]$?

Enkel struktur, strukturfaktor og diffrakterte intensiteter

KRAH 15

Cu og Zn danner en rekke forskjellige intermetalliske forbindelser. En av dem er av CsCl typen, dvs. strukturen kan tenkes sammensatt av et kubisk primitivt Cu-gitter og et like stort kubisk primitivt Zn-gitter forskjøvet $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ i forhold til Cu-gitteret. Det blir gjort Debye-Scherrer opptak av denne CuZn strukturen.

- a) Vis diffraksjonsbetingelsene generelt ved hjelp av Ewalds konstruksjon, og bruk denne til å forklare prinsippene for Debye-Scherrer metoden.
- b) Forklar metoden for indicering av linjene ved opptak fra kubisk struktur.
- c) Hvilken romgittertype tilhører CuZn her? Svaret skal begrunnes.
- d) Utled et uttrykk for strukturfaktor F_{hkl} for CuZn. Hvilke linjer blir systematisk sterke og hvilke blir systematisk svake?

For den integrerte intensiteten I_{hkl} av en Bragg-refleks gjelder: $I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2$. I_{hkl} er dessuten avhengig av flere andre faktorer som varierer med Braggvinkelen θ . En av dem er polarisasjonsfaktoren $p(\theta) = 1/2(1 + \cos^2 2\theta)$

e) Hvilken fysikalsk betydning ligger i polarisasjonsfaktoren?

Andre vinkelavhengige faktorer som det må korrigeres for er Lorentz-faktoren $L(\theta) = \frac{1}{\sin 2\theta \sin \theta}$ for polykrystallinsk prøve, multiplisitetsfaktoren M , og atomær forskyvningsparameter $T(\theta) = \exp(-2B \sin^2 \theta / \lambda)$. Lorentz-, polarisasjon- og multiplisitetsfaktor slått sammen i en faktor blir:

$$M \cdot Lp = M \cdot \frac{1 + \cos^2 2\theta}{4 \sin^2 \theta \cos \theta}$$

Ta med denne sammensatte korreksjonsfaktoren og se på diffraksjonslinjer ved lavest mulig spredningsvinkel slik at en tilnærmet kan sette atomformfaktor $f_a \approx Z$; $Z(\text{Cu}) = 29$, $Z(\text{Zn}) = 30$ Gitterkonstanten $a = 2.955 \text{ \AA}$.

- f) Hva er indices for første (laveste) systematisk sterke og første svake diffraksjonslinje? Gi multiplisiteten for disse to linjene.
- g) Beregn Braggvinkelen θ for begge linjene.
- h) Beregn tilnærmet intensitetsforholdet $I_{\text{svak}}/I_{\text{sterk}}$ mellom de to diffraksjonslinjene.