

## MEF 3000/4000

### Tema: Strukturmodeller

Følgende strukturmodeller av enkle strukturer foreligger:

AB: NaCl-type  
NiAs-type  
sink blende-type  
wurtsitt -type

AB<sub>2</sub>: fluoritt-type  
CdI<sub>2</sub>-type  
rutil-type

ABO<sub>3</sub>, perovskitt-type

AB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, spinell-type

dessuten foreligger modeller av CuO og Pb<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

- Identifiser anioner og kationer i de ulike strukturene.
- Bestem koordinasjonspolyhedrene rundt anioner og kationer
- Identifiser tettpakkede lag av anionkuler for alle strukturtypene unntatt CuO og Pb<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. For fluoritt-typen (CaF<sub>2</sub>) er det kationene som danner tettpakkede lag. For perovskitt-typen dannes tettpakkede lag av A og O atomer.

Betrakt så noen utvalgte modeller i stor detalj. Bruk en god del tid på dette da det gir deg en mye bedre forståelse for symmetri-forhold, kulepakking, koordinasjonsforhold, mm.

#### Betrakt NaCl-strukturen

- finn tettpakkede plan
- beskriv hvilke atomer som ligger på (100) og på (110) plan
- betrakt Na-atomene. Be:skriv Bravais-gitteret.

#### Betrakt NiAs-strukturen

- finn tettpakkede plan
- angi koordinasjonspolyeder for Ni og for As
- identifiser 6<sub>3</sub> aksene
- studer hvorledes oktaederhullene ligger langs c-aksen
- vurder om strukturen er sentrosymmetrisk

#### Betrakt sink blende (ZnS) strukturen

- angi koordinasjonsforhold for Zn og for S
- angi Bravais-gitter ved kun å betrakte S-atomene
- gjør det samme ved å betrakte Zn atomene
- velg ut et Zn som origo. Er strukturen sentrosymmetrisk ?
- Hva slags rotasjonsakse løper langs [100] ?
- identifiser oktaederhullene.

#### Betrakt wurtsitt (ZnS) strukturen

- beskriv koordinasjonspolyedrene
- identifiser tettpakkede lag av S
- sammenlign hvorledes tetraederhull er plassert langs c-aksen med plassering av oktaederhull

**Betrakt CdI<sub>2</sub>-strukturen**

- sammenlign med NiAs-strukturen
- redegjør hvorfor strukturen kan beskrives som sjikt-struktur
- definer enhetscellen

**Betrakt CaF<sub>2</sub>-strukturen**

- identifiser enhetscellen
- beskriv Bravais-gitteret (betrakt først kun Ca og deretter kun F)
- beskriv koordinasjonspolyedrene
- beskriv tettpakkede lag og identifiser oktaederhullet
- hva slags rotasjonsakse går gjennom origo (Ca) langs [100] ?

**Betrakt CuO-strukturen**

- hva slags koordinasjon har Cu?
- identifiser de ekstra O-atomene som skal til for å lage et oktaeder rundt Cu.
- Hva er årsaken til deformasjon av CuO<sub>6</sub>-oktaederet ?

**Betrakt Pb<sub>3</sub>O<sub>4</sub> strukturen**

- er alle Pb atomene identiske?
- hvilke oksidasjonstrinn har Pb i Pb<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ?
- hva slags koordinasjon har de ulike Pb-spesies ?
- hva er årsaken til at koordinasjonspolyedret er sterkt deformert for Pb(II) ?