

Structuur van de vaste stof

 tuyaux.winak.be/index.php/Structuur_van_de_vaste_stof

Structuur van de vaste stof

Richting	<u>Fysica</u>
----------	---------------

Jaar	<u>2BFYS</u>
------	--------------

Bespreking

Komt nog.

Puntenverdeling

50% op het theorie-examen

50% op het oefeningensexamen (als er tijd voor is, hoort hier ook nog een evaluatie bij van een opdracht aan de elektronenmicroscopie)

Examenvragen

Academiejaar 2021-2022 1^{ste} zit

Prof. Joke Hadermann

Theorie

:

Deel 1

Hieronder staan verschillende beweringen. Elk van deze fragmenten bevat minstens één fout. Uw opdracht is om iedere fout te vinden en uit te leggen waarom het fout is (voor enkel het aanduiden van de fout krijg je nog geen punten).

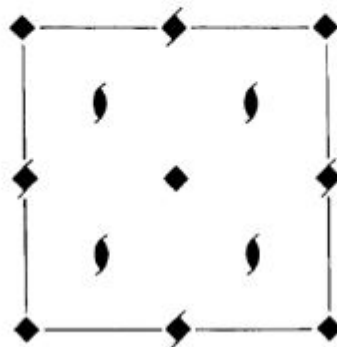
1. NaCl is een standaard type structuur, met zowel Na als Cl in een hexagonale coördinatie, met zes naaste naburen. In CsCl daarentegen hebben zowel Cs als Cl acht naaste naburen, wat erop wijst dat Cs een kleinere ionaire straal heeft.
2. Als een structuur kan beschreven worden met een A-gecenterde cel, bevat de cel 2 roosterpunten. Als er geen experimenteel bewijs is voor een verschil tussen de celparameters a en b, maar celparameter c duidelijk verschillend is, kan je best de hoogst mogelijke symmetrie aanhouden, wat betekent dat je zou kiezen voor een tetragonale eenheidscel voor deze structuur.
3. Als je ziet dat de 120 reflectie verschoven is naar grotere 2θ, kan je hieruit afleiden dat, ongeacht de symmetrie van de nieuwe eenheidscel, de afstand tussen atomen langs de [120] richting korter geworden is.
4. De zone-as [001], de rechte van de oorsprong van het reciproke rooster naar de 001 reflectie, de c-as en de c*-as staan allen altijd loodrecht op zowel de a-as als de b-as.
5. Wanneer dopering met een ander element er voor zorgt dat je een alternatie krijgt tussen twee elementen waar voorheen alle posities ingenomen werden door hetzelfde element, resulteert dit in een extra reflectie op 0 0 1/2. Om deze te kunnen indexeren moet de c-as worden gehalveerd.
6. In het kubische stelsel staat [111] loodrecht op {111}, in de orthorhombische en tetragonale stelsels staat [111] niet loodrecht op {111}.
7. Een structuur die twee spiegelvlakken bevat is orthorhombisch, aangezien de doorsnede van twee spiegelvlakken automatisch een 2-tallige as creëert, en dit de puntgroep mm2 impliceert, die behoort tot de orthorhombische kristalklasse.
8. Wanneer tijdens een fase-overgang van het materiaal met samenstelling AB tijdens een temperatuursverlaging, de symmetrie reduceert van de tetragonale ruimtengroep I4/m naar de orthorhombische P2, betekent dit dat we naar lagere symmetrie gaan, en meer specifiek zal de equivalentie tussen de posities $0, \frac{1}{2}, z$ en $0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ in I4/m

verloren gaan in P2. Bijgevolg kunnen A en B in P2 geordend voorkomen met A op $0, \frac{1}{2}, z$ en B op $0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$, terwijl dit niet mogelijk was in I4/m. Dit komt overeen met de verwachting dat er meer ordening zal zijn bij lagere temperatuur.

9. Wanneer bij afkoeling van een bepaald materiaal de symmetrie verlaagt van Cmmm naar C2/m en vervolgens het aanleggen van een elektrisch veld voor een verdere verlaging naar Cm zorgt, zal deze laatste translationengleiche fase-overgang van Index 4 maken dat het materiaal optisch actief wordt.
10. Wanneer je voor de structuur van NaCl de ruimtgroep behoudt, maar a groter maakt dan b en c, zal de 100 piek splitsen in een 100 piek en een 010/001 piek. De 100 piek zal een lagere intensiteit hebben en bij hogere 2 θ liggen.
11. Wanneer je uit een elektronendiffractiepatroon genomen van de [100] zone de reflectieconditie $k+l=2n$ afleidt, is het materiaal A-gecenterd.

Deel 2

Hieronder ziet u een bepaald ruimtgroepdiagram. Leid zoveel mogelijk informatie af uit dit ene ruimtgroepdiagram. Enkele voorbeelden zouden kunnen zijn welke ruimtgroep het is en welke symmetrie-elementen er langs welke oriëntaties zijn, wetmatigheden waar coördinaten van atomen aan zullen voldoen, de mogelijke fysische eigenschappen voor materialen met deze ruimtgroep, ...



Academiejaar 2019-2020 1^{ste} zit

Prof. Joke Hadermann

Theorie

Vragenreeks 1

In onderstaande stukken tekst werden er fouten of onnauwkeurigheden begaan die jullie met je huidige kennis kunnen traceren. Vind de fout. Geef nooit enkel de fout zonder uitleg (dit levert je geen punten op), maar leg duidelijk uit waarom dit fout is. Er kan méér dan één fout of onnauwkeurigheid zitten in eenzelfde fragment. De materialen zijn fictief. (Indices van groepen, reflectiecondities etc. worden niet als van buiten geleerd verondersteld, u kan die zelf afleiden zoals getoond in de theorieles.)

Vraag 1.1

AOAO is kubisch gestapeld met de octaëdrische gaten die gevuld zijn. BOBO, met atoom BB kleiner dan AA vult de tetraëdrische gaten. De puntgroep verandert niet in dit proces.

Vraag 1.2

$[111][111]$ staat loodrecht op $(111)(111)$ in een kubische structuur, dit geldt niet voor orthorhombische en tetragonale structuren.

Vraag 1.3

Bij het afkoelen van een kubische cel zien we geen faseovergang. Dit betekent dat de symmetrie niet verandert tot de laagste temperatuur dat we experimenteel kunnen bereiken.

Vraag 1.4

We gaan van de stof AO_2AO_2 naar AOAO door een zuurstofatoom te verwijderen. Dit stelt dan een klassengleiche subgroep voor van de originele stof, wat een 2^{de} orde faseovergang betekent.

Vraag 1.5

Door afkoeling gaat de stof van een tetragonale piramide naar een tetragonale bipiramide, wat een extra spiegelvlak introduceert.

Vraag 1.6

Een tetragonaal A-gecenterde cel van 2 atomen heeft geen experimenteel bewijs dat $a=b$. Toch kiezen we geen orthorhombische eenheidscel omdat dit een lagere symmetrie heeft.

Vraag 1.7

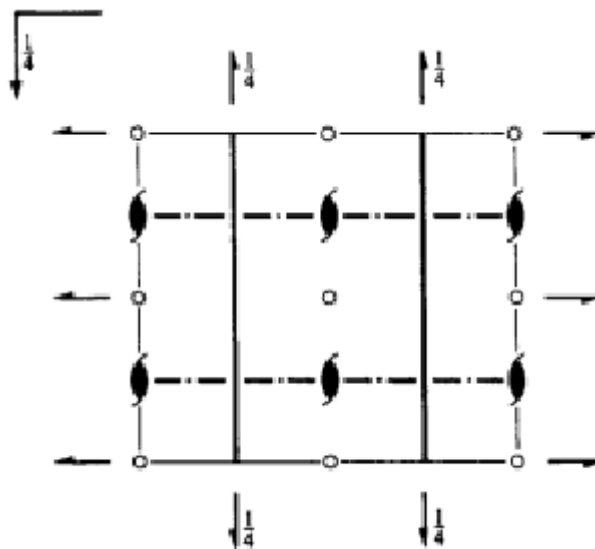
Afkoelen van een bepaald materiaal zorgt ervoor dat celparameters a en b dalen en c stijgt. Hierdoor splitst de kubische 100100 op in de tetragonale 100100 en 001001. Hierdoor zien we in het XRD-patroon een lagere piek op een hogere 2θ .

Vraag 1.8

Een materiaal heeft de reflectieconditie $k+l=2n$ of $k+l=2n$. Hieruit kunnen we concluderen dat het een A-gecenterde cel is.

Vragenreeks 2

Geef zoveel mogelijk informatie over volgende tekening.



(Bij deze vraag wordt de puntgeving geschaald op de gemiddelde score dat behaald wordt op deze vraag.)

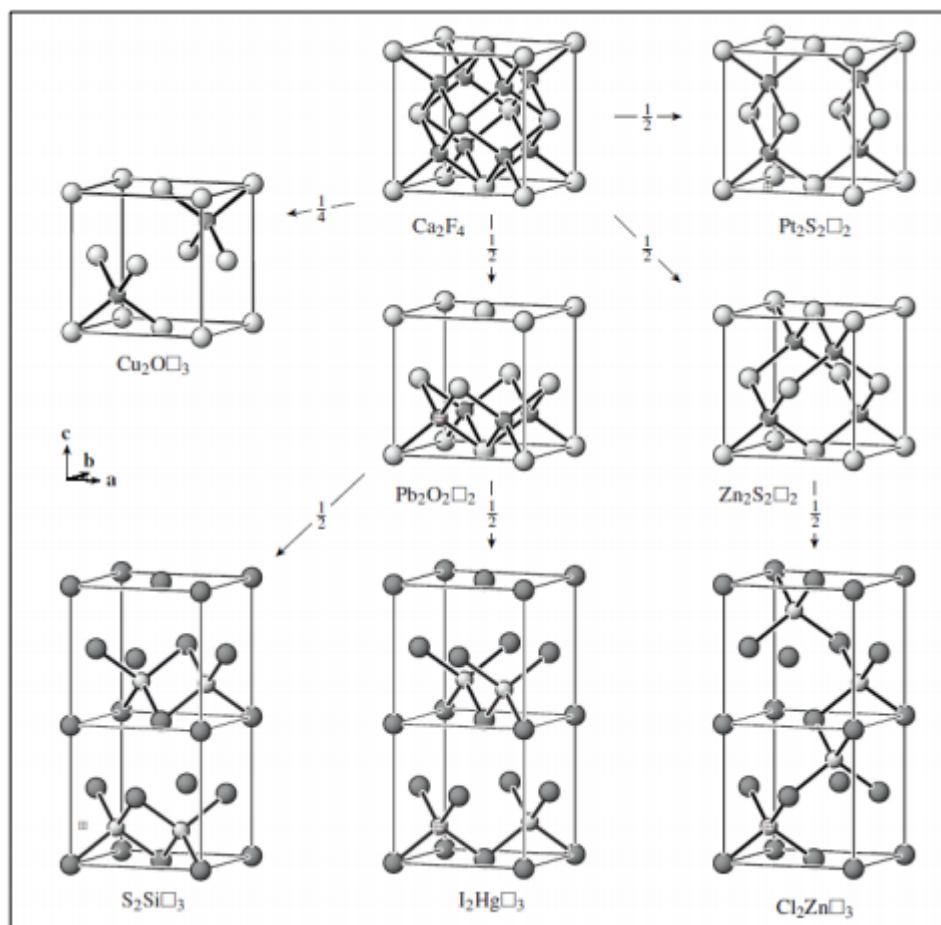
Oefeningen

Tip: heel het examen gaat over dezelfde twee structuren, alles hoort bij elkaar. Je kan bij de meeste vragen de oplossing vinden op verschillende wijzen, door informatie uit verschillende stappen op verschillende manieren te combineren. Het uiteindelijke resultaat moet dan ook consistent zijn overheen alle vragen.

De figuren en gegeven waarden

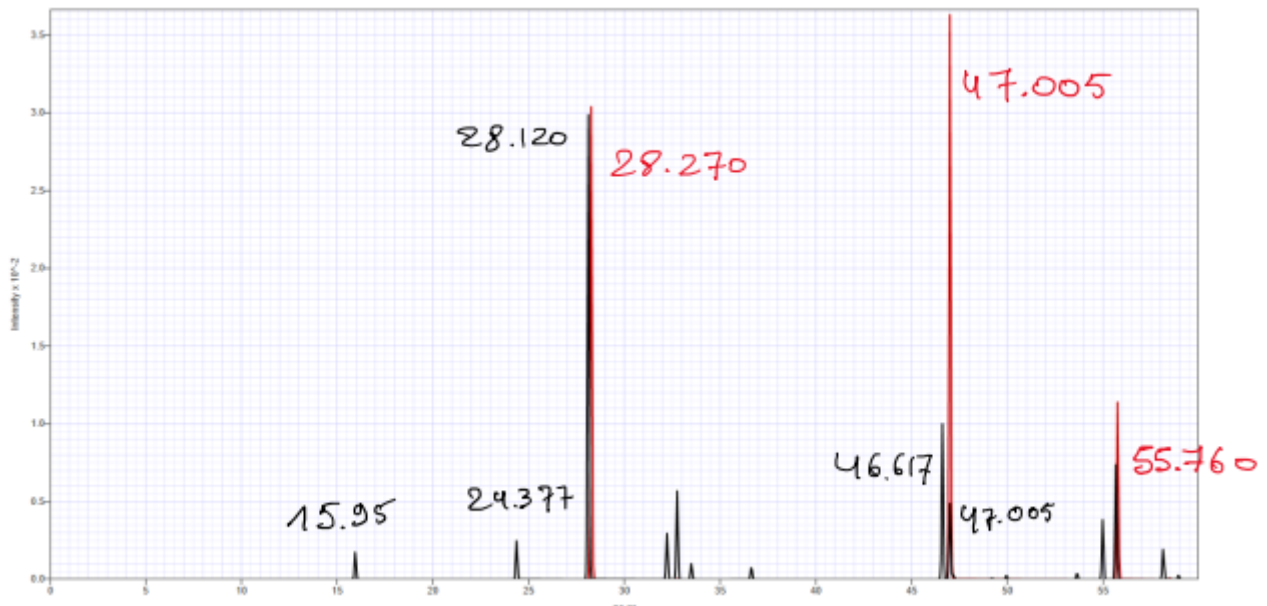
Het examen gaat over de structuren CaF_2CaF_2 en HgI_2HgI_2 . CaF_2CaF_2 heeft ruimtengroep $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$, de ruimtengroep van HgI_2HgI_2 is niet gegeven. Beide structuren kan u terugvinden op onderstaande figuur. De cel gegeven op de figuren is een mogelijke eenheidscel, maar niet noodzakelijk de conventionele eenheidscel (d.w.z. die aan alle eisen voldoet die we gezien hebben).

:



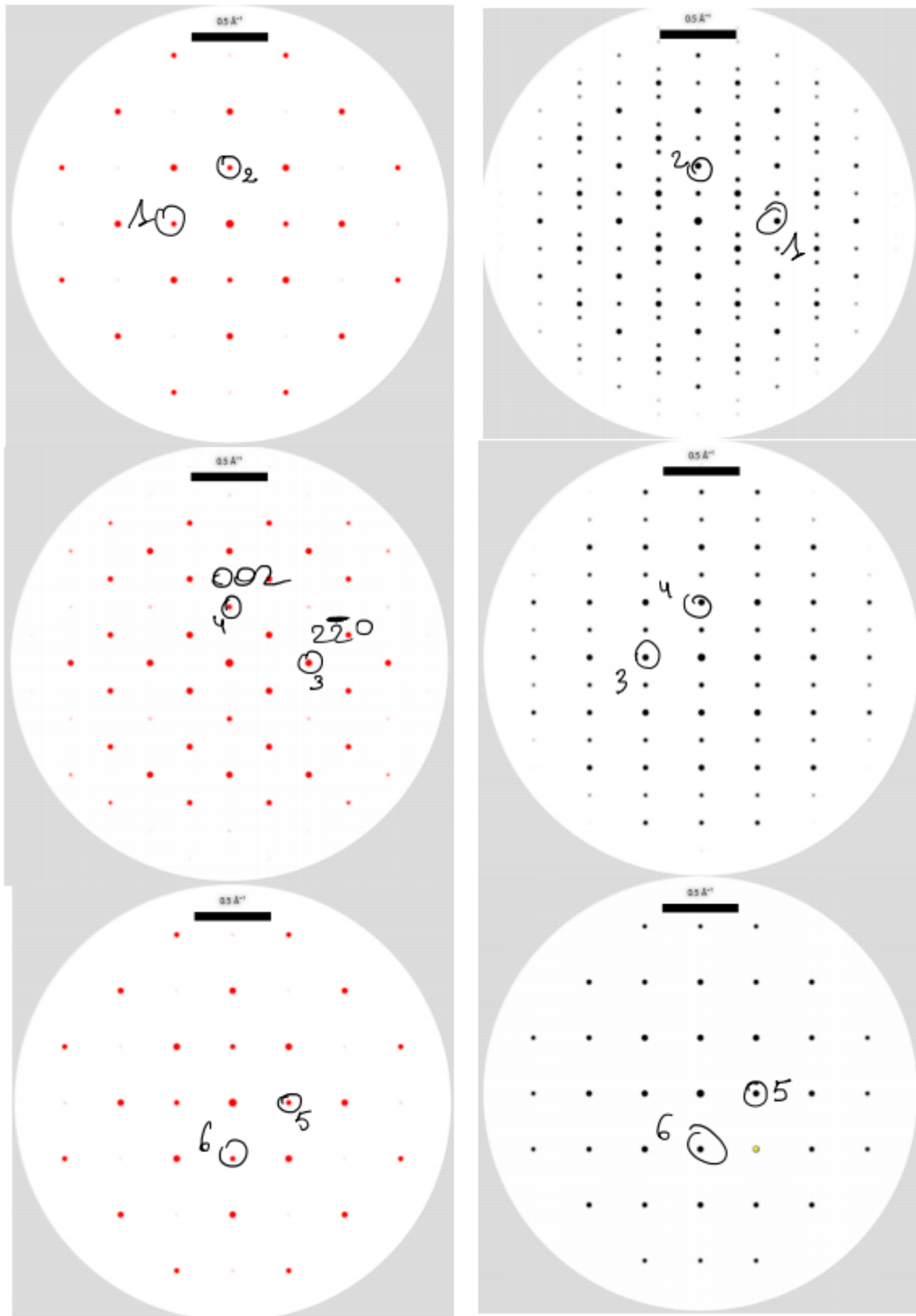
De volgende figuur bevat twee X-stralen poederdiffractiepatronen. De rode curve is het patroon van CaF_2CaF_2 , de zwarte curve is het patroon van HgI_2HgI_2 . Beide patronen werden genomen onder dezelfde omstandigheden, met als straling $\text{CuK}\alpha$, $\lambda = 1.54\text{\AA}$. De relevante exacte hoeken vind je op het antwoordenblad, het is voldoende dat je hier op de figuur het interval kan afschatten.

:



Hieronder zie je de gesimuleerde elektronendiffractiepatronen van beide structuren. De linkse set patronen is van CaF_2CaF_2 , in volgorde van boven naar onder de zones $[100]$, $[100]$, $[110][110]$ en $[001][001]$. De rechtse set is van HgI_2HgI_2 , ook van boven naar onder $[010][010]$, $[110][110]$ en $[001][001]$. Alle patronen hebben dezelfde schaal, de balk komt overeen met $0.5\text{\AA}-10.5\text{\AA}^{-1}$

:



Vragenlijst

- Stel de transformatiematrix op van CaF_2CaF_2 naar HgI_2HgI_2 .

- CaF_2CaF_2 heeft ruimtengroep $\text{Fm}\bar{3}\text{mFm}\bar{3}\text{m}$, wat is de ruimtengroep van HgI_2HgI_2 ? Een deel van het symbool is al gegeven op het antwoordenblad, vul de ontbrekende symmetrie-elementen nog aan.

..n21.2c

..n21.2c

- Wat is de kristalklasse van HgI_2HgI_2 ?
- Teken het stereogram van de Laue groep waartoe deze ruimtengroep behoort.
- Wat zijn de Wyckoffposities van het CaCa atoom en het FF atoom?

Voor het indexeren van de X-stralenpatronen heb je niet veel rekenwerk nodig als je goed begrijpt hoe alles in elkaar past, de elektronendiffractiepatronen kan je zelfs helemaal zonder rekenen indexeren bij goed begrip. De schaalverdeling is er toch bijgegeven zodat je het gewoon kan uitrekenen als plan B, indien je de connecties niet ziet

- Indexeer het X-stralendiffractiepatroon van CaF_2CaF_2 .
- Indexeer het X-stralendiffractiepatroon van HgI_2HgI_2 . Alle nodige data is wel degelijk gegeven op het patroon, of af te leiden uit de andere figuren en je antwoorden op de andere vragen.
- Indexeer de elektronendiffractiepatronen van CaF_2CaF_2 .
- Indexeer de elektronendiffractiepatronen van HgI_2HgI_2 .
- Duid op de figuren van CaF_2CaF_2 het vlak (200)(200) en de richting $[110][110]$ aan, en op de figuur van HgI_2HgI_2 het vlak (110)(110) en de richting $[010][010]$.
- Wat zijn de lengtes van de basisvectoren van CaF_2CaF_2 en HgI_2HgI_2 ?
- Wat zijn de reflectiecondities voor CaF_2CaF_2 en HgI_2HgI_2 ?

Academiejaar 2018-2019 1^{ste} zit

Prof. Joke Hadermann

Theorie

Vragenreeks 1

In onderstaande stukken tekst werden er fouten of onnauwkeurigheden begaan die jullie met je huidige kennis kunnen traceren. Vind de fout. Geef nooit enkel de fout zonder uitleg (dit levert je geen punten op), maar leg duidelijk uit waarom dit fout is. Er kan méér dan één fout of onnauwkeurigheid zitten in eenzelfde fragment. De materialen zijn fictief. (Indices van groepen, reflectiecondities etc. worden niet als van buiten geleerd verondersteld, u kan die zelf afleiden zoals getoond in de theorieles.)

Vraag 1.1

In NaClNaCl hebben NaNa en ClCl een hexagonale coördinatie met zes burens zoals in overeenkomst met de relatieve stralen. In CsClCsCl hebben CsCs en ClCl acht burens. Hieruit volgt dat CsCs een kleinere straal heeft dan NaNa.

Vraag 1.2

Voor een eenheidscel geldt dat $a=b \neq c$, dus de cel is tetragonaal. De cel kan dus niet kubisch zijn.

Vraag 1.3

Een inwendig gecenterde cel heeft atomen op 0,0,0,0,0 en 12,12,12,12,12.

Vraag 1.4

4mm4mm is een puntgroep. Voor polen niet op de spiegelvlakken heeft men een vorm met achttallige symmetrie, voor polen niet op de evenaar heeft men een pyramide en anders heeft men een prisma.

Vraag 1.5

AO₂AO₂ is van het fluoriettype. AOAO heeft een zinkblendestructuur en heeft dus als ruimtengroep een klassengelijke subgroep van de ruimtengroep van fluoriet. Dit is in overeenkomst met een continue faseovergang.

Vraag 1.6

Gegeven een niet-ferroëlektrisch materiaal. Het materiaal kan wel ferroëlektrisch worden door het op te warmen, omdat de symmetrie dan verhoogt. Het diffractiepatroon heeft dan

een kleiner aantal reflecties want meer reflecties zijn dan symmetrisch equivalent en zullen dus overlappen.

Vraag 1.7

Tetragonale $A2B3X4A2B3X4$ heeft reflectiecondities $h0l:k+l=2n$ en $okl:k=2n$. $a=b < c$. In het XRD-patroon is er een splitsing van de kubische 100100 piek in 100100 en 001001, tetragonaal. De piek 100100 is tweemaal hoger dan de piek 001001.

Vraag 1.8

Het XRD-patroon van $RbClRbCl$ en $NaClNaCl$ zijn volledig hetzelfde op een kleine verschuiving na want ze hebben dezelfde ruimtengroep en gelijkaardige celparameters. De pieken voor $RbClRbCl$ zijn lichtjes verschoven naar hogere 2θ -waarden.

Vraag 1.9

Beschouw de groep 4^-2m4^-2m . Indien men een elektrisch veld aanlegt langs de c -as, dan wordt het materiaal optisch actief.

Vragenreeks 2

Je krijgt enkele fragmenten uit de gegevens over een bepaalde ruimtengroep (zoals in de appendix). Je moet dan aan de hand van deze gegevens zoveel mogelijk gegevens van die ruimtengroep afleiden.

Je mag tabel op p.44 met de boomstructuur van puntgroepen gebruiken.

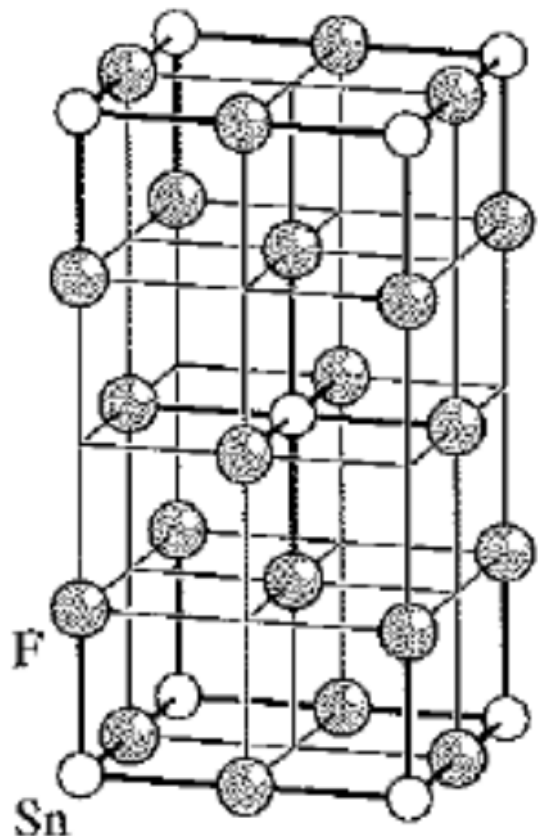
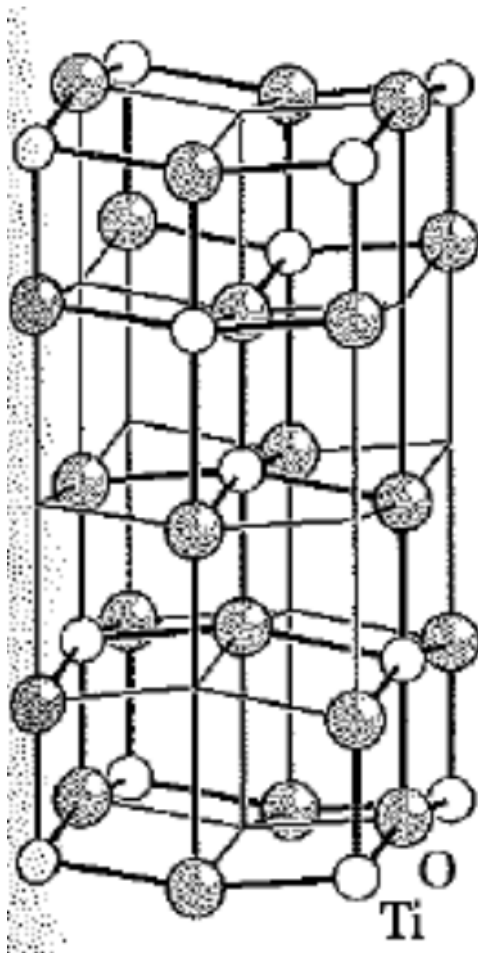
Academiejaar 2014-2015 1^{ste} zit

1. Kan je verklaren waarom er in een metallische structuur maar beperkte aantal mogelijkheden zijn van stapeling zoals bvb HCP en CCP? Dit is anders zo in ionische structuren waar meerdere mogelijkheden toepasselijk zijn, waarom?
2. De hkl -waarden van een bepaald vlak zijn (103), waar snijdt dit vlak de assen abc ?
3. De roosterparameters abc zijn gelijk, welke kristalklasse(n) zijn er mogelijk en waarom?

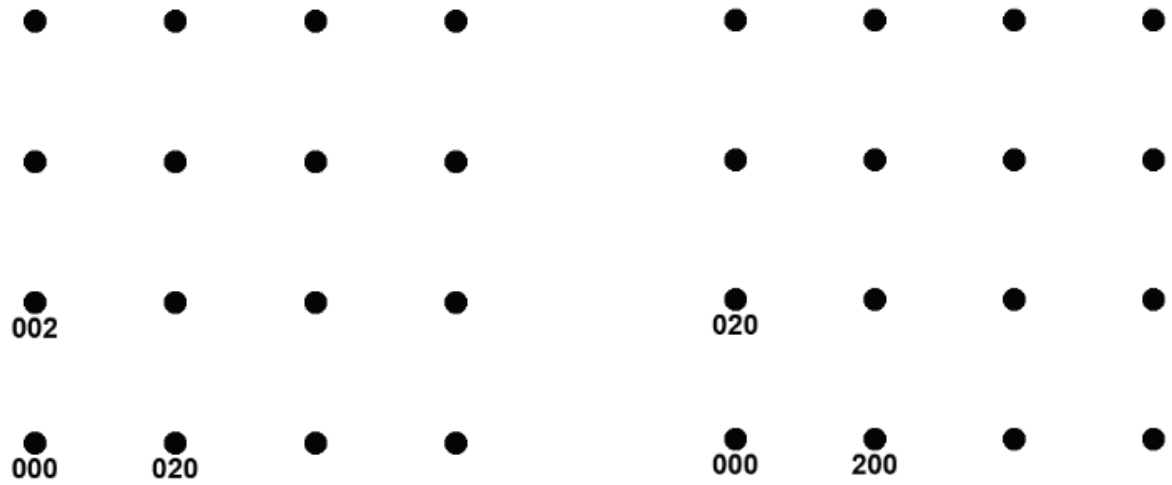
4. Je hebt de oplossing van een bepaalde structuur gevonden, de antwoorden die je denkt mogelijk te zijn, zijn een tetragonale A-gecenterde eenheidscel en een orthorombisch B-gecenterde eenheidscel met 2 keer het volume. Welke is de juiste? Verklaar.
5. Verklaar de woorden "punt" en "groep" in de term puntgroep.
6. Waarom zijn er een beperkt aantal puntgroepen? Niet de hele afleiding maar wel de redenen waarom dit zo is.
7. Teken de stereogram van de puntgroep $4/m$. Welke vormen zijn er mogelijk die uit deze puntgroep voortkomen (naam gevraagd)? Teken tevens de stereogrammen van elks van deze vormen.
8. Waarom is het belangrijk om rekening te houden met de externe factoren bij het bekijken van een puntgroep van een kristal?
9. Je hebt een I-gecenterde eenheidscel, vervang het centraal gelegen atoom door een andere. Wat zijn de nieuwe reflectiecondities?
10. Verklaar waarom een schroefas met een willekeurige translate voldoet aan m/X (=bewijs van schroefas)?
11. Verklaar waarom het niet mogelijk is om een a-glijvlak te hebben in een orthorombische structuur loodrecht op de a-as?
12. Je hebt de reflectie afkomstig van het (100) vlak, als plots de intervlaksafstand wordt verlaagd, wat zal er dan gebeuren met de hoek waaronder die reflectie valt? Verklaar.
13. Hoe staan de assen a^*b^* en c^* ten opzichte van de assen abc ? Wanneer zijn ze evenwijdig?

1. NaCl is u welbekend en heeft ruimtegroep $F4/m\bar{3}2/m$ (zie ook tastbaar model beschikbaar in het examen). Van NaCl worden veel andere structuren afgeleid via substituties en vervormingen. Voorbeelden zijn gegeven op Figuur 1: rechts SnF_4 en links TiO_2 in anatase-vorm (in de cursus hebben we TiO_2 in rutielvorm gezien). Het reciproke rooster op het volgende blad is het reciproke rooster van NaCl, getoond door middel van de $[010]$ en $[001]$ zones. Tweemaal onderaan hetzelfde omdat je het tweemaal nodig zult hebben.

1. Teken de reciproke roosterpunten van SnF_4 bij op de bovenste twee zones van NaCl, waarbij je een kruisje gebruikt als het roosterpunt extinct zal zijn en een cirkel rond het punt als het niet extinct zal zijn. (Verwaarloos kleine verschillen in schaal.)
2. Wat is de puntgroep van SnF_4 ?
3. Wat is de ruimtegroep van SnF_4 ?
4. Welke symmetrie-elementen die wél aanwezig zijn in SnF_4 , zijn verdwenen in TiO_2 ? Je mag je beperken tot symmetrie-elementen die expliciet in het ruimtegroepsymbool van SnF_4 staan (volledige vorm, niet afgekorte vorm). Welke elementen zijn er in de plaats gekomen van deze verdwenen symmetrie-elementen?
5. Teken de reciproke roosterpunten van anatase bij op de onderste twee zones van NaCl, waarbij je een kruisje gebruikt als het roosterpunt extinct zal zijn en een cirkel rond het punt als het niet extinct zal zijn. (Verwaarloos kleine verschillen in schaal.)

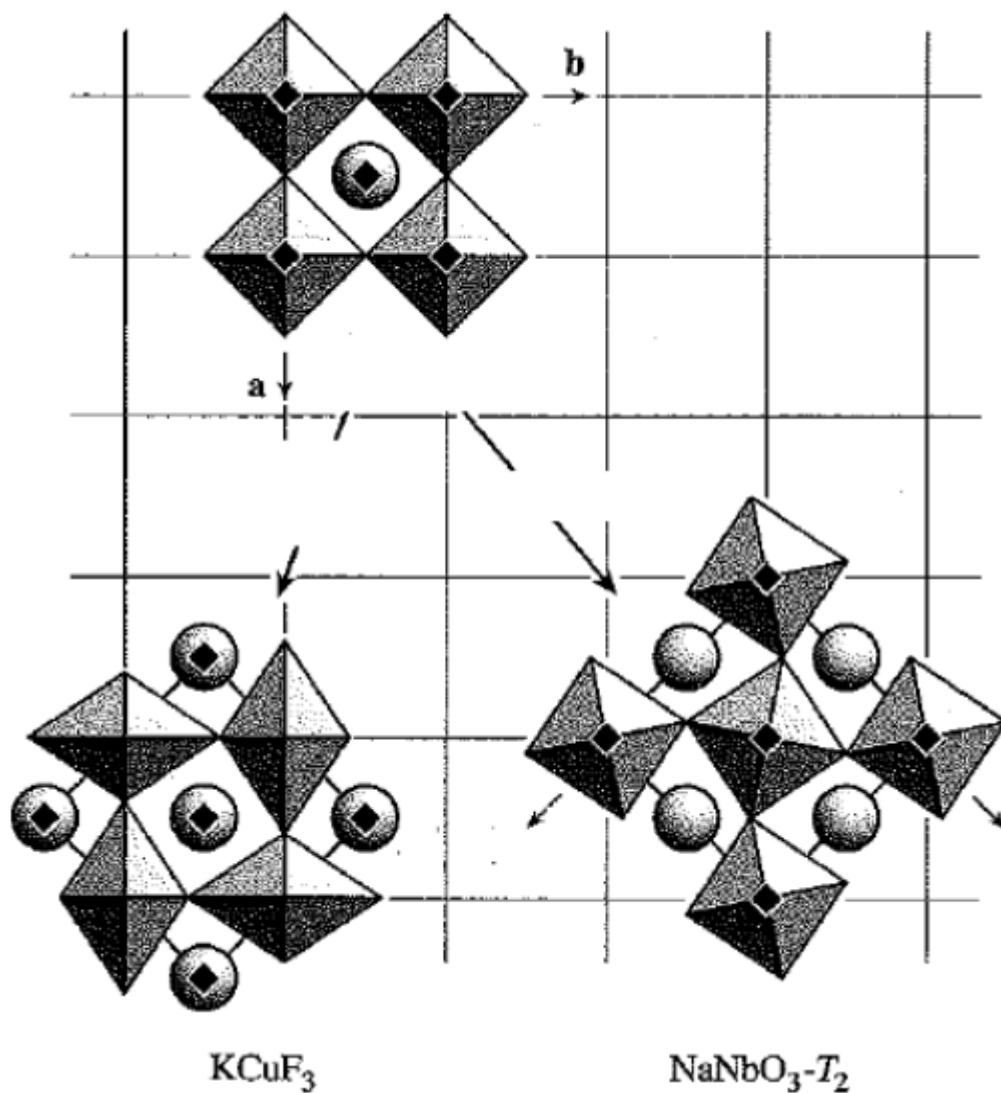


Links TiO_2 , rechts SnF_4



2. Op Figuur 2 zie je 3 structuren die duidelijk op elkaar trekken. De eerste is perovskiet, die we in de les gezien hebben. De tweede is KCuF_3 , waarbij de octaëders allen uitgerokken zijn i.p.v. regelmatig, en de derde figuur is één van de vele fasen van NaNbO_3 , fase T, waarbij de octaëders wél regelmatig zijn, maar geroteerd t.o.v. hun positie in de ideale perovskiet die erboven staat. Beide afgeleide vormen hebben ruimtengroep $P4/\text{mbm}$. De posities van de 4-tallige assen zijn aangeduid op de figuur. Er is telkens exact 1 eenheidscel getekend. De schaal van de drie tekeningen is gelijk.

1. Geef de transformatiematrix van perovskiet naar KCuF_3 .
2. Geef de transformatiematrix van perovskiet naar NaNbO_3 -T.



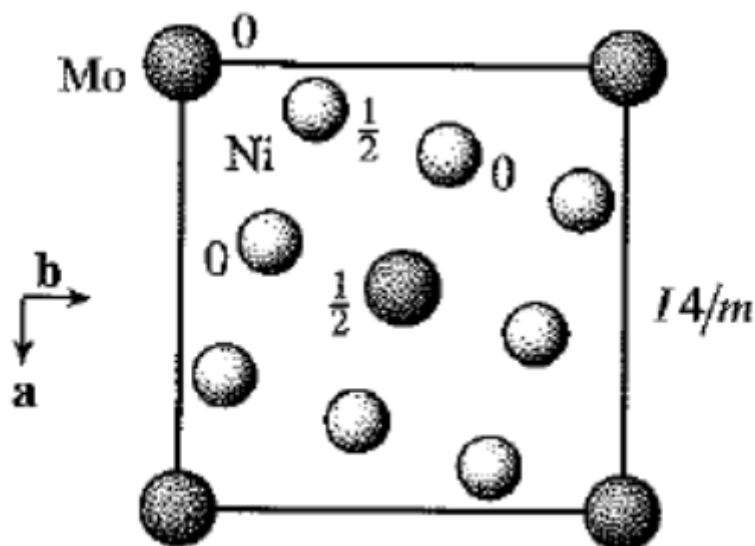
Bovenaan perovskiet, onderaan links KCuF_3 , onderaan rechts NaNbO_3 .

3. Op Figuur 3b zie je twee elektronendiffractiepatronen. Deze zijn genomen van MoNi_4 . MoNi_4 neemt een verschillende structuur aan naargelang hoe het gemaakt is: wanneer het zeer snel afgekoeld wordt vanaf 1200°C , kristalliseert het in een kubische structuur met een willekeurige verdeling van Ni en Mo over de aanwezige atomaire posities. De ruimtgroep is dan $F4/m\bar{3}2/m$, met celparameter $a=3.61 \text{ \AA}$. Wordt het dan langdurig verwarmd tot 840°C , dan ordenen de Ni en Mo atomen zich over die posities zoals ook getoond op figuur 3a. De ruimtgroep wordt dan $I4/m$, met celparameters $a=5.72 \text{ \AA}$ en $c=3.56 \text{ \AA}$. De coördinaten en celparameters voor beide vormen zijn ook nog eens gegeven op Figuur 3a.

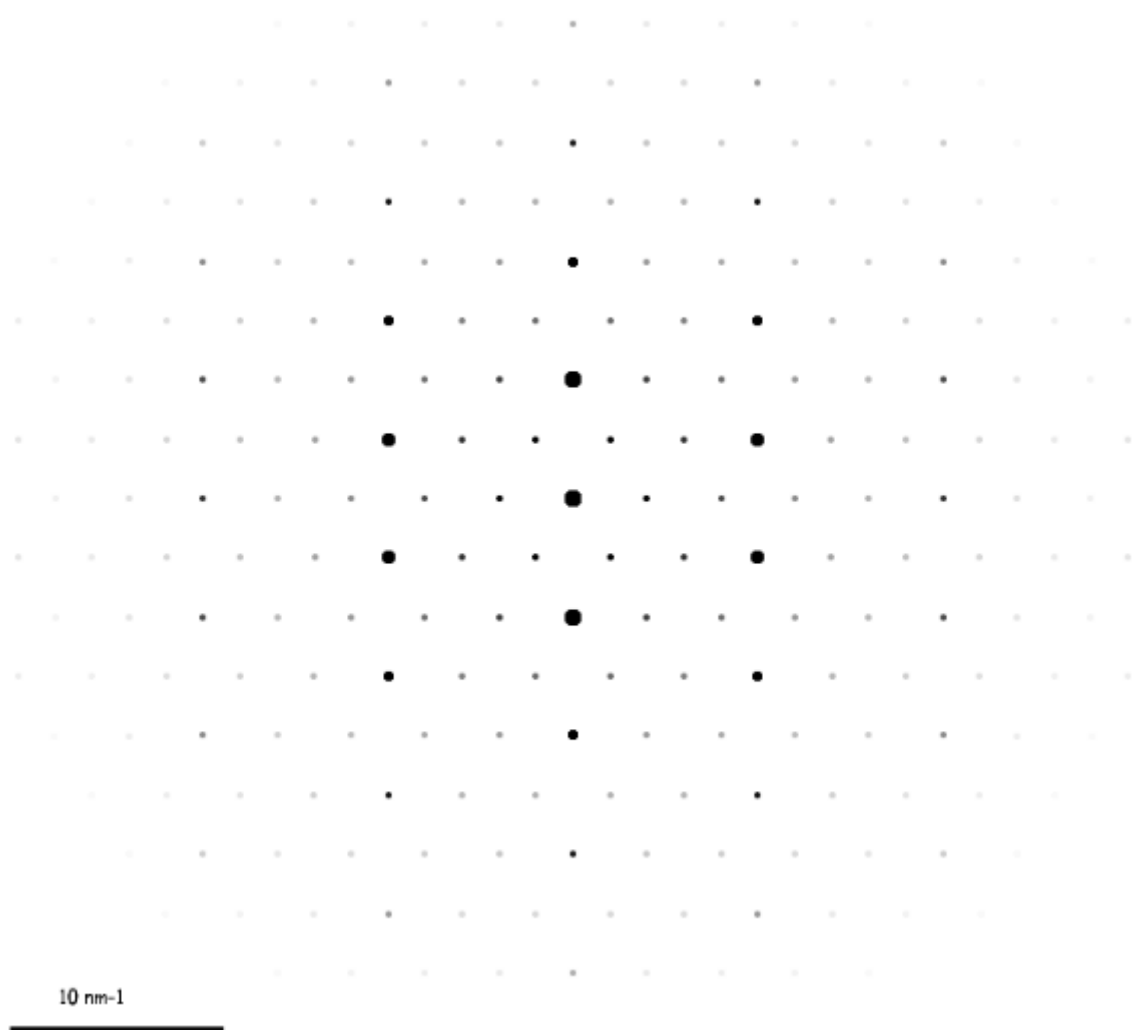
1. Van welke van de twee vormen werden deze elektronendiffractiepatronen genomen, geordende of niet-geordende fase?
2. Indexeer de patronen in deze fase (zet indices bij minstens 4 verschillende reflecties die niet op één lijn liggen).
3. Zet op elk elektronendiffractiepatroon wat de zone is van het patroon.

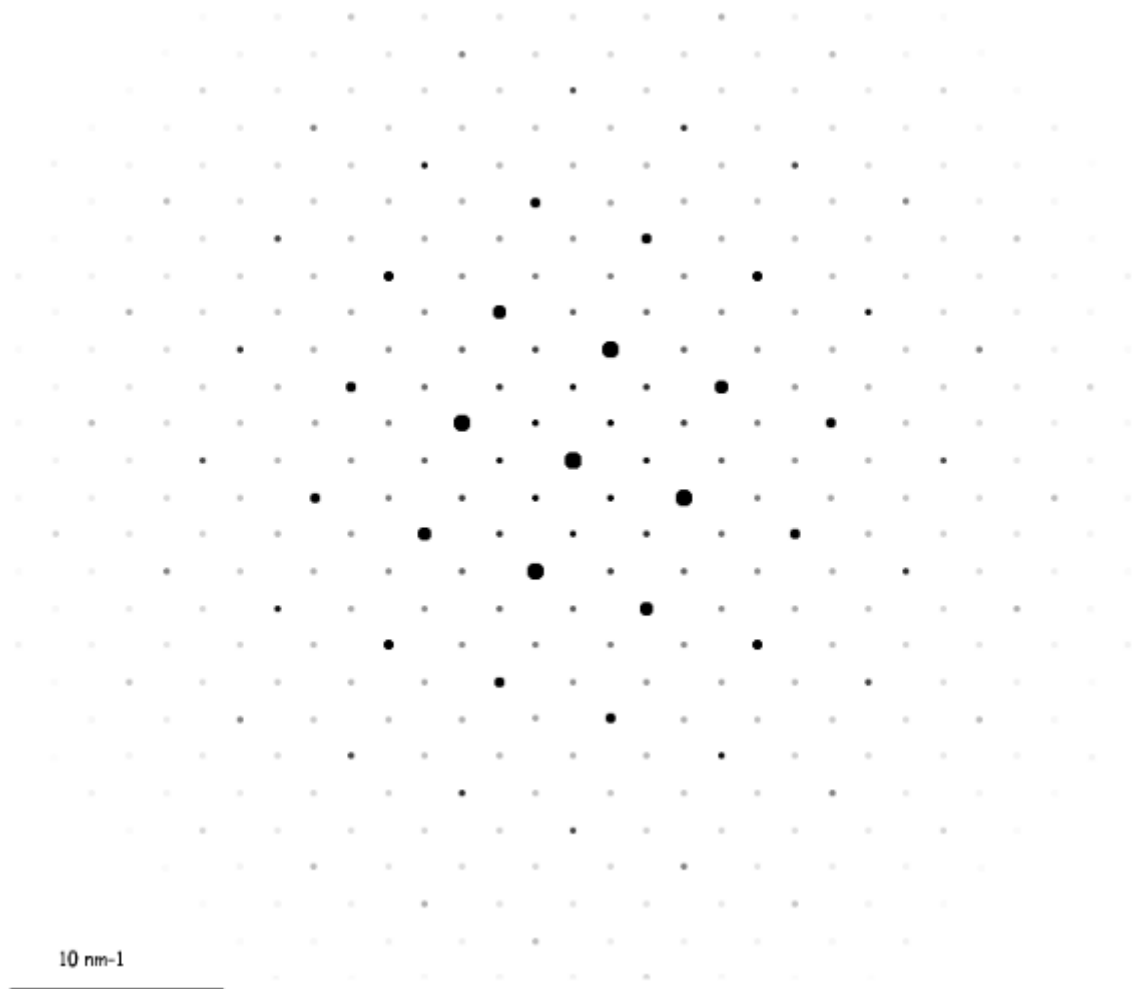
Hint: combineer je kennis over het indexeren van elektronendiffractiepatronen met de mogelijkheden van transformatiematrices om te vermijden dat je veel moet rekenen.

MoNi ₄ , Cu type, $Fm\bar{3}m$				ordered MoNi ₄ , $I4/m$					
$a = 361.2 \text{ pm}$				$a = 572.0 \text{ pm}, c = 356.4 \text{ pm}$					
	x	y	z		x	y	z		
Mo, Ni	$4a$	0	0	0	Mo	$2a$	0	0	0
					Ni	$8h$	0.400	0.200	0



Figuur 3a. De structuur van MoNi_4 in tetragonale vorm, plus de coördinaten en ruimtgroepen voor beide vormen. Het getal naast een atoom geeft de z-coördinaat.





Figuur 3b. Elektronendiffractiepatronen van één van de twee vormen van MoNi_4 .

4. Op figuur 4 zie je het XRD-patroon van Pyriet, d.i. FeS_2 . Dit heeft ruimtegroep P21a3 .

De bladzijden uit de Internationale Tabellen der Kristallografie voor deze ruimtegroep vind je mee bij deze opgave, ter informatie.

14. Men heeft een kubische cel waarbij men het tweede atoom op de b-as iets hoger legt en het derde atoom iets lager.
1. Wat zijn nu de celparameters in functie van de oude?
 2. Wat is de lengte van de reciproke?
 3. Wat is het effect op het XRD patroon?
 4. Wat is het effect op het ED in de richting $[100]$ +teken
 5. Wat is het effect op het ED in de richting $[010]$ +teken
15. Kan men op een XRD patroon aflezen of er een inversiecentrum aanwezig is? Is dit inversiecentrum belangrijk?

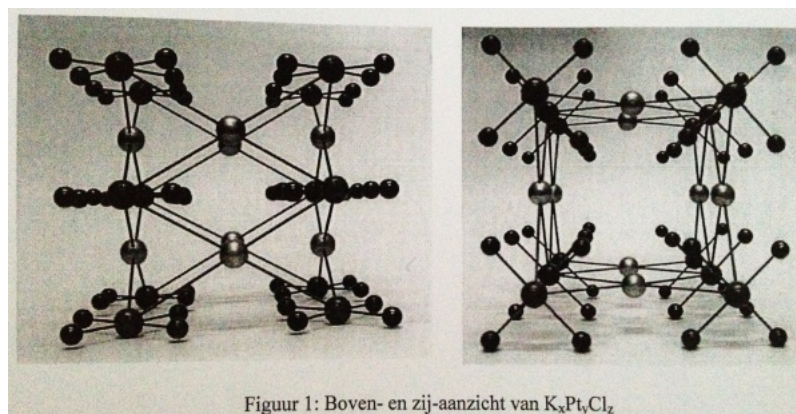
Academiejaar 2010-2011 1^{ste} zit

1. Kubische structuren komen veel vaker voor dan bv. tetragonale. Waarom? (minstens 2 redenen geven)
2. Stel de transformatiematrix van de viertallige rotatie-inversie op.
3. Waarom is de puntgroep $22m$ niet mogelijk?
4. Hoe wordt de volgorde van de symbolen van een puntgroep bepaald?
5. Men heeft een stof waarin de brekingsindex in alle richtingen dezelfde is. Tot welke kristalklasse behoort deze?
6. Men heeft een natuurlijk gegroeid kristal dat een perfecte kubus is. Is dit een algemene, speciale of begrensde vorm en waarom? (meerdere opties mogelijk)
7. Op de achterkant van het opgaveblad was een uittreksel uit de tabellen gegeven, over P_{nma} . Hierin waren enkele dingen gecensureerd.
 1. Wyckovvpositie van punt met coördinaten ...
 2. Is 101 zichtbaar?
 3. Wat is de orde van de puntgroep?
 4. Schroefas langs a : welke coördinaten?
8. Ionen vervangen in een structuur kan ertoe leiden dat de intervlaksafstand vergroot. Welk effect heeft dit op de reflectie 101 ?
9. Een structuur gaat tijdens het afkoelen over van kubisch naar tetragonaal. Welk effect heeft dit op het XRD-spectrum?
10. Rood licht met golflengte 700 nm , wat is de kleinste intervlaksafstand die je daarmee kan "zien"?

Academiejaar 2009-2010 2^{de} zit

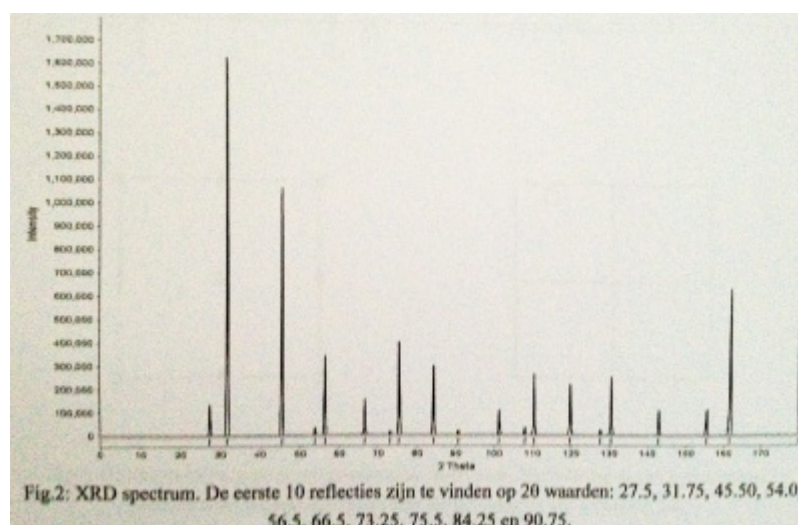
1. Figuur 1 toont het kristalrooster van $K_xPt_yCl_z$. Op het ruimterooster stellen de grijze bollen de kaliumatomen voor, de oranje platinum en de rode chloor. Antwoord op alle vragen zo volledig mogelijk om uiteindelijk één consistent antwoord te verkrijgen.

1. Geef van dit rooster de eenheidscel (teken deze)
2. Geef de coördinaten van alle atomen in de eenheidscel.
3. Geef de samenstelling van de eenheidscel.
4. Wat is de basis en wat zijn de coördinaten van deze atomen?
5. Geef de belangrijkste symmetrie-elementen (waar kan ik deze vinden?) en wat is de puntgroep van deze structuur?
6. Geef het Bravaisrooster van de eenheidscel die je hebt gekozen.
7. Wat is de ruimtgroep?
8. Wat is de Wyckoffpositie en de multipliciteit van de atomen die je hebt opgegeven als basis?
9. Welke reflectievoorwaarden heb je voor deze structuur?
10. Teken het reciproke roostervlak gezien langs de c^* -as snijdt ($l=0$). Duidt de reflecties aan met een "o", extincties met een "x". Indiceer al deze punten.

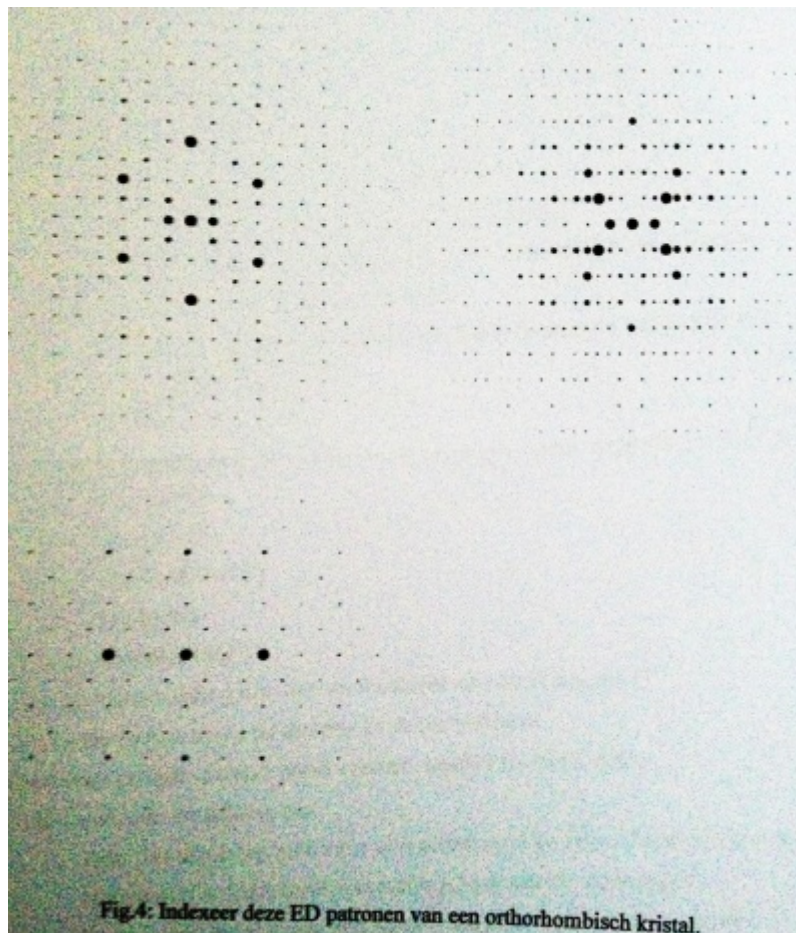


Figuur 1: Boven- en zij-aanzicht van $K_xPt_yCl_z$

2. Het XRD-patroon van een kubisch kristal is weergegeven in fig.2. Indexeer dit, bepaal de centering en de roosterparameters (6) van dit kristal.

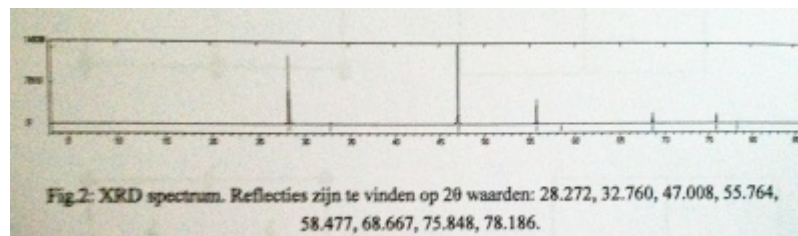


3. Vervolledig de projecties in figuur 3 en geef alle coördinaten van de gegenereerde atomen. Geef het kristalsysteem, Bravaisrooster, puntgroep en de ruimtengroep. Toon ook wat elk symbool van de ruimtengroep betekent. Fout bij het aanmaken van de miniatuurafbeelding: Bestand is zoek
4. Figuur 4 geeft de drie hoofdzones van een orthorhombisch kristal. De grootste parameter van dit kristal bedraagt $11,08 \text{ \AA}$. Indexeer deze patronen, bereken de andere parameters, zoek de reflectiecondities (extra gegeven: $hkl: /$), het extinctie-symbool en mogelijke ruimtengroepen.



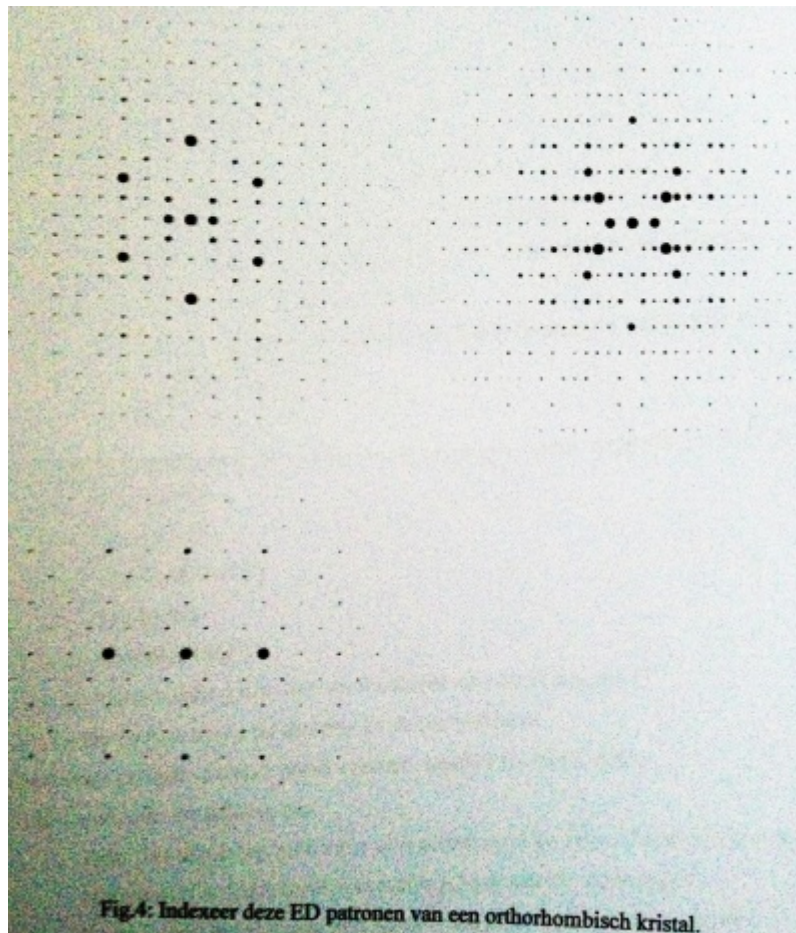
Academiejaar 2009-2010 1^{ste} zit

1. Figuur 1 toont het kristalrooster van Ca_xF_y . Op het ruimterooster stellen de grijze bollen de calciumatomen voor en de rode fluor. Antwoord op alle vragen zo volledig mogelijk om uiteindelijk één consistent antwoord te verkrijgen.
 1. Geef van dit rooster de eenheidscel (teken deze).
 2. Geef de coördinaten van alle atomen in de eenheidscel.
 3. Geef de samenstelling van de eenheidscel.
 4. Wat is de basis en wat zijn de coördinaten van deze atomen?
 5. Geef de belangrijkste symmetrie-elementen (waar kan ik deze vinden?) en wat is de puntgroep van deze structuur?
 6. Geef het Bravaisrooster van de eenheidscel die je hebt gekozen.
 7. Wat is de ruimtengroep?
 8. Wat is de Wyckoffpositie en de multipliciteit van de atomen die je hebt opgegeven als basis?
 9. Schrijf de uitdrukking voor de structuurfactor in een zo eenvoudig mogelijke vorm.
 10. Welke reflectievoorwaarden kan je uit de structuurfactor halen voor deze structuur?
 11. Welke centering komt met deze reflectiewaarden overeen?
 12. Teken het reciproke roostervlak gezien langs de c^* -as snijdt ($l=0$)? Duidt de reflecties aan met een "o", extincties met een "x". Indiceer al deze punten.
 13. Indexeer het X-stralen diffractiepatroon van dit materiaal (fig. 2)
 14. Welke reflectievoorwaarden kan je afleiden uit het X-stralenpatroon? (Maak tabel)
 15. Wat zijn de roosterparameters van dit materiaal?
- Fout bij het aanmaken van de miniatuurafbeelding: Bestand is zoek



2. Vervolledig de projecties in figuur 3 en geef alle coördinaten van de gegenereerde atomen. Geef het kristalsysteem, Bravaisrooster, puntgroep en de ruimtengroep. Toon ook wat elk symbool van de ruimtengroep betekent.
- Fout bij het aanmaken van de miniatuurafbeelding: Bestand is zoek

3. Figuur 4 geef de drie hoofdzones van een orthorhombisch kristal. De grootste parameter van dit kristal bedraagt $11,08 \text{ \AA}$. Indexeer deze patronen, bereken de andere parameters, zoek de reflectiecondities (extra gegeven: $hkl: /$), het extinctie-symbool en mogelijke ruimtegroepen.



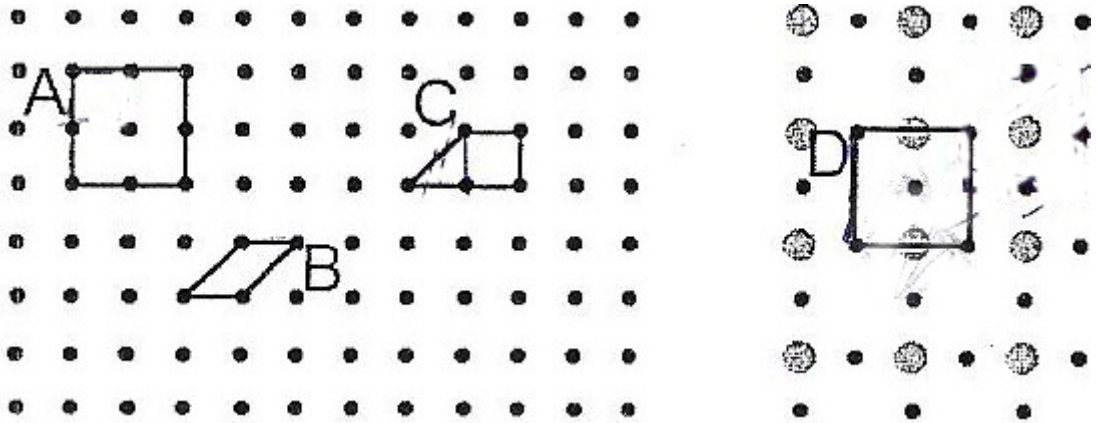
Academiejaar 2007-2008 1^{ste} zit

Theorie

Prof. Dr. J. Hadermann

1. Op onderstaande tekening, beantwoord voor A tot D telkens:

1. Is dit een geldige eenheidscel? Ja/neen.
2. Zo ja: waarom? Zo neen: waarom niet?
3. Zo ja: is het de best mogelijke of kan er nog een betere eenheidscel gekozen worden en hoe/waarom/waarom niet?



2.

1. Kan 5-tallige rotatie-symmetrie voorkomen in een kristal? Waarom wel/niet? 1 sluitende uitleg is voldoende.
2. Zou voor moleculen dezelfde redenering opgaan? Waarom wel/niet?
3. $4/mmm$ en $4mm$: slechts 1 van deze twee is een correcte verkorte schrijfwijze voor de puntgroep $4/m\ 2/m\ 2/m$. Welke en waarom die wel en de andere niet?
4. Wat is het verschil tussen 23 en 32 . leg ook hoe je dit kan zien zonder dat je dit verschil van buiten had hoeven te leren.
5. $23^-3^-3^-3^-$ is gelijk aan een andere puntgroep die we wel behouden hebben al een van de 32 puntgroepen. Welke en leg stap voor stap uit hoe je tot die equivalentie komt.
6.
 1. Wat is het verband tussen een 4^-4^- -as en een 2-as? Voeg een tekening toe.
 2. Wat is het verband tussen een 422 -as en een 2-as? Voeg een tekening toe.
7. Waarom staat er tussen de 14 Bravaisroosters geen:
 1. kubisch A?
 2. orthorhombisch A?
8. Leg uit waarom het geven van één enkele brekingsindex in optica voor een kristallijn materiaal een benadering is in veel gevallen.

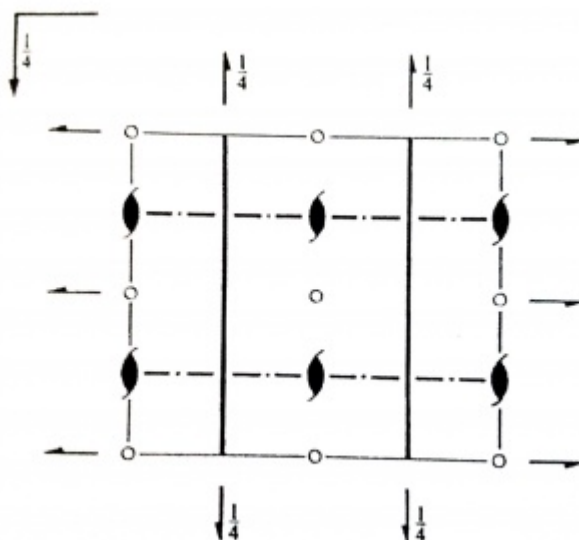
9. Leg uit wat het verband is tussen symmetrie en het feit dat vaak bepaalde fysische eigenschappen slechts optreden in een materiaal afkoeling of opwarming voorbij een bepaalde kritische temperatuur.
10. Wanneer je een diffractiepatroon (X-stralen zowel als elektronendiffractie) indexeert, zal je vaak merken dat verschillende reflecties op systematische wijze ontbreken.
1. Wat is de oorzaak hiervan?
 2. Hoe kan je dit in je voordeel gebruiken om iets te weten te komen over de structuur?
11. Waarom kan je uit een X-stralendiffractiepatroon niet het onderscheid maken tussen bijvoorbeeld de puntgroepen $2, m$ en $2/m$?
12. Leg uit op welke manier matrixkristallografie nuttig is bij de studie van nieuwe materialen
13. Wat is het verband tussen de grootte van het centrale ion in een polyëder en het coördinaatgetal van dat ion?
14. Wat is het verschil tussen een speciale pool, een speciale positie en een speciale vorm? Is er een verband tussen de 3? Of is er geen verschil?
15. Zijn er voor verschillende kristallen gegroeid van eenzelfde materiaal
1. altijd evenveel polen? Waarom?
 2. vaste plaatsen voor de polen met bepaalde indices? Waarom?

Academiejaar 2005-2006 2^{de} zit

- Deze vraag behandelt het 3D model. U hebt hiervan ook foto's gekregen (niet bijgehouden). Verwijs naar de atomen in deze structuur als O=Oranje, Z=Zilveren, R=Rode atomen. *De vragen waarvoor u volgens mij het rooster in handen moet hebben, zijn in schuin lettertype gezet.* Schrijf je redenering telkens mee op, en zet het uiteindelijke antwoord voor elke vraag in een kadertje. Let telkens op dat dat kadertje enkel bevat exact wat gevraagd werd!

Geef voor deze structuur: De beste eenheidscel, duid deze duidelijk aan op minstens 1 van de foto's, en schrijf hierbij A. Bespreek vervolgens aan de hand van deze door jou gekozen eenheidscel:

- De puntgroep*
 - Het Bravaisrooster*
 - De ruimtgroep*
 - Het geheel aan minimale informatie (en dus niets overbodig!) die nodig is als je van de structuur een exact schaalmodel zou willen tekenen. Als je hierbij iets moet herhalen dat je al eerder hebt neergeschreven, dan doe je dat.*
 - Geef van elk van de atomen die je hebt neergeschreven voor (d) de multipliciteit en de Wyckoffpositie.
 - Wat is de chemische formule van dit materiaal, in termen van O, Z en R?
 - Welke polyeders kan je vinden in deze structuur? Beschrijf ze op volgende manier: bvb. "octaëder met X in het centrum en Y op de hoekpunten".*
- Bereken de structuurfactor voor een C-gecenterde eenheidscel met als basis A op 0, 0, 0 en B op $\frac{1}{2}$, 0, 0.
 - Schrijf de structuurfactor neer in zijn meest vereenvoudigde vorm.
 - Bespreek welke reflecties zullen aan- of afwezig zijn en of er een relatief verschil in intensiteit zal zijn tussen de reflecties die aanwezig zijn.
 - Schrijf de reflectievoorwaarden die je hieruit haalt op de correcte wijze, zoals gebruikt in de Internationale tabellen.
 - Welke ruimtgroep wordt voorgesteld door onderstaand diagram? Duid ook de assen die je kiest aan op dit opgaveblad, zodat ik zeker weet dat we over hetzelfde bezig zijn.



4. Teken het stereogram van de puntgroep $6\bar{6}$. Los vervolgens volgende opdrachten op:
 1. Teken de algemene vorm van $6\bar{6}$. Geef de naam van de figuur en de index van de vorm. (Bvb je tekent een kubus, naam "kubus", indices {hkl}.)
 2. Teken de begrenzende vorm van $6\bar{6}$. Geef de naam van de figuur en de index van de vorm.
 3. Welke combinatie van puntsymmetrie-elementen geeft hetzelfde stereogram als $6\bar{6}$?
5. Voor de ruimtengroep $P 4/m 1 1$:
 1. Teken het diagram van de symmetrie-elementen geprojecteerd op het grondvlak a-b.
 2. Geef het effect van deze ruimtengroep op een atoom op een algemene positie.
 3. Stel de matrix op voor elk van de symmetrie-operaties die bij deze ruimtengroep voorkomen.

Academiejaar 2005-2006 1^{ste} zit

Theorie

Prof. Dr. J. Hadermann

1. Hoe kies je stap voor stap de beste eenheidscel voor een bepaalde structuur?
2. ## Wat is een rooster?
 1. En wat is een reciproke rooster?
3. Als je wil nagaan of een bepaalde puntgroep kan bestaan, welke stappen moet je dan achtereenvolgens ondernemen?
4. Wat bepaalt de volgorde van de symmetrie-elementen in de symbolen voor de puntgroepen? Ondersteun je antwoord ook met enkele voorbeelden.
5. ## Waarom is tetragonaal C geen Bravaisrooster?
 1. Hoeveel atomen heb je in een C-rooster
 2. Wat moet gelden voor elk atoom dat aanwezig is in een C-rooster?
 3. Bestaat er een tetragonaal A-rooster?
6. Als je een $3\bar{3}$ hebt, heb je dan automatisch ook een 3? En omgekeerd?
7. Wat betekent $Pnm2121$? En tot welk kristalsysteem behoort deze ruimtengroep?
8. Illustreer op overtuigende wijze het belang van symmetrie voor de fysische eigenschappen.
9. Leg uit in volzinnen wat het concept is van het hoofdstuk matrixkristallografie: wat is de bedoeling van wat we daar doen, hoe doen we dit, waarom is het nodig dit te kunnen doen, etc. Laat zien dat je begrepen hebt waar het allemaal om gaat.
10. Wat is het verband tussen het reciproke rooster van een materiaal en het experimentele stralenpatroon van een materiaal?
11. Welke informatie zit er allemaal vervat in een goed XRD patroon, en in welke vorm zit die informatie er telkens in (stel bvb, "de kleur van de atomen kan je zien aan de kleur van de pieken",.....)?
12. Wat is een structuurfactor? Leg dit uit in volzinnen!

13. ## Wat is het verschil tussen een algemene en een speciale positie?
 1. Wat is het verband tussen een speciale positie en een speciale vorm?
14. Zullen alle kristallen van een zelfde materiaal dezelfde polen hebben?
15. ## Beschrijf de FCC en HCP structuren.
 1. Wat zijn de streefdoelen voor het aannemen van een bepaalde structuur?
 2. Waarom zijn er nog andere structuren dan FCC en HCP?

Academiejahr 2004-2005 1^{ste} zit

Theorie

Prof. Dr. J. Hadermann

1. Algemeen

1. Wat is (kort):
 1. een zone?
 2. algemene positie en speciale positie?
 3. asymmetrische eenheidscel?
 4. rooster?
 5. reciproke rooster? (wat het is, niet constructie ervan!)
2. Is er altijd maar 1 mogelijke keuze van eenheidscel? Zo ja, wat zijn dan de eisen? Zo nee, welke eenheidscel is dan de beste?
3. Geef 2 verschillende situaties waarin we multipliciteit gedefinieerd hebben en maak een gedetailleerde vergelijking van het concept multipliciteit voor deze twee gevallen.

2. Morfologie

Zullen alle kristallen van een zelfde materiaal dezelfde polen hebben, d.w.z.

1. liggen de polen met eenzelfde index altijd op dezelfde positie?
2. Zijn het er altijd evenveel voor elk groeiend kristal?

Leg duidelijk uit waarom!

3. Puntgroepen

1. Waarom hebben we geen combinaties van slechts twee assen bekeken?
Ondersteun je antwoord grafisch.
2. Waarom staat bij een orthorhombische puntgroep de a-as op de eerste plaats en bij een tetragonale puntgroep slechts op de tweede plaats in het symbool van de puntgroep?
3. Wat is het verband tussen de symmetrie van een bepaald kristalsysteem en de eisen die worden gesteld aan de celparameters?
4. Wat is het verband tussen de symmetrie en de fysische eigenschappen van een materiaal?

4. Ruimtegroepen

1. Wat is het verschil tussen een puntgroep en een ruimtegroep?
2. Wat is het strikte minimum aan informatie dat je nodig hebt om een kristalstructuur exact op schaal te kunnen tekenen?
3. Leg uit wat *Pnma* wil zeggen. Tot welk kristalsysteem behoort deze ruimtegroep?
4. *P4m4mmm*:
 1. Is dit een verkorte of volledige vorm? Leg uit.
 2. Wat is de Laue groep van *4m4mmm*?
5. Als er een 2121-as aanwezig is in je kristalstructuur, is er dan ook altijd een 22-as aanwezig? En omgekeerd?

5. Bravaisroosters

1. Waarom bestaat er geen Bravaisrooster dat tetragonaal C heet?
2. Wat is er speciaal aan de ruimtegroepen van Bravaisroosters?
3. Zegt het Bravaisrooster van een kristal hoeveel atomen je in de eenheidscel hebt?
4. Wat moet gelden voor elk atoom dat aanwezig is in een A-gecenterd rooster?

6. X-stralendiffractie

1. Waarom zijn X-stralen geschikt om kristalstructuren te onderzoeken?
2. Waarom krijg je met de poedermethode ringen op je fotoplaat?
3. Welke informatie over de kristalstructuur kan je afleiden uit een goed XRD patroon en hoe haal je die informatie er telkens uit?
4. Structuurfactor:
 1. Leg uit wat de structuurfactor is.
 2. Wat is het verband tussen de structuurfactor van een materiaal en het XRD patroon van dat materiaal?
 3. Wat is het verband tussen de structuurfactor van een materiaal en de ruimtengroep van een materiaal?

7. Kristalchemie

1. Wat zijn de mogelijke *dichtst* gestapelde bolstapelingen? Voor welk soort materialen komen deze voor?
2. Welke opeenvolgende coördinaties gaat men doorlopen voor een ionaire structuur als men de straal van het kation telkens gaat verkleinen? Geef niet alleen de naam, maar maak telkens ook een kleine schets.

Oefeningen

Lessen gegeven door Bert Willems, examen door Prof. Dr. J. Hadermann

1. Noteer of u de structuur met *blauw-rood-grijs* of de structuur met *oranje-rood-grijs* hebt. <Bij vraag 1 en 2 kan de student 20min. beschikken over een structuur om de vragen op te lossen.
 1. Beschrijf deze structuur met *minimale* en voldoende informatie, zodanig dat een willekeurig ander persoon deze structuur uit uw beschrijving kan reconstrueren. Duid op de foto aan welke eenheidscel u gekozen hebt en noteer er het nummer 1 bij.
 2. Zoek nu nog een tweede eenheidscel, verschillend van degene waarmee u hebt gewerkt in vraag (a). Duid op de foto aan welke eenheidscel u gekozen hebt en noteer er het nummer 2 bij.
 3. Tot welk kristalsysteem behoort deze tweede eenheidscel?
 4. Welke centering heeft deze tweede eenheidscel?
 5. Bepaal de transformatiematrix van uw eerste naar uw tweede eenheidscel.

2. Noteer op uw blad of u het *grijs-rode* of het *grijs-gele* model hebt.
 1. Teken de projectie van de eenheidscel, geprojecteerd op het *abab*-vlak. De assen en de eenheidscel zijn aangeduid op de foto. Gebruik de notaties zoals in de internationale tabellen en maak een duidelijk verschil tussen de gele of rode en de grijze atomen.
 2. Teken datzelfde grondvlak, maar duidt er nu alle symmetrie-elementen op aan die u in de structuur vindt.
 3. Bepaal de ruimtengroep van deze structuur.
 4. Bepaal de structuurfactor van deze structuur.
 5. Als we van dit materiaal een X-stralendiffractiepatroon zouden maken, welke reflectievoorwaarden zouden daarin dan aanwezig zijn?
 6. Toon ook met uw gevonden structuurfactor de aanwezigheid aan van deze reflectievoorwaarden.
3. Gebruik voor deze vraag het X-stralendiffractiepatroon.
 1. Bepaal uit het XRD patroon de celparameters van de eenheidscel van het onderzochte materiaal. Gebruik $\text{CuK}\alpha=1,54\text{\AA}$ $\text{CuK}\alpha=1,54\text{\AA}$.
 2. Bepaal de reflectievoorwaarden voor dit materiaal.
 3. Bepaal de ruimtengroep van dit materiaal.
4. Teken op het Wulff-net dat u gegeven werd de voornaamste polen (d.w.z. de polen met $h,k,l \leq 1$, $h,k,l \leq 1$) van het onderstaand materiaal. Duid ook de zonecirkels aan waarvoor geldt $u,v,w \leq 1$, $u,v,w \leq 1$.

o Ruimtengroep
P42mm

o $a=4,59\text{\AA}$ $a=4,59\text{\AA}$
o $c=2,96\text{\AA}$ $c=2,96\text{\AA}$
o Basis
Ti

P42mm

Ti

op (0,0,0)(0,0,0) OO op (0,3;0,3;0,3)(0,3;0,3;0,3)

Academiejahr 2003-2004 1^{ste} zit

1. Bij deze vraag hoort het diagram op deze bladzijde (niet bijgehouden).
 1. Geef de ruimtengroep die met die diagram overeenkomt.
 2. Welke reflectievoorwaarden kan je afleiden uit het diagram?
 3. Van alle mogelijke combinaties hkl met h, k, l = 0 of 1, voor welke zal je hiervan een reflectie of piek zien in diffractie-experiment?
 4. Teken een vierkant. Dit stelt het diagram voor. Duidt daarop de assen aan die je gebruikt hebt voor deze oefening.

2. Bij deze vraag hoort het driedimensionale grijpbare model. Grijs Cs, rood is Cl, maar je mag ze gewoon grijze en rode atomen noemen. Enkel voor de vragen met (*) moet je de structuur in handen hebben, de andere kan je achteraf oplossen.
1. Geef de puntgroep. (*)
 2. Geef het Bravaisrooster. (*)
 3. Geef de ruimtengroep.
 4. Schets de eenheidscel. (*)
 5. Wat is de samenstelling van een eenheidscel van deze structuur?
 6. Geef de coördinaten van de atomen in de eenheidscel.
 7. Kies hieruit atomen die een basis vormen: geef hun coördinaten.
 8. Geef $\langle uvw \rangle$ van de richting die:
 - Van 1 rood atoom gaat naar een ander rood atoom dat met het eerste verbonden is door een lichaamsdiagonaal van de eenheidscel.
 - Van 1 rood atoom naar een ander rood atoom dat met het eerste verbonden is door een ribbe van de eenheidscel.
 9. Welke reflectievoorwaarden horen bij deze structuur?
3. Bij deze vraag hoort noch diagram, noch structuur. Het enige dat gegeven is is het symbool $P4_2n4_2ncm$.
- Geef mij zoveel mogelijk informatie die jij kan afleiden uit dit symbool.

Categorieën:

- Fysica
- 2BFYS