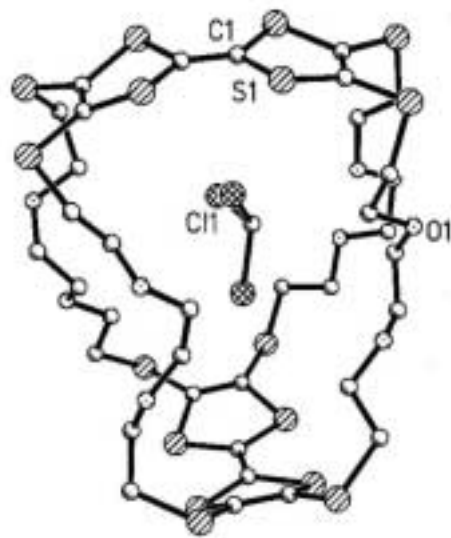
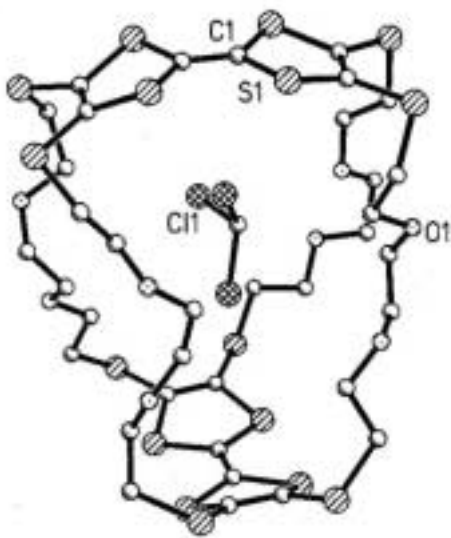


# Kemi for tiden

## Krystalstrukturer og egenskaber

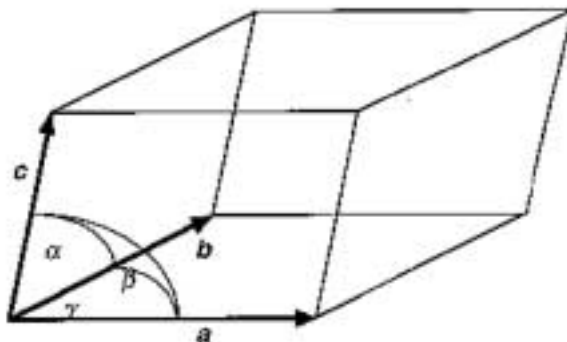
### Opgaver



Karl P. Larsen

## Indledning

Den krystallinske tilstand er karakteriseret ved en repetition af stoffets mindste bestanddele i tre uafhængige dimensioner, hvorved der fremkommer et krystalgitter. Den mindste byggesten i dette gitter kaldes en enhedscelle, og det har vist sig muligt at inddele disse enhedsceller i 7 forskellige krystalsystemer. Enhedscellen beskrives ved de tre akser  $a$ ,  $b$  og  $c$  og vinklerne  $\alpha$ ,  $\beta$  og  $\gamma$  (se tegningen nedenfor).



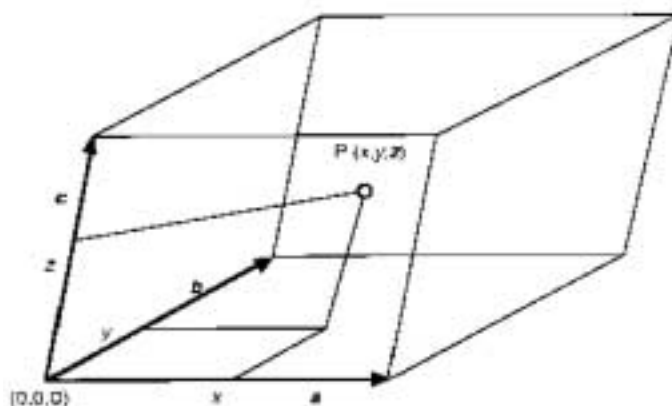
$\forall$  = vinklen mellem akserne  $b$  og  $c$  (osv.)

Det simpleste tilfælde er den kubiske enhedscelle, hvor alle akser er lige lange og alle vinkler rette, ganske som i et tre-retvinklet koordinatsystem. I f.eks. det orthorhombiske system er vinklerne stadigvæk rette, men enhedscellens akser er nu alle af forskellig længde. I det trikline system bliver det hele lidt mere kompliceret, da akserne nu har forskellige længder og tilmed er  $\alpha$ ,  $\beta$  og  $\gamma$  alle forskellige fra  $90^\circ$ .

Krystalsystem	Enhedscelleakser	Enhedscellevinkler	Stofeksempel
Kubisk	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	NaCl, C(diamant)
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\text{Cu}_4\text{Te}_3$ , PbO
Orthorhombisk	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	CoSi, $\text{FeF}_2$
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ$ , $\gamma = 120^\circ$	$\text{Mo}_2\text{C}$ , C(grafit)
Trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\text{CdCO}_3$ , $\text{Zn}_2\text{SiO}_4$
Monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ$ , $\beta \neq 90^\circ$	$\text{Pb}(\text{ClO}_3)_2$ , $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7$
Triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$\text{MnSiO}_3$ , $\text{Ag}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$

**Tabel over de 7 krystalsystemer**

Inde i enhedscellen sidder nu de enkelte atomer i forskellige positioner, beskrevet ved et koordinatsæt  $(x, y, z)$ , der vil være brøkdeler af de tilsvarende enhedscelleakser (se tegning).



Antallet af formelenheder pr. enhedscelle kaldes  $Z$ , og  $Z$  vil i simple forbindelser ofte være små hele tal (2, 3, 4, 6, 8 osv.). Normalt vil det være ret enkelt eksperimentelt at bestemme stoffets densitet  $\rho$  (massefylde). Med kendskab til enhedscelleparametrene og  $\rho$  vil det være muligt at beregne  $Z$  ud fra formlen:

$$\rho = \frac{Z \cdot M}{N_A \cdot V}$$

hvor  $M$  er stoffets formelmasse,  $N_A$  er Avogadros tal og  $V$  er enhedscellens volumen.

Gangen i en strukturoptklaring vil da være følgende: Der udvælges en passende lille og fejlfri krystal, som i et såkaldt diffraktometer beskydes med røntgenstråling med kendt bølgelængde. Enhedscellens parametre bestemmes og der indsamles et (oftest meget stort) antal reflekser, dvs. spredt røntgenstråling. Ved hjælp af computer bestemmes nu krystalsystem og rumgruppe og atomernes positioner beregnes. En nydelig tegning afslutter dette arbejde og den egentlige vurdering af stoffets strukturelle egenskaber kan begynde.

### Supplerende litteratur:

Borchardt-Ott, W., Crystallography, Springer-Verlag, Berlin 1995 (ISBN 3-540-59478-7).

Thorup, N., Elementær Fysisk Kemi, Polyteknisk Forlag, 1984 (ISBN 87-502-0606-0).

Naturens Verden, 5 (1981).

Holden, A. og Singer, P., Krystallernes Verden, Gyldendals Kvantebøger, Kbh. 1962.

Azároff, L. V., Elements of x-ray Crystallography, McGraw-Hill, 1968.

### Eksperimenter:

Med mikrobølgeudstyr fra UNILAB<sup>®</sup>, som findes i mange skolars fysiksamling, har man mulighed for at udføre et modelforsøg til illustration af Bragg-ligningen ( $2d\sin\theta = n\lambda$ ). Bølgelængderne er i mikrobølgeområdet (2,8 cm) og krystallen består af en flamingoklods, hvori der er anbragt små metalkugler i et kubisk gitter. Ved at undersøge, hvilke vinkler der giver maksimal refleksion, kan afstanden mellem lagene bestemmes.

### Link til diverse informationer om krystallografi:

<http://www.iucr.org/cww-top/edu.index.html>

### Forsideillustration:

Stereotegning af en "criss-cross overlappet tetrathiafulvenophane" (dvs. baseret på tetrathiafulvalen) med et inkluderet solventmolekyle  $\text{CHCl}_3$ .

(Ref.: Niels Thorup m.fl.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1* (1998), 1305-1308).

## Opgaver

- Anvend de i appendiks 1 viste skabeloner til at fremstille papmodeller af de 7 krystalsystemer.
- Lithiumtetrachlorozinkat(II)dihydrat krystalliserer i det orthorhombiske krystalsystem med enhedscelleparametrene  $a = 10,24 \text{ \AA}$ ,  $b = 11,98 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,44 \text{ \AA}$  og 4 formelenheder pr. enhedscelle ( $Z = 4$ ).

a) Beregn stoffets densitet.

Cobalt(II)chloriddihydrat krystalliserer i det monokline krystalsystem med enhedscelleparametrene  $a = 7,256 \text{ \AA}$ ,  $b = 8,575 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,554 \text{ \AA}$  og  $Z = 2$ .

b) Beregn stoffets densitet.

Cæsiumtetrachloromanganat(II)dihydrat, der har densiteten  $3,23 \text{ g/cm}^3$ , krystalliserer triklint med celleparametrene  $a = 5,74 \text{ \AA}$ ,  $b = 6,66 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,27 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 67,0^\circ$ ,  $\beta = 87,8^\circ$  og  $\gamma = 84,3^\circ$ .

c) Beregn antallet af formelenheder pr. enhedscelle.

*Note:*

*Enhedscellens volumen,  $V$  er i det generelle tilfælde givet ved udtrykket*

$$V = aAbAc (1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{1/2}$$

*(Ref.: Jensen, Stig J.: Hydrater af nogle divalente metaller chlorider, Århus 1969).*

- I en undersøgelse af intermetalliske faser mellem de sjældne jordarts metaller (4f-grundstofferne) og aluminium, har man bl.a. fundet en fase med støkiometrien  $\text{Me}_2\text{Al}$ . De tilhørende enhedsceller er tilordnet via pulverdiagrammer og der er fundet nedenstående enhedscelleparametre, alle i det orthorhombiske system.

Forbindelse	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$
$\text{Pr}_2\text{Al}$	7,872	9,461	11,45
$\text{Nd}_2\text{Al}$	7,848	9,395	11,38
$\text{Sm}_2\text{Al}$	7,782	9,302	11,21
$\text{Gd}_2\text{Al}$	7,69	9,24	11,21
$\text{Y}_2\text{Al}$	7,62	9,22	11,14
$\text{Tb}_2\text{Al}$	7,66	9,18	11,07
$\text{Dy}_2\text{Al}$	7,59	9,13	11,04
$\text{Ho}_2\text{Al}$	7,570	9,150	10,965
$\text{Er}_2\text{Al}$	7,523	9,056	10,925

a) Beregn enhedscellernes volumener,  $V$ .

b) Hvorfor mon  $V$  falder, selv om  $\text{Me}$ 's atomnummer stiger ned gennem tabellen?

*(Ref: Buschow, K.H.J and van Vucht, J.H.N., Philips Res. Repts. 22, (1967) 233-245).*

4. Normalt vil det være ret kompliceret at sætte de rigtige  $(h,k,l)$ -indices på et pulverdiagrams linier (= indeksering), hvis man ikke kender enhedscelleparametrene på forhånd. I det kubiske tilfælde er det dog relativt simpelt, hvis ellers enhedscellen ikke er alt for stor. Det skyldes, at alle celleakser er lige lange og at alle vinkler er rette, hvad der letter beregningerne gevaldigt. I det kubiske tilfælde gælder således:

$$(1) \quad 1/d_{hkl}^2 = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2$$

Desuden vides (Braggs lov), at

$$(2) \quad 2 d_{hkl} \sin\theta = \lambda$$

Heraf fås nu

$$(3) \quad \sin^2\theta = k(h^2 + k^2 + l^2) \quad \text{hvor } k \text{ er en konstant}$$

Dvs.  $\sin^2\theta$  er i det kubiske tilfælde ligefrem proportional med summen af de kvadrerede Miller-indices for en given reflekt  $(h,k,l)$ .

- a) Udled formel (3) og find derved et udtryk for konstanten  $k$ .

Summen af de kvadrerede Miller-indices må nødvendigvis være et helt tal. Indekseringsproceduren er da følgende. Man opsøger på pulverdiagrammet den lavestliggende top og aflæser (finder) den tilhørende  $\sin^2\theta$ -værdi. De efterfølgende  $\sin^2\theta$ -værdier divideres hermed. Dette svarer i virkeligheden til at dividere tabellen af  $(h^2 + k^2 + l^2)$ -værdier med den mindste af disse, jvf. nedenfor:

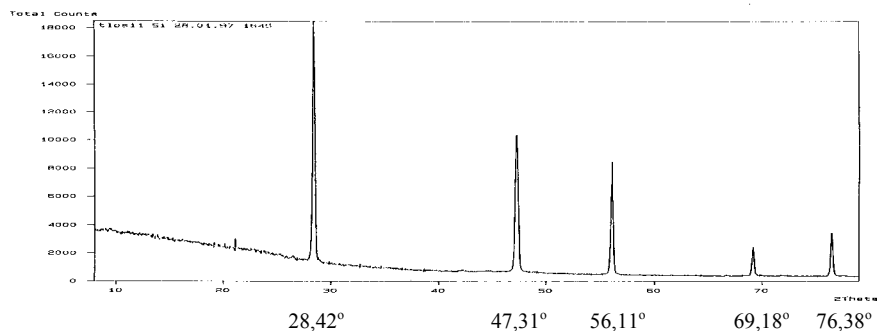
$$S = \frac{\sin^2\theta}{(\sin^2\theta)_{\min}} = \frac{k(h^2 + k^2 + l^2)}{k(h^2 + k^2 + l^2)_{\min}}$$

Herved vil der fremkomme en tabel med ”pæne” decimalbrøker. Man finder nu ved ”trial and error” det hele tal, som ganget på tallene vil give en række af hele tal. Dette svarer i virkeligheden til at finde  $(h^2 + k^2 + l^2)_{\min}$ . Nedenfor er vist resultaterne fra et pulverbillede af NaBr, optaget med Cu-K $_{\alpha}$ -stråling ( $\lambda = 1,5408\text{\AA}$ ):

$2\theta/\text{grader}$	$d/\text{\AA}$	$\sin^2\theta$	$S$	$4S$	$(h^2 + k^2 + l^2)$
25,72	3,463	0,050	0,75	3	3
29,81	2,996	0,066	1	4	4
42,78	2,113	0,133			
50,50	1,807	0,184			
52,86	1,731	0,198			
68,78	1,364	0,319			
70,35	1,338	0,332			
78,39	1,219	0,399			
84,14	1,150	0,449			

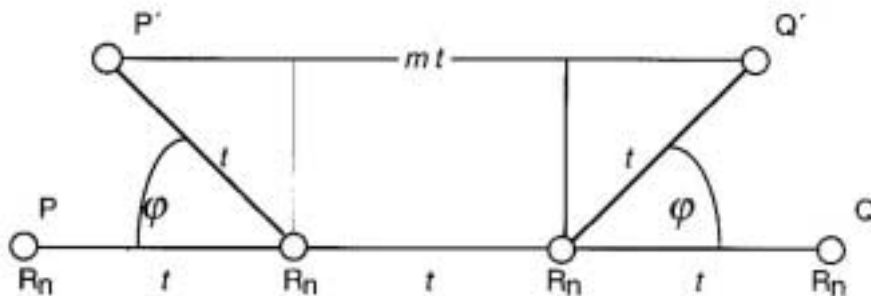
- b) Udregn de manglende tal i kolonnerne 4 og 5, idet der i 5 afrundes til ”pæne” hele tal.
- c) Plot sammenhørende talsæt  $(\sin^2\theta, (h^2 + k^2 + l^2))$ . Er krystallen kubisk?

- d) Beregn hældningen og find herudfra enhedscellens kantlængde.
- e) Stemmer dette overens med tabelværdien?
- f) Gennemfør en lignende analyse af pulverdiagrammet for Si, der er gengivet nedenfor. Da det af diagrammet er vanskeligt at aflæse præcise  $2\theta$ -værdier, er disse desuden påført; diagrammet er igen optaget med Cu- $K_\alpha$ -stråling.



(Ref: Poulsen, J. H.: *Større skriftlig opgave, Skanderborg Gymnasium, 1998*)  
 (Lund-Olesen, T., *Større skriftlig opgave, Aabenraa Gymnasium og HF, 1996*)

5. Den krystallinske tilstand er karakteriseret ved en periodisk repetition af enhedsceller i tre uafhængige dimensioner. Det betyder, at der kun kan være et antal forskellige symmetrielementer i krystallen (symmetriplaner, inversionscentre, rotationsakser, glideplaner, skrueakser etc.). Kravet om repetition lægger f.eks. bånd på mulighederne for rotations-akser, idet der kun kan være 2-, 3-, 4- og 6-tals akser. Betragt nedenstående tegning:



$R_n$  er en  $n$ -tals rotationsakse med den tilhørende drejningsvinkel  $\varphi$ , vinkelret på papirets plan, medens  $t$  er gitterpunktafstanden (svarer til f.eks. enhedscellekonstanten  $a$ ). Gitterpunkterne P og Q vil ved drejningen på  $\varphi$  grader gå over i punkterne P' og Q', som per definition også skal være gitterpunkter. Dette betyder, at der skal være et helt antal afstande  $mt$  mellem P' og Q'.

$$mt = t + 2 (tA \cos \varphi)$$

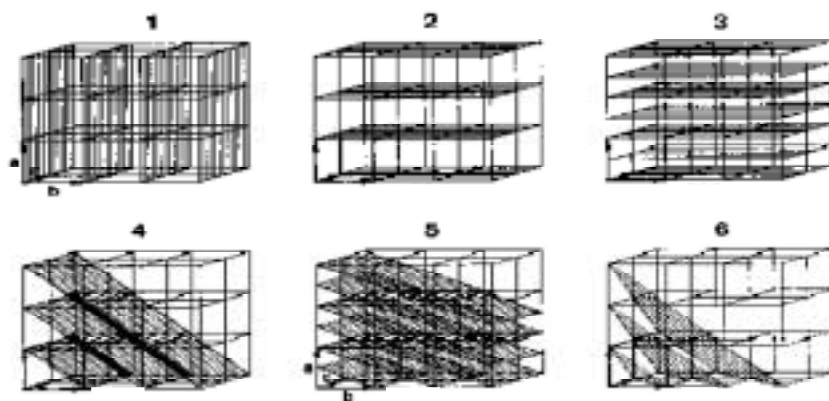
Udled heraf, at der ikke kan være 5-talsrotationsakser og at der ikke kan forekomme rotationsakser af højere orden end 6 i krystallinske stoffer.

6. Germanium krystalliserer flade-centreret kubisk med kantlængden  $a = 5,655 \text{ \AA}$ . Der er Ge-atomer i  $(0,0,0)$  og  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

- Lav en tegning af germaniums enhedscelle med indhold.
- Beregn den korteste Ge – Ge afstand.
- Find bindingsvinklen mellem Ge - atomerne i f.eks.  $(0,0,0)$ ,  $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$  og  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ .

(Ref: Azároff, Leonid V.: *Elements of X-ray Crystallography*; McGraw-Hill, 1968).

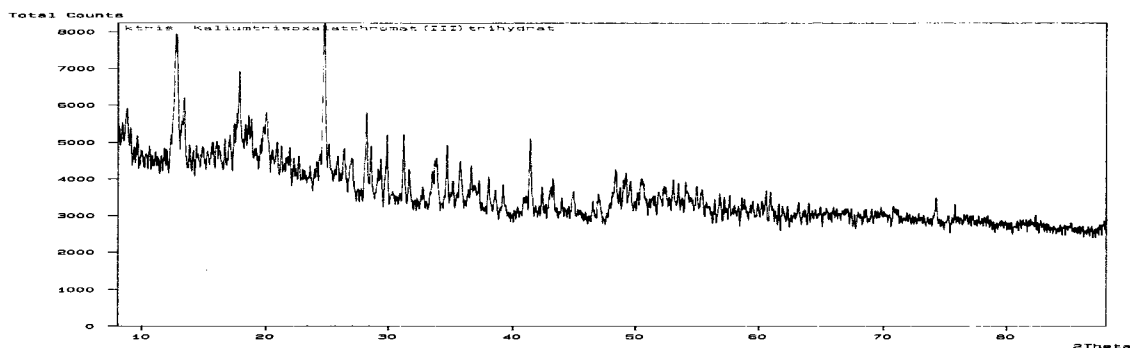
7. Nedenfor er vist et udsnit af et krystalgitter med forskellige plansæt indtegnede.



Bestem planernes Miller-indices.

(Ref.: Hazell, R., Hazell, A. og Krebs Larsen, F., *Naturens Verden*, 5 (1981) 17 – 32).

8. Nedenfor er vist pulverdiagrammet for, hvad der ifølge synteseforskriften skulle være kaliumtrisoxalatochromat(III), trihydrat. Der er ved optagelsen benyttet Cu- $K_{\alpha}$ -stråling med bølglængden  $1,5406 \text{ \AA}$ . I tabellen er vist et antal liniers  $d$ -spacings og relative intensiteter fra Powder File.



- Opskriv formelen for stoffet.
- Omregn de 5 stærkeste liniers  $d$ -spacings til de tilsvarende  $2\theta$ -værdier.

- c) Har syntesen givet det rigtige stof?  
(Bemærk, at krystallitternes orientering kan have indflydelse på de relative tophøjder i spektret).

**Tabel over d-spacings:**

38-1448					Wavelength= 1.541778				
O6CrK3O12·3H2O					d(Å)	Int	h	k	l
Potassium Chromium Oxalate Hydrate					9.8231	710	0	2	0
					6.9710	240	0	2	1
					6.8676	650	1	1	0
					6.6142	330	1	1	1
					4.9911	120	1	1	1
					4.9295	690	0	4	0
					4.9295	690	0	0	2
					4.8024	110	1	3	1
					4.7095	120	1	1	2
					4.4127	260	0	4	1
					4.4023	260	0	2	2
					4.0704	50	1	3	1
					3.6725	63	2	0	0
					3.6068	150	2	1	0
					3.5885	860	2	2	1
					3.5435	96	1	1	2
					3.4824	77	0	4	2
					3.4422	220	1	5	1
					3.3666	170	1	1	3
					3.3116	130	2	2	2
					3.2905	430	0	6	0
					3.1588	290	1	3	2
					3.1225	999*	0	6	1
					3.1156	999*	0	2	3
					3.0605	130	1	5	2
					3.0376	170	2	4	1
					3.0344	170	1	3	3
					2.9837	340	2	2	1
					2.9468	49	2	4	0
					2.8514	190	2	4	2
					2.8234	61	2	2	3
					2.7347	71	0	6	2
					2.7295	67	0	4	3
					2.6750	79	1	1	3
					2.6602	48	1	5	2
					2.6455	110	2	4	1
					2.5840	130	1	5	3
					2.5817	130	2	0	2
					2.5499	68	3	1	1
					2.5089	110	3	1	2
					2.5015	83	2	6	1
					2.4674	53	0	8	0
					2.4508	150	2	6	0
					2.4487	190	3	2	2
					2.4457	150	0	7	2
					2.4303	51	3	1	0
					2.4102	53	1	3	4
					2.3586	61	3	3	2
					2.3538	42	2	2	4
					2.3276	75	3	1	3

Peak height intensity, C.D. Cell: a=10.365, b=19.739, c=7.729, β=108.20, a/b=0.5251, c/b=0.3916, S.G.=P21/a(14), PSC: mP124, Mwt: 487.40, Volume[CD]: 1502.20.

9. Som omtalt i teksten er den spredte røntgenstrålings intensitet proportional med kvadratet på den såkaldte strukturfaktor  $F_{hkl}$ :

$$I_{hkl} = k F_{hkl}^2$$

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^N f_n (\exp 2\pi i (hx_n + ky_n + lz_n))$$

hvor  $f_n$  er spredningsfaktoren. Disse spredningsfaktorer, der i øvrigt afhænger af spredningsvinklen  $\theta$ , er tabellerede for alle atomer og de er et talmæssigt udtryk for atomets sprednings-evne for den givne reflekt.  $N$  er det samlede antal atomer i enhedscellen og hvis  $N$  er stor, kan det meget hurtigt blive et større computerarbejde at beregne  $F_{hkl}$ -værdier ud fra en given model af atomernes placering i enhedscellen.

I simple tilfælde kan regnearbejdet dog godt håndteres med papir og blyant. Betragt således metallisk Cs, der krystalliserer kubisk rumcentreret med Cs i (0,0,0) og ( $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ ).

- a) Vis, at  $F_{hkl}$  da vil være givet ved

$$F_{hkl} = f_{Cs} (1 + (-1)^{(h+k+l)})$$

- b) Hvad bliver nu værdien af  $F_{hkl}$  for  $(h+k+l)$  lige, hhv.  $(h+k+l)$  ulige?

Dette fænomen kaldes udslukninger, og er ofte til stor hjælp for at finde den korrekte enhedscelletepe.



I cæsiumchlorid er atomet i ( $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ) erstattet af en chloridion.

c) Find de tilsvarende udtryk for  $F_{hkl}$ , opdelt i de i b) nævnte tilfælde.

Røntgenstråling spredes på atomets elektroner, hvor det er rimeligt at antage, at spredningsevnen følger atomets atomnummer.

d) Hvordan vil dette afspejle sig i intensiteterne af de to refleksgrupper for CsCl?

10. Når man via diverse overvejelser og metoder har fundet en model for enhedscellens indhold, beregnes de teoretiske værdier for  $F_{hkl}$ , hvorefter de sammenlignes med de observerede intensiteter. Disse er naturligvis behæftede med eksperimentel usikkerhed, ligesom den opstillede model jo heller ikke behøver at være korrekt. Som mål for overensstemmelsen mellem model og observationer bruges den såkaldte  $R$ -værdi, der er defineret ved

$$R = \frac{\sum \|F_{hkl}(obs) - F_{hkl}(bereg)\|}{\sum |F_{hkl}(obs)|}$$

Nedenfor er vist et lille udsnit af strukturfaktortabellen for stoffet  $(C_6H_5NH_3)_2CuCl_4$ .

- a) Hvad er det systematiske navn for dette kompleks?
- b) Lav en  $R$ -værdiberegning på f.eks. 20 af de største reflekser, dvs. dem med de højeste talværdier for  $F_{hkl}$ .

$h$	$k$	$l$	$F_{obs}$	$F_{bereg}$	$h$	$k$	$l$	$F_{obs}$	$F_{bereg}$
-20	0	2	283	263	-21	0	2	236	222
-19	2	0	215	216	-17	5	3	145	136
-17	1	2	103	-108	-16	8	2	163	163
-16	8	4	244	238	-16	1	2	129	-131
-16	1	3	189	198	-16	3	4	129	-124
-8	2	2	854	859	-8	4	4	352	357
-7	0	4	626	642	-3	0	4	903	907
-3	2	0	568	-532	-3	4	1	433	-427
2	0	0	449	439	2	0	2	592	-559
2	0	4	332	326	2	2	6	265	263
2	3	3	343	342	2	3	6	256	-256
2	4	0	918	923	2	4	4	239	240
8	0	0	678	678	6	0	0	804	827

- c) Hvis  $R$  er passende lav ( $< 5,0\%$ ), er der stor sandsynlighed for, at modellen er korrekt. Hvordan ser det ud i dette tilfælde?

11. I en én-krystalundersøgelse af  $NaBrO_3$  er det fundet, at stoffet krystalliserer i det kubiske system i rumgruppen  $P2_13$  med  $a = 6,707\text{\AA}$ . Nedenfor er vist et udsnit af de mulige positioner i rumgruppen.

Cubic 2 3

 $P 2_1 3$ 

No. 198

 $P 2_1 3$   
 $T^4$ Origin on 3, halfway between three pairs of non-intersecting 2<sub>1</sub>-axes

12	b	1	$x, y, z;$	$x, x, y;$	$y, z, x;$
			$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, z;$	$\frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} - x, y;$	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z, x;$
			$\bar{x}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z;$	$\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y;$	$\bar{y}, \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} - x;$
			$\frac{1}{2} - x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z;$	$\frac{1}{2} - z, \bar{x}, \frac{1}{2} + y;$	$\frac{1}{2} - y, \bar{z}, \frac{1}{2} + x;$

General:

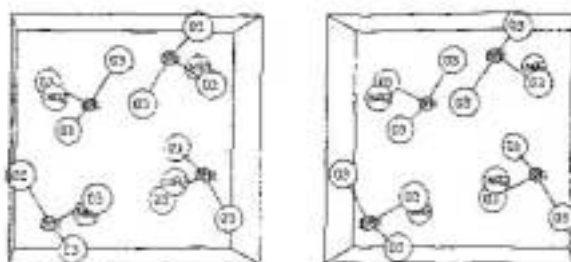
hkl: No conditions

h00:  $h = 2n$ ;  $\bar{C}$ 

Special: as above only

4	a	3	$x, x, x;$	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \bar{x};$	$\bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x;$	$\frac{1}{2} - x, \bar{x}, \frac{1}{2} + x;$
---	---	---	------------	--	--	--

Br-atomet ligger i position a med koordinaterne  $(x, x, x) = (0,1561, 0,1561, 0,1561)$ . De øvrige tre Br-atomer i enhedscellen kan nu beregnes ved at udføre de i tabellen viste transformationer. Det næste koordinatsæt vil således være  $(0,6561, 0,3439, 0,8439)$ , idet  $x$  læses som  $1-x$ . På lignende vis kan de 12 oxygenatomer genereres ud fra koordinatsætte b med  $(x, y, z) = (0,2623, 0,3513, 0,0390)$ . Se øvrigt nedenstående tegning.



Er bromationen regulært tetraederisk?

(Ref.: Fredslund, V.: *Større skriftlig opgave, Aabenraa Gymnasium og HF, 1998*).

12. Zeolit X har en kubisk enhedscelle med  $a = 24,92 \text{ \AA}$ . Netværket indeholder pr. enhedscelle 106 Si-atomer, 86 Al og 384 oxygenatomer. Det antages, at atomradierne er:

$$r_{Si} = 0,42 \text{ \AA}$$

$$r_{Al} = 0,51 \text{ \AA}$$

$$r_O = 1,40 \text{ \AA}$$

- a) Beregn "tomrumsvolumnet", dvs. den del af enhedscellen, der ikke er optaget af atomer.

Zeolit AIPO-25 krystalliserer orthorhombisk med  $a = 9,4 \text{ \AA}$ ,  $b = 15,2 \text{ \AA}$  og  $c = 8,4 \text{ \AA}$ . Enhedscellen indeholder 12 Al, 12 P ( $r_P = 0,35 \text{ \AA}$ ) og 48 O-atomer.

- b) Beregn som ovenfor zeolittens tomrumsvolumen.

## **Appendiks 1:**

Forlæg til fremstilling af modeller af de 7 krystalsystemer.

Modellen for hvert krystalsystem kan opfattes enten som en enhedscelle, eller som en krystal.

*(Ref. Simonsen, O., Kemisk Institut, Syddansk Universitet, Odense Universitet).*

Forstør oplæggene på passende svært papir.

Skær eller klip modellerne fri af arkene. Rids med en spids genstand langs kanterne, hvor der herefter foldes. Lim fladerne sammen.