

Spørsmål 1

10 av 10 poeng

Gi en kort beskrivelse av krystallstrukturene würtzitt og sinkblende.

Valgt svar:	würtzitt: Oppbygd av sink og ssvovel. hcp-pakning av anionenene, 1/2- parten av tetraedriske hull er fylt av kationene. Zn = kation, Sink = anion. CN = 4 for alle ionene. sinkblende: Oppbygd av sink og ssvovel. ccp-pakning av anionenene, 1/2- parten av tetraedriske hull er fylt av kationene. Zn = kation, Sink = anion. CN = 4 for alle ionene
Tilbakemelding på respons:	[Ingen gitt]

Spørsmål 2

10 av 10 poeng

Hvilke krystallstrukturer får vi dersom vi har kubisk eller heksagonal tetteste kulepakning av anioner, og kationer i alle oktaedriske hull?

Valgt svar:	NiAs: hcp-pakning, 6:6-koordinasjon NaCl: ccp-pakning, 6:6-koordinasjon
-------------	--

Spørsmål 3

10 av 10 poeng

a) Gi en kort beskrivelse av strukturen til perovskitt, normal spinell og invers spinell.

b) Hvilke koordinasjonstall har kationene i disse strukturene, og hvordan påvirker dette radien til kationene?

c) Hva er summen av ladningen til kationene i disse to krystallstrukturene? Skriv opp de mulige kombinasjonene av ioneladning. Hint: Se på kjemisk formel (ABX_3 og AB_2X_4).

Valgt svar:	Perovskitt: a) ABO_3 , danner en ccp-struktur med AO_3 , B befinner seg i de oktaedriske hullene. Den kan også sees på som oktaedra av BO_6 der A ligger i 12-koordinerte hulrom mellom oktaedra. b) A og B er begge kationer. Koordinasjonstallene er 12 for A og 6 for B, hvilket er mer enn normalt, altså har B større radius enn det som er vanlig i tetraedriske hull. c) For at ladningen av molekylet skal være 0, må ladning fra A+ ladning fra B være lik 6. Det gir disse kombinasjonene: Ladning Ladning A B +1 +5 +2 +4 +3 +3
-------------	---

Normal spinell:

a) AB_2O_4 i ccp. Kation B ligger i oktaedriske hull (1/2-parten), Kation A ligger i tetraedriske hull (1/8 av dem).

b) CN: Kation = $4(A)/6(B)$, CN: Anion = 3. Dette betyr at A som oftest er mindre enn B

c) Summen av ladningene fra A og B skal være lik 8, vi får disse mulige kombinasjonene:

Ladning A	Ladning B
+1	+3/+4
+2	+3
+3	+2/+3
+4	+2
+5	+1/+2
+6	+1

I en inversspinell struktur er halvparten av B i tetraedriske hull mens den andre halvparten av B og A er i oktaedriske hull. Det er også mulig med en vilkårlig fordeling av A og B på tetraedriske og oktaedriske hull, dvs. en uordnet spinell.

Invers spinell:

a) I motsetning til normal spinell ligger 1/2-parten av B i tetraedriske hull, og alle A og den resterende 1/2-parten av B i oktaedriske hull.

b) og c), så vidt jeg vet, ingen endring. (Regner med at CN for de B som ligger i oktaedriske hull er lik A i okte

Tilbakemelding på respons:	Veldig bra! Står ikke noe i LF om CN for invers spinell, men er enig med det du skriver :)
----------------------------	--

Spørsmål 4

9 av 10 poeng

Hvilken krystallstruktur tror du forbindelsene LiF, CsF og BeS har? Begrunn svaret.

Valgt svar: Alle radiusene er oppgitt i pikometer (pm)
LiF:
 $r(\text{Li}) = 76(6)/59(4)$
 $r(\text{F}) = 133(6)$
 $r(\text{Li})/r(\text{F}) = 76/133 = 0.57$, $0.414 < 0.57 < 0.732 \Rightarrow$ oktaedriske hull, hcp/ccp.
Mest sannsynlig har LiF en NaCl-stuktur eller en NiAs-struktur.
CsF
 $r(\text{Cs}) = 167/174(8)$
 $r(\text{F}) = 133(6)$
 Forhold radius: $0.80, 0.80 > 0.732 \Rightarrow$ kubiske hull, primitiv pakning. (F er større enn Cs, hvilket gjør at i dette tilfellet vil F danne hovedstrukturen, og Cs ligge i hulrommene.)
CsCl-struktur
BeS
 $r(\text{Be}) = 45(6)/27(4)$
 $r(\text{S}) = 184$
 Forhold radius: $0.24/0.15, 0.15 < 0.225 < 0.24 \Rightarrow$ tetraedriske hull, det er 2 hull per kule, men 1:1 forhold av ionene. Det er kun fylling av halvparten av de tetraedriske hullene.
Mest sannsynlig sinkblende eller würtzitt.

Tilbakemelding på respons: Veldig bra. Ser ut som du har skrevet litt feil for CsF. Du har tatt $r(\text{F})/r(\text{Cs})$, som vil gi at Fluor ligger i kubiske hull, men du har skrevet motsatt.

Spørsmål 5

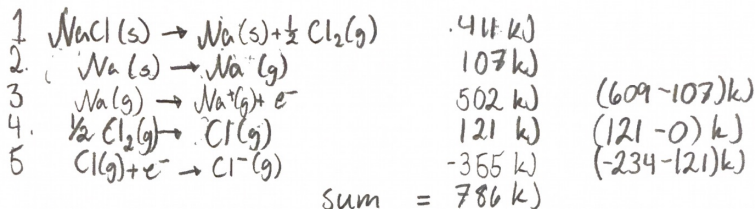
10 av 10 poeng

Beregn gitterentalpien for NaCl(s) ved hjelp av en Born-Haber-syklus. Benytt data fra SI Chemical Data, og vis utregningen.

Oppgave 5:

Born - Haber syklus

Entalpi



Gitterentalpien er 786 kJ ved Born-Haber syklus

Spørsmål 6

10 av 10 poeng

- Sammenlign gitterentalpien for NaCl(s) med bindingsenergien for ett mol NaCl(g) beregnet ved hjelp av Coulombs lov.
- Beregn gitterentalpien for ett mol NaCl(s) ved hjelp av:
 - Coulombs lov,
 - Born-Mayer-ligningen,
 - Kapustinskii-ligningen.
- Hvorfor er gitterentalpien for NaCl(s) langt større enn bindingsenergien for ett mol NaCl(g)?
- De ioniske modellene underestimerer gitterentalpien for NaCl(s) sammenlignet med verdien vi får fra en Born-Haber-syklus. Hvorfor?

Oppgave 6:

a) Coulombs lov: $V = N_A \frac{(e Z_A)(e Z_B)}{4\pi \epsilon_0 r_{AB}} = \frac{N_A e^2}{4\pi \epsilon_0 r_{NaCl}} = \frac{\overbrace{N_A e^2}^{\text{konstanter}}}{4\pi \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \cdot (102+181) \cdot 10^{-12}}$

1 mol NaCl(g)
Bindingsentalpi $V = 490 \text{ kJ/mol}$ (ser ut som sammenlikning skal i oppgave c))

b) Gitterentalpi 1 mol NaCl(s)

i) Coulombs lov: $\Delta H_L = \frac{N_A e^2}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{|Z_A Z_B|}{d} \cdot A = V_{NaCl(s)} \cdot 1,748$
 $= 858 \text{ kJ/mol}$

ii) Born-Mayer: $\Delta H_L = \frac{N_A e^2}{4\pi \epsilon_0 d} \left(1 - \frac{d^*}{d}\right) A = 858 \text{ kJ/mol} \left(1 - \frac{34,5}{(102+181)}\right) = 753 \text{ kJ/mol}$

iii) Kapustinski's ligning:

$\Delta H_L = \frac{N_A |Z_{Na} Z_{Cl}|}{d} \left(1 - \frac{d^*}{d}\right) \cdot K = \frac{2}{283} \left(1 - \frac{34,5}{283}\right) 1,21 \cdot 10^5 \text{ kJ} \cdot \text{pm/mol}$
 $= 751 \text{ kJ/mol}$ (Hvis det er forvirring over hva jeg har gjort i b), jeg gjentfente felles elementer i formlene.)

c) det er fordi NaCl(s) har krystallstruktur, og NaCl(g) er en gass.

bindingsentalpi, NaCl(g) får kun påvirkning av den ene bindingen i molekylet
 gitterentalpi, NaCl(s) får påvirkning av alle ionene i krystallen s.e.
 alle ionene bidrar til gitterentalpien, det er rett og skitt flere bidrag.

d) De ioniske modellene tar ikke høyde for polarisering eller van der Waalske krefter

Spørsmål 7

10 av 10 poeng

Hvor stor forventer du gitterentalpien til CaO(s) å være sammenlignet med gitterentalpien for NaCl(s)? Begrunn svaret.

Valgt svar:

Forventer en mye større gitterentalpi til CaO enn NaCl. $\text{CaO} \Rightarrow \text{Ca}^{2+}$ og O^{2-} , $\text{NaCl} \Rightarrow \text{Na}^+$ og Cl^- . CaO består av to ion med "dobbel" ladning. NaCl består av to ion med "enkel" ladning. Ifølge lovene som estimerer gitterentalpien, vil gitterentalpien være avhengig av $|Z_A^* Z_B|$, når vi har doble ladninger vil dette gi ca. 4 ganger så høy gitterentalpi som enkle.