

Räkneövningarna hålls torsdag 1.3. kl. 14 i Acceleratorlaboratoriets seminarierum.

1. Härled jonradieförhållandet i 3D för koordinationsstalen 4, 6 och 8.
2. Förutspå strukturen hos alkalihaliderna LiCl, NaCl, KCl, RbCl och CsCl.
3. Hur mycket ändras atomfraktionen av vakanser och interstitiella atomer i kristallint Cu vid uppvärmning från 300 K till 1000 K?
4. CdS har en kubisk enhetscell och på basis av röntgendiffraktion är längd av dess kant 0.528 nm. Ifall densiteten är 4.82 g/cm^3 , hur många Cd^{2+} och S^{2-} joner är det per enhetscell?
5. (a) Anta Li_2O orenhetsdefekter i CaO , med Li^+ -joner som substitutionella defekter i stället för Ca^{2+} -joner. Vad är antalet sådana vakanser per Li^+ -jon? (b) Anta CaCl_2 orenhetsdefekter i CaO , med Cl^- -joner som substitutionella defekter i stället för O^{2-} -joner. Vad är antalet sådana vakanser per Cl^- -jon?
6. Beräkna merens molvikt för (a) polytetrafluoroetylen, (b) polymetyl metakrylat, (c) nylon 6,6 och (d) polyetylen tereftalat.
7. För en linjär polymermolekyl kan den totala längden L ges med hjälp av bindingslängden mellan atomer d , det totala antalet bindningar i molekylen N och vinkeln mellan närliggande atomer Θ som $L = Nd \sin(\Theta/2)$. För en serie polymermolekyler är sträckan mellan ändpunkterna $r = dn^{1/2}$. Bestäm L och r för linjärt polyetylen med molvikten $300\,000 \text{ g/mol}$.
8. Bestäm kiraliteten i nanotuben som illustreras i bilderna nedan.
9. Beräkna arean och volymen för en avskärd oktaeder som funktion av avståndet från mitten av klustern till mittpunkten av 111-sidorna r_{111} och till mittpunkten av 100-sidorna r_{100} . Du kan begränsa dig till fallet där 111-sidorna är sexkantiga.
10. För Co har följande värden för ytenergin rapporterats: fcc(001) $2,78 \text{ J/m}^2$, fcc(111) $2,70 \text{ J/m}^2$ (lägre värde är energetiskt fördelaktigt). Beräkna ytenergin för (a) en kubisk Co-fcc-kluster med alla yttre sidor 100, (b) en tetraedrisk Co-fcc-kluster med alla yttre sidor 111, och (c) en avskärd oktaedrisk CO-fcc-kluster med $r_{100}=r_{111}$, för klustrar med volymen 1000 nm^3 . Vilken av dessa former är energetiskt mest fördelaktigt?

