
V1: Bestimmung der Loschmidt-Zahl

Durchführende: Alea Tokita, Julia Stachowiak
Assistentin: Annemarie Kehl
Versuchsdatum: 09.11.2015
Datum der Abgabe: 16.11.2015

Werte:

$$\Delta\lambda = 676 \pm 52\text{nm}$$

$$d = 72 \pm 3\mu\text{m}$$

Inhaltsverzeichnis

1	Theoretische Grundlagen	3
1.1	Stoffmenge	3
1.2	Elementarzelle	3
1.3	Bestimmung der Loschmidt-Zahl	5
1.4	Bestimmung von a des Kalziumfluoridkristalls	6
2	Experimentelles	7
2.1	Versuchsaufbau	7
2.2	Hilfsmittel	7
2.3	Durchführung	7
3	Auswertung	7
4	Fehlerrechnung	8
4.1	Aluminiumzylinder	9
4.2	Lithiumfluoridkristall	10
4.3	Calciumfluoridkristall	10
5	Fehlerdiskussion	10
6	Literaturverzeichnis	10

1 Theoretische Grundlagen

1.1 Stoffmenge

Im Umgang mit chemischen Reaktionen müssen Stoffmengen betrachtet werden. Da jedoch die Teilchen, mit denen sich auseinandergesetzt wird so klein sind, ist es höchst unpraktisch mit den jeweiligen Teilchen Zahlen zu rechnen. Daher wurde die Einheit Mol eingeführt, in welcher die Stoffmenge angegeben wird. Diese Einheit ist so definiert, dass 1mol einer beliebigen Substanz dieselbe Anzahl von Teilchen (Moleküle, Atome, Ionen) enthält, wie die in 12g des Kohlenstoff-Isotops ^{12}C enthalten sind. Diese Zahl an Teilchen, die in einem Mol enthalten sind, wird durch die Loschmidt-Zahl N_A (oder auch Avogadro-Konstante oder Avogadro-Zahl) angegeben:

$$N_A = 6,02214129(27) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Mit dieser Zahl lässt sich nun die Molmasse M einer Substanz angeben, welche die Masse eines Mols einer Substanz in der Einheit $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ist. Analog bezeichnet das Molvolumen V_m das Volumen, welches von einem Mol eines Stoffes eingenommen wird. Dieses Volumen ist temperatur- und druckabhängig.

1.2 Elementarzelle

In einem Kristall sind Teilchen (Atome, Ionen, Moleküle) in symmetrischer und geordneter Weise in einem sich periodisch wiederholenden, dreidimensionalen Muster angeordnet. Diese Symmetrie eines Kristalls kann mithilfe eines Kristallgitters beschrieben werden. Indem die Mittelpunkte der Teilchen gedanklich durch Gitterpunkte ersetzt werden, lässt sich aus einer Kristallstruktur ein Kristallgitter ableiten.

||||| HEAD Ein Kristallgitter kann in lauter identische Elementarzellen zerlegt werden. Das Gitter ist also aus wiederholt in alle Raumrichtungen aneinandergereihte Elementarzellen aufgebaut. Dies lässt sich wieder auf die Kristallstruktur übertragen: Da der Kristall durch wiederholtes aneinanderlegen der Elementarzellen aufgebaut ist, muss die chemische Zusammensetzung einer Elementarzelle exakt der Zusammensetzung der Substanz entsprechen¹.

Je nach ihrer Symmetrie können Kristallgitter in Gittertypen eingeteilt werden, die sich in der Metrik ihrer Elementarzellen unterscheiden². Mithilfe von Röntgenstrahlung bekannter Wellenlänge kann die Struktur und Größe einer Elementarzelle, also ihre Gitterstruktur und Gitterkonstante a bestimmt werden. Hier eine Darstellung dieser Größe an den von uns vermessenen Kristallen:

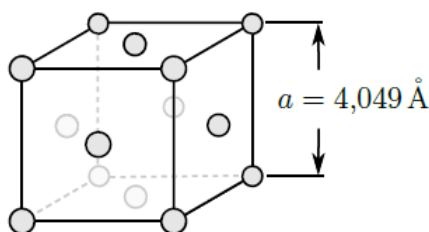
¹Vgl. Mortimer s. 180

²Vgl. Mortimer

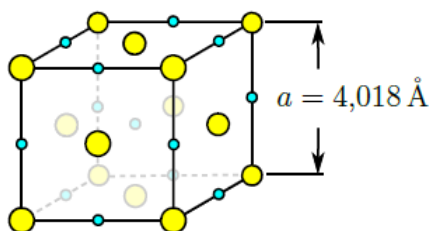
===== Ein Kristallgitter kann in lauter identische Elementarzellen zerlegt werden. Das Gitter ist also aus wiederholt in alle Raumrichtungen aneinandergereihte Elementarzellen aufgebaut. Dies lässt sich wieder auf die Kristallstruktur übertragen: Da der Kristall durch wiederholtes aneinanderlegen der Elementarzellen aufgebaut ist, muss die chemische Zusammensetzung einer Elementarzelle exakt der Zusammensetzung der Substanz entsprechen³.

Je nach ihrer Symmetrie können Kristallgitter in Gittertypen eingeteilt werden, die sich in der Metrik ihrer Elementarzellen unterscheiden⁴. Mithilfe von Röntgenstrahlung bekannter Wellenlänge kann die Struktur und Größe einer Elementarzelle, also ihre Gitterstruktur und Gitterkonstante a bestimmt werden. Hier einige Beispiele solcher Messungen, es sind die von uns zu vermessenden Kristalle:

~~~~~ origin/master



**Abbildung 1:** Kristallstruktur von Aluminium<sup>a</sup>



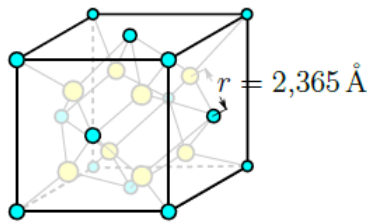
**Abbildung 2:** Kristallstruktur von Lithiumfluorid<sup>b</sup>

---

<sup>a,b,c</sup> Skriptum für das Praktikum zur Einführung in die Physikalische Chemie, Seite 2.

<sup>3</sup>Vgl. Mortimer, S. 180

<sup>4</sup>ebd.



**Abbildung 3:** Kristallstruktur von Kalziumfluorid<sup>c</sup>

In den Beispielen liegt bei den ersten beiden Kristallen ein kubisch-flächenzentriertes Gitter und bei dem letzten Kristall ein kubisch-flächenzentriertes Gitter aus  $\text{Ca}^{2+}$  – Ionen und ein kubisch-primitives Gitter aus  $\text{F}^-$  – Ionenvor. Des weiteren gibt es etwa tetragonale, hexagonale, rhomboedrische sowie viele weitere Strukturen.

Eine primitive Elementarzelle enthält von jeder Atomart nur ein äquivalentes Atom. Die acht Atome in den Eckpunkten der Elementarzellen gehören nur zu einem achtel zu der Elementarzelle, da an jeder Ecke acht Elementarzellen aufeinander treffen.

In einer flächenzentrierten Elementarzelle befinden sich in den Ecken und in den Mitten aller sechs Flächen äquivalente Atome. Ein Atom auf einer Fläche gehört der Zelle zur Hälfte, eines auf der Kante zu einem viertel und eines im Zentrum der Zelle ganz.

Mithilfe dieser Informationen lässt sich berechnen, wie viele Formeleinheiten  $N_Z$  auf eine Elementarzelle kommen. Beispielsweise kommt auf eine primitive Elementarzelle eine Formeleinheit, da wir acht Teilchen haben, die der Elementarzelle zu je einem achtel gehören.

Mithilfe folgender Überlegungen lässt sich die Masse  $m_Z$  einer Elementarzelle bestimmen:

$$m_Z = N_Z \cdot \frac{M}{N_A} \quad (1)$$

Das Volumen der Elementarzellen unserer zu untersuchender Kristalle lässt sich wie das Volumen eines Würfels folgendermaßen berechnen.

$$V_Z = a^3 \quad (2)$$

### 1.3 Bestimmung der Loschmidt-Zahl

Ziel des Versuchs ist es, die Loschmidt-Zahl  $N_A$  durch den Vergleich von makroskopischer Dichte  $p_{\text{makro}}$  mit mikroskopischer Dichte  $p_{\text{mikro}}$  von exakt geformten, zylindrischen Lithiumfluorid-, Calciumfluorid- und Aluminiumkristallen, zu bestimmen.

Die Makroskopische Dichte lässt sich durch Masse und Volumen der Probekörper wie folgt errechnen:

$$\rho_{makro} = \frac{m_{Zyl}}{V_{Zyl}} \quad (3)$$

Das Volumen des zylindrischen Probekörpers kann dabei durch genaue Bestimmung von Radius  $r$  und Länge  $l$  mithilfe folgender Formel bestimmt werden:

$$V_{zyl} = \pi \cdot r^2 \cdot l \quad (4)$$

Für die mikroskopische Dichte  $\rho_{mikro}$  einer Elementarzelle gilt, dass sie identisch zu der Makroskopischen Dichte ist, da ein Kristall durch die periodische Wiederholung seiner Elementarzellen aufgebaut ist.

$$\rho_{mikro} = \frac{m_Z}{V_Z} \quad (5)$$

Masse und Volumen der Elementarzelle lassen sich mithilfe der oben aufgeführten Gleichungen 1 und 2 berechnen. Somit gilt unter Annahme, dass die makroskopische Dichte identisch zur mikroskopischen ist:

$$\frac{m_{Zyl}}{V_{Zyl}} = \frac{N_Z \cdot M}{N_A \cdot a^3} \quad (6)$$

Dies lässt sich nun nach  $N_A$  umformen und ergibt folgende Formel zur Berechnung der Loschmidt-Zahl:

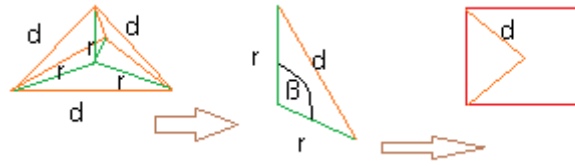
$$N_A = \frac{N_Z \cdot M \cdot V_{Zyl}}{a^3 \cdot m_{Zyl}} \quad (7)$$

## 1.4 Bestimmung von $a$ des Kalziumfluoridkristalls

Um die Loschmidt-Zahl zu bestimmen wird der Wert  $a$ , die Kantenlänge einer Elementarzelle, benötigt. Dieser ist für die meisten Kristalle schon gegeben, lediglich für den Kalziumchlorid-Kristall muss sie noch ermittelt werden. Abbildung 3 zeigt die Kristallstruktur von Kalziumfluorid. Es ist ein größeres kubisch-flächenzentriertes Gitter von  $\text{Ca}^{2+}$ -Ionen sowie ein darin liegendes, kleineres kubisch-primitives Gitter von  $\text{F}^-$ -Ionen erkennbar. Als Information ist uns der Abstand  $r$  von den Ionen gegeben. Bei genauerer Betrachtung des Kristalls ist zu erkennen, dass ein Fluorid-Ion tetraedrisch von je vier Kalzium-Ionen umgeben ist. Der Abstand vom Zentrum zu den Ecken des Tetraeders entspricht dabei dem Abstand  $r$ .

So lässt sich nun die Länge  $d$  mithilfe des Kosinussatzes berechnen, da der Winkel in einem Tetraeder allgemein mit  $109,5^\circ$  bekannt ist:

$$d = \sqrt{2r^2 - 2r^2 \cdot \cos \beta} = 3,863 \text{ \AA} \quad (8)$$



**Abbildung 4:** Berechnung von  $a$

Die Länge  $d$  ist die Hälfte der Flächen-diagonalen des Kalzium-Ionengitters. Da der Winkel zwischen den Flächen-diagonalen allgemein mit  $90^\circ$  bekannt ist, lässt sich wieder mithilfe des Kosinussatzes die Länge  $a$  berechnen:

$$d = \sqrt{2d^2 - 2d^2 \cdot \cos \gamma} = 5,463 \text{ \AA} \quad (9)$$

## 2 Experimentelles

### 2.1 Versuchsaufbau

### 2.2 Hilfsmittel

Als Hilfsmittel werden eine Analysewaage sowie eine Mikrometerschraube verwendet.

### 2.3 Durchführung

Für die Bestimmung der Loschmidt-Zahl werden die drei Kristalle jeweils zehnmal gewogen und ausgemessen. Mithilfe der Analysewaage wird die Masse  $m_{Zyl}$  bestimmt. Mit der Mikrometerschraube wird die Länge  $l$  und Durchmesser  $d$  gemessen. Im Umgang mit den Kristallen müssen Baumwollhandschuhe getragen werden.

## 3 Auswertung

Zur Bestimmung der Loschmidt -Zahl wird nach der in Kapitel 1.3 beschriebenen Vorgehensweise vorgegangen. Zuerst muss der Mittelwert der verschiedenen Messgrößen errechnet werden:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (10)$$

Für die gemessenen Werte ergeben sich somit folgende Mittelwerte:

**Aluminiumkristall:**

Masse  $\bar{m} = 9,9446 \text{ g}$

Durchmesser  $\bar{d} = 15,00 \text{ mm}$

Länge  $\bar{l} = 24,883 \text{ mm}$

**Lithiumfluorid-Kristall:**

Masse  $\bar{m} = 15,8498 \text{ g}$

Durchmesser  $\bar{d} = 25,88 \text{ mm}$

Länge  $\bar{l} = 11,96 \text{ mm}$

**Calciumfluorid-Kristall:**

Masse  $\bar{m} = 10,0479 \text{ g}$

Durchmesser  $\bar{d} = 19,98 \text{ mm}$

Länge  $\bar{l} = 10,00 \text{ mm}$

Mit  $r = \frac{d}{2}$  lassen sich mithilfe von Formel 4 folgende Volumina berechnen:

$$V_{\text{Aluminiumkristall}} = 6299 \text{ mm}^3$$

$$V_{\text{Lithiumfluorid-Kristall}} = 4398 \text{ mm}^3$$

$$V_{\text{Calciumfluoridkristall}} = 3138 \text{ mm}^3$$

Daraus ergeben sich für die Loschmidt-Zahl nach Formel 7 folgende Werte:

$$\text{Aluminium-Kristall: } N_A = 7,190 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{mit } N_Z = 4 \text{ und } a = 4,049 \cdot 10^{-7} \text{ mm}$$

$$\text{Lithiumfluoridkristall: } N_A = 6,360 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{mit } N_Z = 4 \text{ und } a = 4,018 \cdot 10^{-7} \text{ mm}$$

$$\text{Calciumchloridkristall: } N_A = 5,985 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\text{mit } N_Z = 4 \text{ und } a = 5,4627 \cdot 10^{-7} \text{ mm}$$

## 4 Fehlerrechnung

Fehler bei dem Versuch entstehen jeweils für jede der drei Messungen an dem Kristall. Einerseits muss der Fehler, der durch die Messungenauigkeit der Geräte entsteht, berücksichtigt werden und andererseits die jeweilige Standardabweichung des Mittelwer-



tes, da auch der Mittelwert nie vollständig korrekt ist. Diese beiden Fehler müssen für jede der drei Messgrößen berücksichtigt werden.

Die Gerätefehler sind für alle Messungen gleich:

$$\Delta m = 0,00005 \text{ g}$$

$$\Delta d = 0,005 \text{ mm}$$

$$\Delta l = 0,005 \text{ mm}$$

Die Standardabweichung des Mittelwertes muss für jede Messung einzeln ausgerechnet werden. Sie ergibt sich durch folgende Formel:

$$s_N = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (11)$$

Diese entstandenen Fehler setzen sich im Laufe der Rechnung fort und müssen bei der Berechnung von  $N_A$  mit berücksichtigt werden. Dafür wird die Gauß'sche Fehlerrechnungsformel angewandt:

$$\Delta f = \sqrt{\sum_i \left( \frac{\delta f}{\delta x_i} \cdot \Delta x_i^2 \right)} \quad (12)$$

Angewandt auf die Formel für  $N_A$  ergibt sich für den Fehler somit folgende Formel:

$$\Delta f = \sqrt{\left( \frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot 2d \cdot l}{m_{Zyl} \cdot a^3 \cdot 4} \right)^2 \cdot \Delta d^2 + \left( \frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot d^2 \cdot 1}{m_{Zyl} \cdot a^3 \cdot 4} \right)^2 \cdot \Delta l^2 - \left( \frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot d^2 \cdot l}{m_{Zyl} \cdot a^3 \cdot 4} \right)^2 \cdot \Delta m^2} \quad (13)$$

## 4.1 Aluminiumzylinder

Mithilfe der Standardabweichung des Mittelwertes wurden folgende Fehler für die einzelnen Größen berechnet:

$$\Delta m = 5,2068 \cdot 10^{-5} \text{ g} \quad \Delta d = 0,01659 \text{ mm} \quad \Delta l = 0,01059 \text{ mm}$$

Bei Vergleich der Gerätefehler wird deutlich, dass sich beide Fehler in ungefähr derselben Größenordnung befinden und somit keiner der beiden Fehler überwiegt und der andere vernachlässigt werden kann. Somit müssen die beiden Fehler für die verschiedenen Größen addiert werden und es ergeben sich folgende Werte:

$$\Delta m = 5,5207 \cdot 10^{-4} \text{ g} \quad \Delta d = 0,02159 \text{ mm} \quad \Delta l = 0,01059 \text{ mm}$$

Nach der Gaußschen Fehlerfortpflanzung ergibt sich somit für die mithilfe des Aluminiumzylinders errechnete Loschmidt-Zahl  $N_A$  folgender Fehler:

$$\Delta_f = 2,092 \cdot 10^{21} \text{ mol}^{-1}$$

## 4.2 Lithiumfluoridkristall

## 4.3 Calciumfluoridkristall

# 5 Fehlerdiskussion

Die "wahre" Loschmidt-Zahl müsste zwischen den Werten liegen

# 6 Literaturverzeichnis

- 1 Götze, Eckhold: *Skriptum zur Einführung in die physikalische Chemie*, Institut für physikalische Chemie, Uni Göttingen, **2015**.
- 2 *Skriptum für das Praktikum zur Einführung in die Physikalische Chemie*, Institut für physikalische Chemie, Uni Göttingen, **2015**.
- 3 Charles E. Mortimer, Ulrich Müller: *Das Basiswissen der Chemie*, 7. Auflage, Georg Thieme Verlag, Stuttgart **2003**.