# V1: Bestimmung der Loschmidt-Zahl

Durchführende: Alea Tokita, Julia Stachowiak

Assistentin: Annemarie Kehl

Versuchsdatum: 09.11.2015 Datum der Abgabe: 16.11.2015

Werte:

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

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

# Inhaltsverzeichnis

1	Theoretische Grundlagen	3
	1.1 Stoffmenge	3
	1.2 Elementarzelle	
	1.3 Bestimmung der Loschmidt-Zahl	5
2	Experimentelles	6
3	Messwerte	6
4	Auswertung	6
5	Fehlerrechnung	7
	5.1 Aluminiumzylinder	8
	5.2 Lithiumfluoridkristall	9
	5.3 Calciumfluoridkristall	9
6	Fehlerdiskussion	9
7	Literaturverzeichnis	9

## 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 Sunstanz in der Einheit  $g \cdot \text{mol}^{-1}$  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

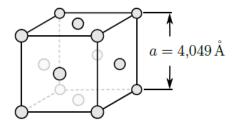
In einem Kristall sind Teilchen (Atome, Ionen, Moleküle) in symmetrischer und geordneter Weise in einem sich periodisch wiederholenden, dreidimensionalen Muster angeordnet. Diese Symmetrie eines Kristalls kann mithilfe eines Kristallgitters beschrieben werden. Indem die Mittelpunkte der Teilchen gedanklich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

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 entsprechen<sup>1</sup>.

Je nach ihrer Symmetrie können Kristallgitter in Gittertypen eingeteilt werden, die sich in der Metrik ihrer Elementarzellen unterscheiden<sup>2</sup>. Mithilfe von Röntgenstrahlung bekannter Wellenlänge kann die Strukur und Größe einer Elementarzelle, also ihre Gitterstruktur und Gitterkonstante a bestimmt werden. Hier eine Darstellung dieser Größe an den von uns vermessenen Kristallen:

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Vgl. Mortimer s. 180

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Vgl. Mortimer



**Abbildung 1:** Kristallstruktur von Aluminium

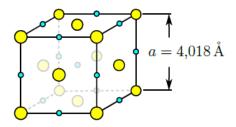


Abbildung 2: Kristallstruktur von Lithiumflourid

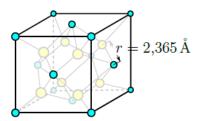


Abbildung 3: Kristallstruktur von Calciumflourid

In den Bespielen liegt bei den ersten beiden Kristallen ein kubisch-flächenzentriertes Gitter und bei dem letzen Kristall ein kubisch-flächenzentriertes Gitter aus  $Ca^{2+}$  – Ionen und ein kubisch-primitives Gitter aus  $F^-$  – 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:

$$m_Z = Nz \cdot \frac{M}{N_A} \tag{1}$$

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

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

## 1.3 Bestimmung der Loschmidt-Zahl

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

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

$$p_{makro} = \frac{m_{Zyl}}{V_{Zyl}} \tag{3}$$

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

$$V_{zul} = \pi \cdot r^2 \cdot l \tag{4}$$

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

$$p_{mikro} = \frac{m_Z}{V_Z} \tag{5}$$

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:

$$\frac{m_{Zyl}}{V_{Zyl}} = \frac{Nz \cdot M}{N_A \cdot a^3} \tag{6}$$

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

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

## 2 Experimentelles

#### 3 Messwerte

## 4 Auswertung

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

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{8}$$

Für die gemessenen Werte ergeben sich somit folgende Mittelwerte:

#### Aluminiumkristall:

Masse  $\bar{m}=9,9446\,$  g Durchmesser  $\bar{d}=15,00\,$  mm Länge  $\bar{l}=24,883\,$  mm

#### Lithiumfluorid-Kristall:

Masse  $\bar{m} = 15,8498~{\rm g}$ Durchmesser  $\bar{d} = 25,88~{\rm mm}$  Länge  $\bar{l} = 11,96 \, \text{mm}$ 

#### Calciumfluorid-Kristall:

Masse  $\bar{m}=10,0479~{\rm g}$ Durchmesser  $\bar{d}=19,98~{\rm mm}$ Länge  $\bar{l}=10,00~{\rm mm}$ 

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

 $V_{Aluminiumkristall} = 6299 \text{mm}^3$   $V_{Lithiumfluorid-Kristall} = 4398 \text{mm}^3$  $V_{Calciumfluoridkristall} = 3138 \text{mm}^3$ 

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

Aluminium-Kristall:  $N_A=7,190 \cdot 10^{23} \mathrm{mol}^{-1}$  mit  $N_Z=4$  und  $a=4,049 \cdot 10^{-7} \mathrm{mm}$ 

Lithiumfluoridkristall:  $N_A=6,360\cdot 10^{23} \rm{mol}^{-1}$  mit  $N_Z=4$  und  $a=4,018\cdot 10^{-7} \rm{mm}$ 

Calcium chloridkristall:  $N_A=5,985\cdot 10^{23} \text{mol}^{-1}$  mit  $N_Z=4$  und  $a=5,4627\cdot 10^{-7} \text{mm}$ 

## 5 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 Standartabweichung des Mittelwertes, 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 Standartabweichung des Mittelwertes muss für jede Messung einzeln ausgerechnet werden. Sie ergibt sich durch folgende Formel:

$$s_N = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2}$$
 (9)

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

$$\Delta f = \sqrt{\sum_{i} \left(\frac{\delta f}{\delta x_i} \cdot \Delta x_i^2\right)} \tag{10}$$

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

$$\Delta f = \sqrt{\left(\frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot 2d \cdot l}{m_Z y l \cdot a^3 \cdot 4}\right)^2 \cdot \Delta d^2 + \left(\frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot d^2 \cdot 1}{m_Z y l \cdot a^3 \cdot 4}\right)^2 \cdot \Delta l^2 - \left(\frac{N_z \cdot M \cdot \pi \cdot d^2 \cdot l}{m_Z y l^2 \cdot a^3 \cdot 4}\right)^2 \cdot \Delta m^2}$$
(11)

## 5.1 Aluminiumzylinder

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

$$\Delta m = 5,2068 \cdot 10^{-5} \text{ g}$$
  $\Delta d = 00,01659 \text{ mm}$   $\Delta l = 0,01059 \text{ mm}$ 

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:

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

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

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

## 5.2 Lithiumfluoridkristall

## 5.3 Calciumfluoridkristall

# 6 Fehlerdiskussion

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

## 7 Literaturverzeichnis