

## GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

### Lösung zur 12. Übung: Röntgenbeugung am Kristallpulver

#### Aufgabe 1:

Substanz 1								
Nr.	$2\Theta [^\circ]$	I	$\sin^2 \Theta$	$\Delta_{\sin^2 \Theta}$	$N_{=h^2+k^2+l^2}$	$\frac{\lambda^2}{4a^2}$	$d$	$hkl$
1	43.0	4622	0.13432	—	3	0.04477	2.1034	111
2	50.1	2114	0.17928	0,04496	4	0.04482	1.7874	200
3	73.6	917	0.35883	0,17955	8	0.04485	1.2869	220
4	89.0	783	0.49127	0,13244	11	0.04466	1.0998	311
5	94.2	224	0.53662	0,04535	12	0.04472	1.0523	222
6	115.7	141	0.71683	0,18021	16	0.04480	0.91051	400
7	134.8	409	0.85232	0,13549	19	0.04486	0.83501	331
8	142.8	367	0.89826	0,04594	20	0.04491	0.81337	420
$(\lambda^2/4a^2) \approx 0.044798$						$\Rightarrow$	$a \approx 3.638 \text{ \AA}$	

Genauer Wert aus ASTM-Kartei für Kupfer:  $a = 3.615 \text{ \AA}$

Substanz 2								
Nr.	$2\Theta [^\circ]$	I	$\sin^2 \Theta$	$\Delta_{\sin^2 \Theta}$	$N_{=h^2+k^2+l^2}$	$\frac{\lambda^2}{4a^2}$	$d$	$hkl$
1	27.3	1051	0.05569	—	3	0.01856	3.2666	111
2	31.5	8109	0.07368	0.01799	4	0.01842	2.8400	200
3	45.3	4452	0.14830	0.07462	8	0.01854	2.0018	220
4	53.7	164	0.20399	0.05569	11	0.01854	1.7068	311
5	56.2	1212	0.22185	0.01786	12	0.01849	1.6367	222
6	65.8	481	0.29504	0.07319	16	0.01844	1.4192	400
7	72.2	87	0.35131	0.05627	19	0.01849	1.3006	331
8	74.8	892	0.36891	0.01760	20	0.01845	1.2692	420
$(\lambda^2/4a^2) \approx 0.01846$						$\Rightarrow$	$a \approx 5.674 \text{ \AA}$	

Genauer Wert aus der ASTM-Kartei für NaCl:  $a = 5.6402 \text{ \AA}$ .

## Aufgabe 2:

mit Hilfe von $d = 2.09$ ; $I = 100$	$d = 2.82$ ; $I = 100$
$d = 1.81$ ; $I = 46$	$d = 1.99$ ; $I = 55$
und $d = 1.28$ ; $I = 20$	$d = 1.63$ ; $I = 15$

findet man Kupfer bzw. Natriumchlorid (siehe Aufgabenblatt Anhang A2).

## Aufgabe 3:

Kupfer hat eine kubisch flächenzentrierte Struktur (kubisch dichteste Packung), Natriumchlorid ebenfalls, jedoch sind hier 2 verschiedene Atome beteiligt.

## Aufgabe 4:

In der kubisch dichtesten Packung berühren sich die Atome entlang der Flächendiagonale.

$$d_{110,Cu} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{3.638 \text{ \AA}}{\sqrt{2}} = 2.572 \text{ \AA}$$

(Zum Vergleich: Atomradius nach Pauling für Kupfer = 1.28 Å.)

Beim Natriumchlorid berühren sich auf jeder Kante der Elementarzelle abwechselnd Chlorid- und Natriumionen. Der Abstand beider beträgt dabei die Hälfte der Kantenlänge:

$$d_{Na-Cl} = \frac{a}{2} = \frac{5.674 \text{ \AA}}{2} = 2.837 \text{ \AA}$$

## Aufgabe 5:

Dichte ist Masse pro Volumen:  $\rho = \frac{m}{V} = \frac{Z_{\text{Formeleinheiten/Elementarzelle}} \cdot m_{\text{Atom}}}{V_{\text{EZ}}}$

Mit den Angaben aus der ASTM-Karte für Kupfer folgt:

$$M_{\text{Cu,molar}} = \frac{\rho \left[ \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right] \cdot a_0^3 [\text{\AA}^3] \cdot 10^{-24} \left[ \frac{\text{cm}^3}{\text{\AA}^3} \right]}{Z_{\text{Cu/EZ}} \cdot \frac{1}{6.022 \cdot 10^{23} \left[ \frac{\text{Atome}}{\text{mol}} \right]}} = \frac{8.936 \cdot 3.6150^3 \cdot 6.022}{4 \cdot 10^{24} \cdot 10^{-23}} \frac{\text{g}}{\text{mol}} \approx 63.55 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Für Natriumchlorid folgt:

$$M_{\text{NaCl,molar}} = \frac{\rho \left[ \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right] \cdot a_0^3 [\text{\AA}^3] \cdot 10^{-24} \left[ \frac{\text{cm}^3}{\text{\AA}^3} \right]}{Z_{\text{NaCl/EZ}} \cdot \frac{1}{6.022 \cdot 10^{23} \left[ \frac{\text{Atome}}{\text{mol}} \right]}} = \frac{2.164 \cdot 5.674^3 \cdot 6.022}{4 \cdot 10^{24} \cdot 10^{-23}} \frac{\text{g}}{\text{mol}} \approx 59.51 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Dies stimmt recht gut mit den zu erwartenden molaren Massen von Kupfer ( $63.546 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ ) und NaCl ( $58.4428 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ ) überein.