

Beskrivning, uträkning av nödvändiga värden	1
Plottar ration för SC.....	1
Plottar ration för BCC	2
Plottar ration för FCC.....	3
Visar a	4

Beskrivning, uträkning av nödvändiga värden

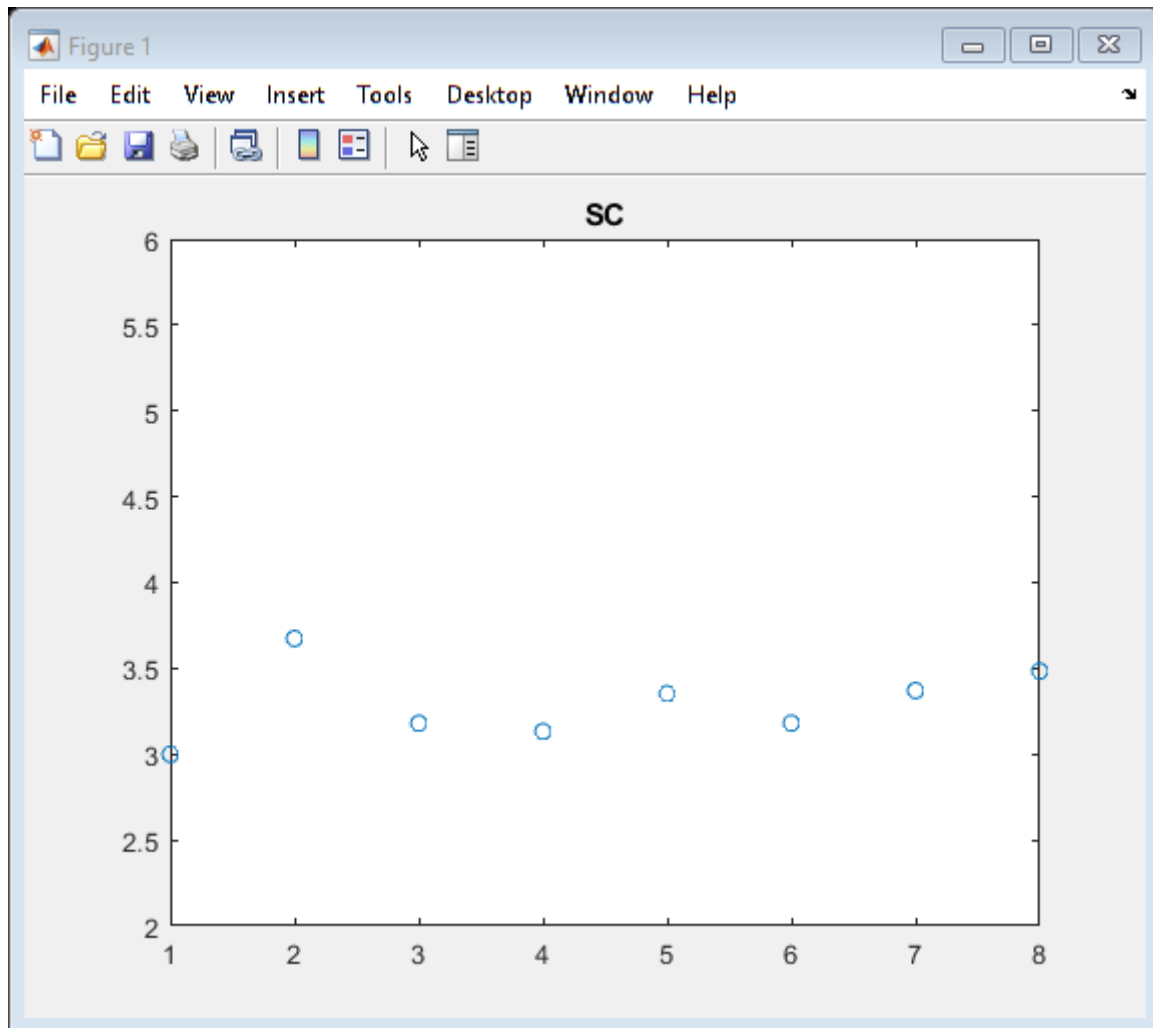
En lösning i MATLAB verkade enklast då många beräkningar krävs. Först räknas sinus av de uppmätta vinklarna upp. Sedan räknas de 8 första värdena på $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ut enligt tabell. För kristallstrukturen vi söker blir $\sqrt{h^2+k^2+l^2}/\sin(\theta) = 2*a/\lambda$, alltså ett konstant värde. För varje kristallstruktur plottas dessa värden. För både SC och BCC blev det inte konstant, men för FCC blev det (i princip) konstant. Därmed är FCC den sökta kristallstrukturen. Konstanten a räknas sedan ut separat för varje (vinkel, hkl)-kombination. Det slutgiltiga värdet på a är medelvärde av alla beräknade a-n, och detta blir ca. 4 Å.

%Räknar ut nödvändiga värden

```
lambda = 1.54;
anglesdeg = [19.48,22.64,33.0,39.68,41.83,50.35,57.05,59.42];
sinusangles = sind(anglesdeg);
hklSC = sqrt([1,2,3,4,5,6,8,9]);
hklBCC = sqrt([2,4,6,8,10,12,14,16]);
hklFCC = sqrt([3,4,8,11,12,16,19,20]);
```

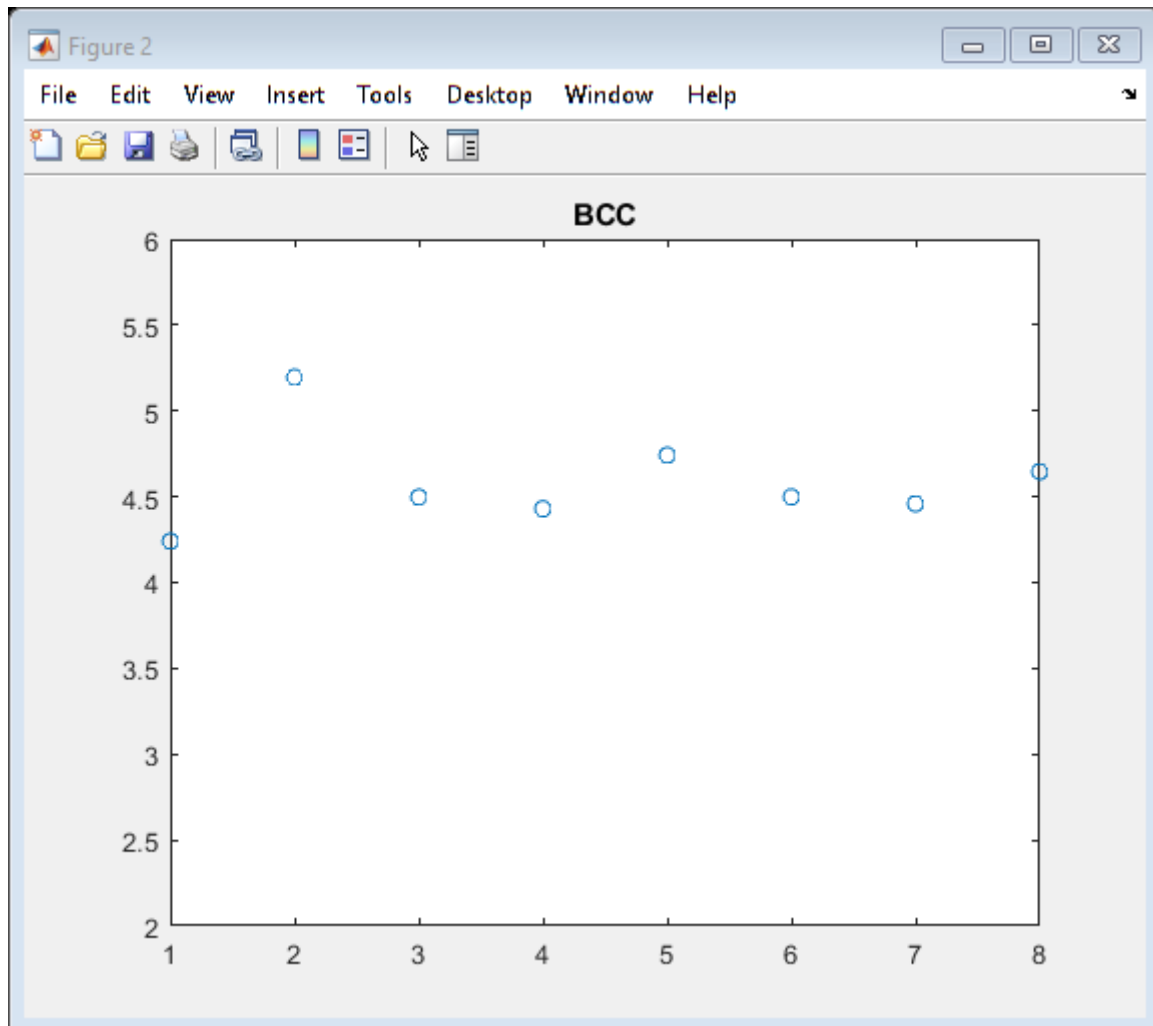
Plottar ration för SC

```
figure(1)
Scratio = hklSC./sinusangles;
plot(1:8,Scratio,'o')
title('SC')
ylim([2 6])
```



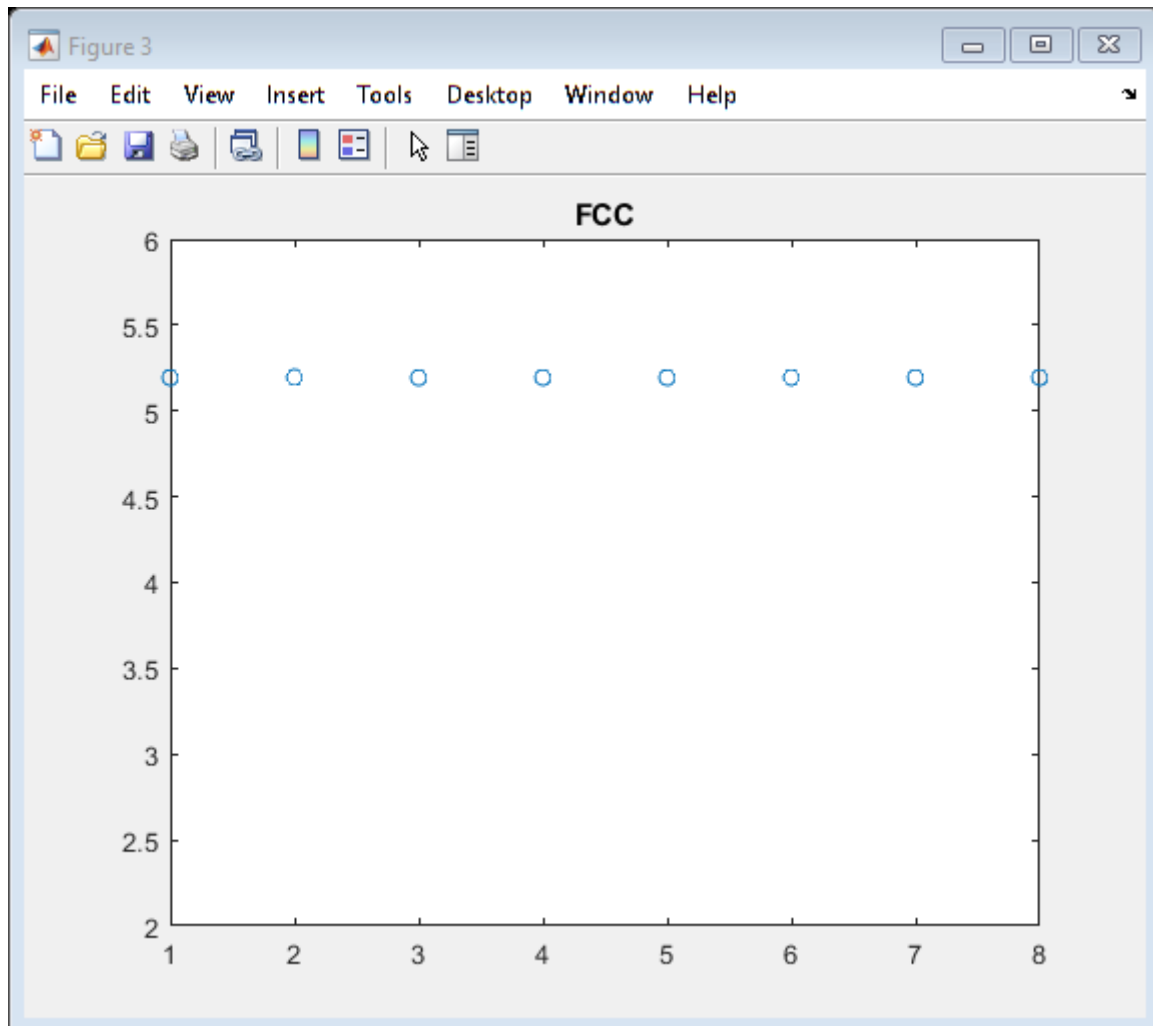
Plottar ration för BCC

```
figure(2)
BCCratio = hklBCC./sinusangles;
plot(1:8, BCCratio, 'o')
title('BCC')
ylim([2 6])
```



Plottar ration för FCC

```
figure(3)
FCCratio = hklFCC./sinusangles;
plot(1:8,FCCratio,'o')
title('FCC')
ylim([2 6])
```



Visar a

```
%Ration för FCC är nästan konstant, så detta är den sökta strukturen  
a = mean(lambda/2 * FCCratio);  
disp(a) %3.9997
```

3.9997