

Anorganische Chemie 3 (ACIII) WS 2011, Übung 5

Indizieren Sie (in Zweiergruppen) das in der Tabelle angegebene, mit Cu-Strahlung ($\lambda = 154,178$ pm) vermessene Pulverdiagramm, bestimmen Sie unter Annahme einer kubischen Elementarzelle die Gitterkonstante a sowohl graphisch als auch numerisch, und vervollständigen Sie die Tabelle. Beachten Sie dabei

- die Bragg-Gleichung in der Form $\lambda = 2d_n \cdot \sin\theta_n$ bzw. $\lambda = 2d_{hkl} \cdot \sin\theta_{hkl}$,
- dass für kubische Kristalle die Beziehung $a = (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \cdot d_{hkl}$ gilt, mit $h^2 + k^2 + l^2 = \Sigma$,
- dass diese Beziehung Geradengleichungen mit den Steigungen $(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ beschreibt, und Indizierung und Gitterkonstantenbestimmung somit graphisch in einem a vs. d Diagramm unter Verwendung eines Papierstreifens geschehen kann, auf dem die d_n -Werte abgetragen werden,
- dass Indizierung und Gitterkonstantenbestimmung auch numerisch durchgeführt werden kann, da gemäß $1/d_{hkl}^2 = (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 1/a^2$ die $1/d_{hkl}^2$ ganzzahlige Vielfache von $1/a^2$ sind bzw. sein müssen.

Namen, Vornamen:

n	I_n/I_0	$\theta_n/^\circ$	d_n	Σ	hkl	a_n und a
1	10	21,675				
2	4	25,250				
3	2	37,100				
4	3	45,000				
5	1	47,625				
6	1	58,525				
7	2	68,250				
8	2	72,350				
Mittelwert aller a_n						