

## Anorganische Chemie 3 (ACIII), 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

- a) die Bragg-Gleichung in der Form  $\lambda = 2d_n \cdot \sin\theta_n$  bzw.  $\lambda = 2d_{hkl} \cdot \sin\theta_{hkl}$ ,
- b) dass für kubische Kristalle die Beziehung  $a = (h^2+k^2+l^2)^{1/2} \cdot d_{hkl}$  gilt, mit  $h^2+k^2+l^2 = \Sigma$ ,
- c) 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,
- d) 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	$I_n/I_0$	$\theta_n/^\circ$	$d_n$	$\Sigma$	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 $a_n$						