

DYFRAKCJA NA KRYSZTAŁACH – INSTRUKCJA WYKONANIA PROJEKTU

Nr	Numer indeksu	Wzór sumaryczny	Numer w bazie COD*
1	292814	TiO ₂ (struktura rutylu)	4102355
2	400872	TiO ₂ (struktura anatazu)	1010942
3	405021	TiO	1536851
4	405024	SiO ₂	1011172
5	405667	NiO	1010093
6	405926	NiO ₂	1522025
7	406264	CrO ₂	1516110
8	406720	CuO	1011148
9	406792	Cu ₂ O	9007497
10	406806	Al ₂ O ₃	1000032
11	407295	AlO	4124784
12	407316	BaO ₂	1010113
13	407607	BaO	1527735
14	407696	CaO	1000044
15	408118	UO ₂	1541665
16	408464	ZrO ₂	1525705

* <http://www.crystallography.net/cod/>

Lista zadań:

1. Proszę narysować komórkę elementarną.
2. Proszę ustawić komórkę elementarną zgodnie z jedną z głównych osi krystalograficznych, a następnie wskazać co najmniej jeden element symetrii (oś obrotu, płaszczyzna symetrii).
3. Proszę podać warunki wygaszeń systematycznych w danej grupie przestrzennej (można skorzystać ze strony <http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/mainmenu.htm>).
4. Proszę zasymulować dyfraktogram dla promieniowania lampy o anodzie Cu K- α w zakresie 2θ od 10° do 80° .
5. Proszę znaleźć najmniejszą odległość między metalem a tlenem.
6. Proszę znaleźć odległość pomiędzy płaszczyznami w rodzinie, dla której suma $h+k+l$ obliczona dla refleksów widocznych na zasymulowanym dyfraktogramie przyjmuje najmniejszą wartość.

Wskazówka:

Do realizacji projektu należy wykorzystać program PowderCell. Wersję 2.3 programu można pobrać ze strony http://mill2.chem.ucl.ac.uk/ccp/web-mirrors/powdcell/a_v/v_1/powder/e_cell.html. Wygenerowane w programie obrazy należy dołączyć do sprawozdania.

Termin przesłania sprawozdania: środa 7 grudnia 2022.