

| | | | | |
|---|---------------------------------------|---|------------------|-------------------------------|
| Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej | Autor/Autorzy: Maciej Szeptuch | Rok: 2025 | Grupa: 2 | Zespół: n/d |
| PRACOWNIA FIZYCZNA WFiS | | Analiza Tlenku Żelaza przy pomocy programu PowderCell | | Ćwiczenie nr: 1 |
| Data wykonania: 2025-12-10 | Data oddania: 2025-12-10 | Zwrot do popr.: | Data oddania: | Data zaliczenia: Ocena: |

1 Rysowanie komórki elementarnej

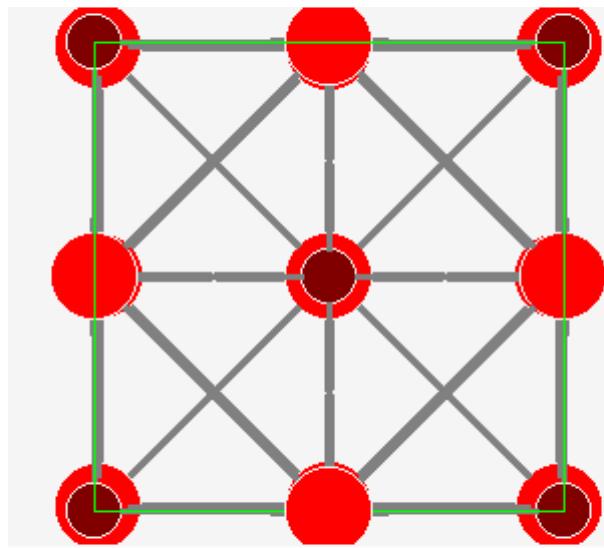
Pobrano plik .cif z bazy COD (Crystallography Open Database) o ID: 1011169. Niestety program PowderCell w wersji 2.4 nie oferuje możliwości importu plików .cif, dlatego parametry sieci należy wpisać manualnie.

The screenshot shows the 'RDZA' tab selected in the top menu. Below it, the 'lattice constants' section is visible, containing fields for space-group (I225), setting (1), and crystal system (F 4/m -3 2/m). It also displays the number of atoms in the unit cell (8.0, 8 pos). Below these are input fields for lattice parameters: a (4.3320), b (4.3320), c (4.3320), alpha (90.0000), beta (90.0000), and gamma (90.0000). Further down, the cell volume is listed as 81.295 Å³, density as 5.870 g/cm³, relative mass as 287.386, and mass absorption coefficient as 242.282 cm². At the bottom, there is a table listing atoms in the unit cell:

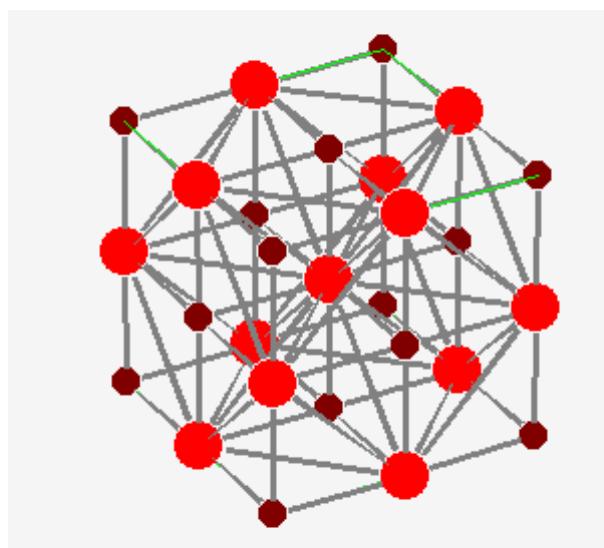
| | name | Z | ion | Wyck | x | y | z | SOF | B (temp) |
|---|------|----|------|------|---------|---------|---------|--------|----------|
| 1 | Fe | 26 | Fe2+ | 4a | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 | 1.0000 | 0.0000 |
| 2 | O | 8 | O2- | 4b | 0.50000 | 0.50000 | 0.50000 | 1.0000 | 0.0000 |

Rys. 1.1: Ustawienia importu do programu PowderCell.

W ten otrzymano następującą komórkę elementarną:



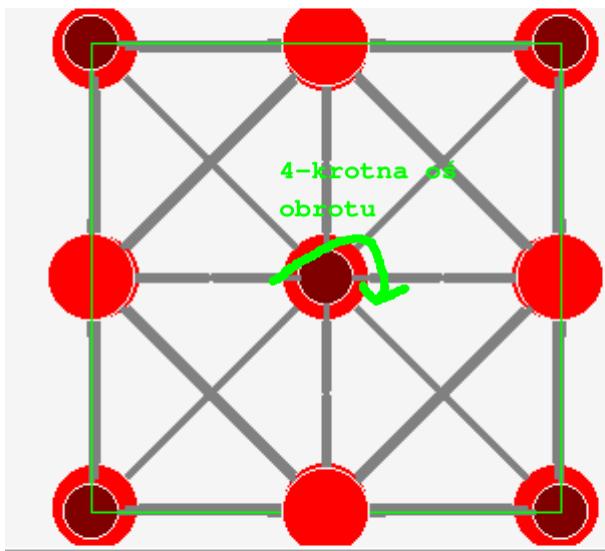
Rys. 1.2: Komórka elementarna w rzucie z góry



Rys. 1.3: Komórka elementarna w rzucie z boku

2 Oś główna

Ustawiono komórkę elementarną wzdłuż osi głównej pokrywającej się z osią c. Osiągnięto symetrię poczwórną przy obrocie o 90° .



Rys. 2.1: 4-krotna osь symetrii

3 Warunki wygaszeń systematycznych w grupie Fm-3m

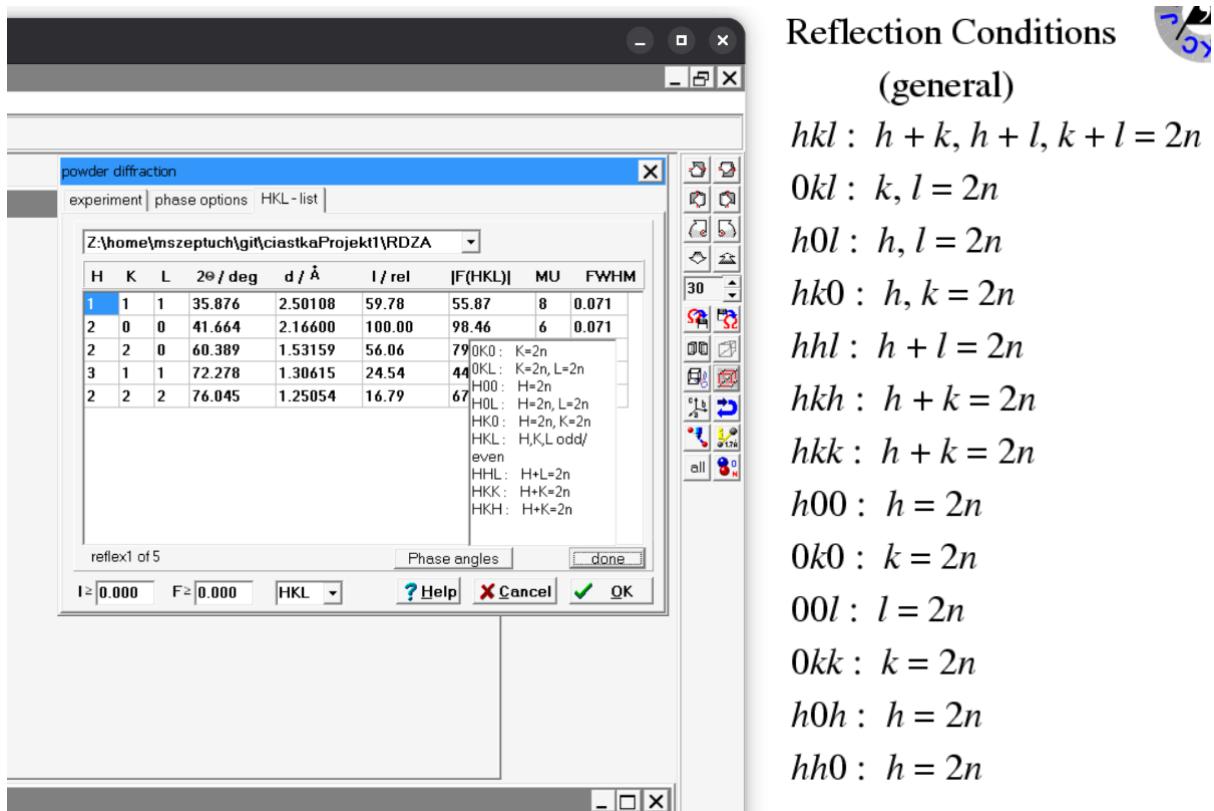
Związek FeO należy do grupy przestrzennej nr 225 (Fm-3m). Ta grupa posiada warunki **odbicia** przedstawione na rysunku [Warunki odbicia](#).

Wskazówka

zestawiono odczyt z programu PowderCell z danymi ze strony img.chem.ucl.ac.uk.

Co przekłada się na następujące warunki **wygaszeń systematycznych**:

| | |
|-------|------------------------|
| HKL : | $H+K, H+L, K+L = 2n+1$ |
| 0KL : | $K = 2n+1, L = 2n+1$ |
| H0L : | $H = 2n+1, L = 2n+1$ |
| HK0 : | $H = 2n+1, K = 2n+1$ |
| HHL : | $H+L = 2n+1$ |
| HKH : | $H+K = 2n+1$ |
| KKK : | $H+K = 2n+1$ |
| H00 : | $H = 2n+1$ |
| 0K0 : | $K = 2n+1$ |
| 00L : | $L = 2n+1$ |
| 0KK : | $K = 2n+1$ |
| H0H : | $H = 2n+1$ |
| HH0 : | $H = 2n+1$ |

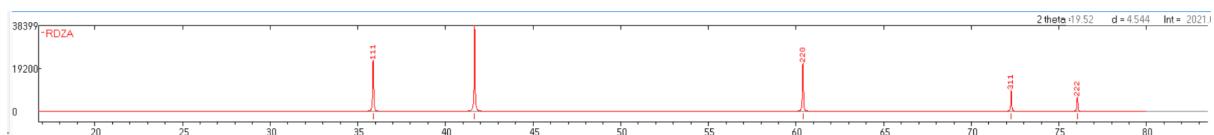


Rys. 3.1: Warunki odbicia

4 Dyfrakcja

Wykonano symulację dyfrakcji rentgenowskiej zgodnie z parametrami zadania:

- Lampa Cu k_{α} ,
- Kąt 2Θ od 10° do 80° ,



Rys. 4.1: Dyfraktogram uzyskany w programie PowderCell na sieci FeO.

5 Odległości żelaza i tlenu

Poniższy rysunek przedstawia długości poszczególnych wiązań.

| generated pos. | bond length | bond angles | spacegroup | site symmetry | subgroups |
|--|-------------|-------------|------------|---------------|-----------|
| Z:\home\mszeptuch\git\ciastkaProjekt1\RDZA | | | | | |
| No atom1 atom2 distance quant | | | | | |
| 1 | Fe | O | 2.1660 | 1 | |

Rys. 5.1: Długość wiązania Fe-O w sieci krystalicznej FeO.

6 Odległość między płaszczyznami

Odczytano następujące wartości odległości dla poszczególnych rodzin płaszczyzn:

| H | K | L | 2θ / deg | d / Å | I / rel | F(HKL) | MU | FWHM |
|---|---|---|----------|---------|---------|--------|----|-------|
| 1 | 1 | 1 | 35.876 | 2.50108 | 59.78 | 55.87 | 8 | 0.071 |
| 2 | 0 | 0 | 41.664 | 2.16600 | 100.00 | 98.46 | 6 | 0.071 |
| 2 | 2 | 0 | 60.389 | 1.53159 | 56.06 | 79.34 | 12 | 0.071 |
| 3 | 1 | 1 | 72.278 | 1.30615 | 24.54 | 44.89 | 24 | 0.071 |
| 2 | 2 | 2 | 76.045 | 1.25054 | 16.79 | 67.41 | 8 | 0.071 |

Rys. 6.1: Odległości między płaszczyznami dla różnych rodzin (hkl).

Dla rodziny płaszczyzn (200), suma $h + k + l = 2$ jest najmniejsza, stąd $d_{200} = 2.166$.

7 Literatura

- <https://www.crystallography.net/cod/result.php> ID: 1011169 Dostęp: 2025-11-26
- <http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/225az1.htm>