

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej	Autor/Autorzy: Maciej Szeptuch		Rok: 2025	Grupa: 2	Zespół: n/d
PRACOWNIA FIZYCZNA AGH		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

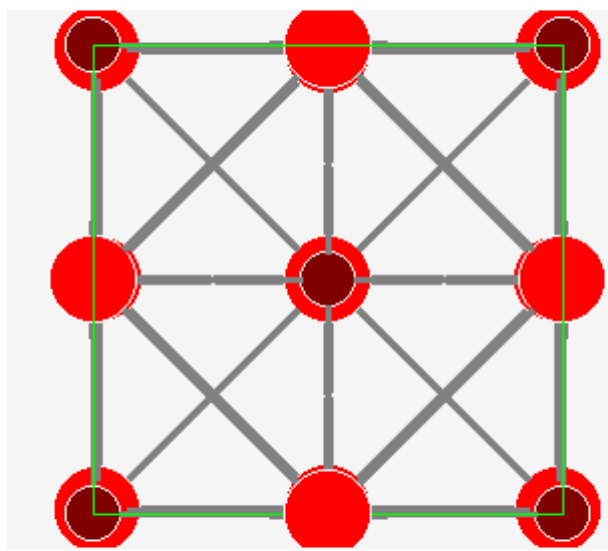
Pobrano plik .cif z bazy COD (Crystallography Open Database) o ID: 1011169. Niestety program PowderCell w wersji 2.4 nie oferuje możliwości importu plików .cif, dlatego parametry sieci należy wpisać manualnie.

The screenshot shows the PowderCell software interface. At the top, there is a dropdown menu labeled 'RDZA'. Below it, the 'lattice constants' section is active. It displays the space group as 'F 4/m -3 2/m' and the number of atoms in the cell as '8.0 (8 pos)'. The lattice parameters are set to a = 4.3320, b = 4.3320, c = 4.3320, α = 90.0000, β = 90.0000, and γ = 90.0000. Below these, the cell volume is 81.295 Å³, density is 5.870 g/cm³, and relative mass is 287.386. A table at the bottom lists the atoms in the unit cell:

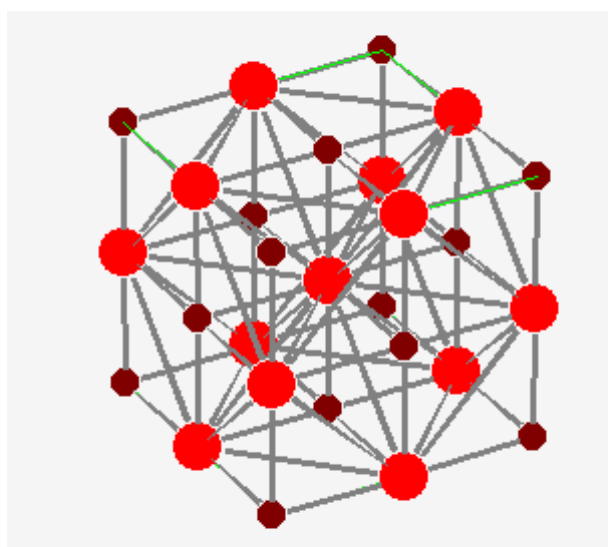
	name	Z	ion	Wyck	x	y	z	SOF	B (temp)
1	Fe	26	Fe2+	4a	0.00000	0.00000	0.00000	1.0000	0.0000
2	O	8	O2-	4b	0.50000	0.50000	0.50000	1.0000	0.0000

Rys. 1.1: Ustawienia importu do programu PowderCell.

W ten otrzymano następującą komórkę elementarną:



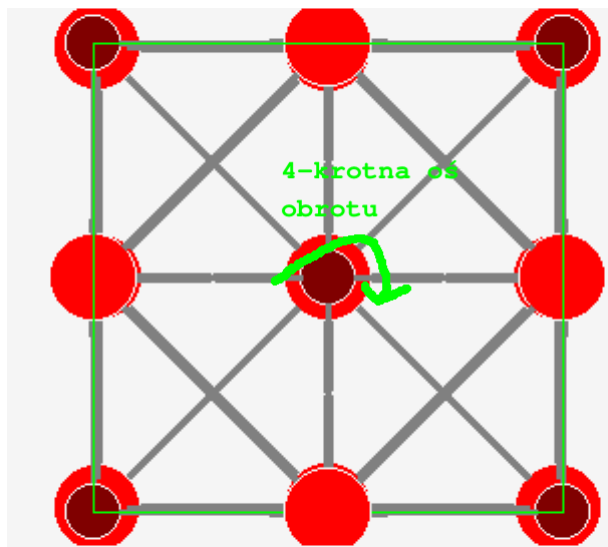
Rys. 1.2: Komórka elementarna w rzucie z góry



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 oś symetrii

3 Warunki wygaszeń systematycznych w grupie Fm-3m

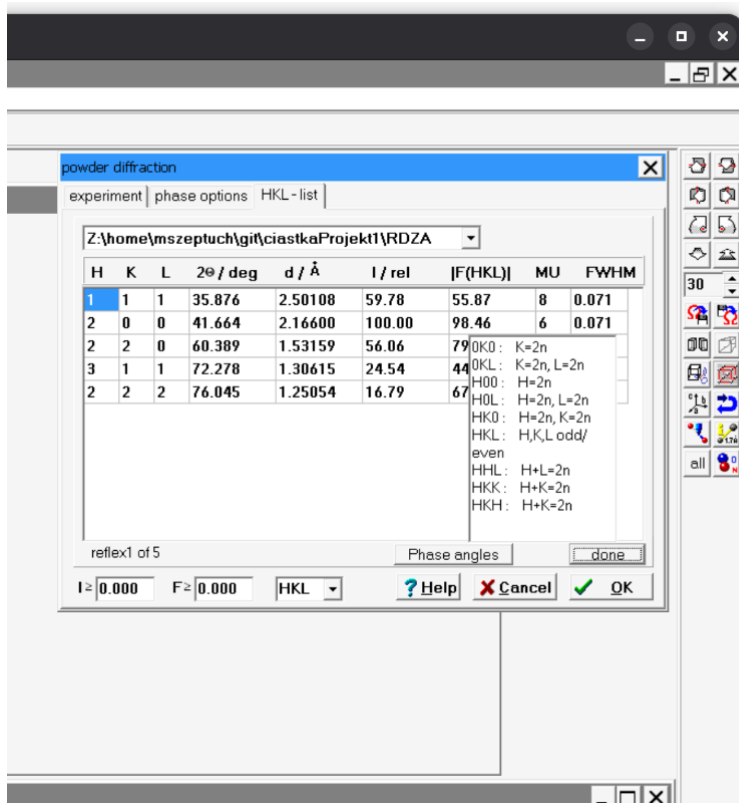
Związek FeO należy do grupy przestrzennej nr 225 (Fm-3m). Ta grupa posiada warunki odbicia przedstawione na rysunku *Warunki odbicia*.

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 : $H+K=2n+1$
HKK : $H+K=2n+1$
H00 : $H=2n+1$
0K0 : $K=2n+1$
00L : $L=2n+1$
0KK : $K=2n+1$
H0H : $H=2n+1$
HH0 : $H=2n+1$



Reflection Conditions



(general)

$$hkl : h + k, h + l, k + l = 2n$$

$$0kl : k, l = 2n$$

$$h0l : h, l = 2n$$

$$hk0 : h, k = 2n$$

$$hhl : h + l = 2n$$

$$hkh : h + k = 2n$$

$$hkk : h + k = 2n$$

$$h00 : h = 2n$$

$$0k0 : k = 2n$$

$$00l : l = 2n$$

$$0kk : k = 2n$$

$$h0h : h = 2n$$

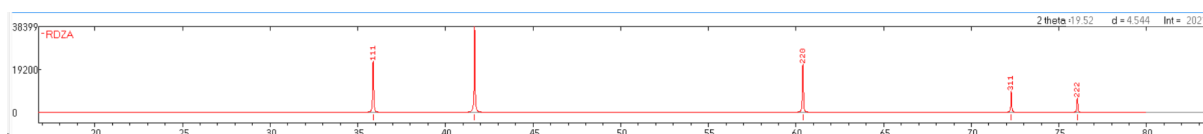
$$hh0 : h = 2n$$

Rys. 3.1: Warunki odbicia

4 Dyfrakcja

Wykonano symulację dyfrakcji rentgenowskiej zgodnie z parametrami zadania:

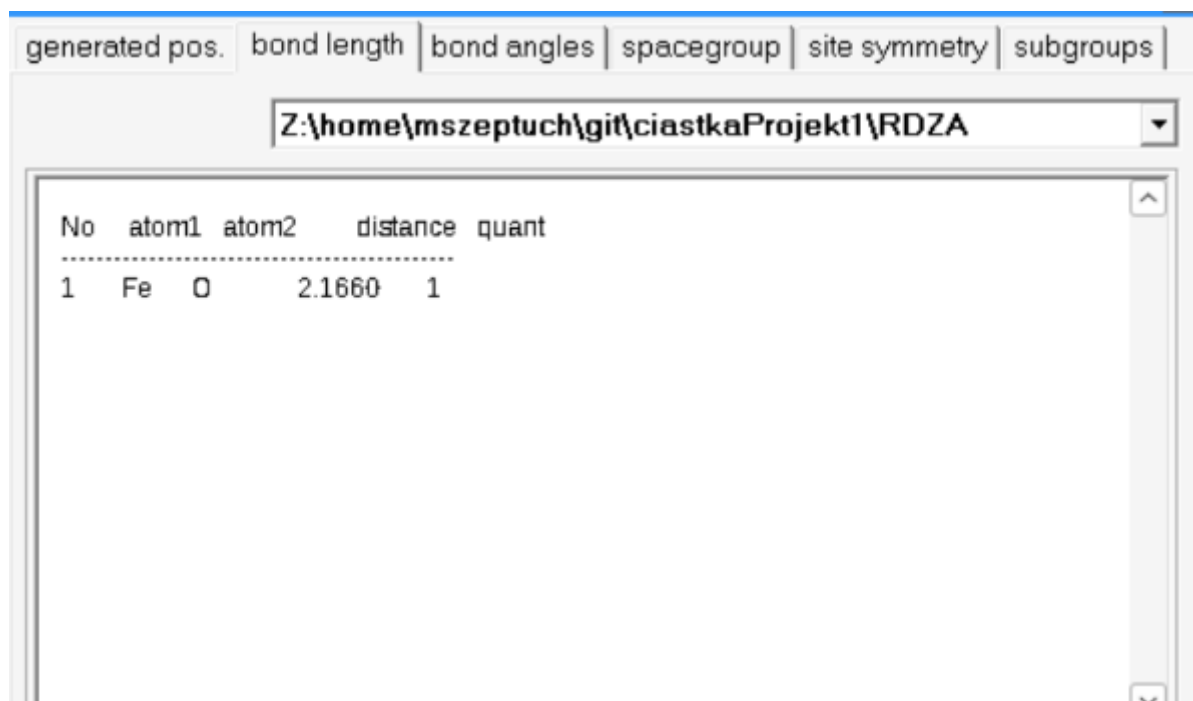
- Lampa Cu k_{α} ,
- Kąt 2θ od 10° do 80° ,



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	2 θ / 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>