

Laboratorium FCS, ćw 1. Badanie struktury ciał stałych.

Temat ćwiczeń: Modelowanie nieznannej struktury krystalicznej

Zajęcia w zespołach będą w poniedziałki o 8:30-11:00, pok. 14 GF.

Plan zajęć obejmuje :

1. Przypomnienie metody Rietveld'a dopasowania modelu struktury krystalicznej do danych doświadczalnych dyfrakcji X na materiałach proszkowych

- używanie programu EXPGUI-GSAS, można sobie przypomnieć jak go używać:

<http://malys.if.pw.edu.pl/lab-analiza-danych.pdf>

http://www.dur.ac.uk/john.evans/topas_workshop/gsas_y2o3riet.htm

2. Modelowanie nieznannej struktury na podstawie dyfraktogramu

- indeksowanie pików (program Winplotr + DICVOL z pakietu Fullprof)

- wyznaczenie wielkości komórki elementarnej, rozpoznanie grupy symetrii

- modelowanie struktury w programie VESTA

<http://jp-minerals.org/vesta/en/>

http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/download/VESTA_Manual.pdf

(+ jest kilka filmów na youtube jak go używać)

3. Sprawdzenie modelu struktury metodą Rietveld'a za pomocą programu GSAS

Proszę zapoznać się z podstawami krystalografii oraz z podstawami oddziaływania promieniowania X z materiałem. Pomocna jest tutaj książka prof. J.Przedmojskiego „Rentgenowskie metody badawcze w inżynierii materiałowej” - krótkie rozdziały 1,3,4. (<http://malys.if.pw.edu.pl/RentMetBad.pdf>)