

ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лекция 3.

Международные таблицы по кристаллографии.

Стандартная форма хранения информации о кристаллической структуре (CIF – Crystallographic Information File)

Информация о кристаллических структурах в базах данных

ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лекция 3.

Международные таблицы по кристаллографии.

Стандартная форма хранения информации о кристаллической структуре (CIF – Crystallographic Information File)

Информация о кристаллических структурах в базах данных

Международные таблицы по кристаллографии

INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY

Brief Teaching Edition of
Volume A
SPACE-GROUP SYMMETRY

Edited by
THEO HAHN

Journals Online

- [Acta Cryst. A](#)
- [Acta Cryst. B](#)
- [Acta Cryst. C](#)
- [Acta Cryst. D](#)
- [Acta Cryst. E](#)
- [Acta Cryst. F](#)
- [J. Appl. Cryst.](#)

J. Synchrotron Rad.

*** International Tables**

- [Volume A](#)
- [\(Teaching Edition\)](#)
- [Volume A1](#)
- [Volume B](#)
- [Volume C](#)
- [Volume D](#)
- [Volume E](#)
- [Volume F](#)
- [Volume G](#)

- * IUCr Newsletter**
- * Teaching Pamphlets**
- * Other Publications**

Services

- * World Directory**

Crystallography

Home

International Tables for Crystallography

First online edition (2006) ISBN: 978-1-4020-4969-9 eISBN: 978-1-4020-5259-0 doi: 10.1107/97809553602060000001

This is the home page for **International Tables**, the definitive resource and reference work for crystallography. The series consists of the following volumes:



Guided tour

- Volume A** Space-group symmetry
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume A1** Symmetry relations between space groups
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume B** Reciprocal space
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume C** Mathematical, physical and chemical tables
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume D** Physical properties of crystals
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume E** Subperiodic groups
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume F** Crystallography of biological macromolecules
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |
- Volume G** Definition and exchange of crystallographic data
| [Contents](#) | [Sample pages](#) | [Indexes](#) |

The series comprises articles and tables of data relevant to crystallographic research and to applications of crystallographic methods in all sciences concerned with the structure and properties of materials. Emphasis is given to symmetry, diffraction methods and techniques of crystal structure determination, and the physical and chemical properties of crystals. Each volume also contains discussions of theory, practical explanations and examples, all of which are useful for teaching.

International Tables is available in [print](#) and [online](#). A brief teaching edition of Volume A is also available in [print](#).

FCT/ZTF



bilbao crystallographic server

UPV/EHU



[The crystallographic site at the Condensed Matter Physics Dept. of the University of the Basque Country]

[[Space Groups](#)] [[Layer Groups](#)] [[Rod Groups](#)] [[Frieze Groups](#)] [[Wyckoff Sets](#)] [[mirror site at IUCR](#)]

Sections

Retrieval Tools

[Group-Subgroup](#)

[Representations](#)

[Solid State](#)

[Structure Utilities](#)

[Subperiodic](#)

[ICSDB](#)

[Contact us](#)

[About us](#)

[Links](#)

[Publications](#)

[How to cite the server?](#)

New programs and updates:

- **TRANPATH**
7-2007: Minor update and fixes.
- **SUPERGROUPS**
6-2007: Added link to Wyckoff Positions splitting.
- **SERIES**

Space Groups Retrieval Tools

GENPOS	Generators and General Positions of Space Groups
WYCKPOS	Wyckoff Positions of Space Groups
HKLCD	Reflection conditions of Space Groups
MAXSUB	Maximal Subgroups of Space Groups
SERIES	Series of Maximal Isomorphic Subgroups of Space Groups
WYCKSETS	Equivalent Sets of Wyckoff Positions
NORMALIZER	Normalizers of Space Groups
KVEC	The k-vector types and Brillouin zones of Space Groups

Group - Subgroup Relations of Space Groups

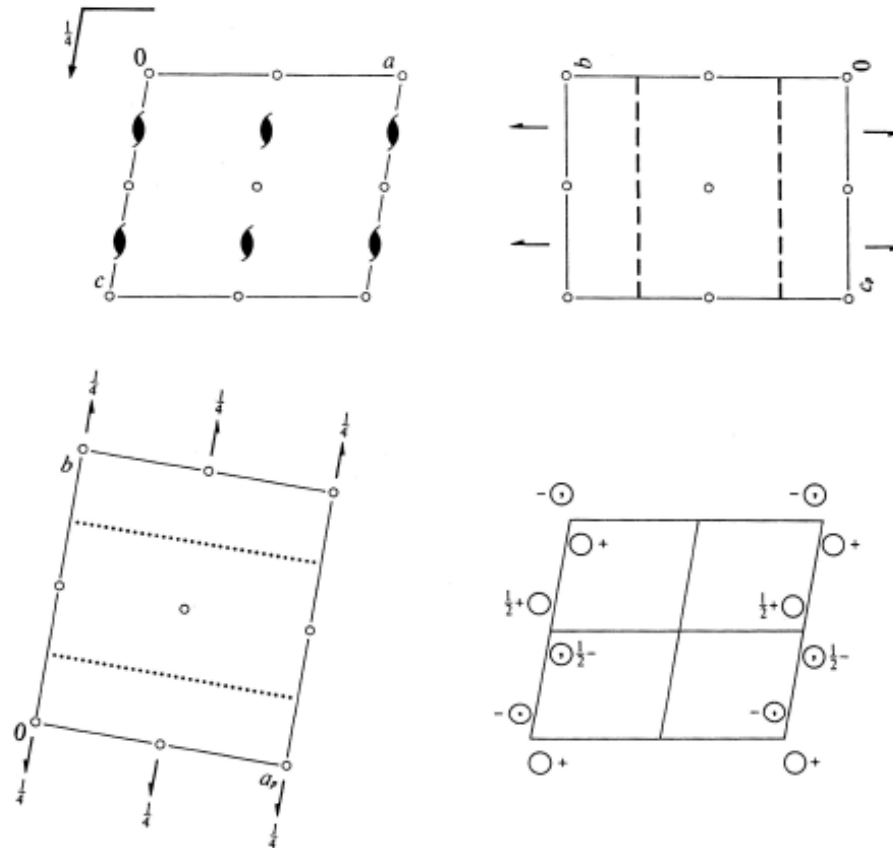
SUBGROUPGRAPH	Lattice of Maximal Subgroups
HERMANN	Distribution of subgroups in conjugated classes
COSETS	Coset decomposition for a group-subgroup pair
WYCKSPLIT	The splitting of the Wyckoff Positions
MINSUP	Minimal Supergroups of Space Groups
SUPERGROUPS	Supergroups of Space Groups
CELLSUB	List of subgroups for a given k-index.
CELLSUPER	List of supergroups for a given k-index.
COMMONSUBS	Common Subgroups of Space Groups
COMMONSUPER	Common Supergroups of Two Space Groups



$P2_1/c$ C_{2h}^5 $2/m$

Monoclinic

No. 14

 $P12_1/c1$ Patterson symmetry $P12_1/m1$ UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1Origin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations

- (1) 1 (2) $2(0, \frac{1}{2}, 0)$ $0, y, \frac{1}{2}$ (3) $\bar{1}$ $0, 0, 0$ (4) c $x, \frac{1}{2}, z$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4 e $\bar{1}$ (1) x,y,z (2) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ (3) \bar{x},\bar{y},\bar{z} (4) $x,\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$

General:

 $h0l : l = 2n$ $0k0 : k = 2n$ $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

2 d $\bar{1}$ $\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$

 $hkl : k+l = 2n$

2 c $\bar{1}$ $0,0,\frac{1}{2}$ $0,\frac{1}{2},0$

 $hkl : k+l = 2n$

2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2},0,0$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

 $hkl : k+l = 2n$

2 a $\bar{1}$ $0,0,0$ $0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

 $hkl : k+l = 2n$ **Symmetry of special projections**Along $[001]$ $p2gm$ $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$, $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$ Origin at $0,0,z$ Along $[100]$ $p2gg$ $\mathbf{a}' = \mathbf{b}$, $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$ Origin at $x,0,0$ Along $[010]$ $p2$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}\mathbf{c}$, $\mathbf{b}' = \mathbf{a}$ Origin at $0,y,0$ **Maximal non-isomorphic subgroups**I $[2]P1c1 (Pc, 7)$ 1; 4 $[2]P12_11 (P2_1, 4)$ 1; 2 $[2]P1(2)$ 1; 3

$P2_1/c$

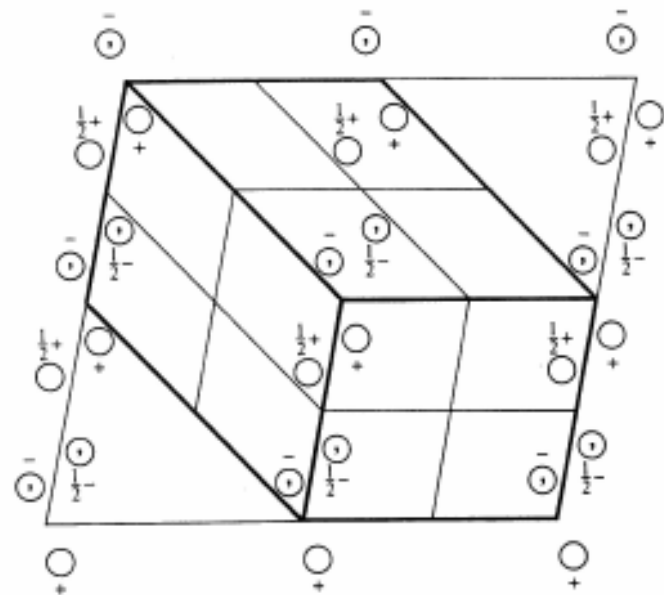
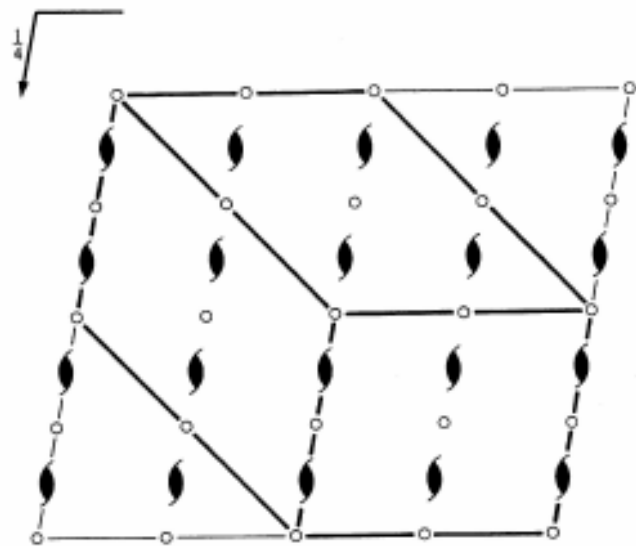
C_{2h}^5

$2/m$

Monoclinic

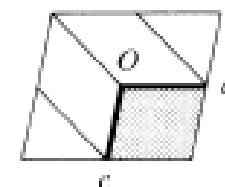
No. 14

UNIQUE AXIS b , DIFFERENT CELL CHOICES



$P12_1/c1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1



Origin at $\bar{1}$

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4 e $\bar{1}$ (1) x, y, z (2) $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$

General:

$h0l : l = 2n$
 $0k0 : k = 2n$
 $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

2 d $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

$hkl : k + l = 2n$

2 c $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, 0$

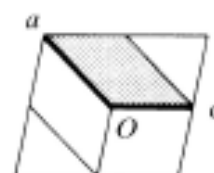
$hkl : k + l = 2n$

2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : k + l = 2n$

2 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : k + l = 2n$

$P12_1/n1$ UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 2Origin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq 1$ Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

4	e	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$
---	-----	---	---------------	---	---------------------------------	---

Reflection conditions

General:

$h0l : h + l = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

$00l : l = 2n$

Special: as above, plus

2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	---------------------	-------------------------------

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

2	c	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	-------------------------------	---------------------

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

2	b	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	-----	-----------	---------------------	-------------------------------

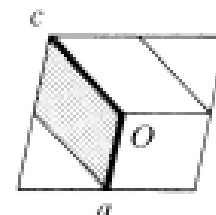
$hkl : h + k + l = 2n$

2	a	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----------	-----------	---

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

$P12_1/a1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 3



Origin at $\bar{1}$

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

General:

4 e 1 (1) x, y, z (2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$

$h0l : h = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

Special: as above, plus

2 d $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : h + k = 2n$

2 c $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, 0$

$hkl : h + k = 2n$

2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : h + k = 2n$

2 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

$hkl : h + k = 2n$

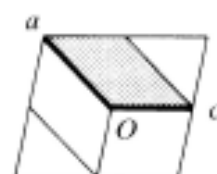
$P12_1/n1$ UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 2Origin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq 1$ Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates	Coordinates	Coordinates	Coordinates
4 e 1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$
2 d $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
2 c $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$		
2 b $\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$		
2 a $\bar{1}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		



Reflection conditions

General:

$h0l : h + l = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

$00l : l = 2n$

Special: as above, plus

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

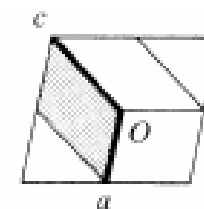
$hkl : h + k + l = 2n$

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

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

$P12_1/a1$

UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 3



Origin at $\bar{1}$

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4 e 1 (1) x,y,z (2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$

General:

$h0l : h = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$h00 : h = 2n$

Special: as above, plus

2 d $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : h + k = 2n$

2 c $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, 0$

$hkl : h + k = 2n$

2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$hkl : h + k = 2n$

2 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

$hkl : h + k = 2n$

General Positions of the Group 14 ($P2_1/c$) [unique axis b]

1	x, y, z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
2	$-x, y+1/2, -z+1/2$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 1/2 \end{pmatrix}$
3	$-x, -y, -z$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
4	$x, -y+1/2, z+1/2$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \end{pmatrix}$

If you want to see the same set of matrices in other setting, [click here](#)

ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лекция 3.

Международные таблицы по кристаллографии.

Стандартная форма хранения информации о кристаллической структуре (CIF – Crystallographic Information File)

Информация о кристаллических структурах в базах данных

Строение кристалла

- Повторяющийся фрагмент + закон повторения
 - Базис + элементарная ячейка на векторах трансляций
 - Симметрически независимая часть + ПГС

P2₁/n

_symmetry_cell_setting ?
_symmetry_space_group_name_H-M ?

loop_		N1 N 1.0920(3) 0.67011(15) 0.84738(13)
_symmetry_equiv_pos_as_xyz		H2 H 1.121(5) 0.717(3) 0.924(2)
'x, y, z'		H5 H 0.914(5) 0.622(3) 0.835(2)
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'	2 ₁	H6 H 1.232(5) 0.600(3) 0.853(2)
'-x, -y, -z'		O1 O 0.7675(3) 0.90229(13) 0.83629(12)
'x-1/2, -y-1/2, z-1/2'	n	O2 O 0.7975(3) 0.66902(15) 0.56824(12)
		H8 H 0.774(5) 0.579(3) 0.594(2)
_cell_length_a	4.832(2)	O3 O 0.9207(3) 1.00598(14) 0.66795(13)
_cell_length_b	9.153(4)	C5 C 1.1220(3) 0.77908(17) 0.74465(14)
_cell_length_c	10.460(4)	H1 H 1.314(4) 0.8161(19) 0.7655(15)
_cell_angle_alpha	90.00	C6 C 0.9179(3) 0.90576(16) 0.75036(15)
_cell_angle_beta	99.85(4)	C7 C 1.0821(3) 0.7095(2) 0.61140(16)
_cell_angle_gamma	90.00	H4 H 1.132(4) 0.780(3) 0.553(2)
_cell_volume	455.8(3)	H7 H 1.209(4) 0.625(2) 0.613(2)
_cell_formula_units_Z	4	

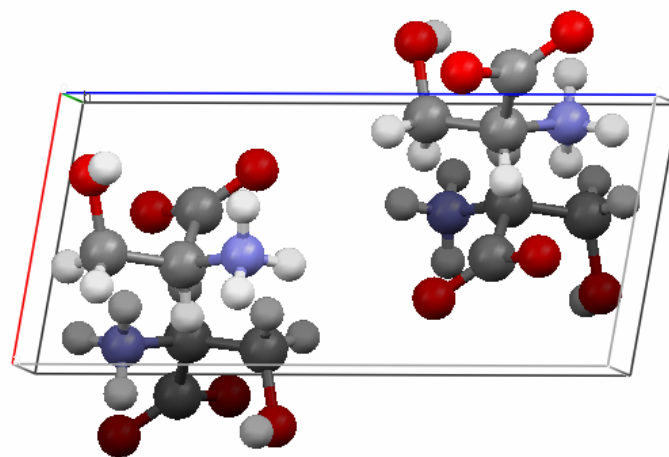
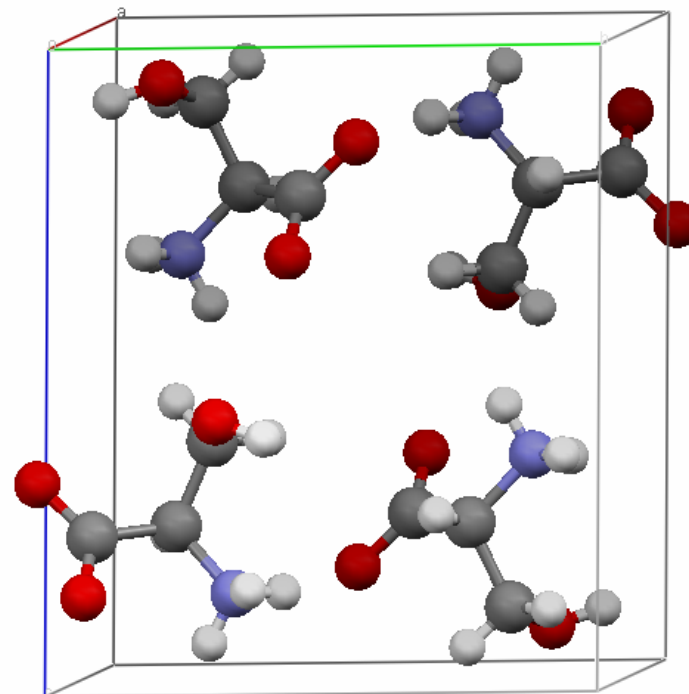
- См. демонстрацию Mercury

_symmetry_cell_setting ?
_symmetry_space_group_name_H-M ?

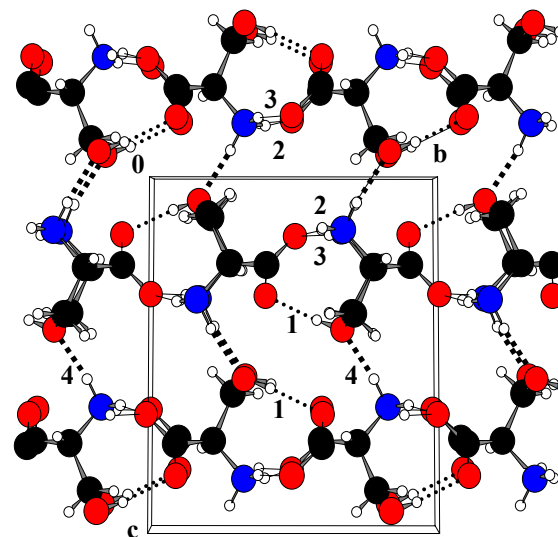
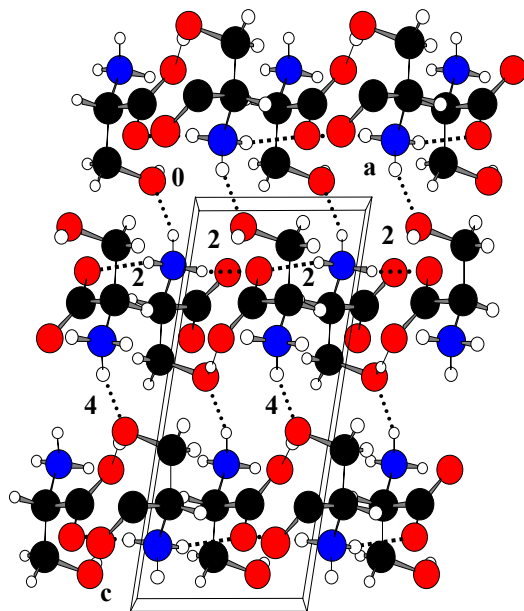
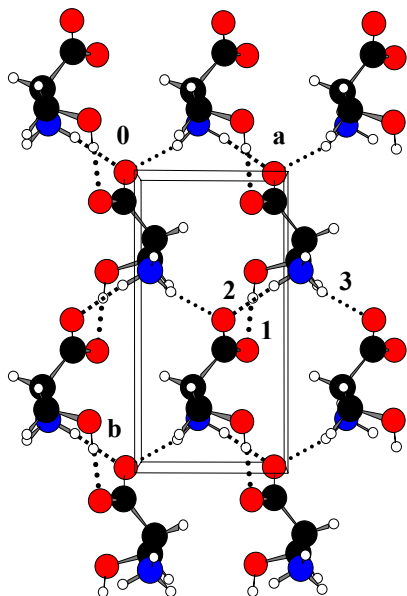
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2' 2_1
'-x, -y, -z'
'x-1/2, -y-1/2, z-1/2' n

_cell_length_a 4.832(2)
_cell_length_b 9.153(4)
_cell_length_c 10.460(4)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 99.85(4)
_cell_angle_gamma 90.00
_cell_volume 455.8(3)
_cell_formula_units_Z 4

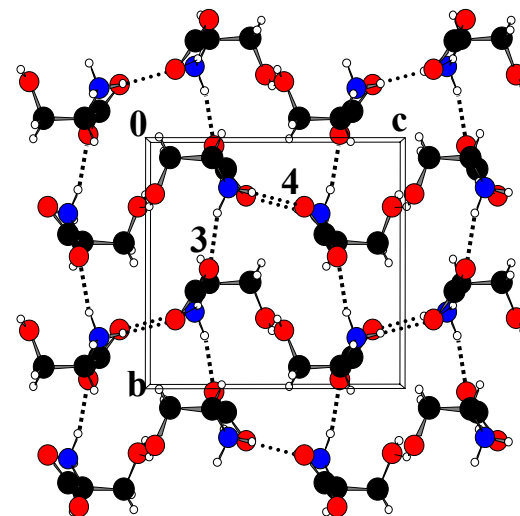
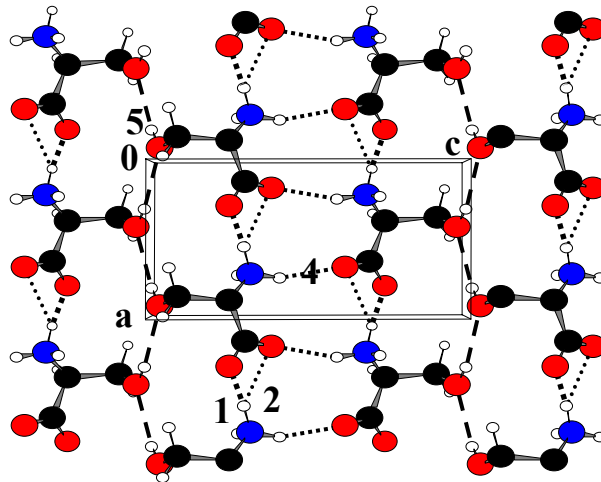
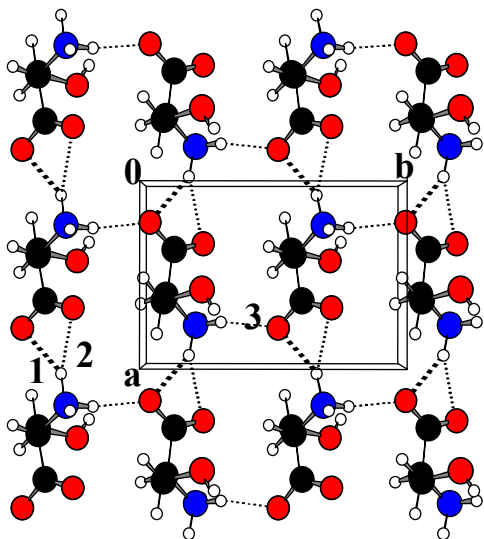
$P2_1/n$



DL-серин

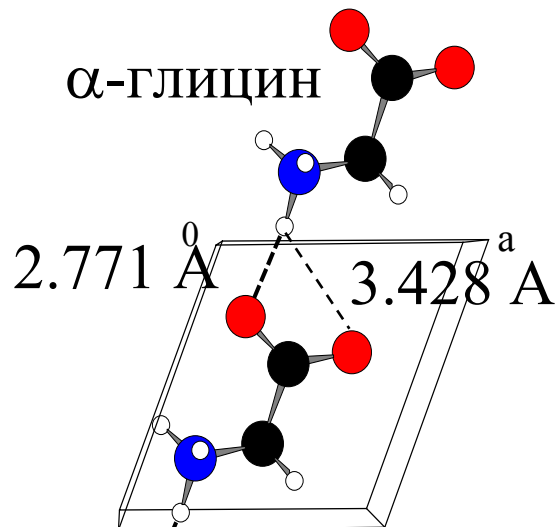


L-серин

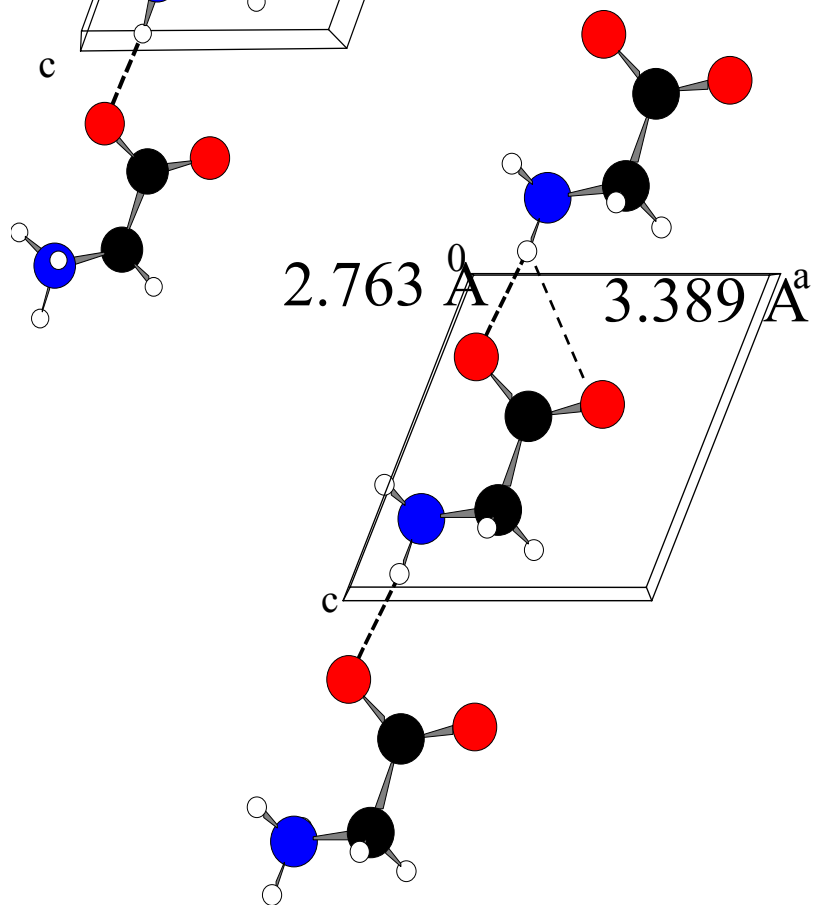


- См. демонстрацию Mercury (H-bonds)

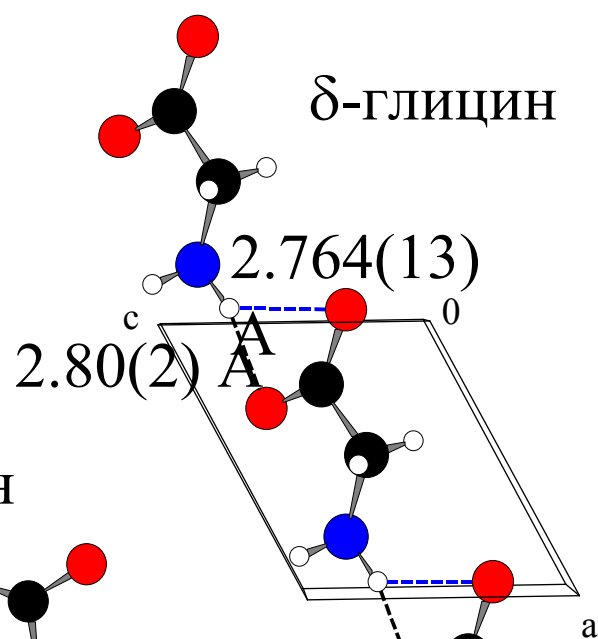
α -глицин



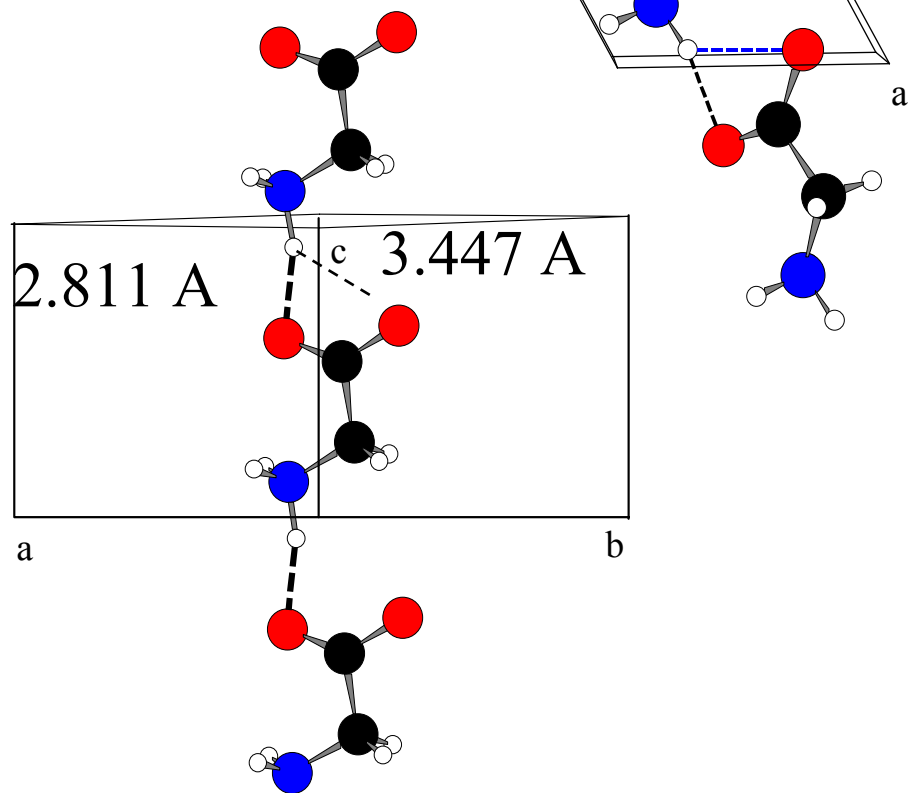
β -глицин



δ -глицин

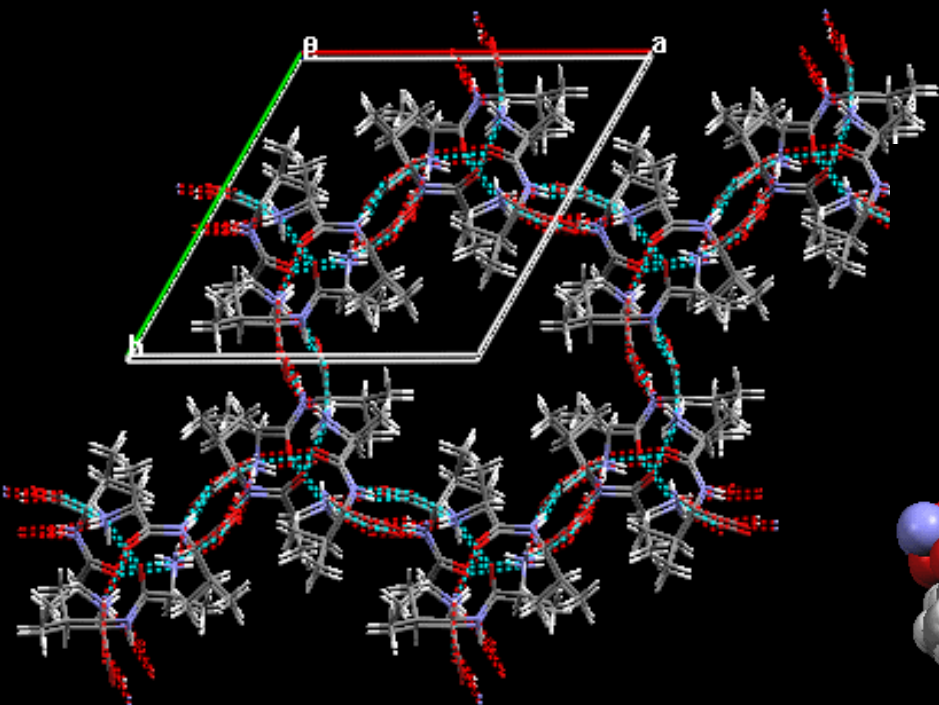
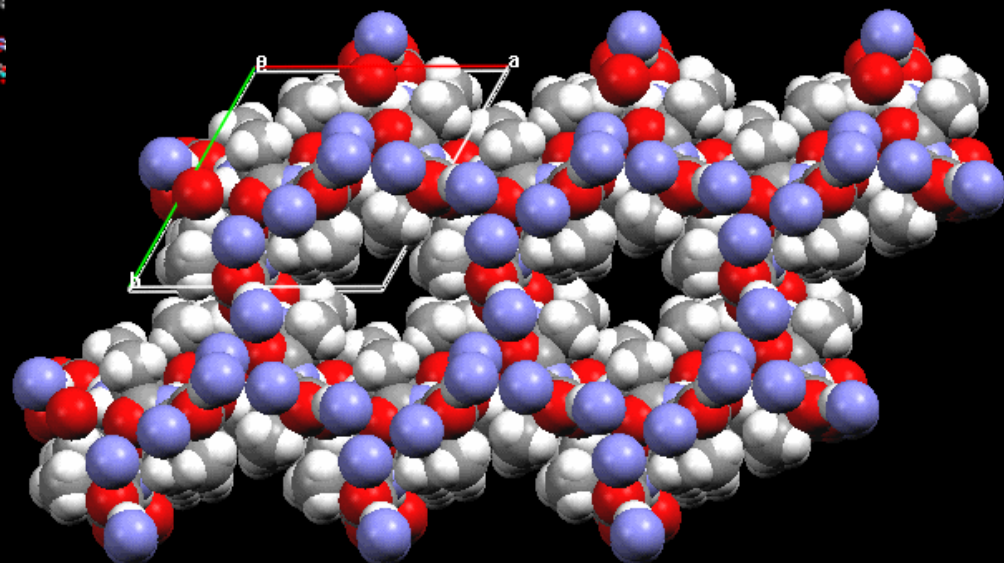


γ -глицин

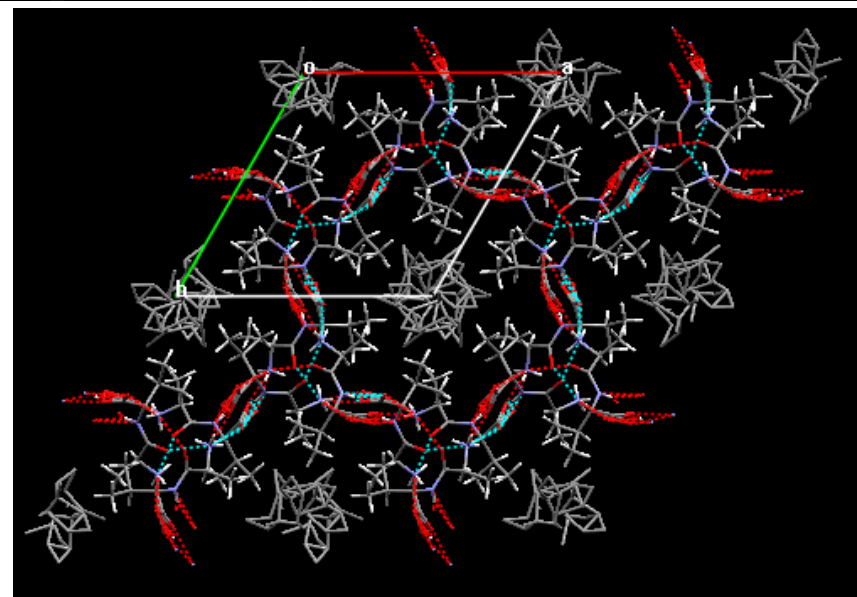


- См. демонстрацию Mercury (Ala-Val)

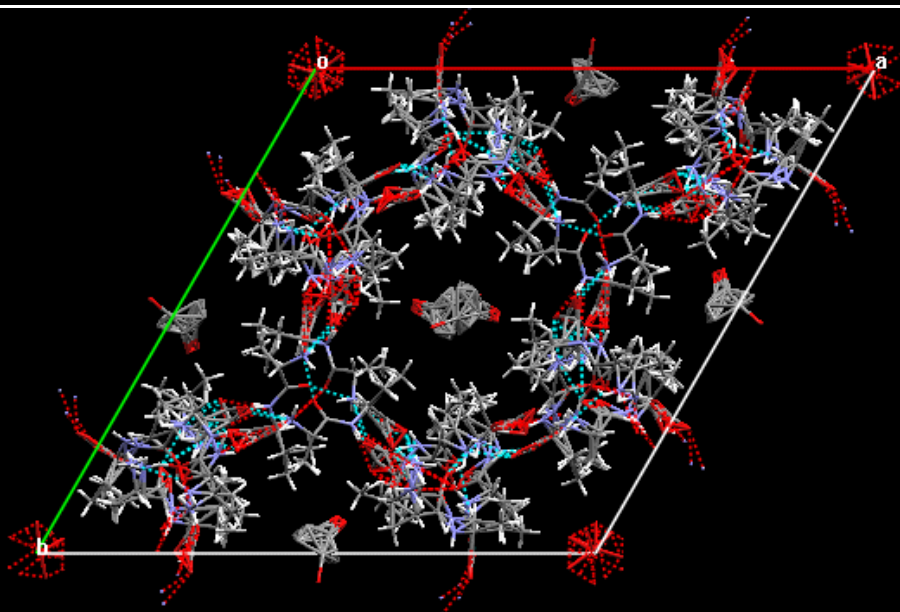
Ala-Val



Ala-Val*propanol



Ala-Val*methanol



ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лекция 3.

Международные таблицы по кристаллографии.

Стандартная форма хранения информации о кристаллической структуре (CIF – Crystallographic Information File)

Информация о кристаллических структурах в базах данных

Основные базы данных

- CCDC (Кембриджский банк данных)
- ICSD (Банк данных неорганических структур)
- CRYSTMET (структуры металлов и интерметаллидов)
- PDB (Protein Data Bank) (структуры белков)



Cambridge Crystallographic Data Centre

[About CCDC](#) [Products](#) [Free Services](#) [News](#) [Events](#) [Contact](#) [Support](#) [Search](#)

Location: [Home](#)

Products

Free Services

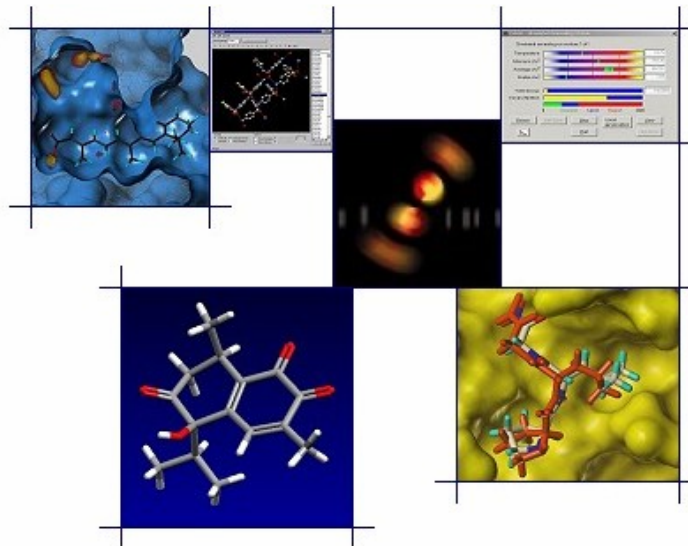
[Cambridge Structural Database \(CSD\)](#)

[Deposit a Structure](#)

[Request a Structure](#)

News

Last Updated:
17 September 2007



The CCDC is dedicated to the advancement of chemistry and crystallography for the public benefit through providing high-quality information services and software.

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>

[| privacy policy |](#)
[| browser support |](#)

Copyright © 2004-2007 The Cambridge Crystallographic Data Centre
12 Union Road, Cambridge, CB2 1EZ, UK, +44 1223 336408
Registered in England No.2155347 Registered Charity No.800579

CCDC: Краткая история

- Основан в 1965 Ольгой Кеннард (Olga Kennard), на химическом факультете Кембриджского университета
- Независимая некоммерческая организация - 1989
- Переезд в собственное здание - 1992
- По-прежнему остаются в составе Кембриджского университета
- 45 сотрудников
- Свыше 1200 подписчиков из университетов и промышленности в 55 странах мира

CCDC

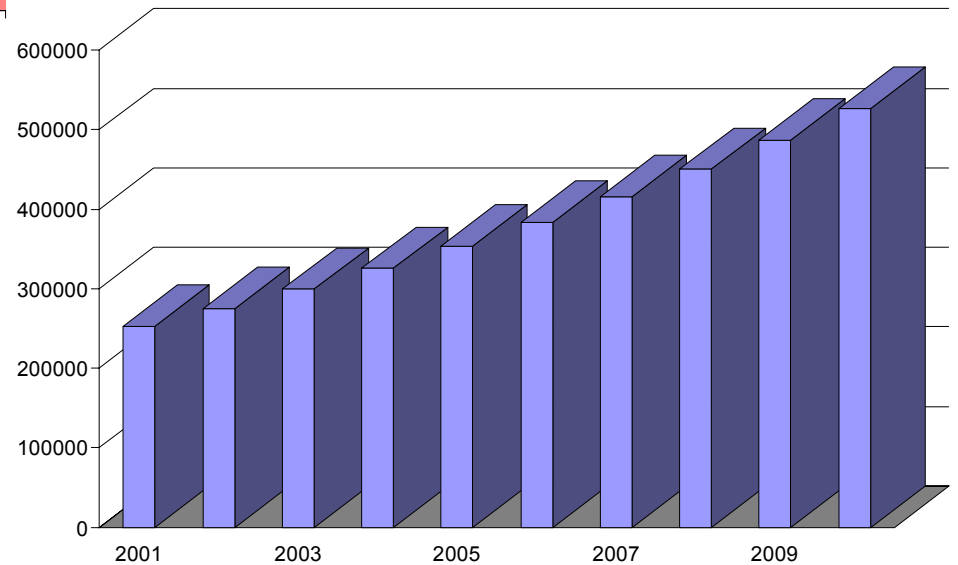
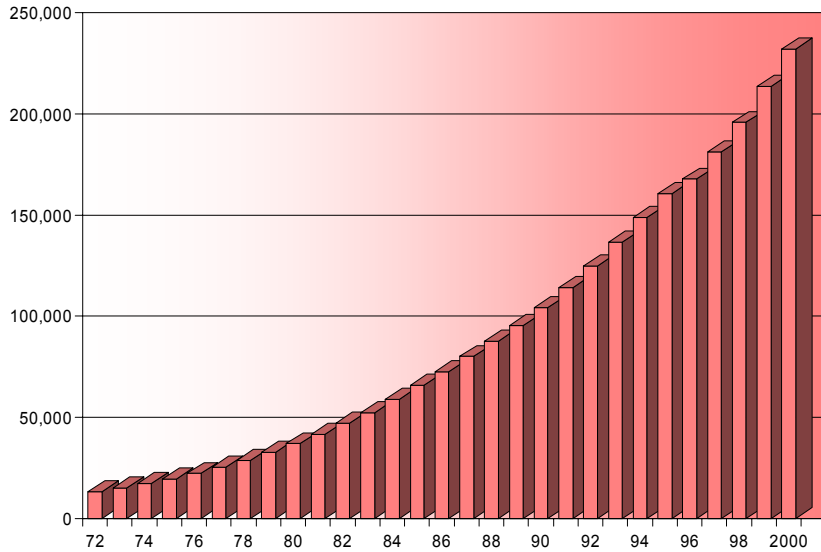
Научные задачи

- Создание и пополнение базы данных:
 - 3D данные о кристаллических структурах,
 - 2D химические диаграммы,
 - Литературные ссылки
- Разработка программного обеспечения для работы с данными и получения структурной информации
- Проведение исследований с использованием Кембриджского Банка Данных

Содержание CSD

- Органические и металлоорганические соединения
- Результаты экспериментальной расшифровки кристаллических структур
- Данные рентгеновских и нейтронографических экспериментов
- Почти 500 000 записей
- Около 20 000 новых записей добавляется каждый год
- Используется свыше 1200 журналов в качестве первичных источников информации

Число структур



Inorganic Crystal Structure Database

- <http://icsd.fiz-karlsruhe.de/icsd/>

FIZ Karlsruhe поддерживает самый крупный Банк данных неорганических структур, в настоящее время содержит 120000 записей (включая координаты атомов), из публикаций с 1913 года.

В настоящее время ICSD содержит:

1400 структур кристаллов элементов

23000 структур кристаллов бинарных соединений

42500 записей структур соединений с тремя элементами

45000 записей структур соединений с 4 и 5 элементами

Около 90000 записей (70,3%) описаны через структурные тип

Анализируются координационные числа, координационные полиэдры и полиэдры Вороного-Дирихле

<http://cds.dl.ac.uk/cds/help/icsd.html>

COL **ICSD** Collection Code 31370

DATE Recorded Dec 31, 1983

NAME Caesium potassium aluminosilicate *

MINR Zeolite - artificial

FORM Cs_{9.0} K_{11.8} Si_{73.2} Al_{22.8} O₁₉₂

= Al_{22.8} Cs₉ K_{11.8} O₁₉₂ Si_{73.2}

TITL The crystal structures of the synthetic zeolites (Cs,K)-ZK5 and
(Cs,D)-ZK5 determined from neutron powder diffraction data

REF ZEKRD 165 (1983) 175-190

AUT Parise J B, Shannon RD, Prince E, Cox DE

CELL a=18.660(1) b=18.660(1) c=18.660(1) α=90.0 β=90.0 γ=90.0

V=6497.3 Z=1

SGR I m -3 m (229) - cubic

CLAS m-3m (Hermann-Mauguin) - Oh (Schoenflies)

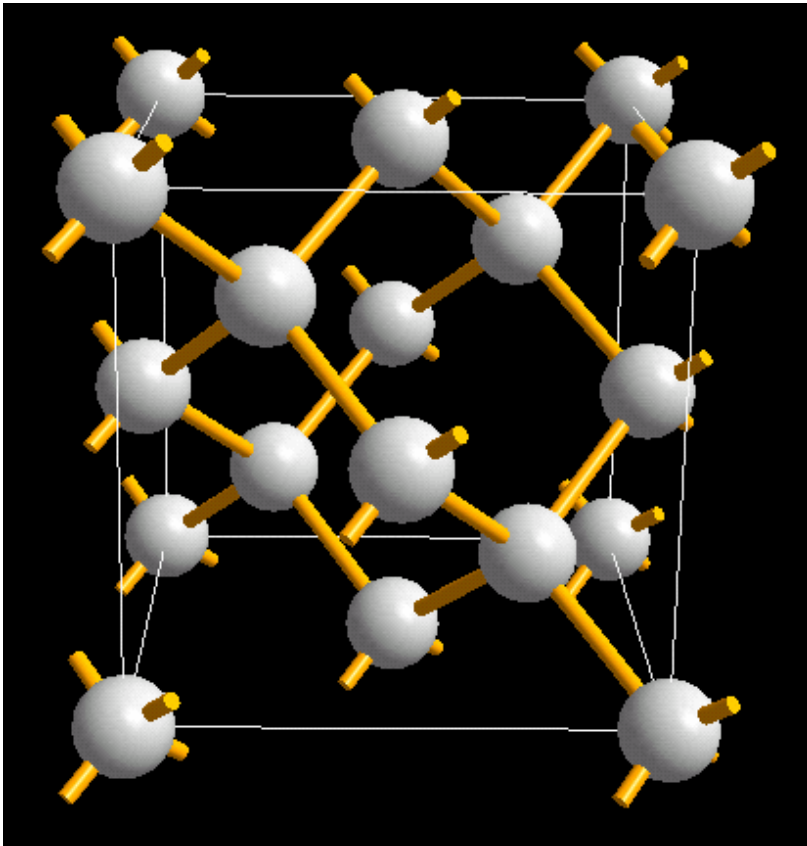
PRS cI309

ANX A3B4C32X64

PARM	Atom	No	OxStat	Wyck	X	Y	Z	SOF
	Si	1	4.000	96i	0.0828(4)	0.2029(5)	0.3219(5)	0.7625
	Al	1	3.000	96i	0.0828(4)	0.2029(5)	0.3219(5)	0.2375
	O	1	-2.000	48k	0.1277(3)	0.1277(3)	0.3140(5)	
	O	2	-2.000	48k	0.2522(3)	0.2522(3)	0.4082(4)	
	O	3	-2.000	48j	0.	0.1785(4)	0.3390(4)	
	O	4	-2.000	48i	1/4	0.1091(3)	0.3909(3)	
	Cs	1	1.000	12e	0.	0.	0.314(1)	0.75
	K	1	1.000	12d	0.	1/4	1/2	0.825
	K	2	1.000	16f	0.152(9)	0.152(9)	0.152(9)	0.1188

Примеры представления неорганических структур

Алмаз (кремний):



Пространственная группа симметрии:
 $Fd-3m$ (N 227),

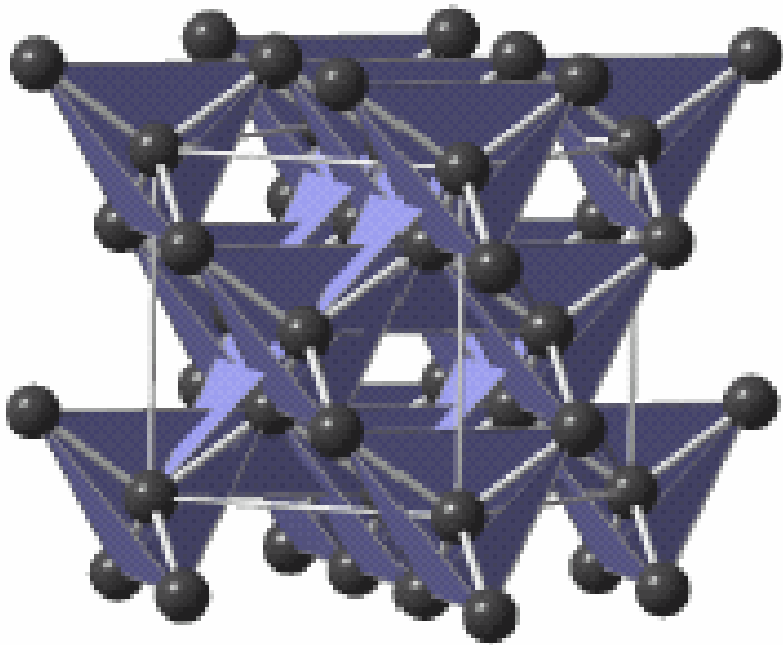
Wyckoff position: 8b

C (Si):

Параметр $a = 3.5667 \text{ \AA}$ (C),
 5.430710 \AA (Si)

Примеры представления неорганических структур

Алмаз (кремний):



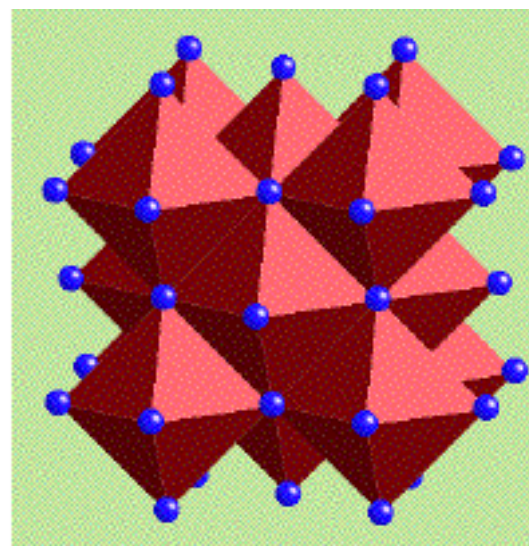
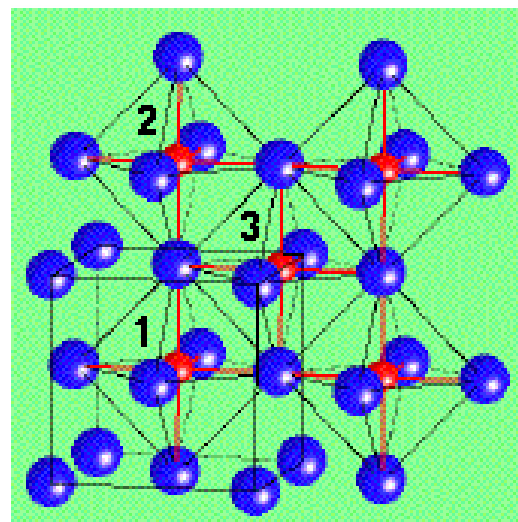
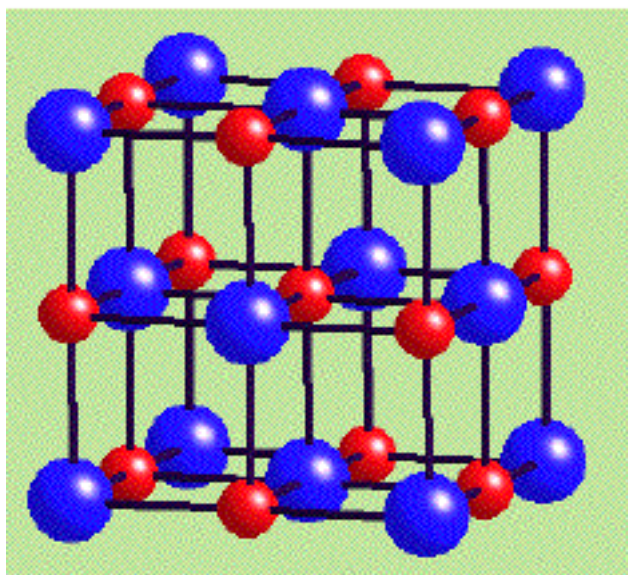
Пространственная группа симметрии:
Fd-3m (N 227),

Wyckoff position: 8b

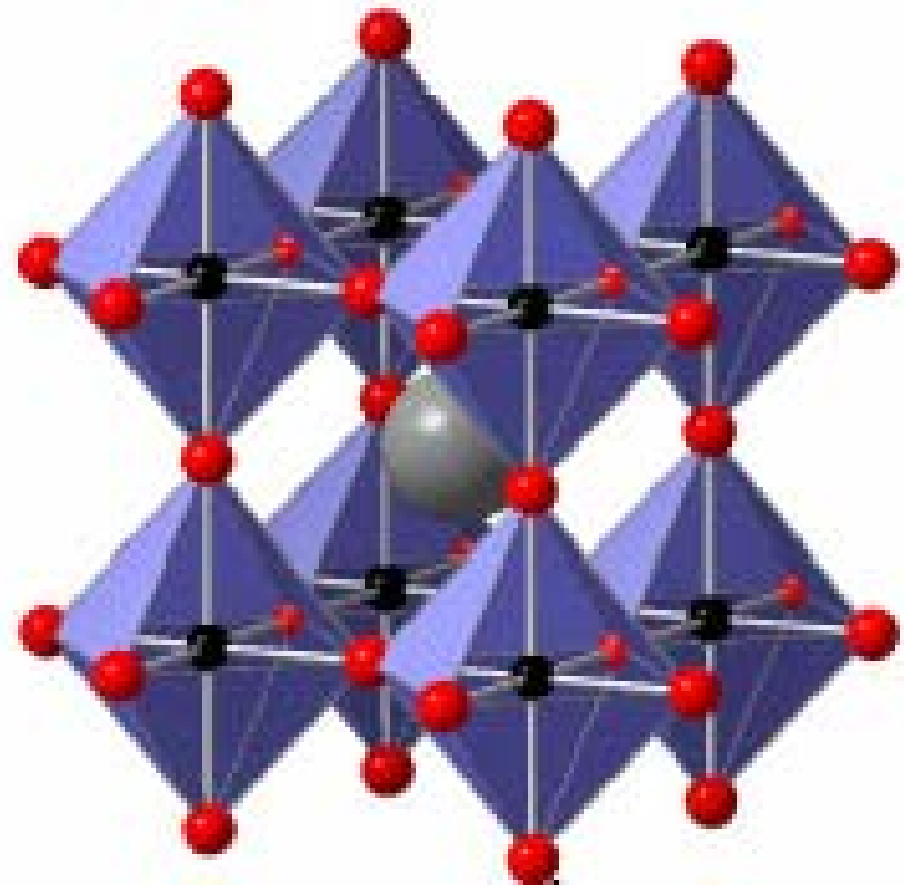
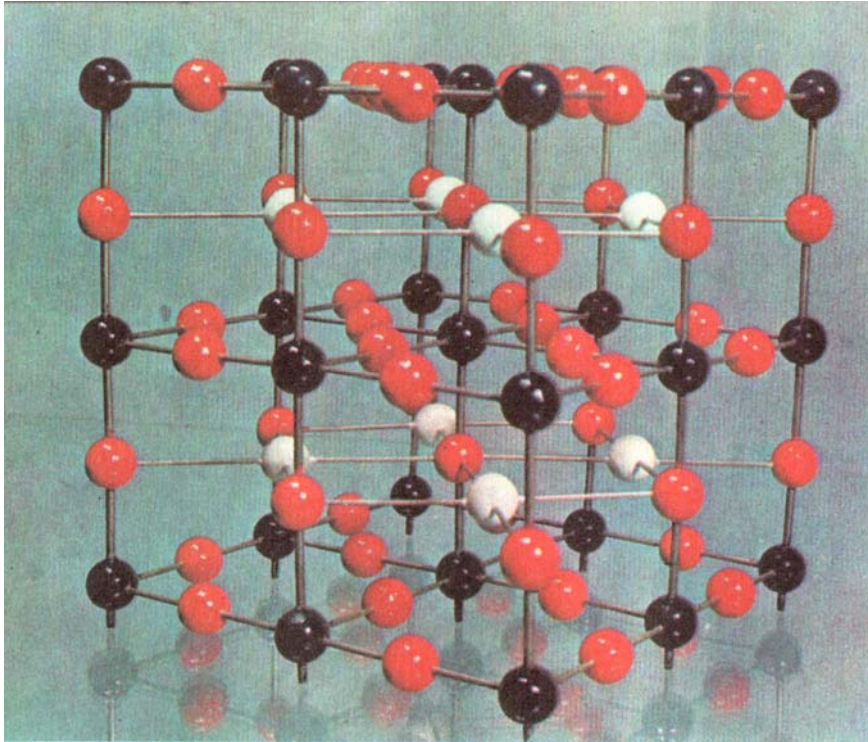
C (Si):

Параметр $a = 3.5667 \text{ \AA}$ (C),
 5.430710 \AA (Si)

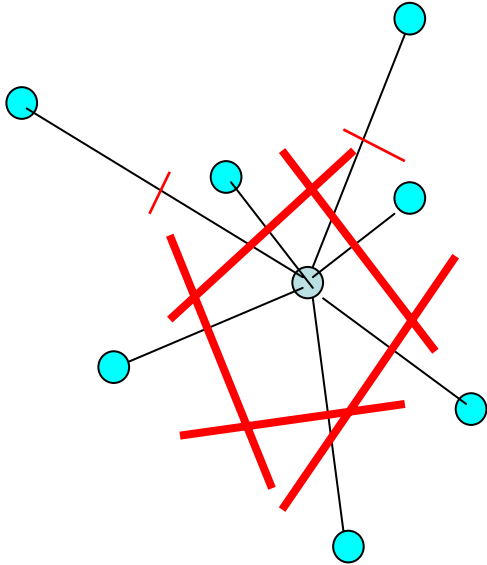
Структурный тип NaCl



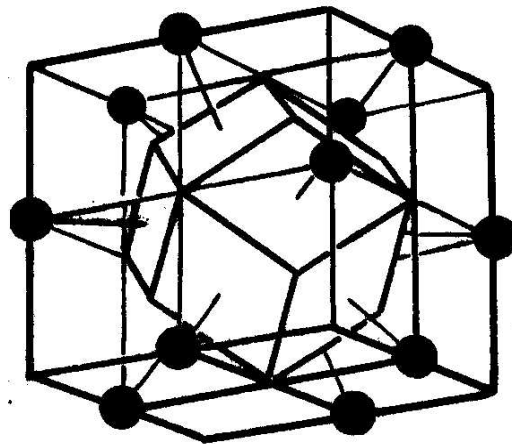
Структурный тип CaTiO_3 (перовскит)



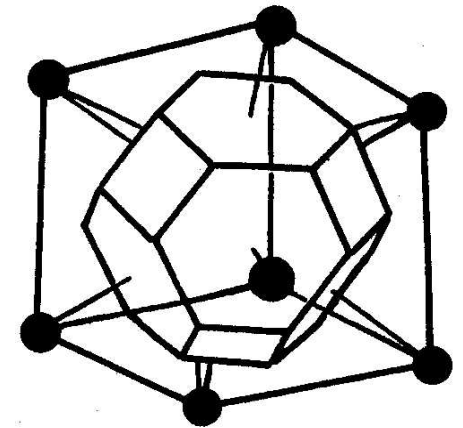
Описание структур через полиэдры Вороного-Дирихле



принцип построения



F-центрировка



I-центрировка

CRYSTMET

<http://www.tothcanada.com/databases.htm>

CRYSTMET® содержит данные о кристаллических структурах металлов, сплавов, интерметаллидов (почти 100 000 записей). Основан в 1960 сотрудниками Лос-Аламоса Cromer и Larson, в настоящее время поддерживается Национальным Исследовательским Советом Канады. В 1996 CRYSTMET® передан Toth Information Systems.

computer programs

Journal of
Applied
Crystallography
ISSN 0021-8898

Received 2 March 2005
Accepted 1 June 2005

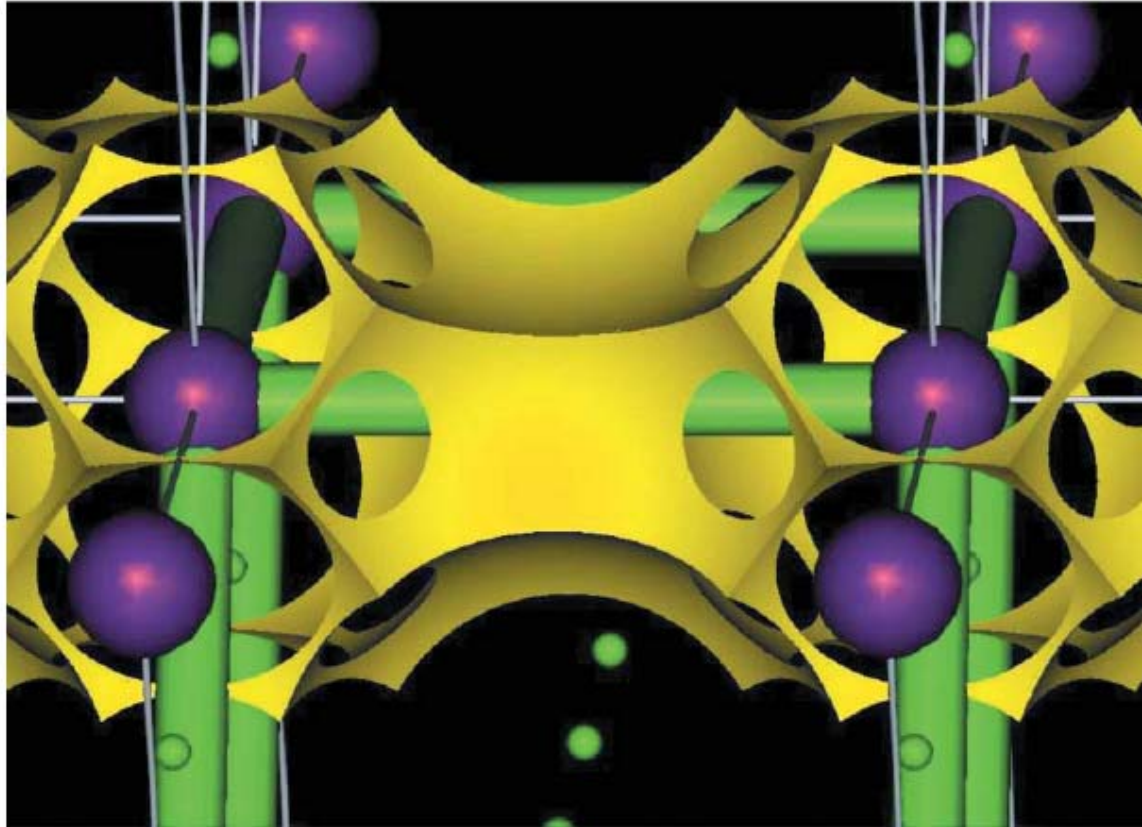
Quantum software interfaced with crystal-structure databases: tools, results and perspectives

Yvon Le Page^{a*} and John R. Rodgers^b

^aICPET, National Research Council of Canada, Canada, and ^bToth Information Systems Inc., Ottawa, Canada.
Correspondence e-mail: yvon.le_page@nrc.ca

Version 2.0 of Toth's *Materials Toolkit* runs under Windows and prepares ASCII input files for popular *ab initio* packages such as *ABINIT*, *VASP* etc. Those packages, obtainable from their respective developers, may run in desktop or supercomputer setups with Linux or Windows operating systems. The *Toolkit* input is taken at will from a direct plug into CRYSTMET, with 93 000 crystal-structure entries for metals and inorganic compounds, from CIF files of public-domain crystal-structure databases, or cut-and-paste from electronic journals followed by minimal free-format editing. The collection of fully general and highly graphical tools grouped on two command screens operates on the structure description stored in an editable ASCII screen. After the model has been searched, modified and evaluated in a few keystrokes with the above tools, its ASCII input files for a selection of *ab initio* packages are produced by selecting the meaningful flags and run options on a dialog. The tedious structure manipulation or decomposition into multiple simulations is performed in the background. Execution is followed by production of a plain-English job report. Four examples among the numerous possible applications of the *Toolkit* illustrate the fact that daunting topics, like the symmetry of chlorapatite, the voids and channels in the hydrogen-storage material EuNi₃, the energy per unit area of the contact plane for spinel twin in diamond, and the hardness of lonsdaleite *versus* diamond, are amenable to processing by materials scientists more versed in experiment than theory. The manual with tutorials and availability information can be found at <http://www.tothcanada.com/toolkit/>.

Необычные представления



Каналы крупнее 1.63 \AA в EuNi_5 (материал для хранения водорода)



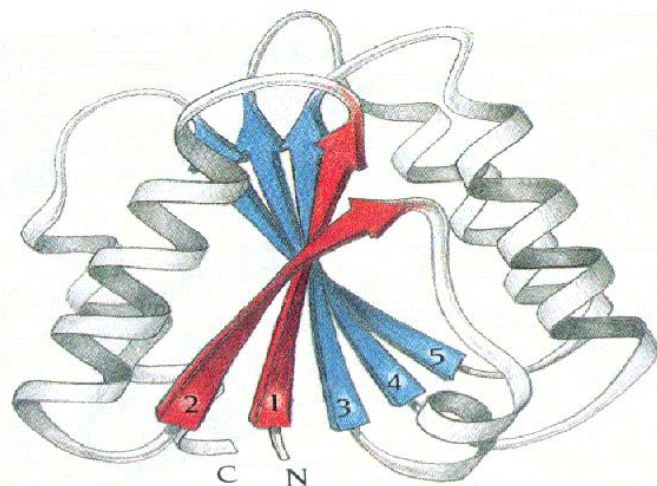
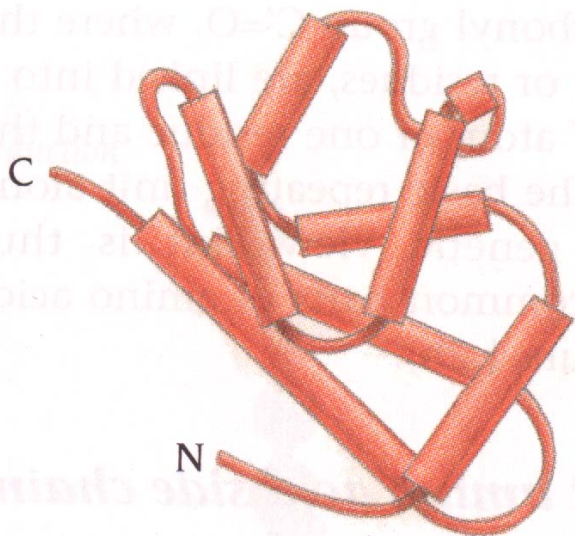
Protein Data Bank

- <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

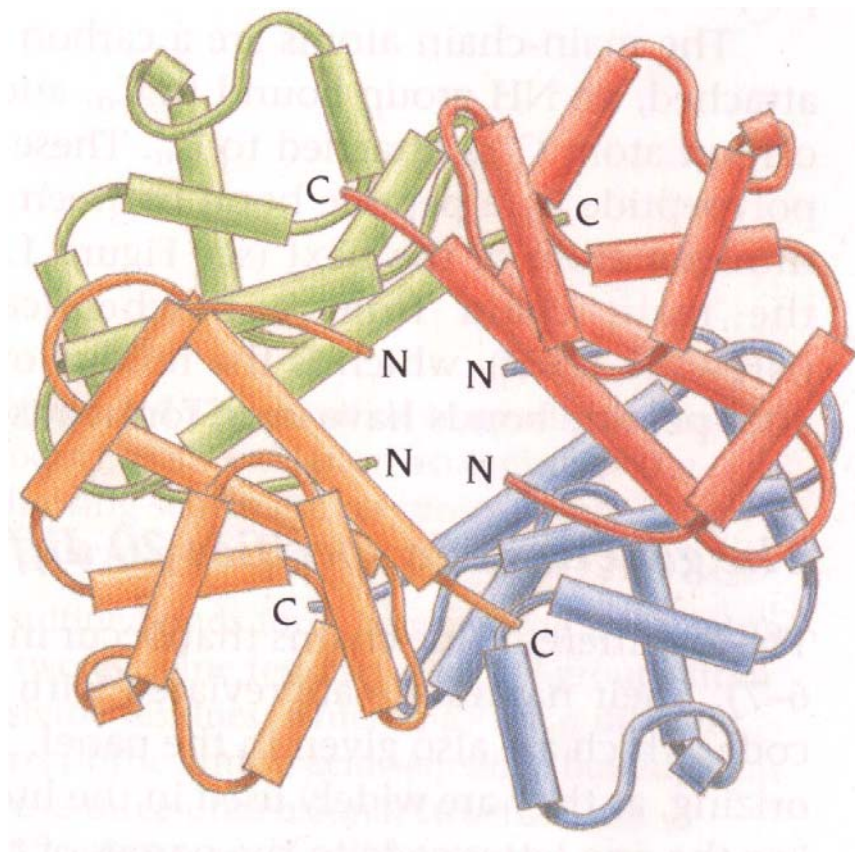
Банк данных структур белков, в настоящее время содержит около 55000 записей (включая координаты атомов), каждый год поступает 7-8 тысяч записей

Данные рентгеновской дифракции, ЯМР, электронной микроскопии

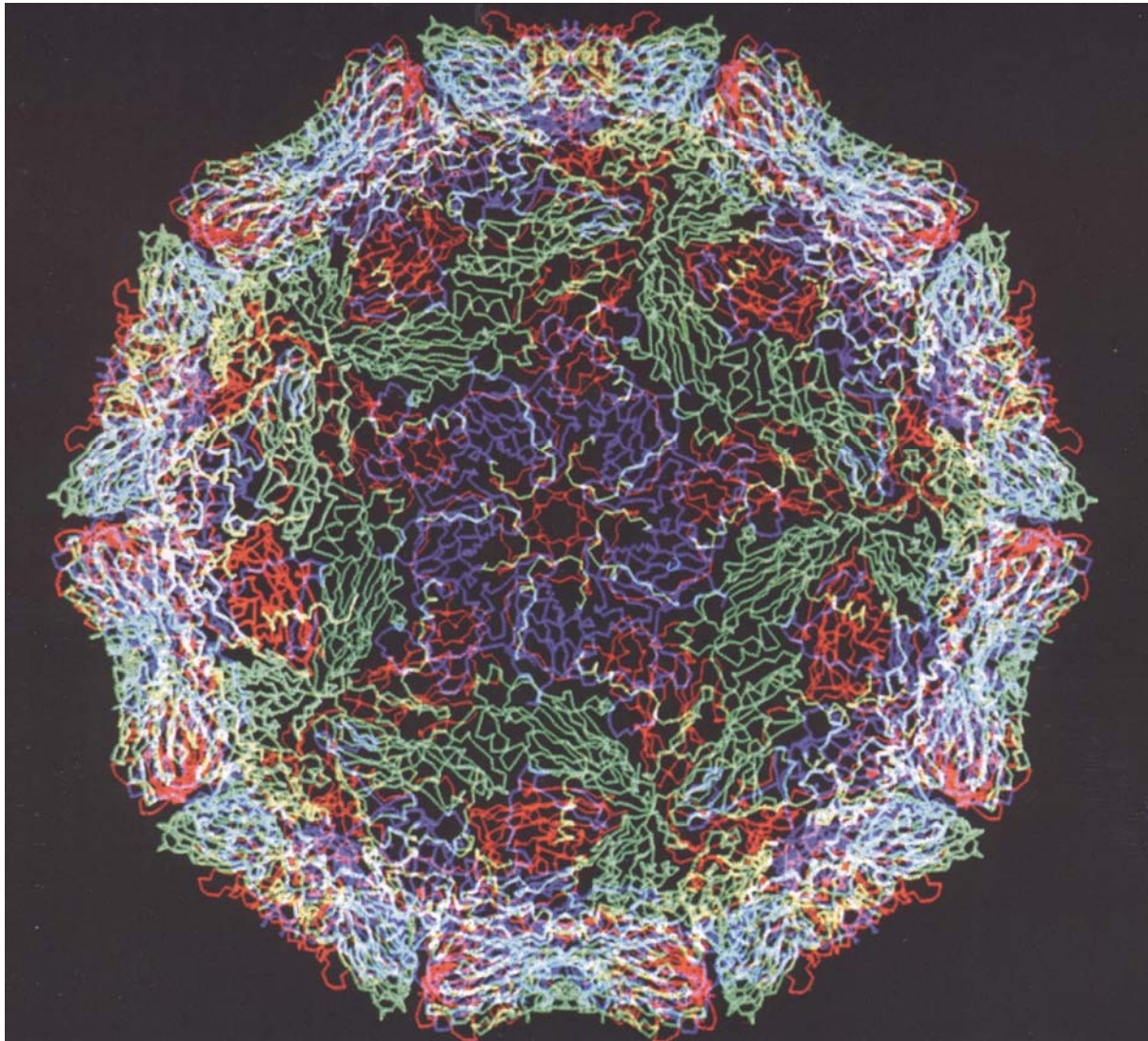
Третичная структура белка



Четвертичная структура белка



ВИРУС



- Demo CCDC