

Výsledky rtg. strukturní analýzy a jejich zpracování

tabulkové

grafické

zhodnocení rtg.
experimentu, kvalita
dat a modelu struktury

- chybovost str. modelu

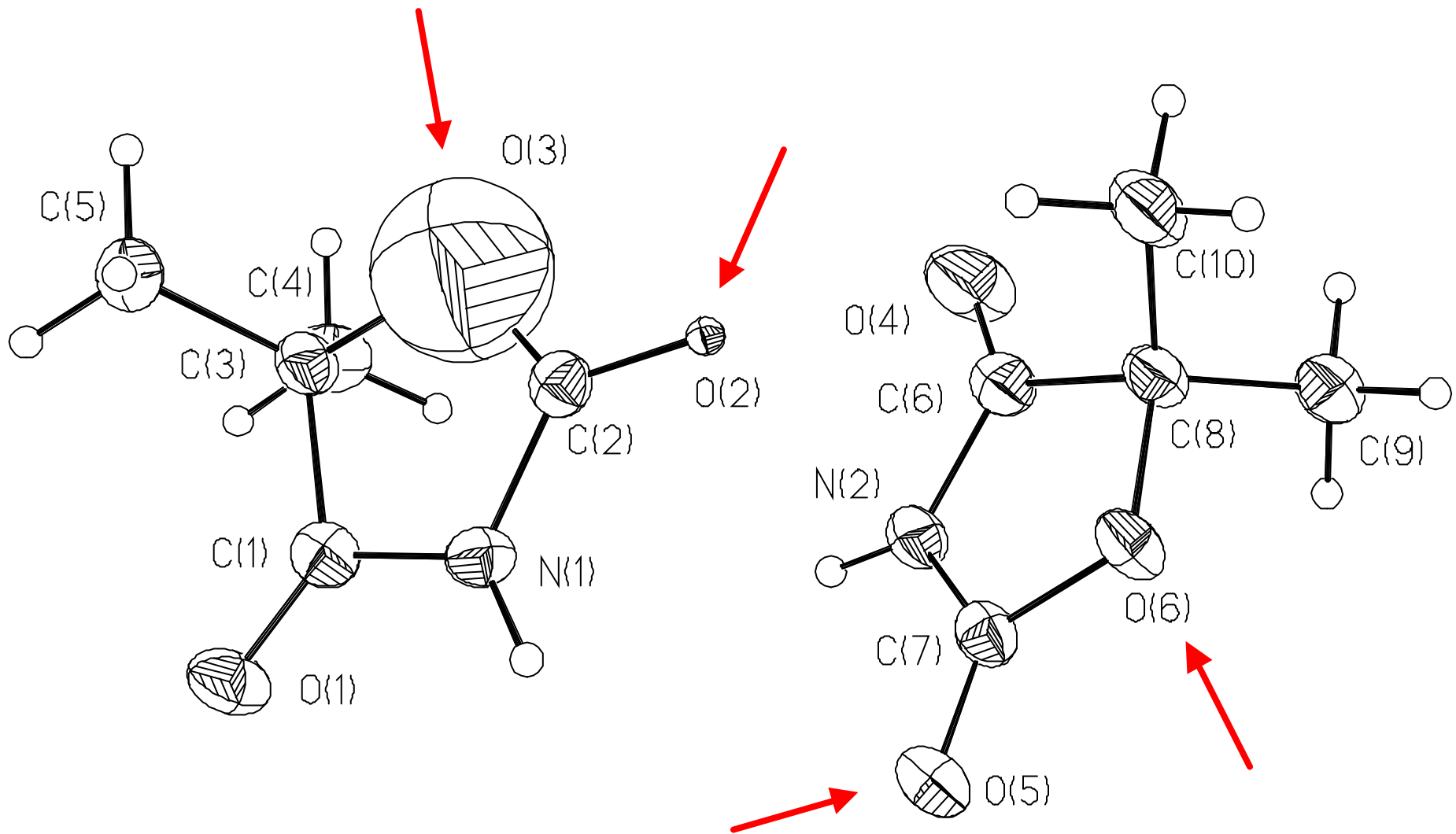
R – faktory

- úplnost a kompletnost dat

- stejnorodost teplotních
kmitu atomu v molekule

- kontrola vaznosti a chem.
správnosti molekuly

stejnorodos teplotních kmitu atomu



Zpusoby prezentace výsledku

textové

- doprovází tab.
a obr.

- obsahuje
strukturní
srovnání s
publikovanými
informacemi

tabulkové

- prostý výčet
informací

- přehlednost a
souhrnnost

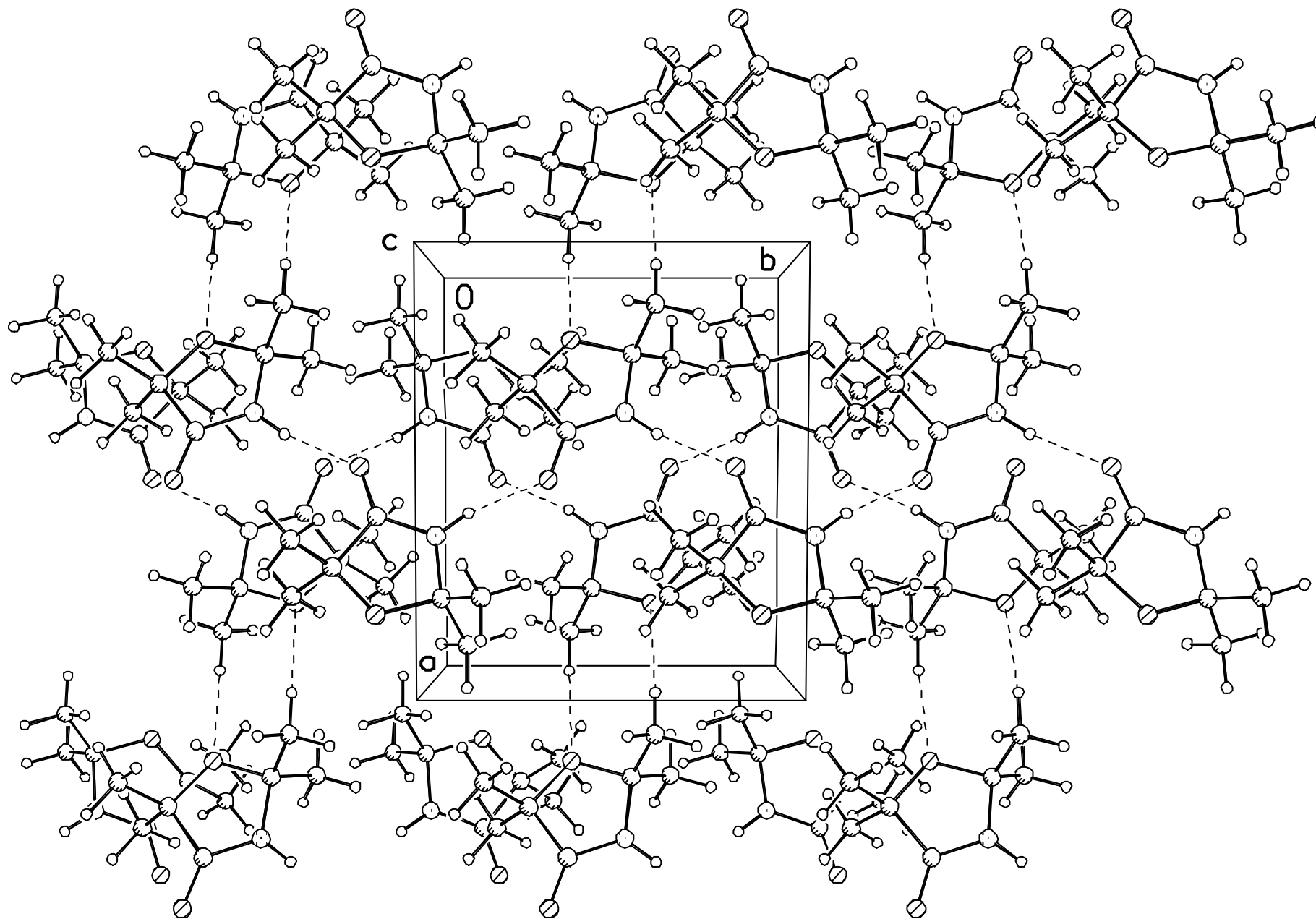
grafické

- názornost

- možnost
prezentace i
obtížně
popsatelných
dat

**Zpusoby prezentace výsledku by se mely o odborné
práci vzájemne doplňovat.**

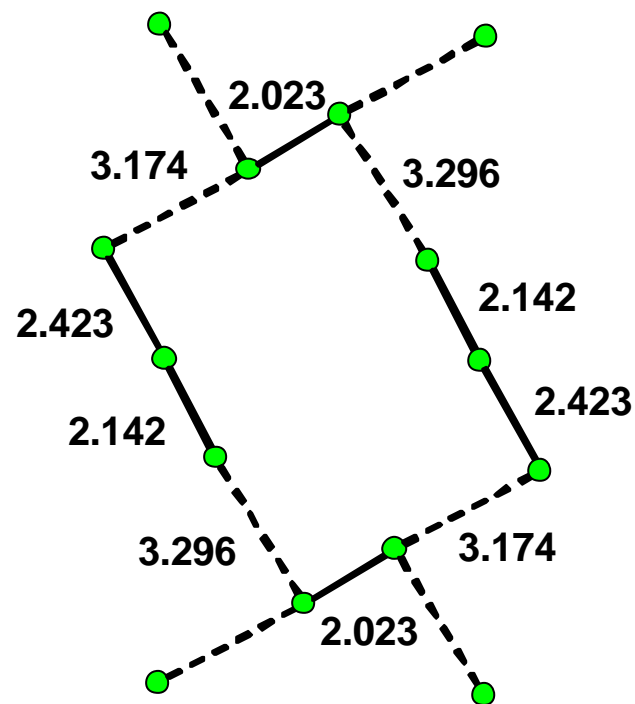
Grafické výstupy



Mezimolekulové interakce – způsoby prezentace

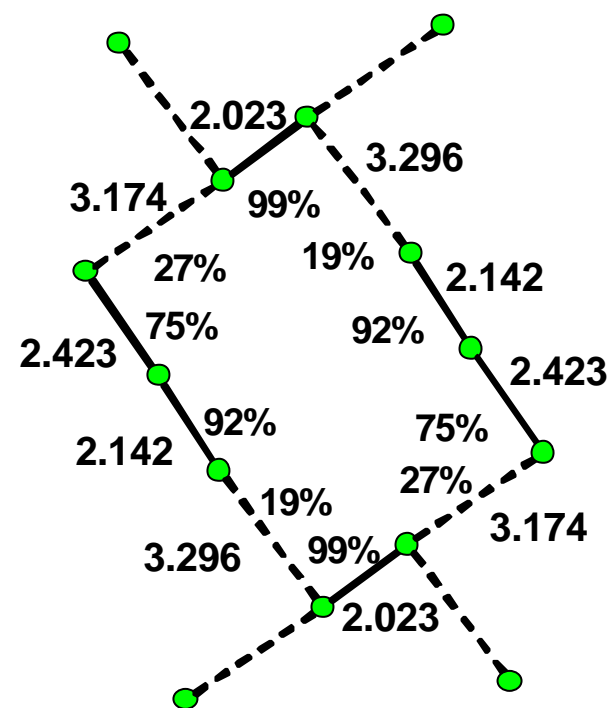
vaz. délky + S VdW

- jednoduchost provedení,
malá názornost



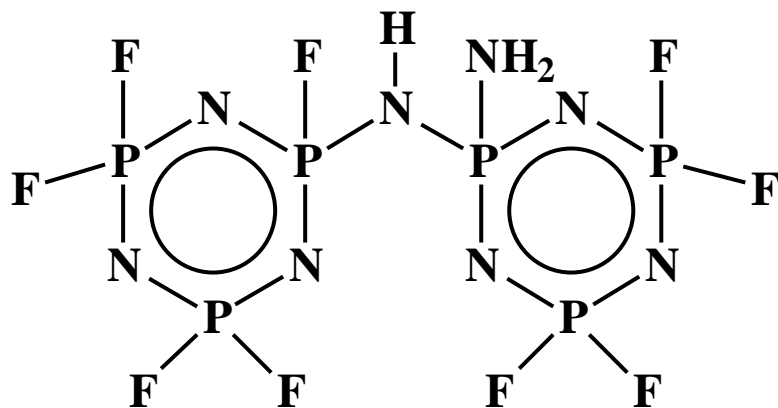
% překryvu orbitalu

$$\% = \frac{\text{Sum VdW} - d(\text{AB})}{\text{Sum VdW}} \times 100$$

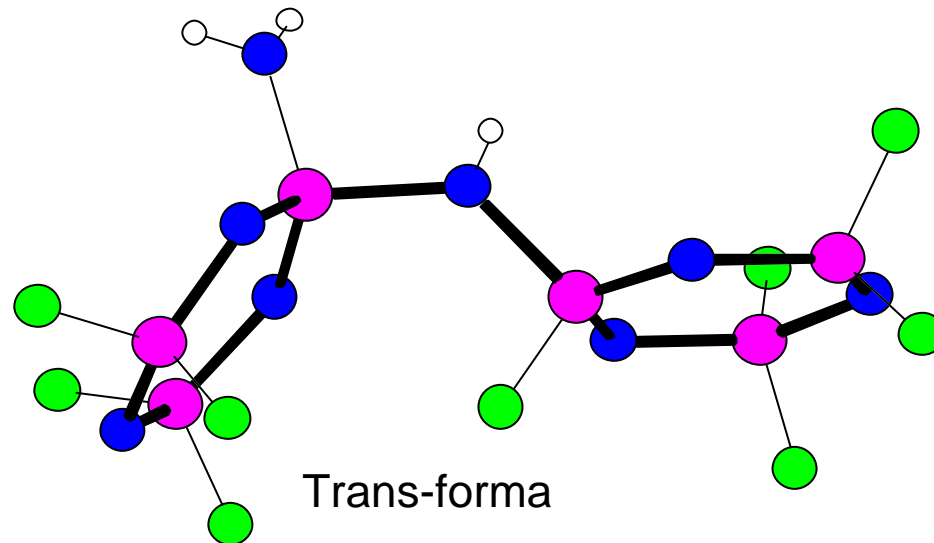
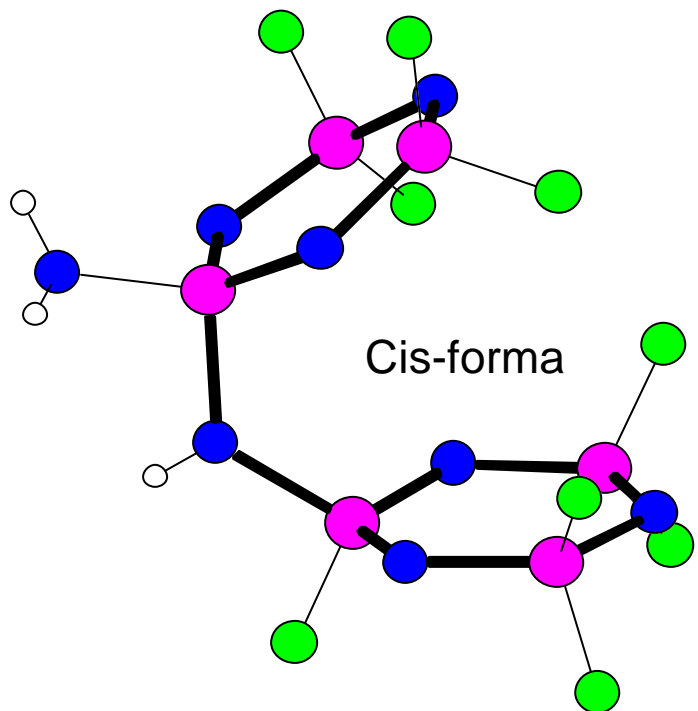


Cl₂ - 2,020 Å (44%) VdW (Cl₂) - 3,60 Å

Praktické příklady z pracoviště posledního soudu



Analyzováno pomocí:
 t_r , IC, RA, MS, NMR



Dekuji za pozornost