### Předmět C8800 Rtg strukturní analýza – úkol Určení prostorové grupy

### Soubor SG.zip (SG je zkratka z anglického Space Group, česky prostorová grupa) obsahuje 5 datových adresářů (označených jednoduše 1, 2, 3, 4 a 5), 1 soubor typu PDF a 4 grafické soubory. PDF obsahuje část Mezinárodních krystalografických tabulek, 3 graf. soubory (se jmény Krok-01, Krok-02 a Krok-03) ilustrující, co je možné vyčíst ze souboru hkl.lst. Soubor List-48-data5.jpg pak ukazuje, jak informace získané v krocích 1 až 3 pomocí Mezinárodních tabulek použít k určení možné prostorové grupy, resp. možných prostorových grup.

### Vaším úkolem je níže detailněji demonstrovaným postupem určit možné prostorové grupy pro difrakční data uložená v adresářích 1 až 4.

### Postup:

### Je nutno přejít do podadresáře 1 (až 4) a otevřít v libovolném textovém editoru soubor hkl.lst. Soubor obsahuje statistické informace o průměrných difrakčních intenzitách difrakčních dat (= dat uložených v souboru \*.hkl) ze stejného adresáře.

### Program, který statistiky počítal, navrhl pro difrakční data \*.hkl možný „lattice type“ = typ Bravaisovy mřížky (viz soupis v Tab. 4 na straně 14 Skript) a možnou Laueho třídu (soupis možností viz Tab. 2 na straně 12 Skript).

### Ve všech případech (viz třeba Krok-01.jpg) jsou nabízeny možnosti *Suggested lattice type is P*, respektive *diffraction symmetry compatible with cell metrics = mmm*. Soupis prostorových grup a podmínek tzv. „pozorovatelnosti“ různých tříd reflexí pro Laueho třídu *mmm* je na přiložených listech Mezinárodních tabulek (soubor SG-det.pdf na str. 47 až 50).

### Další části souboru hkl.lst obsahují tabulky průměrných intenzit reflexí odpovídajících jednotlivým sloupcům tabulek souboru SG-det.pdf. My budeme používat informace z prvních 7 tabulek, počínaje tabulkou se záhlavím „*Reflection class <h k l>*“ a konče tabulkou se záhlavím „*Reflection class <0 k l>*“.

### Příklady získaných informací pro data „5“ jsou na obrázcích Krok-02.jpg a Krok-03.jpg, implementace těchto údajů s Mezinárodními tabulkami v obrázku List-48-data5.jpg. Pří interpretaci se postupuje z leva do prava, počínajíc sloupcem *hkl* (tabulka č. 1), přes sloupce *0kl*, *h0l*, *hk0* (tabulky č. 7, 6 a 5, Krok-03.jpg) po sloupce *h00*, *0k0* a *00l* (tabulky č. 2, 3 a 4, viz Krok-02.jpg)

### Pro data 5 jsem tak určil jako možnou prostorovou grupu SG č. 29, *P ca21*, ev. SG č. 57, *P c a m*

###