

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.

Vášim úkolem je níže detailněji demonstrováním postupem určit možné prostorové grupy pro difrakční data uložená v adresářích 1 až 4.

Postup:

- 1) 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.
- 2) 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).
- 3) 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).
- 4) 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>**“.
- 5) 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. Při interpretaci se postupuje zleva doprava, 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)
- 6) Pro data 5 jsem tak určil jako možnou prostorovou grupu SG č. 29, $Pca2_1$, ev. SG č. 57, $Pcam$

