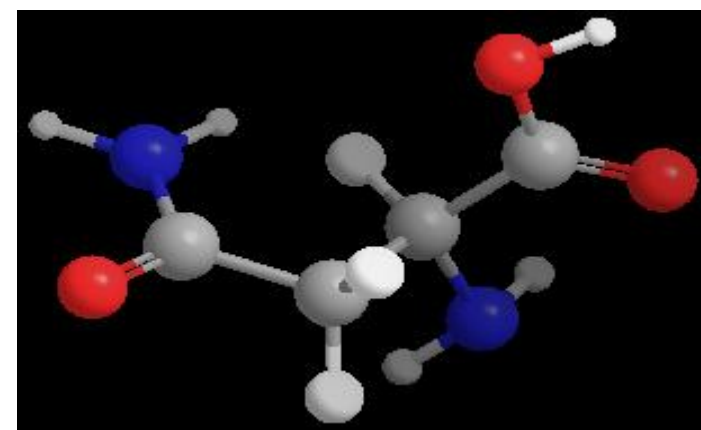
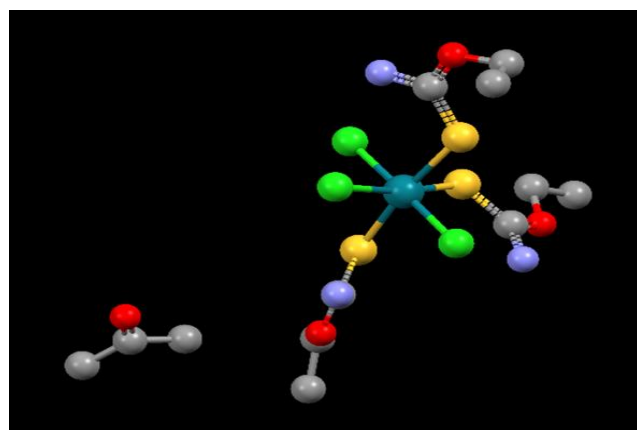
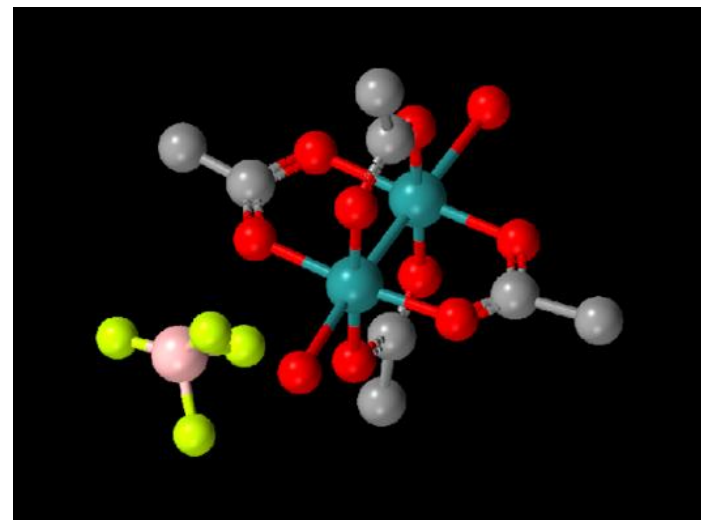
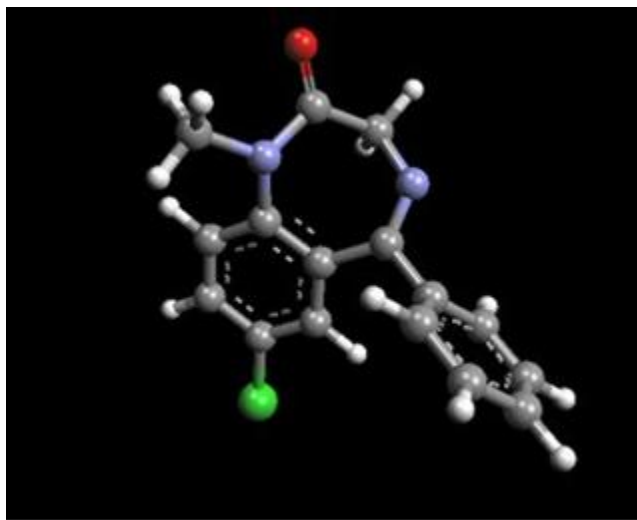
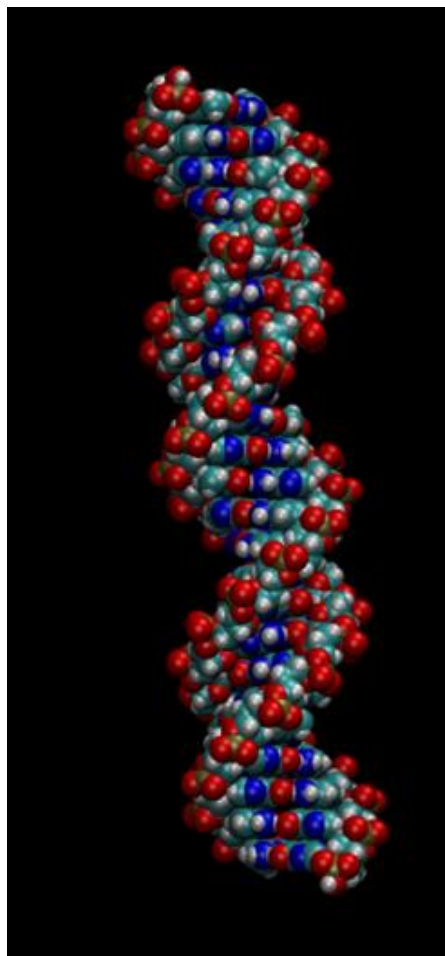


СТРУКТУРНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ

Автор: Земцова В. М.

3D структура молекул



Кристаллические структуры

Кристаллы — твёрдые тела, в которых частицы (атомы и молекулы) расположены закономерно, образуя трёхмерно-периодическую пространственную укладку — кристаллическую решётку.



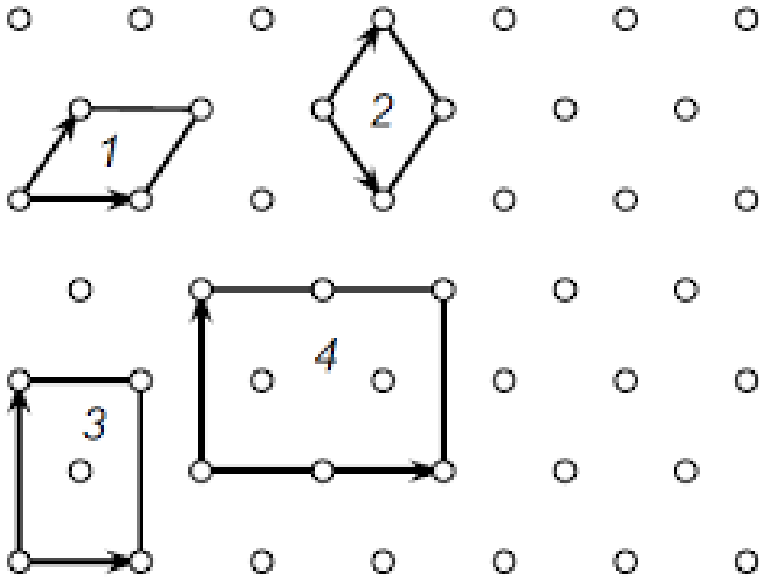
Монокристаллы



Поликристаллы



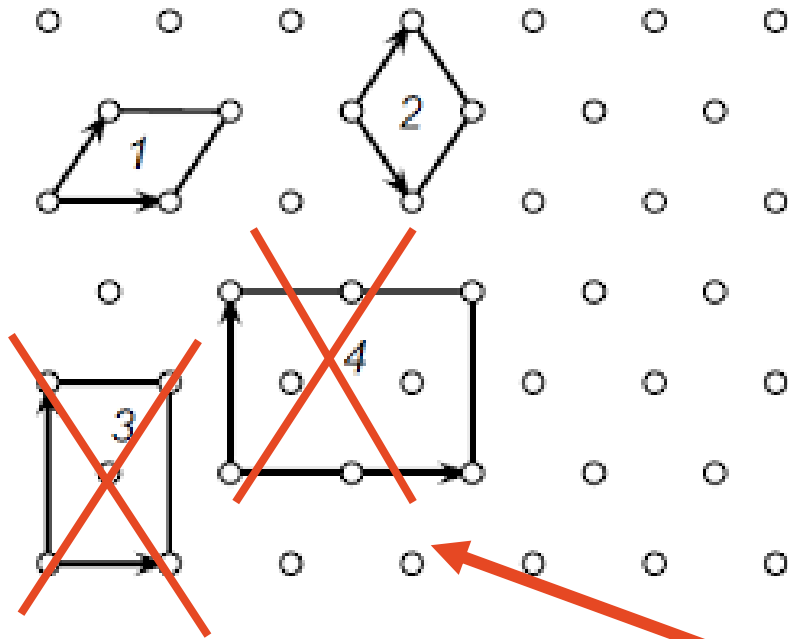
Кристаллические структуры



Элементарная ячейка
- минимальная ячейка, отвечающая единичной решеточной точке структуры, которая отражает свойства кристалла

2D элементарная ячейка

Кристаллические структуры



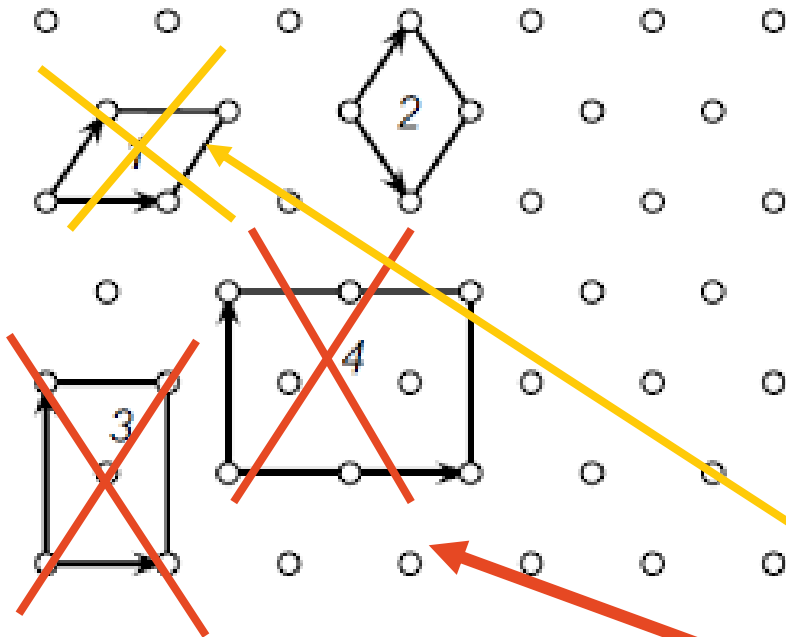
Элементарная ячейка

- минимальная ячейка, отвечающая единичной решеточной точке структуры, которая отражает свойства кристалла

2D элементарная ячейка

Слишком большие, можно меньше

Кристаллические структуры



Элементарная ячейка

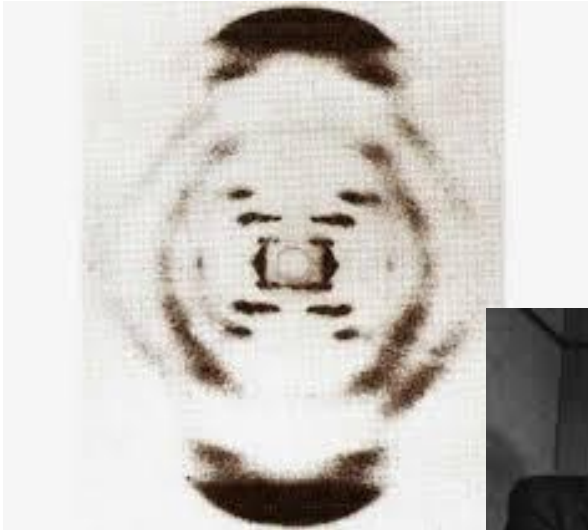
- минимальная ячейка, отвечающая единичной решеточной точке структуры, которая отражает свойства кристалла

не отражает симметрию кристалла

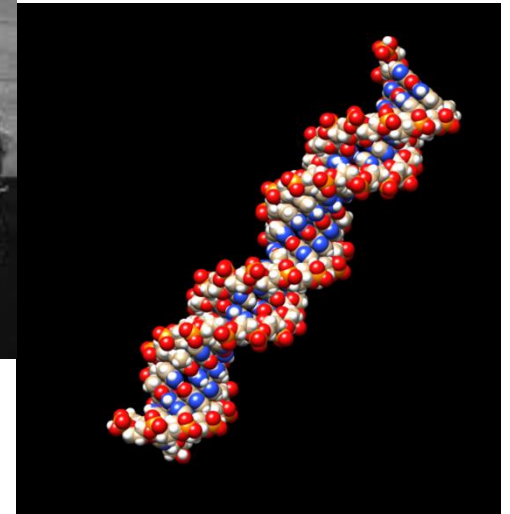
2D элементарная ячейка

Слишком большие, можно меньше

Рентгеноструктурный анализ



1951г. - модель молекулы ДНК Уотсона-Крика



Построена на основе рентгеноструктурного анализа

Кристаллографические базы данных

“Кристаллографические базы данных - базы данных предназначенные для хранения информации о структуре молекул и кристаллов ”

Данные содержащиеся в кристаллографических базах данных получены для *кристаллических структур* с использованием различных кристаллографических методов:

- Дифракция рентгеновских лучей.
- Дифракция нейтронов.
- Дифракция электронов.
- И др.



*Аморфное твердое тело,
не кристаллическая структура*

Кристаллографические базы данных

- **ICSD** (*Inorganic Crystal Structure Database*) - кристаллические структуры неорганических соединений: чистые элементы, минералы, металлы и интерметаллические соединения.
- **ICDD** (*International Centre for Diffraction Data*) - база данных порошковой дифракции. Чаще всего используется для идентификации веществ на основе рентгеновской дифракции.
- **PDB** (*Protein Data Bank*) - база данных трехмерных структур крупных биомолекул (белки и нуклеиновые кислоты). Получают с помощью рентгеновской кристаллографии, ЯМР-спектроскопии или

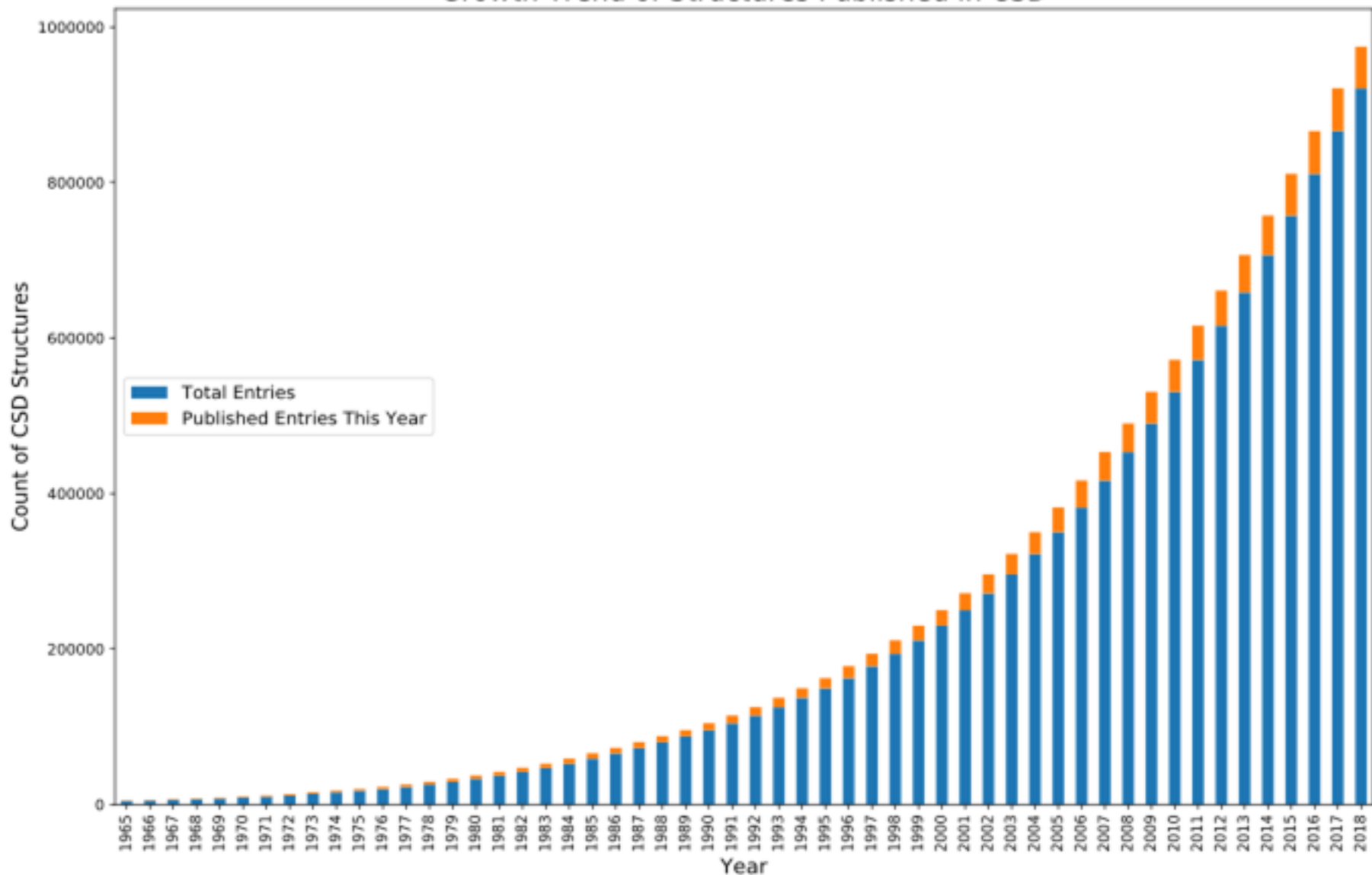
Кристаллографические базы данных

CSD (*Cambridge Structural Database*) - хранилище структурных данных о кристаллических веществах, содержащих, по крайней мере, углерод и водород (органические и металлоорганические соединения). Данные дополняют другие кристаллографические базы данных.

Данные Кембриджской базы получают с помощью рентгеновской дифракции и, реже, с помощью электронной дифракции и нейтронографии. Свободно доступна в Интернете (<http://ccdc.cam.ac.uk/>).

CSD (Cambridge Structural Database)

Growth Trend of Structures Published in CSD



Кристаллографические базы данных

Из данных дифракции получают:

- координаты всех атомов;
- типы атомов;
- параметры элементарной ячейки (это минимальная ячейка, отвечающая единичной решеточной точке структуры с трансляционной симметрией);
- операции симметрии.

Кристаллографические базы данных

- Все данные хранятся в кристаллографических информационных файлах (cif).
- Такой формат файла был принят Международным Союзом Кристаллографии (IUCr).
- Формат файла .cif поддерживается большинством кристаллографических баз данных.