

УДК 548.0+548.73+539.26
ББК 26.31
Г95

Рецензенты: канд. геол.-минер. наук, доц. Г. Л. Старова (Института химии СПбГУ),
канд. геол.-минер. наук, ст. науч. сотр. О. В. Каримова (ИГЕМ РАН)

*Рекомендовано к печати Учебно-методической комиссией Института наук о Земле
Санкт-Петербургского государственного университета*

Гуржий В. В., Золотарев А. А.

Г95 Расшифровка кристаллических структур в программном комплексе *OLEX2*: учеб. пособие. — СПб.: С.-Петербург. гос. ун-т, 2017. — 79 с. (Работа на современных монокристалльных дифрактометрах)
ISBN 978-5-288-05766-3

В настоящем издании описан один из наиболее популярных программных комплексов расшифровки структур кристаллических соединений — *OLEX2*. В основу пособия положена оригинальная документация создателей программного комплекса. Авторы дополнили ее практическими советами и личными наблюдениями, полученными при работе с комплексом.

Пособие предназначено студентам старших курсов, магистрантам и аспирантам Института наук о Земле и Института химии СПбГУ, может быть полезно специалистам в качестве практического руководства при работе с *OLEX2*.

УДК 548.0+548.73+539.26
ББК 26.31

*Настоящая работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ
для ведущих научных школ (НШ-10005.2016.5)*

ISBN 978-5-288-05766-3

© В. В. Гуржий, А. А. Золотарев, 2017
© Санкт-Петербургский государственный университет, 2017

Оглавление

Предисловие	5
Введение. Общие сведения	7
0.1. Интерфейс <i>OLEX2</i>	7
0.2. Работа с файлами	8
0.3. Решение структуры.....	8
0.4. Уточнение структуры.....	9
1. Команды, применяемые в <i>OLEX2</i>	10
1.1. Изменение вида структуры	11
1.2. Комбинации клавиш	12
1.3. Фиксированные / уточняемые параметры	13
1.4. Обработка координации атомов	14
1.5. Операции симметрии	16
1.6. Моделирование разупорядочения: ограничение и фиксирование (Constraints и Restraints)	18
1.7. Примеры синтаксиса выделения структурных фрагментов	22
1.8. Операции с массивом дифракционных данных	22
1.9. Настройка панели управления <i>OLEX2</i>	23
1.10. Выходные данные: таблицы, сообщения, рисунки	25
1.11. Анализ структуры.....	27
2. Примеры задач, решаемых с помощью <i>OLEX2</i>	30
2.1. Сопоставление молекул	30
2.2. Копирование схемы нумерации атомов с одного фрагмента структуры на другой	31
2.3. Определение стандартных отклонений для рассчитанных геометрических параметров	31
2.4. Выделение «маленьких» атомов	32
2.5. Изменение размера эллипсоидов тепловых колебаний	33
2.6. Контроль визуализации структуры и текста консоли.....	33
2.7. Некоторые визуальные эффекты.....	33
2.8. Составление итоговых таблиц с выборочными данными.....	37
2.9. Построение упаковки молекул или наращивание структуры	37
2.10. Редактирование рабочих файлов	38
2.11. Изменение установки пространственной группы	38
2.12. Режим «подгонки» структуры	38
2.13. Библиотека молекул с идеализированной геометрией.....	40
2.14. Оформление результатов расшифровки структуры.....	41
3. Пример расшифровки структуры.....	43
3.1. Решение структуры.....	43
3.1.1. Начало работы.....	43
3.1.2. Создание проекта.....	43
3.1.3. Решение структуры.....	44
3.2. Уточнение структуры.....	48
3.2.1. Расстановка атомов.....	48
3.2.2. Уточнение модели кристаллической структуры	53
3.2.3. Нумерация атомов	55
3.2.4. Расстановка атомов водорода	57
3.2.5. Окончательное уточнение структурной модели.....	59
3.2.6. Весовая схема.....	59

3.3. Дополнительные опции уточнения структуры	60
3.3.1. Определение линейных и угловых параметров структурной модели	60
3.3.2. Высокие пики остаточной электронной плотности	61
3.3.3. Полнота данных	62
3.3.4. Возврат к предыдущим этапам уточнения структуры.....	63
3.4. Создание изображений.....	64
3.5. Создание cif-файла	65
3.6. Данные автоматической проверки файла b175.cif (Check Cif Report)	67
3.7. Данные автоматического отчета уточнения структуры b175	70
Приложение.....	74
Рекомендуемая литература	78