

Crystallography Open Database (COD)

Crystallography Open Database (COD) — большая и растущая бесплатная база данных. Она содержит материал из *American Mineralogist Crystal Structure Database*, базы данных *CrystalEye*, журналов Международного союза кристаллографии и постоянно пополняется структурами, которые присылают авторы работ, опубликованных в иных изданиях.

Поисковый бланк расположен на странице:

<http://www.crystallography.net/search.html>

text (1 or 2 words)	<input type="text"/>
journal	<input type="text" value="acta"/>
year	<input type="text"/>
volume	<input type="text"/>
issue	<input type="text"/>
1 to 8 elements	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>
NOT these elements	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>
volume min and max	<input type="text"/> <input type="text"/>
number of distinct elements min and max	<input type="text"/> <input type="text"/>
filters	<input type="checkbox"/> has F _{obs}
<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Send"/>

Запрос может состоять из слов и химических символов.

Некоторые особенности **заполнения поискового бланка**:

- В текстовых полях можно указывать название химического вещества или минерала, отдельные фрагменты библиографического описания той статьи, в которой был опубликован CIF-файл.
- Каждое поле групп "1 to 8 elements" и "NOT these elements" предназначено для указания только одного химического элемента.
- В случае однобуквенных химических символов (таких как O, C и др.) рекомендуют ставить один пробел перед символом и один пробел после — тогда уменьшается вероятность неадекватной работы программы.
- Можно указывать число атомов элемента в формульной единице. На сайте говорится, что между химическим символом и числом должен быть пробел. Как показывает практика, иногда такой пробел не способствует, а препятствует поиску.
- В графах "number of distinct elements, min and max" указывают минимально и максимально допустимые числа химических элементов в каждом из извлекаемых веществ.

Результаты поиска содержат некоторые кристаллографические характеристики, библиографическое описание публикации — источника структуры — и ссылку на CIF-файл.

Проверочные задания

Задание 1. Структура пероксида водорода.

Извлеките файл со структурой пероксида водорода.

- Чему равен двугранный (торсионный) угол между плоскостями $H_{(1)}OO$ и $H_{(2)}OO$ в молекуле пероксида водорода?
- Одинаковы ли длины связей $H-O$? Чему они равны ?
- Каковы длины водородной связи $O\dots H-O$? (Измерить в пределах одной элементарной ячейки).

Задание 2. Лед под высоким давлением.

Извлеките файлы со структурами льда II и льда III, опубликованными в 1936 году. (лед = ice).

- Каковы длины связи $H-O$ в обеих кристаллических структурах?
- Каковы валентные углы HOH в обеих кристаллических структурах?