

Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)

Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) — наиболее полный в мире архив кристаллографической информации о неорганических веществах. В WWW имеется бесплатный доступ к части этой базы данных — *Demo database*.

Для работы с *Demo database* на основном сайте (<http://icsd.fiz-karlsruhe.de/>) требуется предварительная бесплатная регистрация.

Мы будем работать с предпоследней версией сайта — здесь регистрация не требуется.

При обращении по адресу:
<http://icsd.ill.eu/icsd/index.php>
на экран выводится поисковый бланк:

Authors/Code	Years	Journal	Title/Comment	Help
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="button" value="Search"/> <input type="button" value="Reset"/>
Elements	Element Count	Chem/Mineral Name	ANX/Pearson/S.Type	Cell Size/Mass
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
System	Laue Class	Centering	Space Group	Wyckoff Sequence
any <input type="button" value="v"/>	any <input type="button" value="v"/>	any <input type="button" value="v"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Remarks	Min. Distance	Distance Select	Distance Range	Co-ordin.
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Welcome to the Inorganic Crystal Structure Database.
Click the blue heading links for help and examples.

Поиск можно проводить по многим параметрам; мы сконцентрируем наше внимание на некоторых из них:

Chem/Mineral Name — поиск по названию химического вещества или минерала;

Elements — поиск по элементному составу;

Element Count — число химических элементов в искомом веществе.

Примеры заполнения поля *Elements*

(символы химических элементов записываются через пробелы):

- Cu O — В **брутто**-формуле должны присутствовать Cu и O.
Y Ba2 Cu3 O — В **брутто**-формуле должны присутствовать Y, Ba, Cu, O, причем должно быть 2 атома Ba и три атома Cu.
Zn "P2 O7" — В **брутто**-формуле должны присутствовать Zn, P, O, причем в **структурной** формуле должна быть группировка P₂O₇.

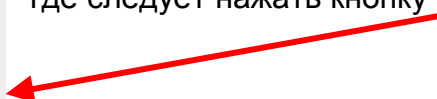
При щелчке по названию графы бланка на экран выводится краткая инструкция по заполнению данного поля (с примерами).

ICSD-WWW Login Form

Enter Username & Password or hit Demo
(NOTE: Case sensitive!)

Save my Password

После заполнения поискового бланка и нажатия кнопки *Search* появляется окно авторизации, где следует нажать кнопку *Demo*.



Так выглядит фрагмент списка результатов поиска:

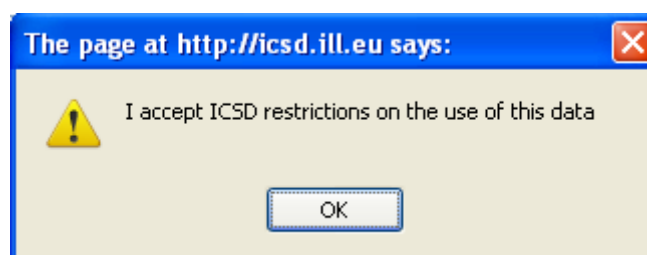
1. Отметить нужную строку галочкой

2. Загрузить CIF-файл

Year	Authors	Title	Struct. Formula	sgf	Mineral
<input type="checkbox"/> 1980	Guth, H.; Heger, G.; Klein, S.; Treutmann, W.; Scheringer, C.;	Strukturverfeinerung von Harnstoff mit Neutronenbeugungsdaten bei 60, 123, 293 K und X-N- und X-X (1S2)-Synthesen bei etwa 100 K	C O (N H2)2	P4-21M	Urea

Page : [1](1 results) 10 results per page.

При вызове CIF-файла потребуется подтвердить честное его использование:



Прежде чем записать новый запрос на поисковом бланке, следует очистить бланк нажатием кнопки **Reset**.

Проверочные задания

Задание 1. Поиск информации по названию вещества.

Найдите информацию о структуре мочевины в кристаллическом состоянии.
(поисковый термин: мочевина = urea)

Проанализируйте структуру и определите величины молекулярных параметров:
длины связей CN, CO, NH;
валентные углы OCN, NCN, CNH, HNH;
двугранный угол между плоскостями, в которых лежат, соответственно, атомы H, N, C и N, C, O.

Задание 2. Поиск по элементному составу.

Найдите информацию о структуре гидрата оксалата аммония.
Подсказка: в поисковом бланке заполните графы *Elements* и *Element Count*.

- Под каким углом развернуты по оси C—C карбоксильные группы друг относительно друга?
- Какова форма иона аммония?
- Каков валентный угол HOH в молекуле воды?