

## Mercury : Краткая инструкция

### Трехмерная визуализация кристаллических структур. Определение структурных параметров химических веществ в кристаллическом состоянии

Откройте файлы 1.cif, 2.cif, 3.cif (*File -> Open...*).

Поэкспериментируйте с программой, чтобы изучить ее возможности.

The image shows a screenshot of the Mercury software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a crystal structure. The interface includes a menu bar (File, Edit, Selection, Display, View, Calculate, Search, Databases, Help), a toolbar, and a Structure Navigator panel on the right. The Structure Navigator shows a list of loaded files, including ACETAC07 (Pna21). The interface also features a 'Display' panel with options for Packing, Auto centre, Short Contact, H-Bond, and Contacts. The 'Options' panel includes checkboxes for Show hydrogens, Show cell axes, Label atoms, Depth cue, Z-Clipping, and Stereo. A red circle highlights the 'Multiple Structures' button in the Structure Navigator panel.

Тип модели

Вид по кристаллографическим осям

Управляемое вращение

Перечень загруженных файлов

Для отображения этой панели указать в меню:  
*View->Toolbars-> -*

Упаковка в кристалле

Ближайшие соседи

Параметры структуры

Показывать атомы водорода

Вернуть исходный вид структуры

Водородные связи

Метки атомов

Генерирование рентгенограммы порошка

Оси элементарной ячейки

Так обозначено то, что не работает в бесплатной версии

## Порядок выполнения отдельных операций

### Управление видом модели

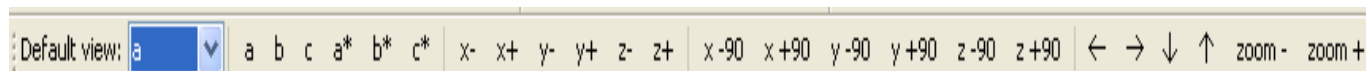
#### а) с помощью мышки.

Установить курсор в поле, где находится модель.

- **Вращение в трехмерном пространстве:** удерживая **левую** клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигать курсор по горизонтали и по вертикали.
- **Вращение в плоскости экрана:** при нажатой клавише **Shift** удерживая **левую** клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигать курсор по горизонтали.
- **Увеличение-уменьшение:** удерживая **правую** клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигать курсор по вертикали.
- **Перемещение по полю:** при нажатой клавише **Ctrl** удерживая **левую** клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигать курсор в нужном направлении.

#### б) с помощью кнопок

Нажать соответствующую кнопку на панели:

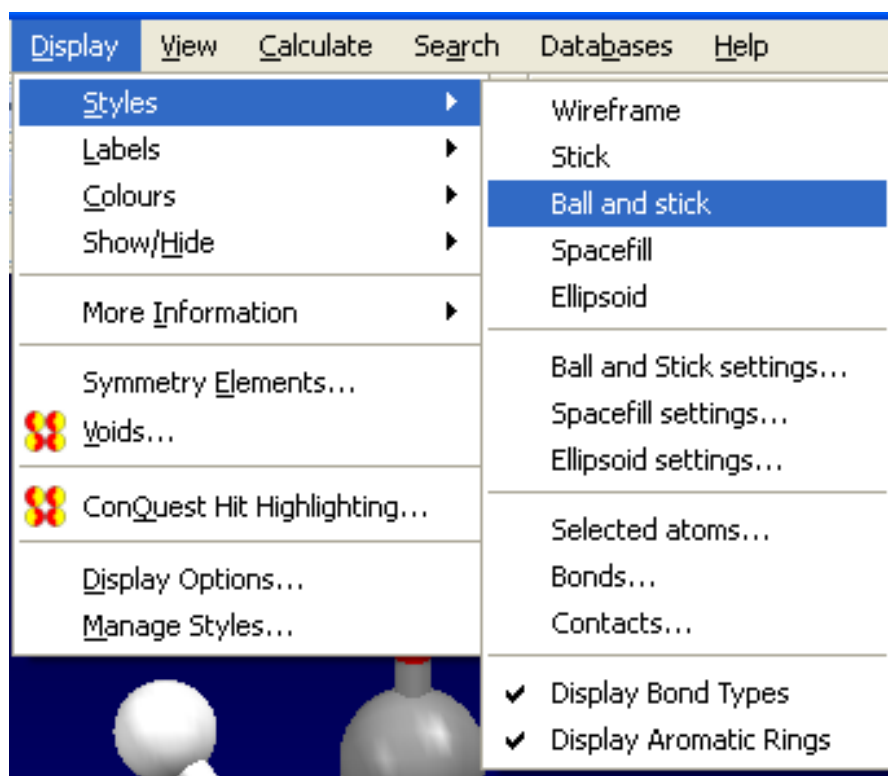
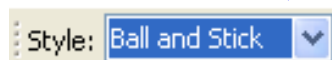


#### Выбор типа модели:

а) через меню

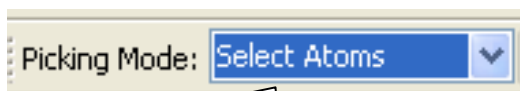


б) из списка Style



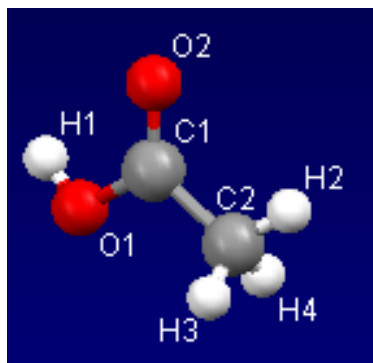
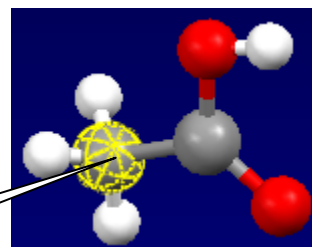
**Выделить атом:** щелкнуть по атому.

**Снять выделение:** повторно щелкнуть по выделенному атому.



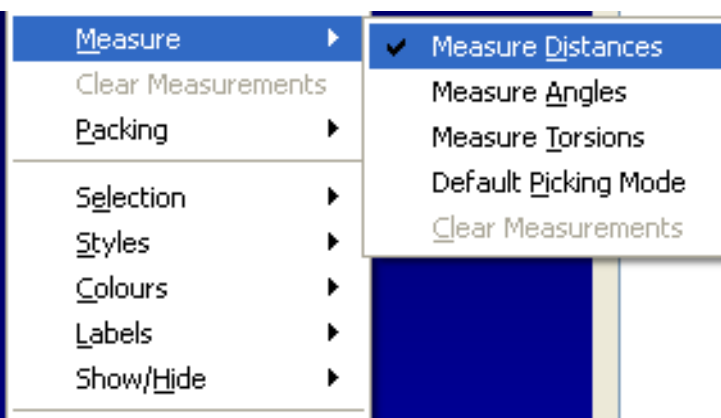
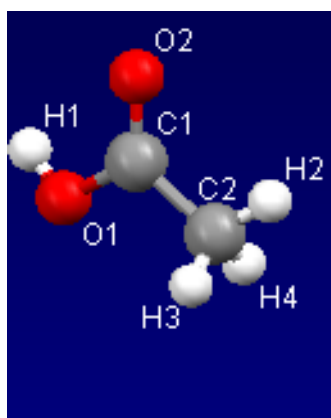
Что именно выделяем - указываем в меню, расположенном в верхней панели

Выделенный атом



**Разметить атомы** — выключателем *Label atoms*

### Измерение отдельных геометрических параметров

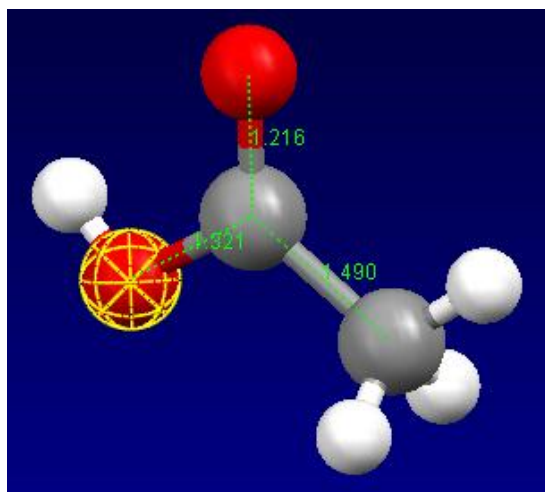


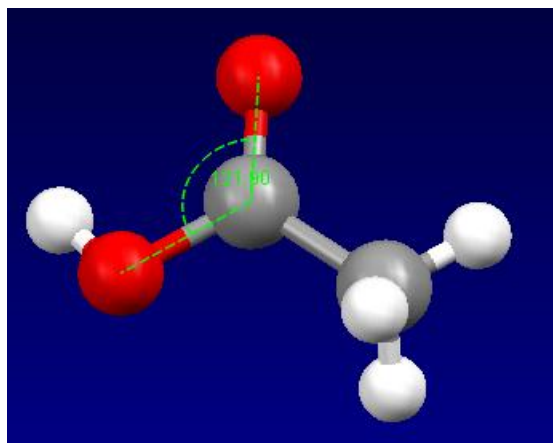
1. Открыть контекстное меню и выбрать требуемый параметр.

2.

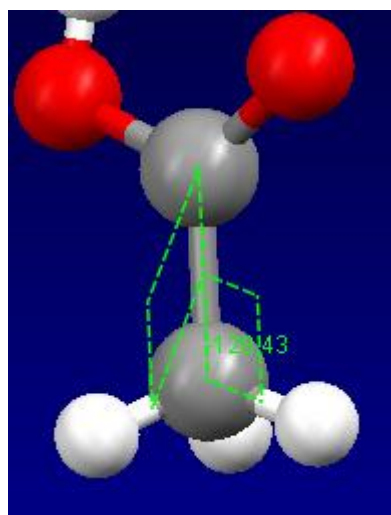
Для измерения **длины связи** (*Measure Distances*) — щелкнуть по двум связанным атомам.

*Совет:* структуру стоит развернуть в наиболее удобное положение и приблизить ее к зрителю.





Для измерения **угла между связями** (*Measure Angles*) — щелкнуть поочередно по трем атомам.



Для измерения **двугранного угла** (*Measure Torsions*) — щелкнуть поочередно по четырем атомам; будет измерен угол между плоскостью, в которой лежат атомы 1-2-3, и плоскостью, в которой лежат атомы 2-3-4.

**Удаление измеренных геометрических параметров с экрана:**

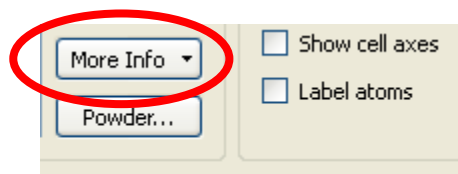
*Clear Measurements* — команда в контекстном меню и кнопка на верхней панели.

### Получение таблиц с числовыми значениями структурных параметров

а) Через меню:

*Display -> More Information -> ...*

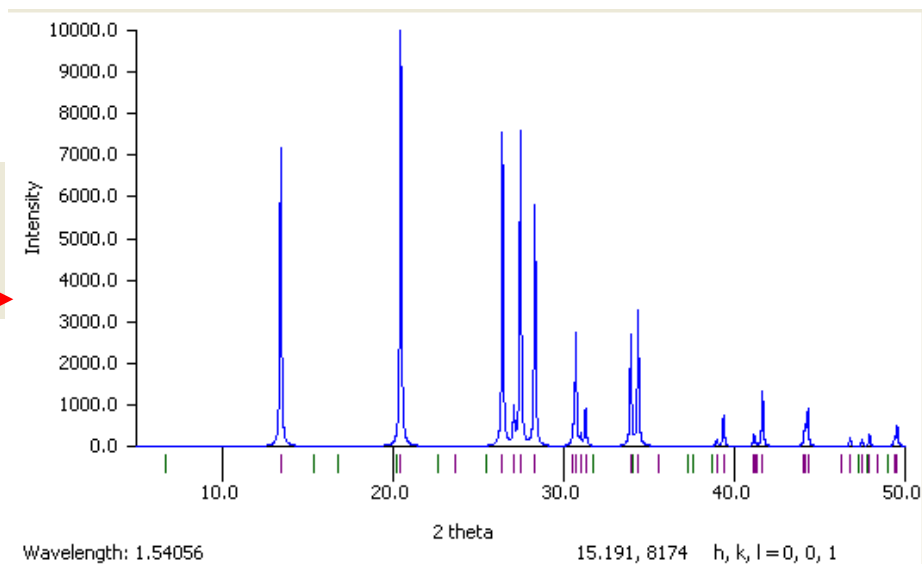
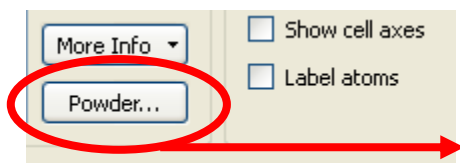
б) Кнопкой *More Info* (расположена на нижней панели)



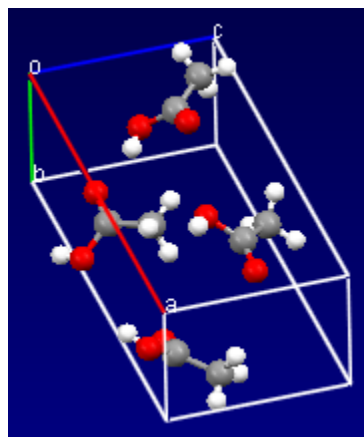
Как правило, наиболее полная информация находится в таблицах *Structure* (кристаллографические параметры), *Bond List* (межъядерные расстояния), *All Angles List* (углы между связями), *All Torsions List* (двугранные углы).

## Генерирование рентгенограммы

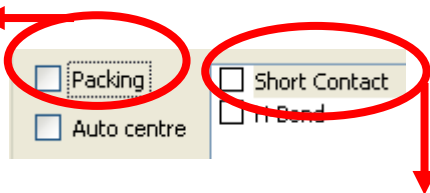
Щелкнуть по кнопке  
*Powder*



## Пространственное заполнение



Инструменты находятся на нижней панели.

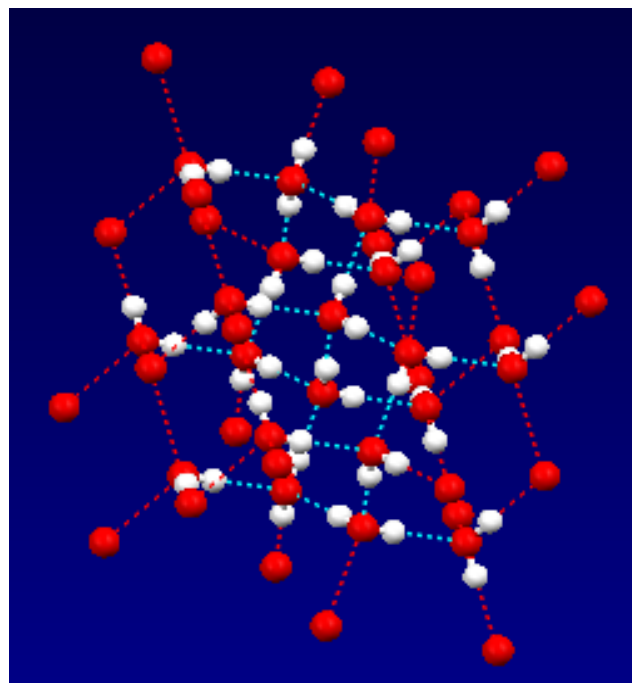


Пунктир указывает на близко расположенные атомы соседних молекул.

Голубой цвет пунктира — если молекулы отображены целиком.

Красный цвет пунктира — если отображен только один атом соседней молекулы.

Для того, чтобы визуализировать только **водородные связи**, необходимо при выключенном *Short Contact* включить *H-Bond*.



## Тренировочные упражнения

Проанализируйте кристаллические структуры, хранящиеся в файлах *1.cif* (уксусная кислота), *2.cif* (вода), *3.cif* (соединение цезия и фуллерена).

1. Определите межъядерные расстояния, углы между связями, двугранные углы в молекуле уксусной кислоты, находящейся в кристаллической фазе.

Ответы для самопроверки:

$$d(\text{C}=\text{O}) = 1,216 \text{ \AA}$$

$$d(\text{C}-\text{O}) = 1,321 \text{ \AA}$$

$$\angle \text{OCO} = 121,90^\circ$$

$$\text{Угол между плоскостями НОС и ОСО: } 8,32^\circ$$

2. Определите межъядерные расстояния в молекулах воды в кристаллической фазе.

Ответ для самопроверки:

$$d(\text{O}-\text{H}) = 0,867 \text{ \AA}; 0,821 \text{ \AA} \text{ и } 0,862 \text{ \AA}.$$

Чему равна длина водородной связи  $\text{H}(3)\dots\text{O}(1)$  ?

Ответ для самопроверки:

$$d(\text{O}\dots\text{H}) = 1,897 \text{ \AA}.$$

3. Оцените диаметр молекулы фуллерена.

Ответ для самопроверки:

$$D = 7,14\dots 7,15 \text{ \AA}$$

---

**Для справки:**

Инсталлятор программы *Mercury* находится по адресу:

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/FreeSoftware/Pages/FreeMercury.aspx>