

Программа Atoms для визуализации кристаллических структур и изучения их геометрических особенностей разрабатывается фирмой Shapessoftware (www.shapesoftware.com) начиная с 1989 года. Из привлекательных особенностей компьютерной программы можно выделить возможность создания видеофайлов кристаллических структур (например, вращающихся молекул), а также возможность записи изображений в stl-файлы для 3D-печати и экспорта структур в векторный формат, что позволяет получать большие изображения фотографического качества. Из недостатков необходимо отметить достаточно громоздкую процедуру создания структурного файла. Программный продукт является коммерческим: бессрочная лицензия на 1 пользователя стоит 380\$, а на компьютерный класс 760\$. Предусмотрены скидки для обновлений программы.

Практическое задание.

*Визуализация фрагмента
кристаллической структуры
цепочечного силиката диопсида*

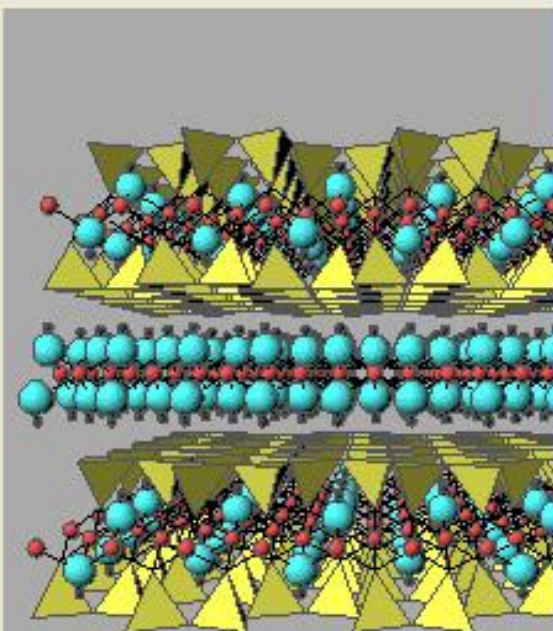


ATOMS Startup Window

File Settings Help

No data present - select option below

- New Enter a new data set
- Open Open an old data file
- Import Import a structure file
- Quit Exit ATOMS
- Help



Title-Axes

Help

Cancel

OK

Title (80 characters):

Диопсид

Structure axes: monoclinic

a: 9.746

b: 8.899

c: 5.251

beta: 105.63

Title on plot

Print title on plot

Scale

Font

Times New Roman - 10 pt

Use PostScript font: Times-Roman

Symmetry Option

Help Cancel OK

Option

- Space group from table
- Point group from table
- Cartesian matrices
- Custom point or space group
- Use no symmetry -

Use no symmetry

- Crystal
- Molecule

Space-Group Symmetry

Basic | Shubnikov

H-M Symbol:

Hall Symbol:

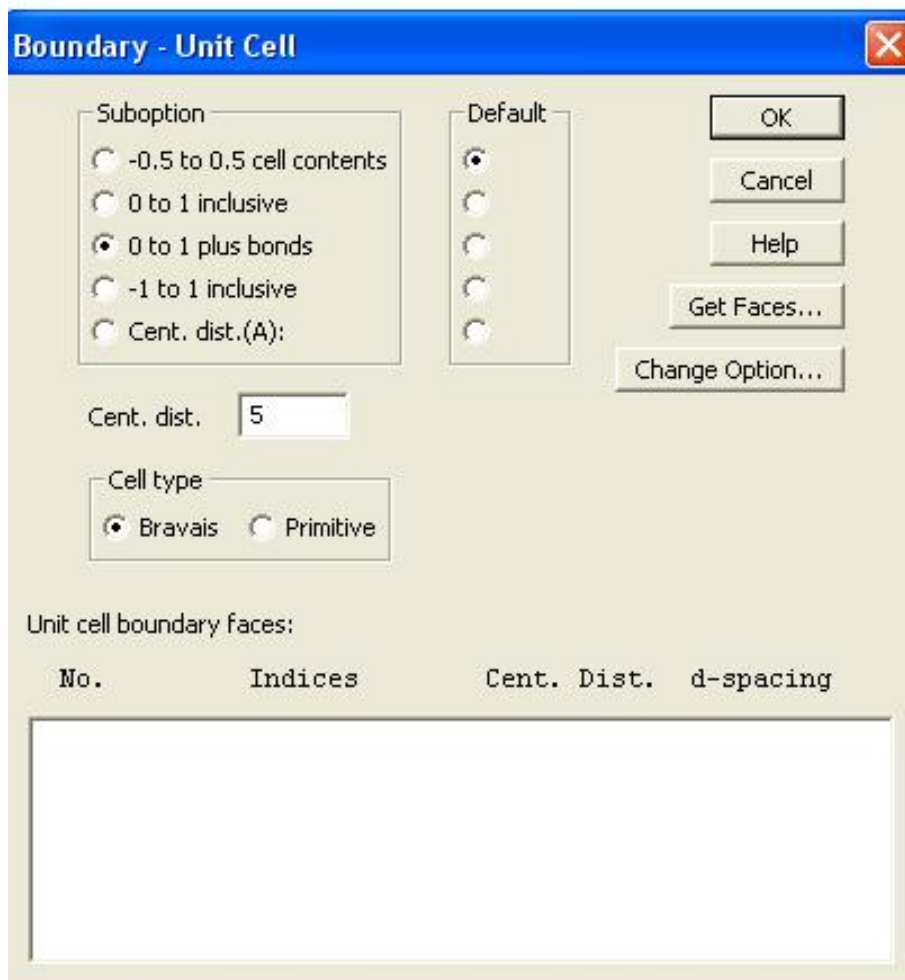
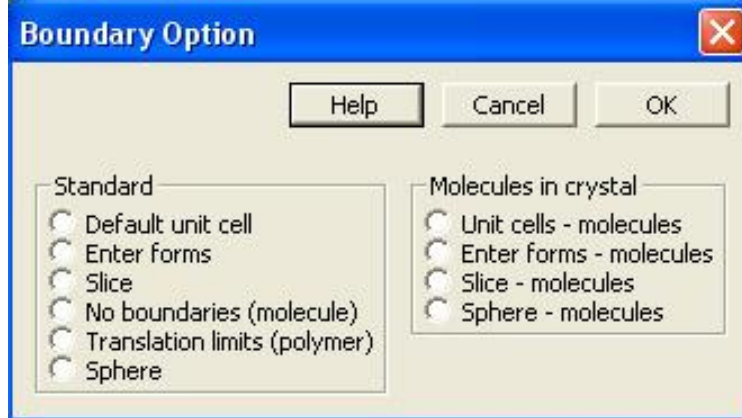
Number:

Number	Hermann-Mauguin	Hall
14:c3	P 1 1 21/b	-P 2bc
14:a1	P 21/b 1 1	-P 2xab
14:a2	P 21/n 1 1	-P 2xn
14:a3	P 21/c 1 1	-P 2xac
15:b1	C 1 2/c 1	-C 2yc
15:b2	A 1 2/n 1	-A 2yac
15:b3	I 1 2/a 1	-I 2ya

International Tables Volume

Vol I (mono - c assumed) Vol A (mono - b assumed) Shubnikov

Change Symmetry Option Help Cancel OK



Input Atoms



Vectors

Temperature Factors

Help

Cancel

OK

No.	Label	Coordinates			Type	Radius
1	Si	0.28620	0.09330	0.22930	14	0.150
2	Mg	0.00000	0.90820	0.25000	12	0.250
3	Ca	0.00000	0.30150	0.25000	20	0.300
4	O1	0.11560	0.08730	0.14220	8	0.400
5	O2	0.36110	0.25000	0.31802	8	0.400
6	O3	0.35030	0.01760	-0.00470	8	0.400

Revise...

Add...

Delete

Delete Range

0

to

0

Read atom list from file

File name:

INFILE

Read Named File...

Browse...

Coordination

Distances and angles

Add Hydrogens

Z-Matrix

Construct a molecule from bonds and angles

Hex->Cart

Cart-Hex

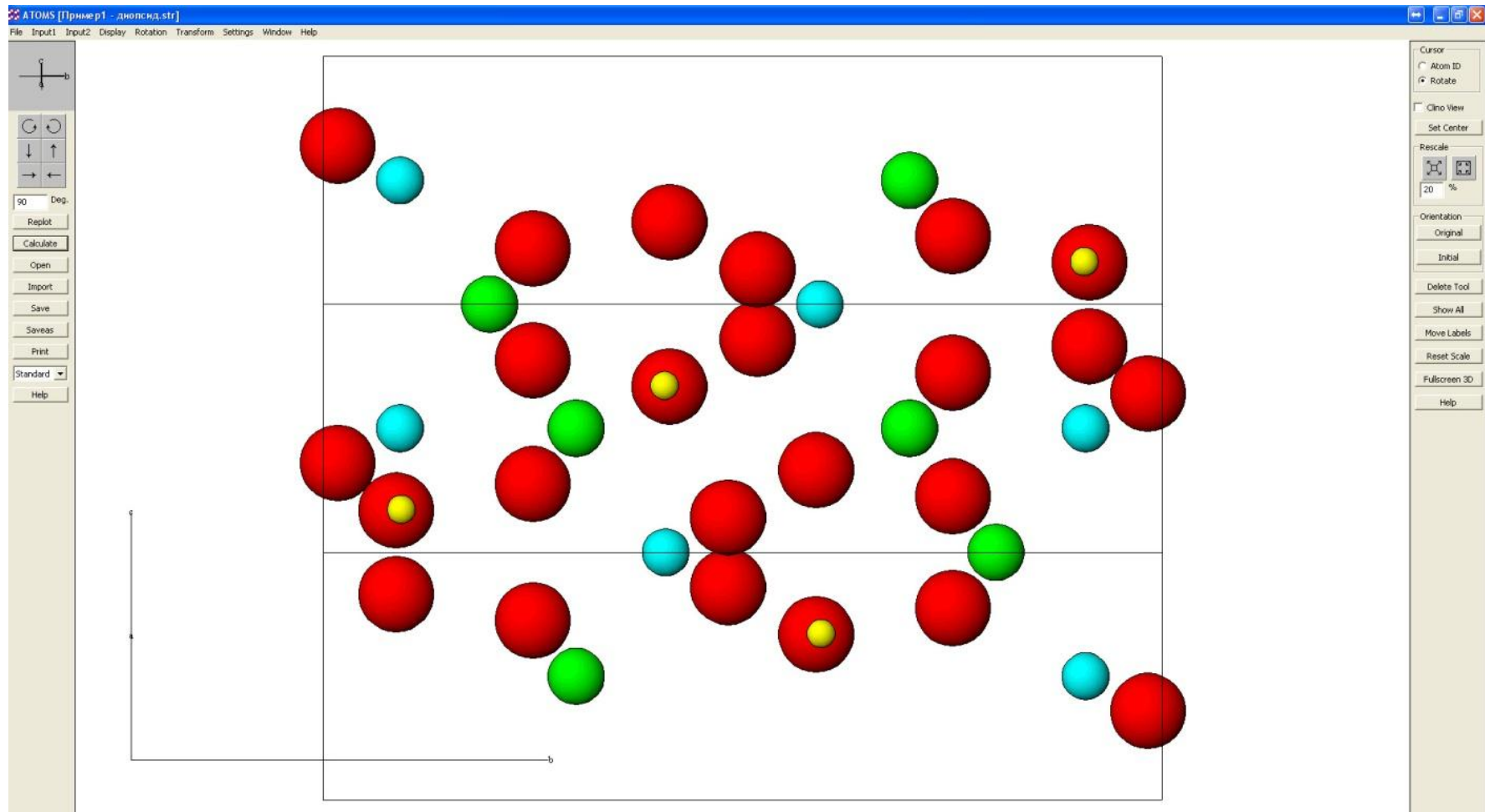
Translate all input atoms:

0

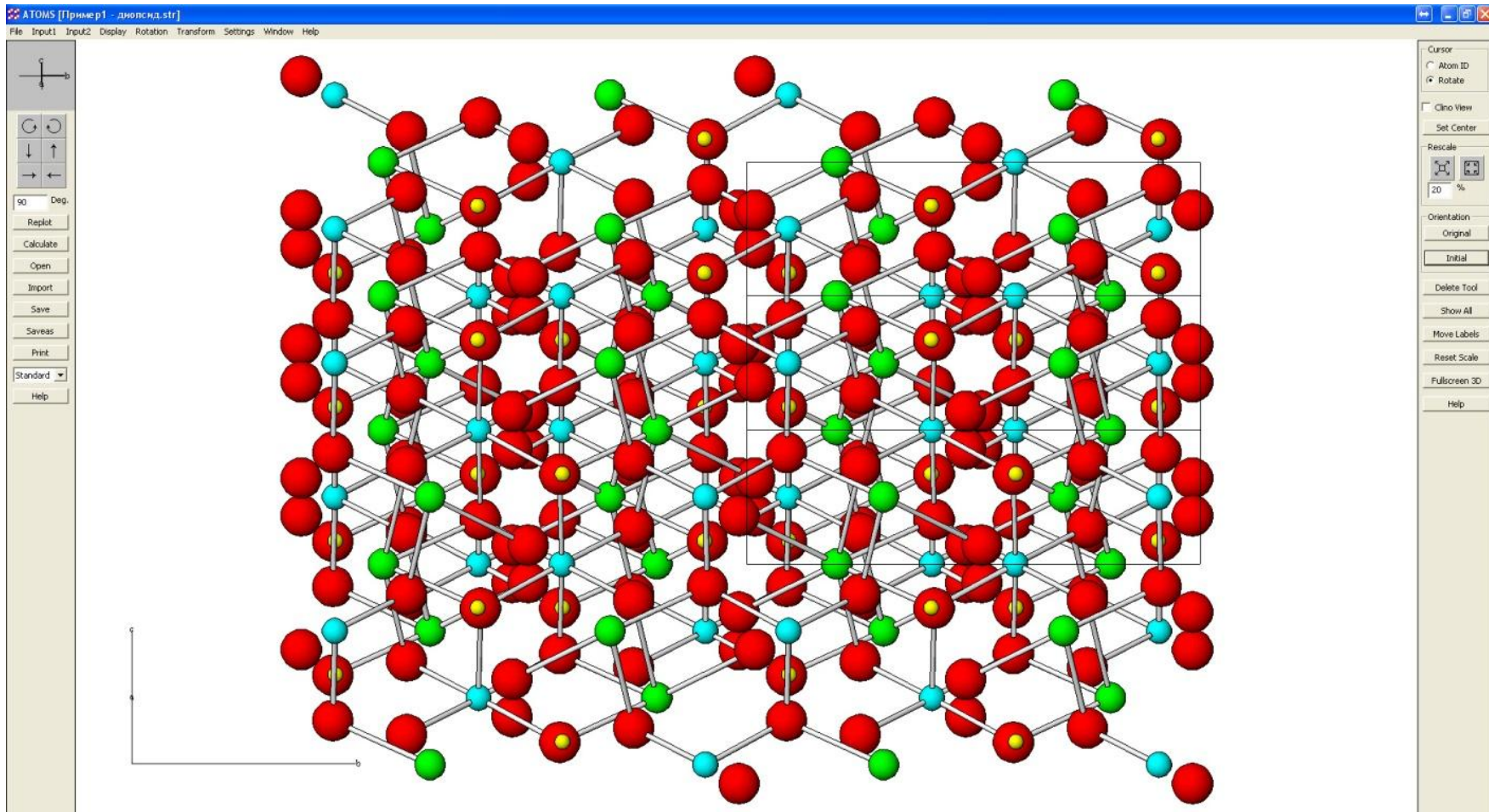
0

0

Translate



Появление объемного эффекта.



Создание связей между атомами.

Input Polyhedron Data

Add polyhedron number 1 Last OK

Coordination number: New Cancel

Maximum bond distance: Help

Types - Central: Ligands:

Colors (RGB 0-255)

Rim: Select Rim Color...

Fill: Select Fill Color...

Black-and-white patterns (shades)

Fill: Rim: Pen no: Line width:

Hachure pattern

0 1 2 3 4 5
 Spacing (A):

Use shade

Polyhedra

Ellipsoid Parameters 3D Parameters Help Cancel OK

No.	C.N.	Central	Ligands	Max. dist.
1	4	14	8 0 0 0 0 0 0 0	2.0000

Revise... Delete... Add Polyhedra...

Show atoms in incomplete polyhedra as spheres

Show back edges dashed (unshaded only)

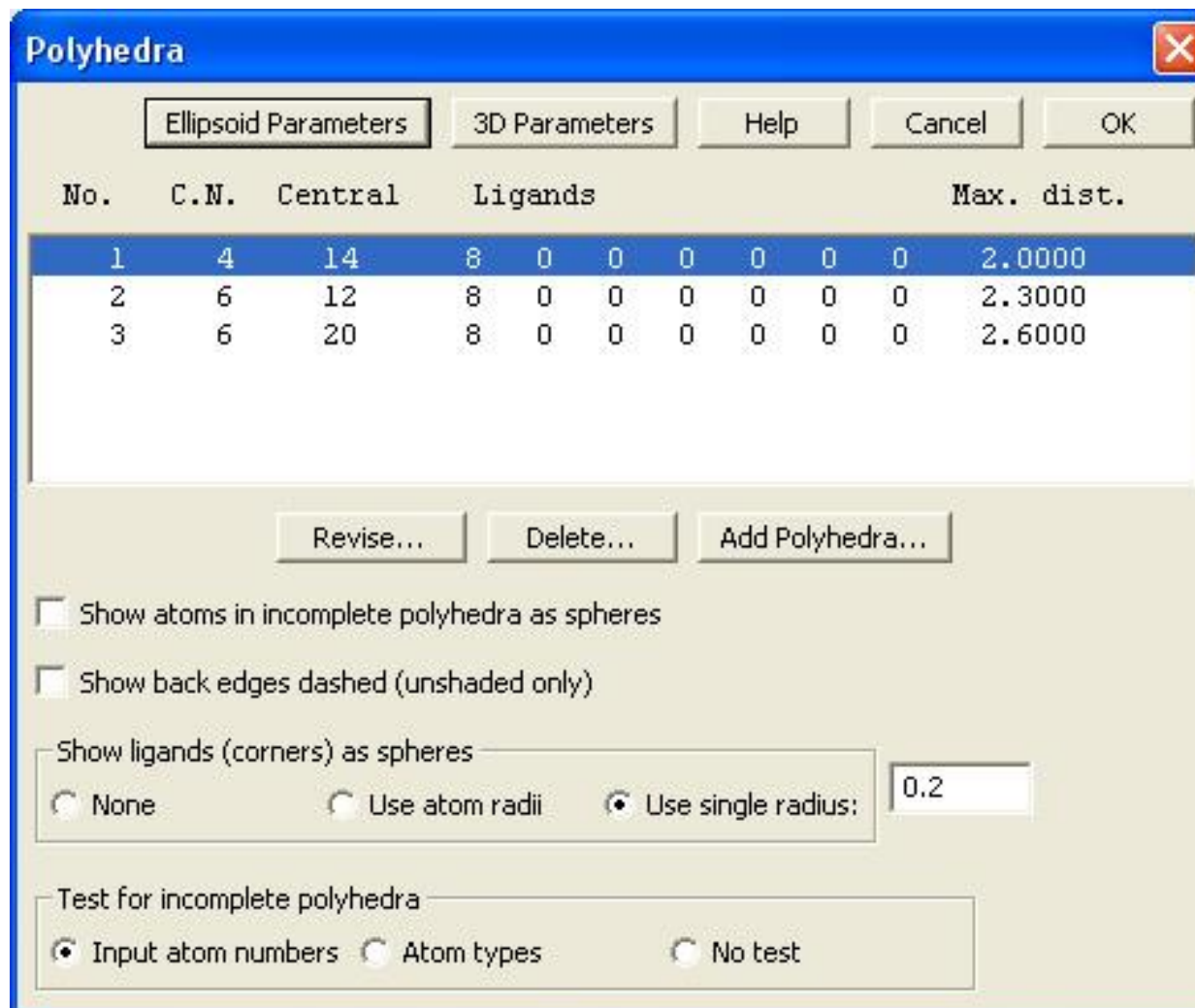
Show ligands (corners) as spheres

None Use atom radii Use single radius:

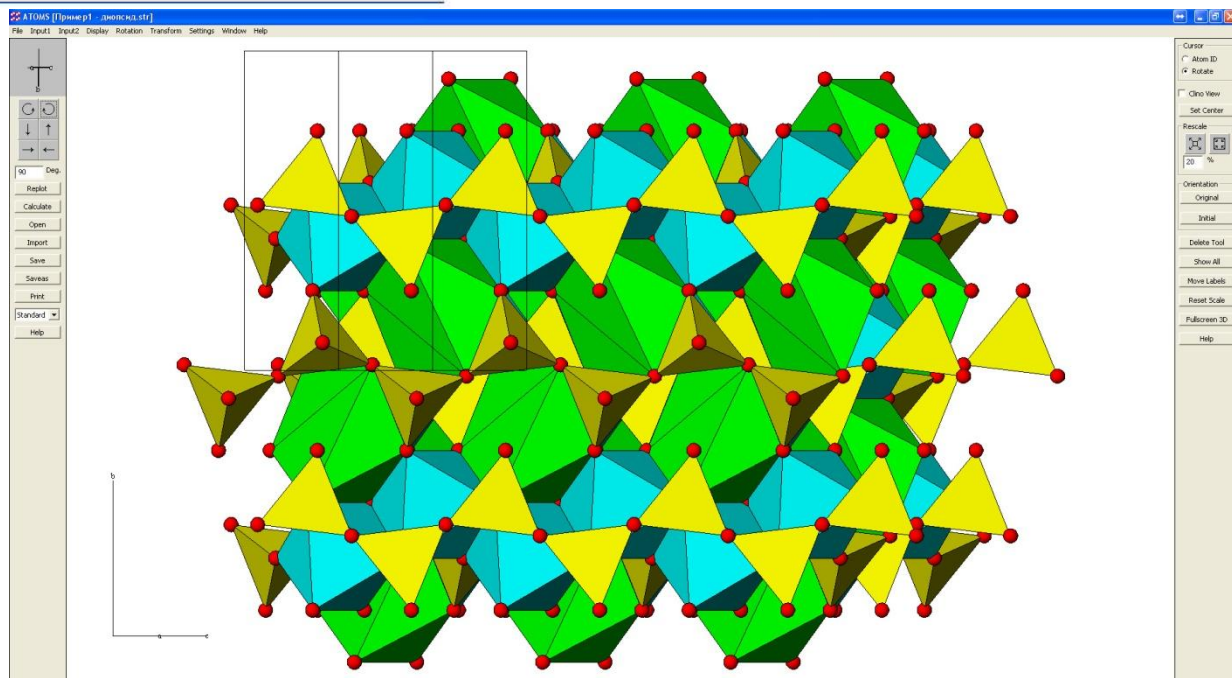
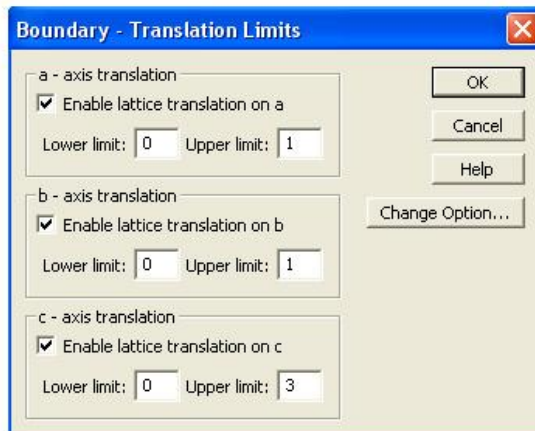
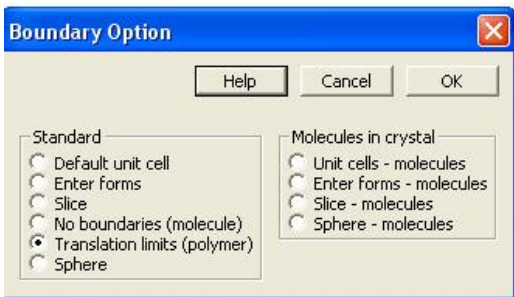
Test for incomplete polyhedra

Input atom numbers Atom types No test

Полиэдрическая модель.



Полиэдрическая модель.



Если заменить различные варианты представления элементарной ячейки (*Default unit cell*) на трансляционный полимер (*Translation limits*) и задать утроение по оси *c*, как показано на рисунке то изображение структуры примет достаточно наглядный вид

File Edit Window Help

ATOMS V6.3.1(12/14/06) Date: 12/05/17 Time: 12:09:58

File: Пример1 - диопсид.str

Title: Диопсид

Listing from Calculation Output command, Input2 menu

Close this window or click on graphics window to return to normal operating mode

All atoms in unit cell (crystal coordinates)

	Type	Coordinates	Symm.
1	Si	14 0.28620 0.09330 0.22930	1
2	Si	14 0.78620 0.59330 0.22930	5
3	Si	14 0.71380 0.09330 0.27070	2
4	Si	14 0.21380 0.59330 0.27070	6
5	Si	14 0.71380 0.90670 0.77070	3
6	Si	14 0.21380 0.40670 0.77070	7
7	Si	14 0.28620 0.90670 0.72930	4
8	Si	14 0.78620 0.40670 0.72930	8
9	Mg	12 0.00000 0.90820 0.25000	1
10	Mg	12 0.50000 0.40820 0.25000	5
11	Mg	12 0.00000 0.09180 0.75000	3
12	Mg	12 0.50000 0.59180 0.75000	7
13	Ca	20 0.00000 0.30150 0.25000	1
14	Ca	20 0.50000 0.80150 0.25000	5
15	Ca	20 0.00000 0.69850 0.75000	3
16	Ca	20 0.50000 0.19850 0.75000	7
17	01	8 0.11560 0.08730 0.14220	1
18	01	8 0.61560 0.58730 0.14220	5
19	01	8 0.88440 0.08730 0.35780	2
20	01	8 0.38440 0.58730 0.35780	6
21	01	8 0.88440 0.91270 0.85780	3
22	01	8 0.38440 0.41270 0.85780	7
23	01	8 0.11560 0.91270 0.64220	4
24	01	8 0.61560 0.41270 0.64220	8
25	02	8 0.36110 0.25000 0.31802	1
26	02	8 0.86110 0.75000 0.31802	5
27	02	8 0.63890 0.25000 0.18198	2
28	02	8 0.13890 0.75000 0.18198	6
29	02	8 0.63890 0.75000 0.68198	3
30	02	8 0.13890 0.25000 0.68198	7
31	02	8 0.36110 0.75000 0.81802	4
32	02	8 0.86110 0.25000 0.81802	8
33	03	8 0.35030 0.01760 0.99530	1
34	03	8 0.85030 0.51760 0.99530	5
35	03	8 0.64970 0.01760 0.50470	2
36	03	8 0.14970 0.51760 0.50470	6
37	03	8 0.64970 0.98240 0.00470	3
38	03	8 0.14970 0.48240 0.00470	7
39	03	8 0.35030 0.98240 0.49530	4
40	03	8 0.85030 0.48240 0.49530	8

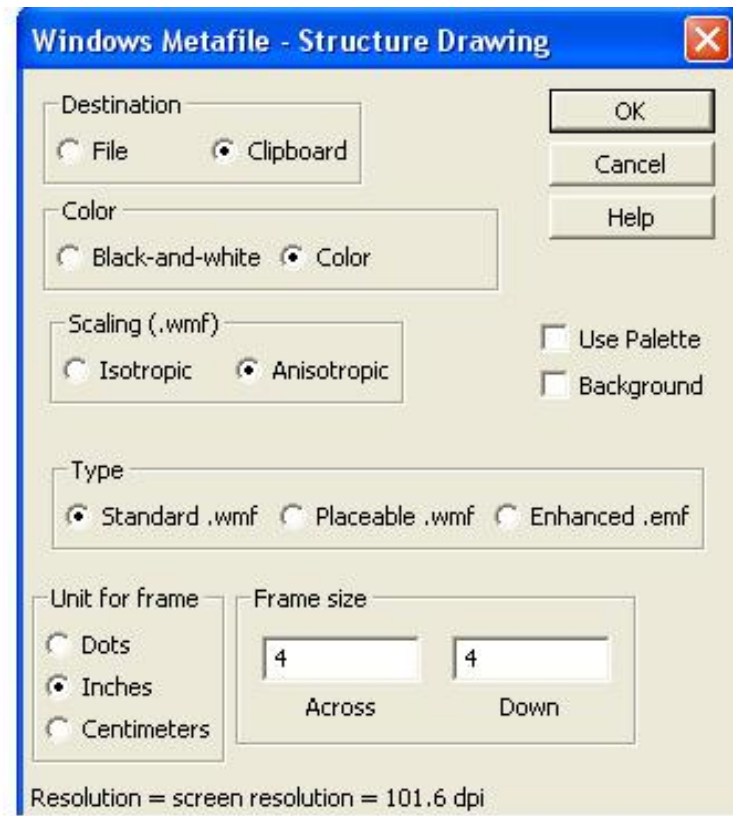
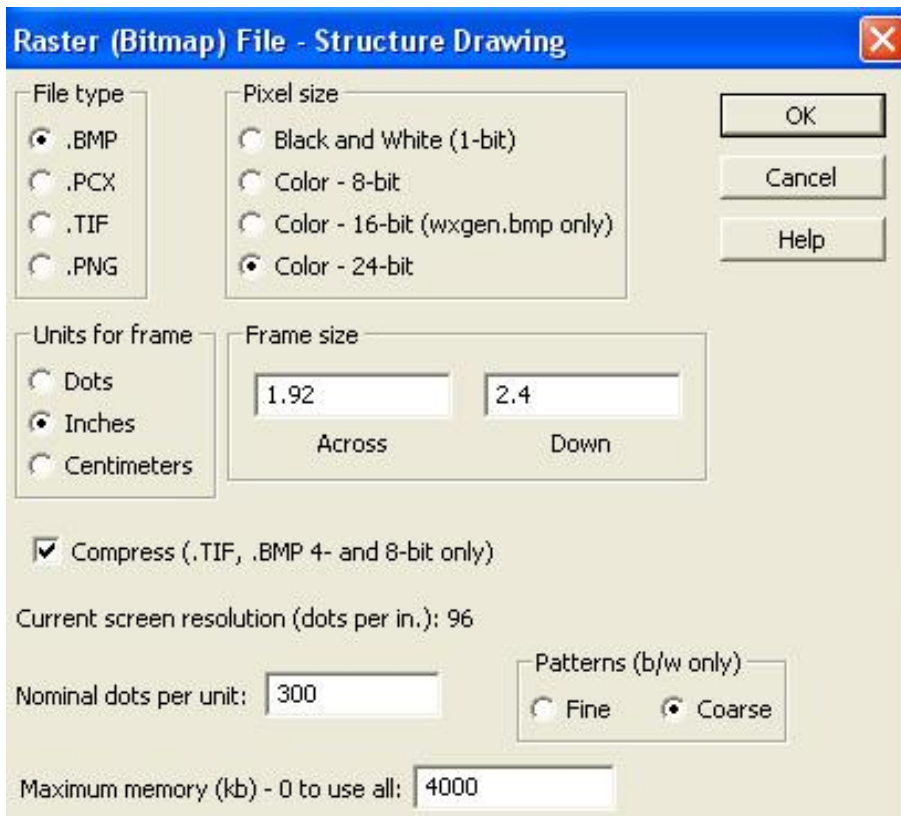
File Edit Window Help

Polyhedra No.	Type	Atoms Central	Ligand	Distance
1	1	1 Si	17 01 1.60210 25 02 1.58468	
** Incomplete polyhedron - rejected				
1	1	2 Si	18 01 1.60210 26 02 1.58468 40 03 1.68671	
** Incomplete polyhedron - rejected				
1	1	3 Si	19 01 1.60210 27 02 1.58468 35 03 1.66358	
** Incomplete polyhedron - rejected				
1	1	4 Si	20 01 1.60210 28 02 1.58468 36 03 1.66358 38 03 1.68671	Volume = 2.220
2	1	5 Si	21 01 1.60210 29 02 1.58468 77 03 1.66358 195 03 1.68671	Volume = 2.220
3	1	6 Si	22 01 1.60210 30 02 1.58468 36 03 1.68671 78 03 1.66358	Volume = 2.220
4	1	7 Si	23 01 1.60210 31 02 1.58468 39 03 1.66358 193 03 1.68671	Volume = 2.220
5	1	8 Si	24 01 1.60210 32 02 1.58468 34 03 1.68671 40 03 1.66358	Volume = 2.220
6	1	41 Si	33 03 1.66358 57 01 1.60210 65 02 1.58468	Volume = 2.220
** Incomplete polyhedron - rejected				
6	1	42 Si	34 03 1.66358 58 01 1.60210 66 02 1.58468 80 03 1.68671	Volume = 2.220
			75 03 1.66358	

File Edit Window Help

Bonds	Type	Atoms	Distance
1	1 9	Mg 23 01	2.0645
2	1 9	Mg 28 02	2.0500
3	1 9	Mg 177 01	2.1151
4	1 10	Mg 18 01	2.1151
5	1 10	Mg 20 01	2.1151
6	1 10	Mg 24 01	2.0645
7	1 10	Mg 25 02	2.0500
8	1 10	Mg 27 02	2.0500
9	1 11	Mg 30 02	2.0500
10	1 11	Mg 57 01	2.0645
11	2 13	Ca 17 01	2.3594
12	2 13	Ca 30 02	2.3523
13	2 13	Ca 36 03	2.5620
14	2 14	Ca 18 01	2.3594
15	2 14	Ca 20 01	2.3594
16	2 14	Ca 29 02	2.3523
17	2 14	Ca 195 03	2.5620
18	2 15	Ca 23 01	2.3594
19	2 15	Ca 68 02	2.3523
20	2 15	Ca 78 03	2.5621
21	2 16	Ca 22 01	2.3594
22	2 16	Ca 24 01	2.3594
23	2 16	Ca 25 02	2.3523
24	2 16	Ca 67 02	2.3523
25	1 19	01 331 Mg	2.0645
26	2 19	01 333 Ca	2.3594
27	2 21	01 335 Ca	2.3594
28	1 21	01 369 Mg	2.0645
29	1 21	01 491 Mg	2.1151
30	1 22	01 50 Mg	2.0645
31	1 23	01 171 Mg	2.1151
32	1 26	02 329 Mg	2.0500
33	2 26	02 335 Ca	2.3523
34	2 31	02 54 Ca	2.3523
35	1 32	02 331 Mg	2.0500
36	2 32	02 373 Ca	2.3523
37	2 34	03 373 Ca	2.5621
38	2 39	03 176 Ca	2.5620
39	2 40	03 335 Ca	2.5620
40	1 49	Mg 63 01	2.0645
41	1 49	Mg 68 02	2.0500
42	1 49	Mg 217 01	2.1151
43	1 51	Mg 70 02	2.0500
44	1 51	Mg 97 01	2.0645
45	2 53	Ca 57 01	2.3594
46	2 53	Ca 70 02	2.3523

Расчет межатомных расстояний и объемов полиэдров



Экспорт данных