

# Chemie a fyzika pevných látek – p3

strukturní faktor, monokrystalové a práškové difrakční metody

Doc. Michal Hušák dr. Ing.

Doporučená literatura:

B. Kratochvíl , L. Jenšovský - Úvod do krystalochemie

Kratochvíl B.: Chemie a fyzika pevných látek I. skriptum. VŠCHT Praha 1994. (<http://tresen.vscht.cz/min/eso>)

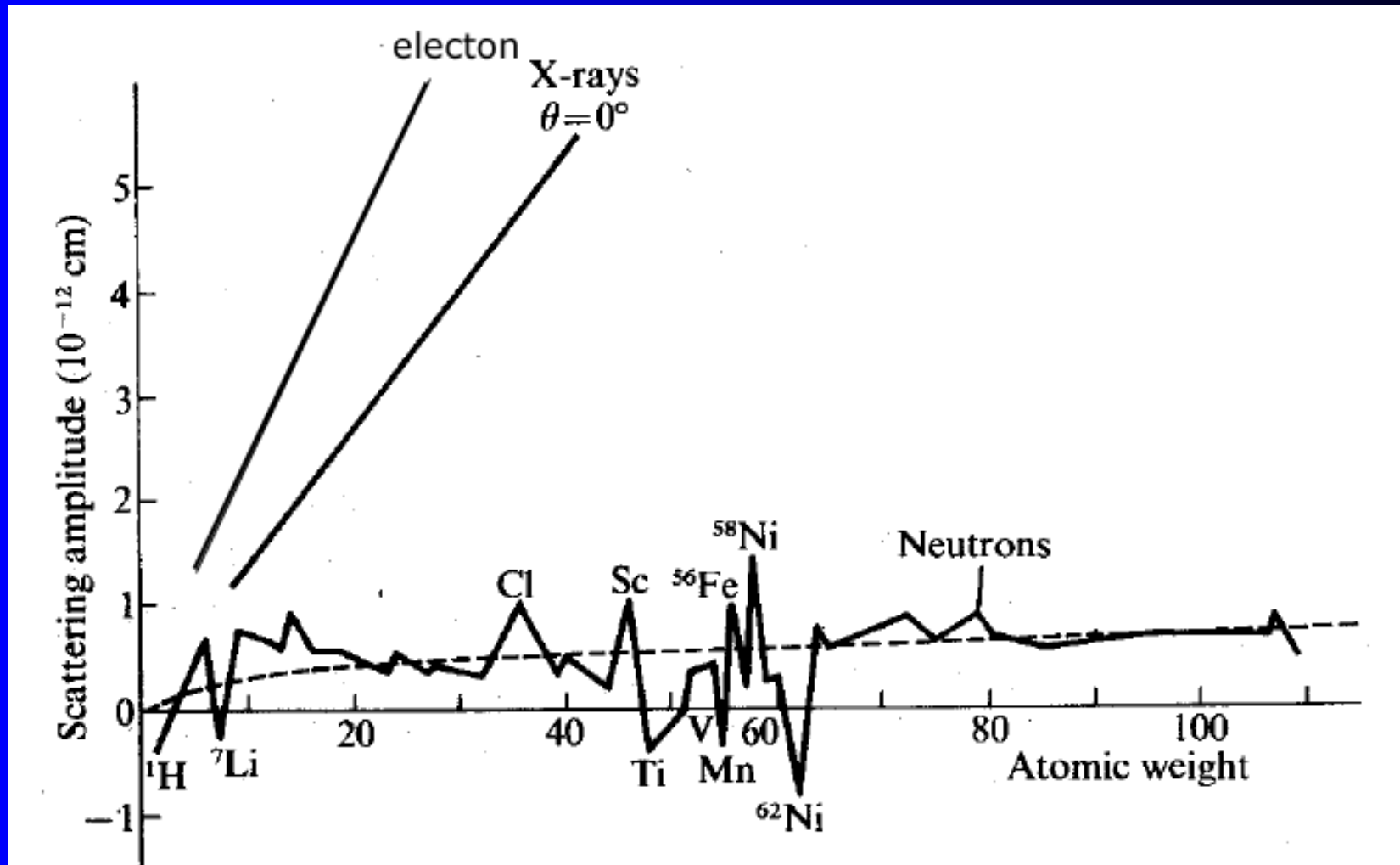
Kratochvíl B. a spol.: Základy fyziky a chemie pevných látek II. skriptum. VŠCHT Praha 1990. (<http://tresen.vscht.cz/min/eso>)

Kratochvíl B. a kol.: Příklady z fyziky pevných látek. skriptum. VŠCHT Praha 1991.

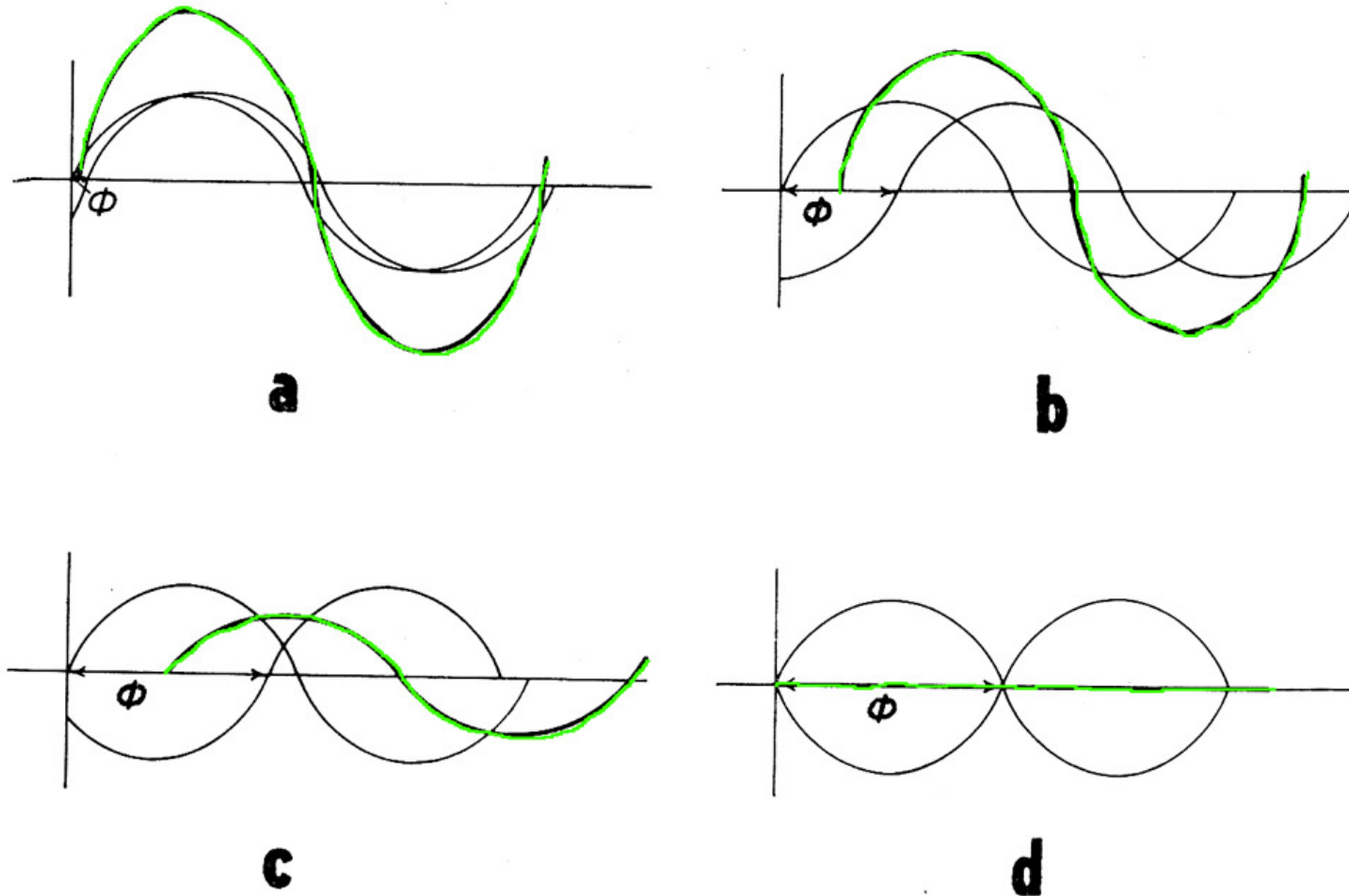
# Obsah přednášky

- Strukturní faktor
- Rtg strukturní analýza
- Kvalitativní a kvantitativní rtg fázová analýza

# Strukturní faktor - atomový rozptylový faktor / typ atomu

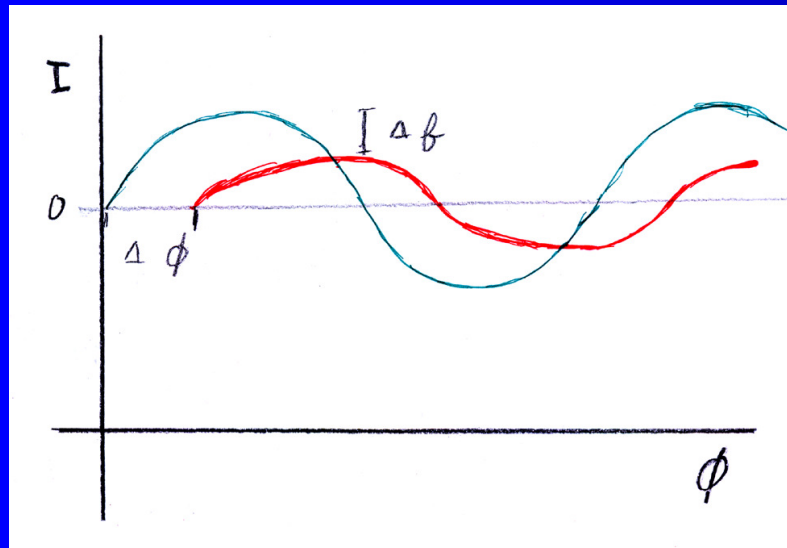
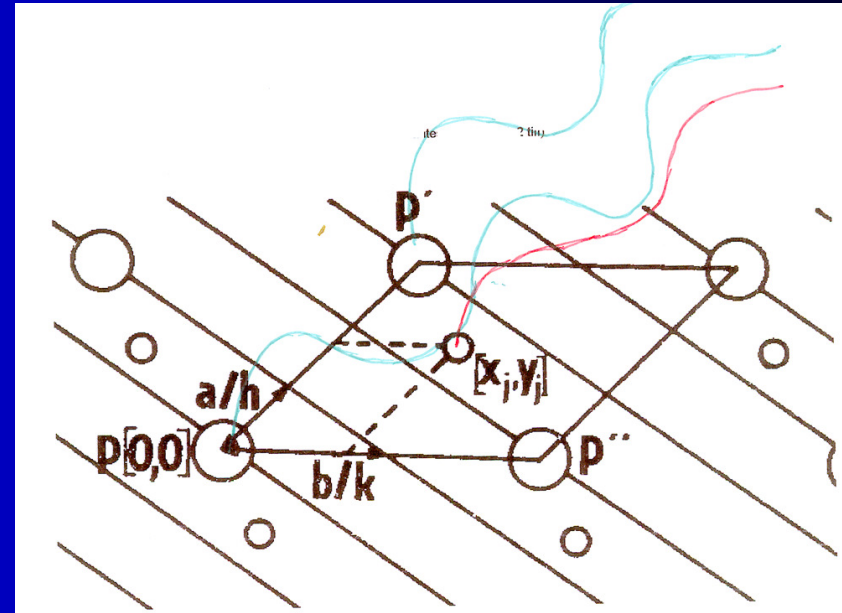
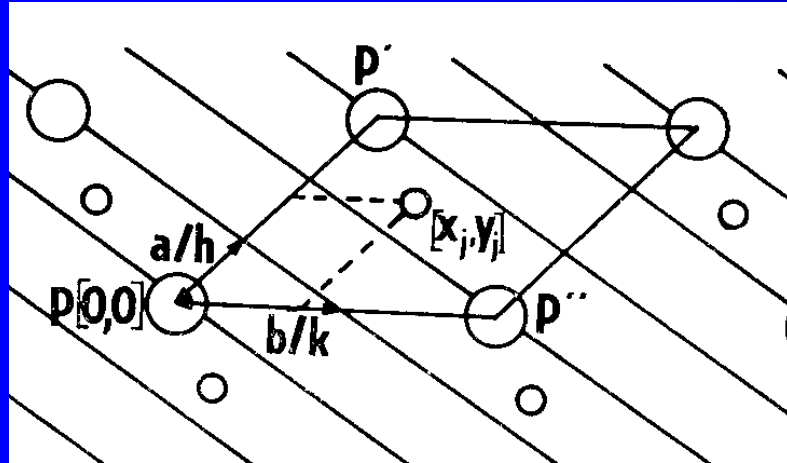


# Skládání vln



Obr. 51. Vliv velikosti fázového posunu (úhlu)  $\phi$  na zesílení (a, b), zeslabení (c) nebo zániku (d) vlnění při interferenci dvou vln

# Strukturní faktor – skládání příspěvků

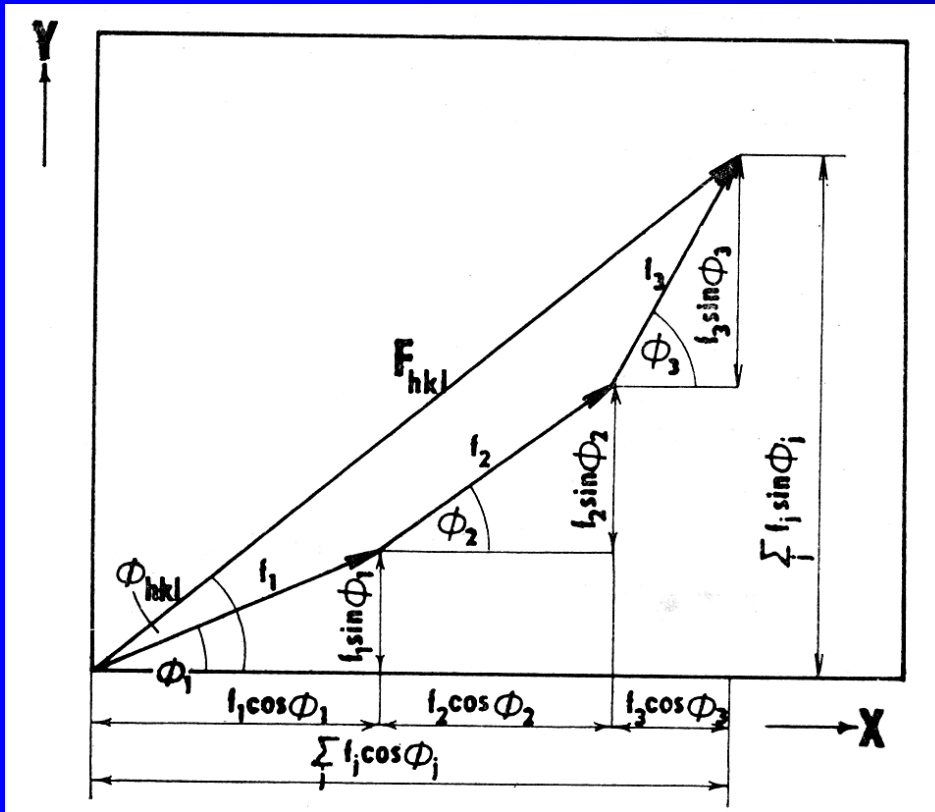


Rozdíl v intenzitě vln – daný rozdílem  $f_j$  (individuální atomový rozptylový faktor)

Rozdíl ve fázi – daný posuvem atomu  $\Phi_j = 2\pi h x_j + 2\pi k y_j + 2\pi l z_j$

$$\Phi_j = 2\pi^*(h x_j + k y_j + l z_j)$$

# Strukturní faktor – skládání příspěvků ve vektorovém prostoru.



$$|F_{hkl}|^2 = \left( \sum_j f_j \cos \Phi_j \right)^2 + \left( \sum_j f_j \sin \Phi_j \right)^2$$

$j = 1 \dots N$  = Počet atomů v  
molekule

$hkl$  – indexy pozorované  
intenzity

$f_j$  – rozptylový faktor daného  
atomu

$$|F_{hkl}|^2 = \left[ \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[ \sum_j f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2$$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + i \sum_j f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

# Strukturní faktor – vyhasínání reflexí

Intenzita reflexí c v grupě  $P2_1$

Pozice atomů:  $x, y, z$     $-x, -y, z+0.5$

Reflexe: 0 0 1

$$F = i * (f * \cos(2\pi z) + f * \cos(2\pi z + 2\pi * 0.5))$$

$$+ (f * \sin(2\pi z) + f * \sin(2\pi z + 2\pi * 0.5)) = 0$$

$$\cos(x) = -\cos(x + \pi), \quad \sin(x) = -\sin(x + \pi)$$

Reflexe: 0 0 2

$$F = i * (f * \cos(2\pi 2z) + f * \cos(2\pi 2z + 2\pi * 2 * 0.5))$$

$$+ (f * \sin(2\pi 2z) + f * \sin(2\pi 2z + 2\pi * 2 * 0.5)) \neq 0$$

Šroubové osy, skluzné roviny, centrace  
A, B, C, F, I způsobují vyhasínání reflexí

No. 4

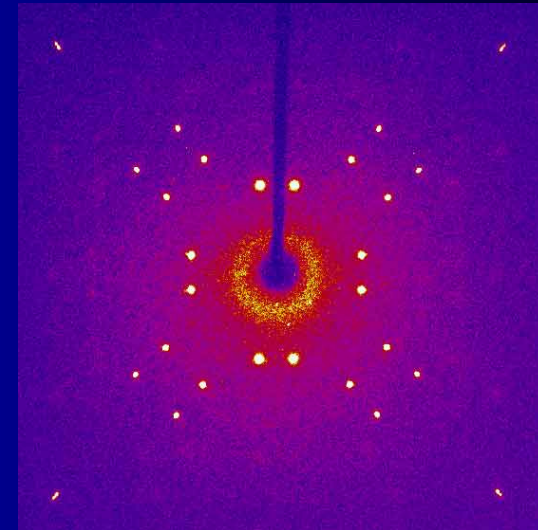
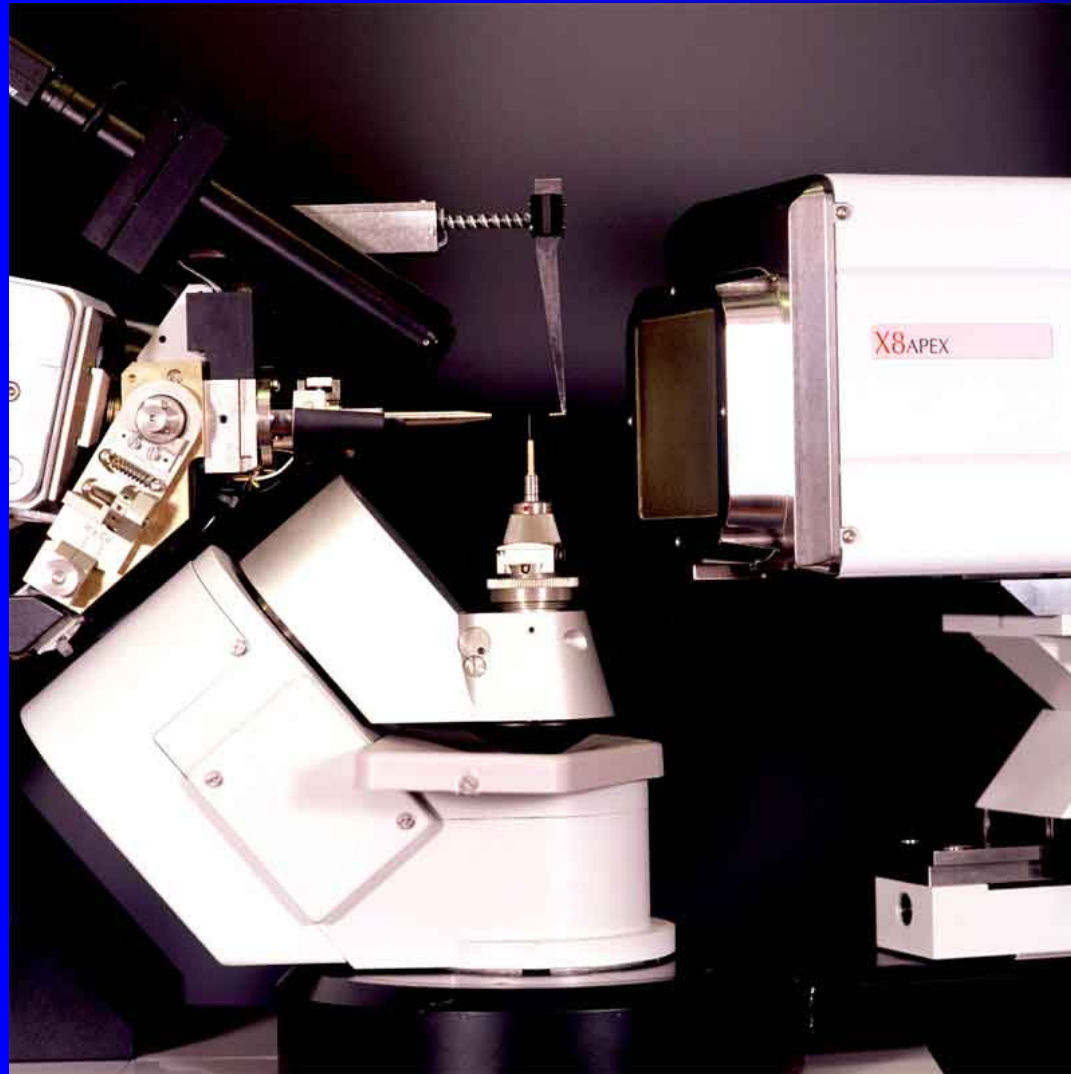
$P2_1$

Reflection conditions

General:

$$00l: l = 2n$$

# Difraktometr s plošným detektorem





# Ukázka programu diffractOgram

The screenshot displays the diffractOgram software interface. The main window is titled "DiffractOgram" and features a 3D visualization of a crystal lattice and its reciprocal lattice. The crystal lattice is shown as a grid of blue spheres, and the reciprocal lattice is shown as a grid of blue dots. A red sphere represents the Ewald sphere, and a yellow circle represents the Bragg circle. The reciprocal lattice is labeled "Reciprocal lattice points". The crystal lattice is labeled "Crystal lattice". The Ewald sphere is labeled "Ewald sphere". The Bragg circle is labeled "Bragg circle". The reciprocal lattice is labeled "Reciprocal lattice". The crystal lattice is labeled "Crystal lattice".

The interface includes a control panel at the bottom with the following sections:

- Unit cell:** a: 3.00 Å, b: 4.00 Å, c: 5.00 Å; alpha: 90°, beta: 90°, gamma: 90°.
- Reciprocal lattice:** a\*: 0.33 Å, b\*: 0.25 Å, c\*: 0.20 Å; alpha\*: 90°, beta\*: 90°, gamma\*: 90°.
- Lattice:** h max: 3, k max: 3, l max: 3. Buttons: More, Less.
- Parameters:** Omega: 42°, Chi: 0°, Phi: 0°, Lambda: 0.60 Å, Precession: 0°. Button: Reset angles. u v w: 0 1 0.
- Animation:** Omega, Chi, Phi; Sequential, Debye-Scherrer; 0° - 360°, Speed; Lambda, Laue; Precession, Angle: 0°, Mask.
- Screen:** Size: 10 x 10 cm, Distance: 4 cm, Flat (selected), Cylindric; Persistent (checked); Clear, Help.

# Řešení struktury – výchozí informace

- Mřížkové parametry
- Intenzity reflexí:  $h, k, l$   $I$   $\sigma I$
- Chemické složení krystalu
- Teorii o tom co má vyjít (např. na základě údajů z NMR)

H	K	L	I	I (esd)
1	-7	-34	1240.65	307.939
0	-9	-25	1088.15	654.618
2	-9	-28	4552.70	534.311
1	-9	-28	644.065	629.196
2	-10	-18	2461.18	914.822
-1	-8	-25	3498.65	801.093

# Řešení struktury – stanovení prostorové grupy

- Mřížkové parametry
- Vyhasínání
- Statistiky normalizovaných intenzit
- Počet vzorcových jednotek na buňku  
 $Z = (\rho * V) / (M_r * U_a)$ ,  $U_a = 1.66034 * 10^{-27} \text{kg}$
- Chiralita látky
- Obvyklé prostorové grupy:  $P1$ ,  $P-1$ ,  $P2_1$ ,  $P2_1/c$ ,  $P2_12_12_1$ ,  $Pnma$

# Fázový problém

Ze znalosti strukturního faktoru je možné přímo  
Vypočítat elektronovou hustotu a pozice atomů.

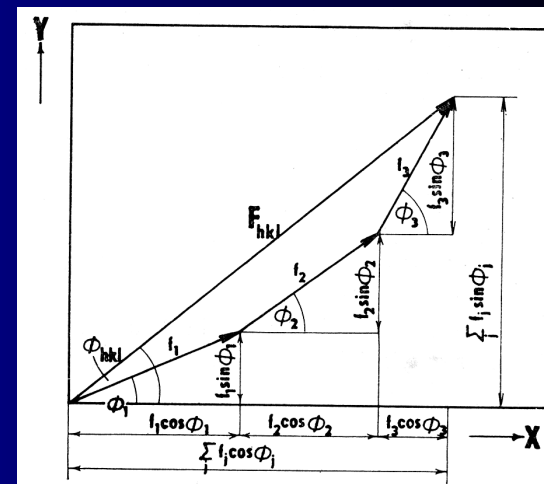
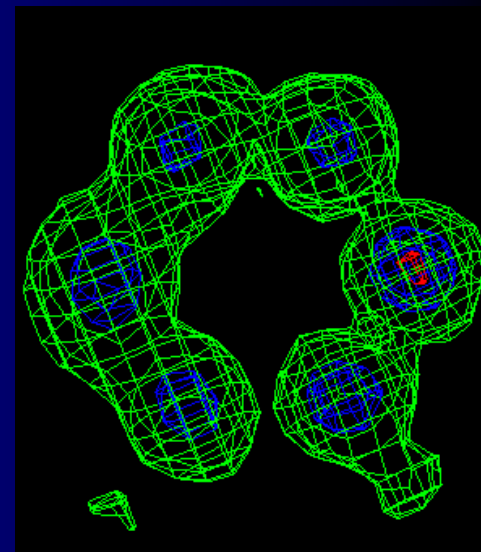
$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F_{hkl} \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)]$$

Jenže strukturní faktor je komplexní číslo  
popisující odraženou vlnu. Jsme schopni  
měřit jen její intenzitu. Fáze je experimentálně  
neměřitelná.

$$F_{hkl} = A + iB$$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + i \sum_j f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

$$|F_{hkl}|^2 = \left[ \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[ \sum_j f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2$$



# Přístup k řešení fázového problému

Pokud známe nějaký výchozí model struktury, můžeme si strukturní faktory vypočítat včetně fáze:

$$F_{hkl} = A + iB$$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + i \sum_j f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

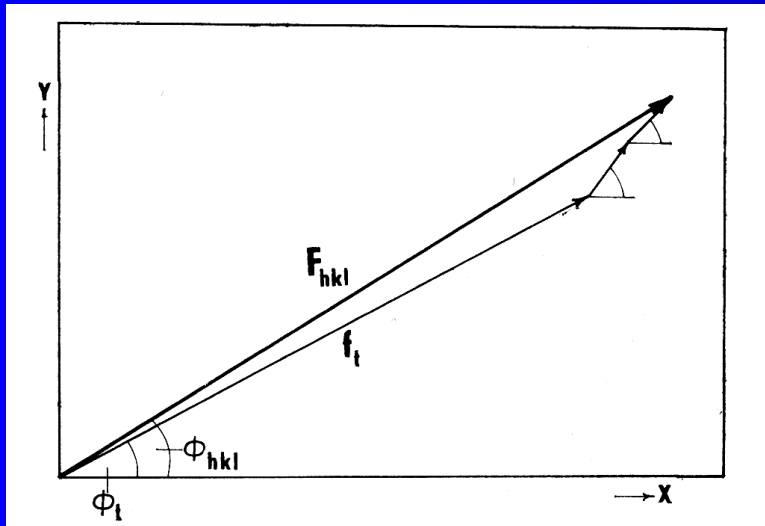
Výpočet můžeme upravit tak, aby intenzita strukturních faktorů odpovídala naměřeným hodnotám. Ze získaných strukturních faktorů pak můžeme získat lepší mapu elektronové hustoty než z modelu.

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F_{hkl} \exp [-2\pi i(hx + ky + lz)]$$

Z vylepšené elektronové hustoty můžeme získat lepší model, a proces opakovat.

**Jak ale získat výchozí model ?**

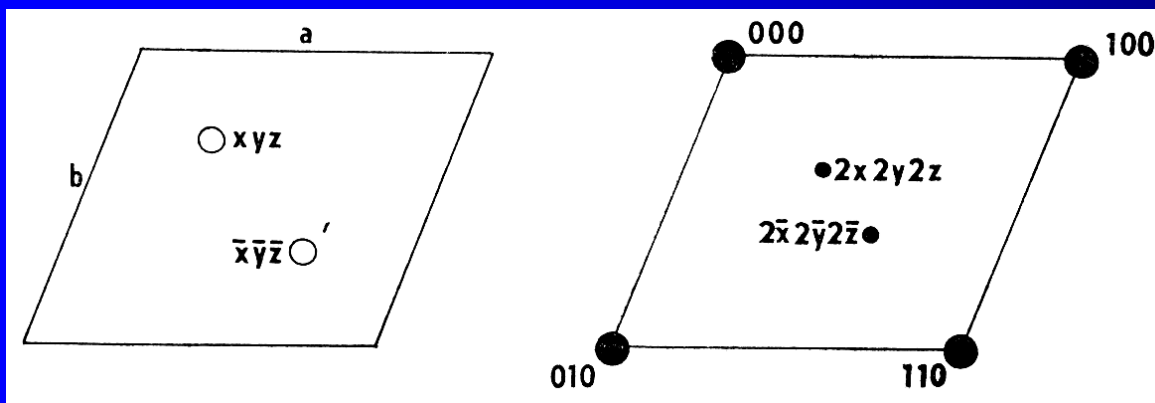
# Metoda těžkého atomu



Výsledná fáze je určena převážně příspěvkem od těžkého atomu. Když získáme pozici těžkého atomu máme dobrý startovací model.

Software: SHELXS, DIRDIF

$$P(U, V, W) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F_{hkl}|^2 \exp [-2\pi i(hU + kV + lW)]$$



Pattersonova funkce sice nevyžaduje znalost fází, ale poskytuje jen hustotu vektorů vzdáleností

# Metoda hledání pozice známého fragmentu

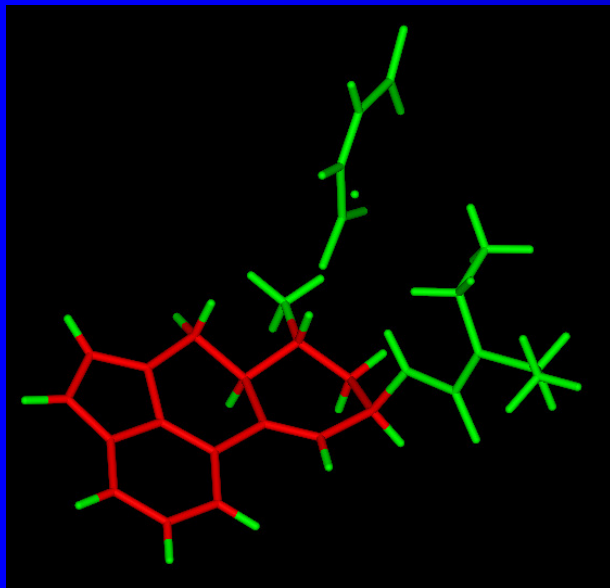
Princip:

10 atomů =  $10 \times 3 = 30$  x, y, z parametrů

Prohledávání s krokem 0.1 =  $10^{30}$  výpočtů

10 atomů v rigidním fragmentu = 6 x, y, z,  $\phi$ ,  $\chi$ ,  $\psi$  parametrů

Prohledávání s krokem 0.1 =  $10^6$  výpočtů



Často stačí aby pouze malá část molekuly (30%) byla rigidní. Při řešení je třeba vynechat flexibilní části.

# Metoda hledání pozice známého fragmentu

Postup:

- vygeneruje se fragment o známé struktuře ( z CSD databáze, přes QM výpočty, přes molekulárně mechanické výpočty)
- mění se parametry  $x, y, z, \phi, \chi, \psi$  a sleduje shoda s práškovým záznamem
- mění se flexibilní parametry fragmentu (torzní úhly)
- Jako kritérium správnosti řešení se používají R faktory

Software: DIRDIF, FOX (prášky i monokrystaly)



# Přímé (statistické) metody

Vlastnosti elektronové hustoty:

- nikdy není záporná
- je lokalizovaná v bodech/koulích

Je možné odvodit statistické zákony chování znaménka strukturních faktorů

Sayreho vzorec – u silných reflexí se dá odhadnout znaménko fáze strukturního faktoru:

$$s(F_{h'k'l'}) \approx s(F_{hkl}) s(F_{h'-h,k'-k,l'-l})$$

# Přímé (statistické) metody

Postup:

- náhodně se zvolí fáze vybraných reflexí
- odvodí se fáze dalších reflexí
- vybere se nejlepší řešení na základě statistických faktorů

Software: SHLEXS , SIR92

# Metoda “Charge flipping”

Předpoklad:

- pokud bude náboj všude kladný, máme správné řešení
- výsledku dosáhneme hrubým násilím (výpočetním výkonem)

Výhody:

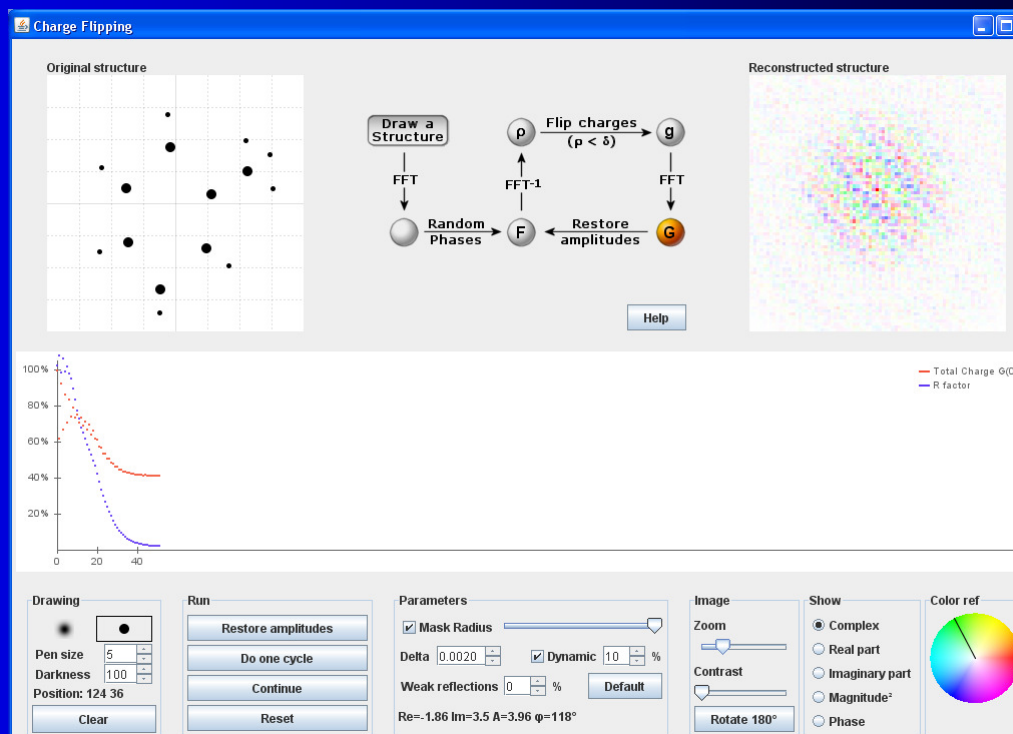
- nemusíme znát prostorovou grupu
- nemusíme znát chemické složení
- postup funguje i pro modulované struktury

# Metoda “Charge flipping”

Postup:

- fáze přiřadíme náhodně
- spočítáme elektronovou hustou
- tam kde vyjde záporná převrátíme její znaménko
- z výsledku spočítáme nové fáze
- fáze přiřadíme naměřeným intenzitám a postup opakujeme

Software:  
SuperFlip,  
CRYSTALS



# Upřesnění struktury

$$|F_c| = |F_c(p_1 \dots p_n)|$$

Vypočítaný strukturní faktor závisí na parametrech modelu.

Snahou je minimalizovat rozdíl čtverců naměřených a vypočtených strukturních faktorů.

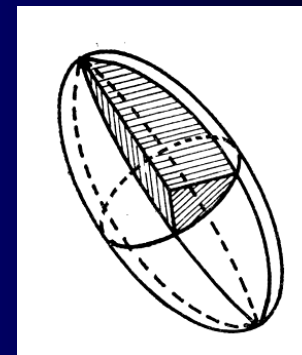
$$\sum_{hkl} w_{hkl} [|F_o| - |F_c(p_1 \dots p_n)|]^2 = \min$$

Výpočet se provádí numericky převodem rovnic na lineární systém pomocí rozvoje do Taylorovy řady.

$$\sum_{hkl} 2w_{hkl} \left[ |F_o| - |F_c(p_1^0 \dots p_n^0)| - \frac{\partial |F_c|}{\partial p_1} \Delta p_1 - \dots - \frac{\partial |F_c|}{\partial p_n} \Delta p_n \right] \frac{\partial |F_c|}{\partial p_j} = 0$$

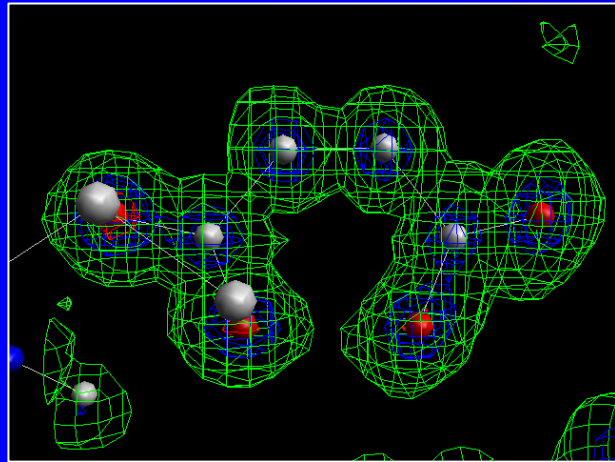
# Upřesňované parametry

- Škálový faktor
- Pozice atomů
- Teplotní kmity atomů (izotropní , anizotropní)
- Okupační faktory atomů
- Enantiomerní faktor



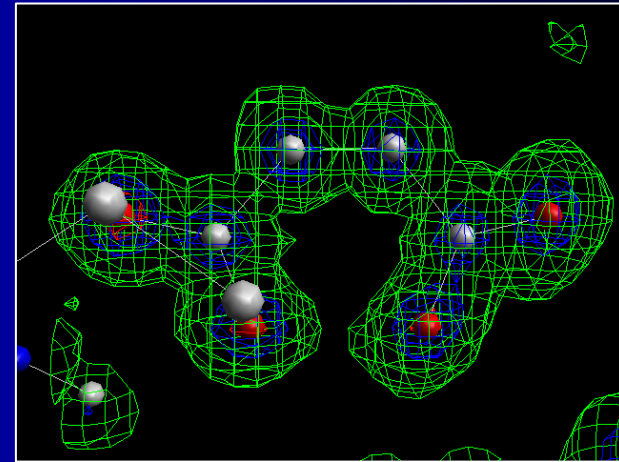
# Princip diferenční Fourierovy mapy

$$\Delta\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l (F_o - F_c) \exp [-2\pi i(hx + ky + lz)]$$



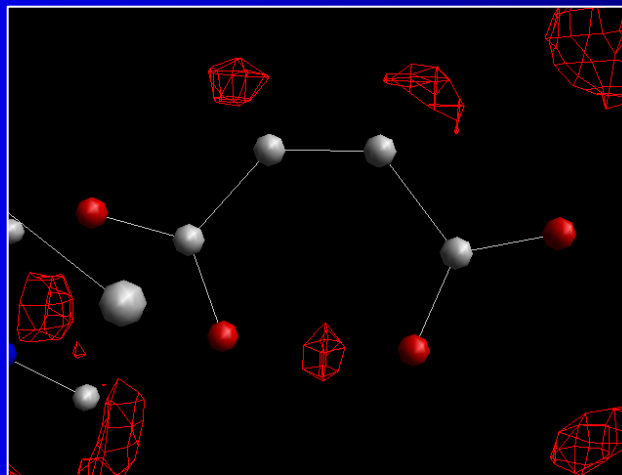
F<sub>o</sub>

−



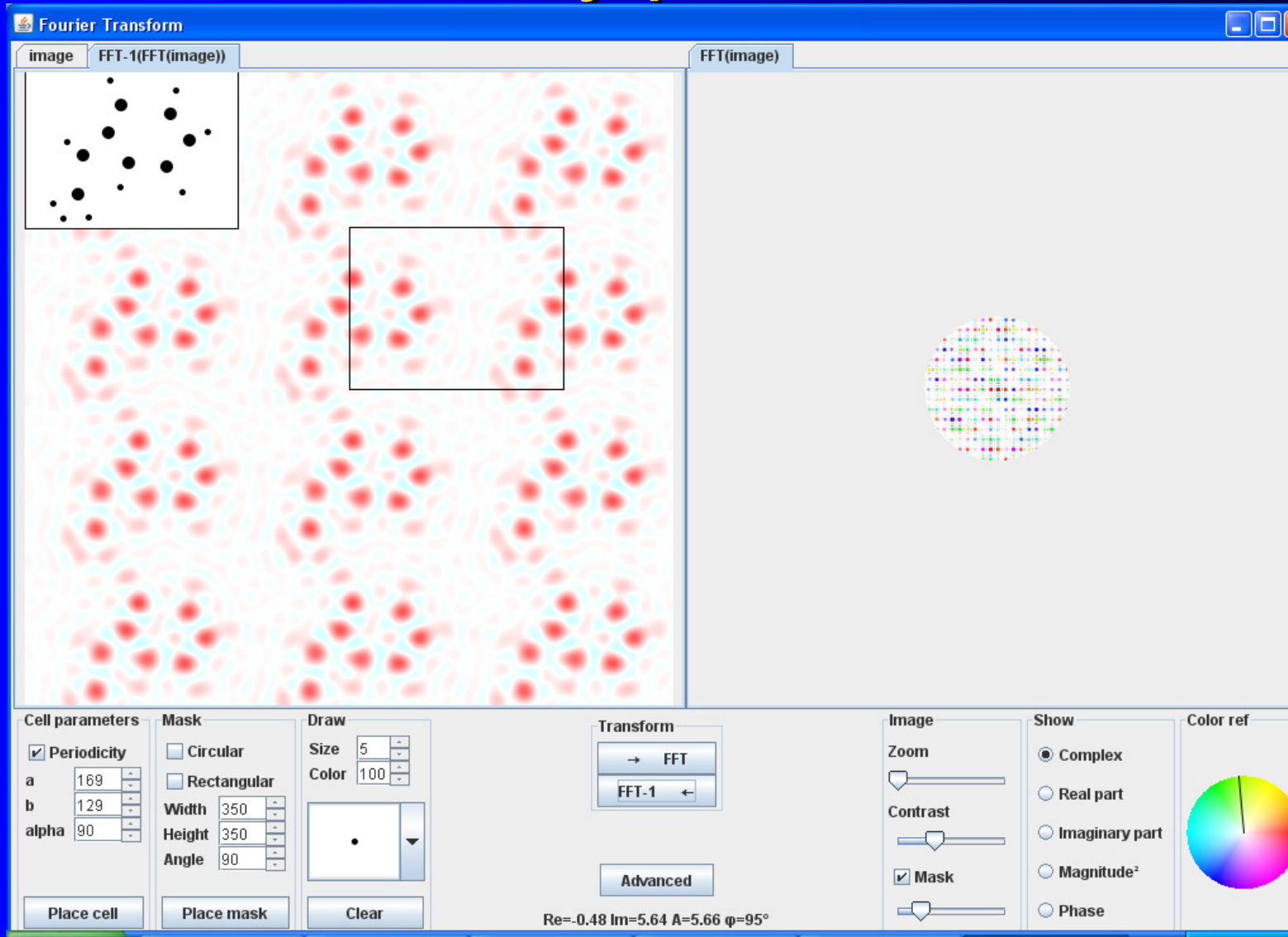
F<sub>c</sub>

=



F<sub>o</sub>-F<sub>c</sub>

# Limity Fourierovy transformace omezený počet reflexí





# Kriteria kvality upřesnění struktury

- R a Rw faktory
- Zbytková elektronová hustota
- Chyby (e.s.d.) pozic a vzdáleností
- Celková smysluplnost výsledku

$$R = \frac{\sum_{hkl} \left| |F_o| - |F_c| \right|}{\sum_{hkl} |F_o|}$$

$$wR = \sqrt{\left( \frac{\sum_{hkl} w_{hkl} (|F_o| - |F_c|)^2}{\sum_{hkl} w_{hkl} |F_o|^2} \right)}$$

# Informace získané upřesněním

- Chemické složení
- Solvatace
- Systém vodíkových a dalších vazeb v krystalu
- Kompletní informace o geometrii molekuly –  
délky vazeb, vazebných úhlů, torzních úhlů
- Absolutní konfigurace (chiralita)
- Elektronové hustoty

# Přehled programů pro řešení a upřesňování struktury

Účel programu	Názvy programů
Řešení struktury	Sir92, SHLEXS, DIRDIF, FOX, SuperFlip
Upřesňování struktury	CRYSTALS, SHELX
Vyhodnocování výsledků	Platon, Mercury, DSViewer, Ortep

# Praktická ukázka postupu při řešení struktury v systému CRYSTALS

The screenshot displays the CRYSTALS software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a complex organic molecule. The interface includes a menu bar (File, X-ray Data, Solve, Structure, Fourier, Refinement, Analyse, Results, Graphics, Appearance, Tools, Help) and a toolbar with various icons. A text area on the left provides version information (Version 12.20 for i386 under Win 32, 10 Mar, 2004) and help links. Below the text area is a refinement status table.

Version 12.20 for i386 under Win 32 10 Mar, 2004  
Copyright Chemical Crystallography Laboratory, Oxford

For help getting started with CRYSTALS see the primer.  
click here: ["crystdir:manual/primer-1.html"](#)  
or here: <http://www.xtl.ox.ac.uk/primer-1.html>  
Additional help may be available in the list of FAQs:  
["crystdir:manual/faq-1.html"](#)  
or here: <http://www.xtl.ox.ac.uk/faq-1.html>

Problems using or installing crystals? Click to email either:  
<mailto:richard.cooper@chem.ox.ac.uk> <mailto:david.watkin@chem.ox.ac.uk>  
and quickly explain the problem. Feedback helps us to improve  
software and maintain the FAQ list.  
Report bugs by clicking here: <http://www.xtl.ox.ac.uk/bug.html>

Refinement	Cell/Sym	Weights	Constrain	Restrain	File
Results of last cycle:					
R	12.86010	Parameters	882.		
Rw	16.34085	Reflections	10365.		
Goof	0.886	max shift	9.6486		
Refining against	F	Sigma cutoff	3.00		

Id	Ty...	Serial	x	y	z	o...	Type	L
25	N	81	0.799	0.357	-0.332	1	Aniso	0
26	N	102	0.953	0.255	0.237	1	Aniso	0
27	N	103	0.896	0.245	0.297	1	Aniso	0
28	N	112	0.812	0.272	0.152	1	Aniso	0

O(4)

# diffractOgram - prášek

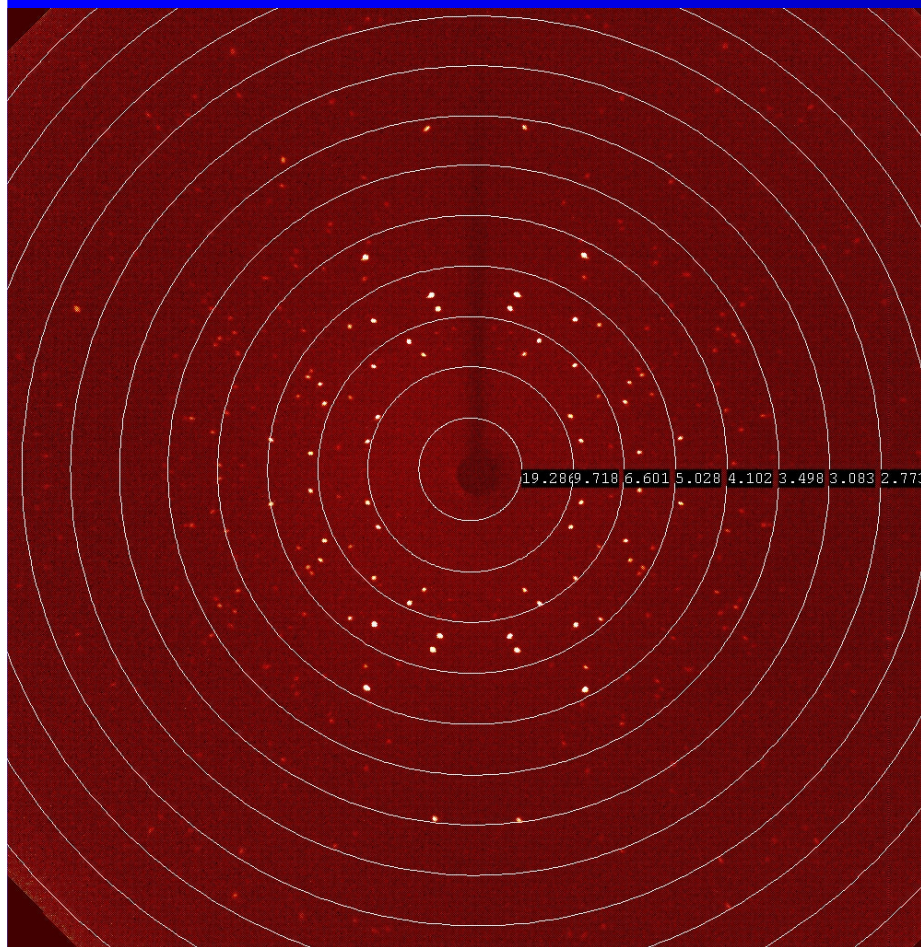
DiffractOgram

The software interface displays a 3D diagram of a crystal (left) and its reciprocal lattice (middle), with a diffraction pattern (right). The 3D diagram shows a crystal with a reciprocal lattice of blue points. A red circle represents the Ewald sphere, and a yellow circle represents the Debye-Scherrer circle. A pink arrow indicates the incident beam direction. The diffraction pattern is a 2D plot of black dots on a white background, showing a central spot and surrounding rings. The control panel at the bottom contains the following sections:

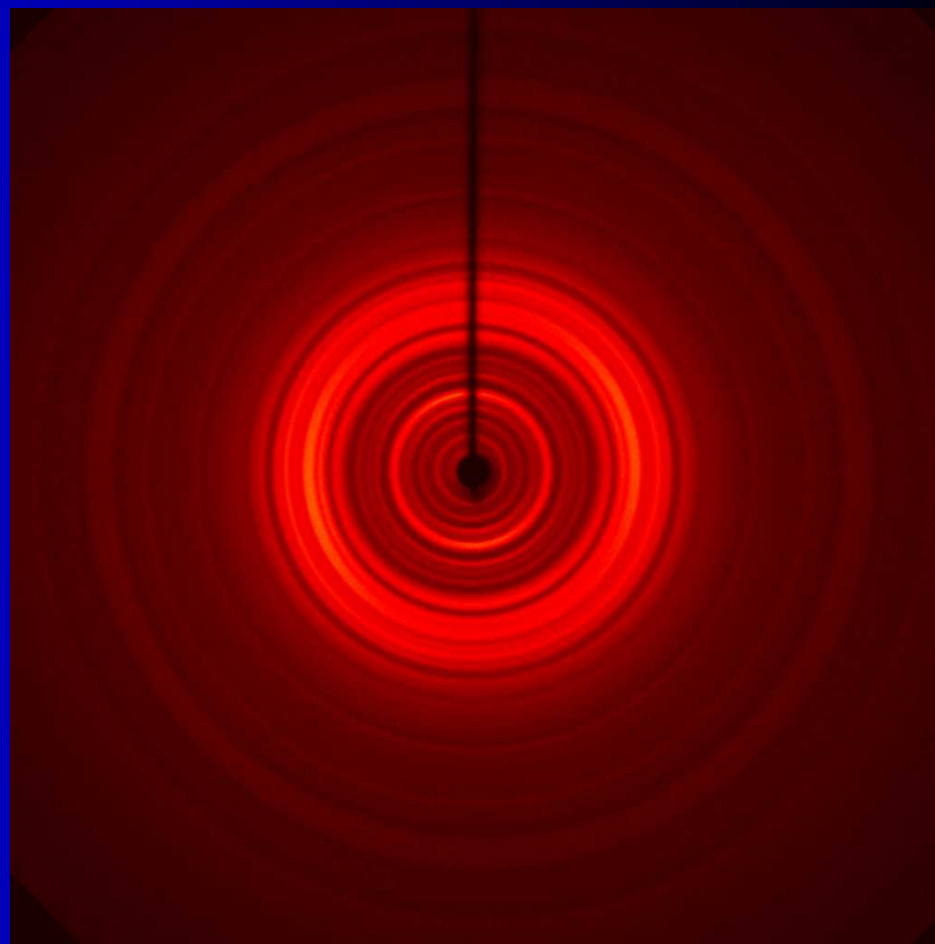
- Unit cell:** a 3.00 Å, b 4.00 Å, c 5.00 Å, alpha 90°, beta 90°, gamma 90°.
- Reciprocal lattice:** a\* 0.33 Å, b\* 0.25 Å, c\* 0.20 Å, alpha\* 90°, beta\* 90°, gamma\* 90°.
- Lattice:** h max 3, k max 3, l max 3. Buttons: More, Less.
- Parameters:** Omega 77°, Chi 52°, Phi -109°, Lambda 0.72 Å, Precession 0°. Buttons: Reset angles, u v w 0 1 0.
- Animation:** Omega, Chi, Phi. Sequential, Debye-Scherrer. 0° - 360°, Speed. Lambda, Laue. Precession, Angle 0°, Mask.
- Screen:** Size 10 x 10 cm, Distance 4 cm. Flat, Cylindric.  Persistent. Buttons: Clear, Help.



# Monokrystal vs prášek

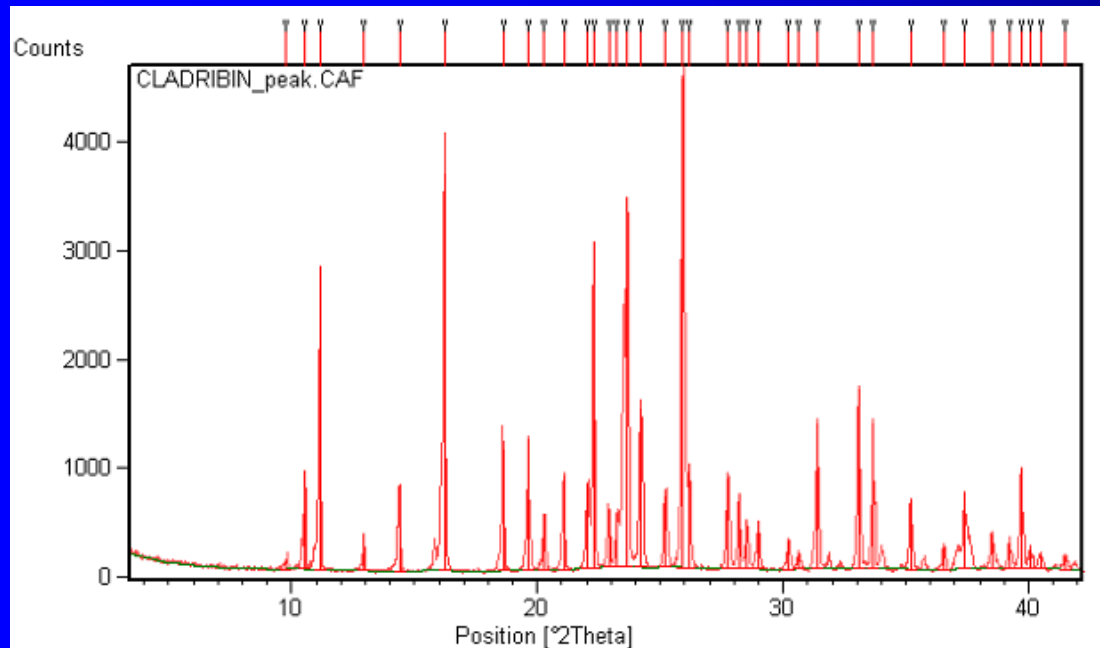


kvalitní monokrystal

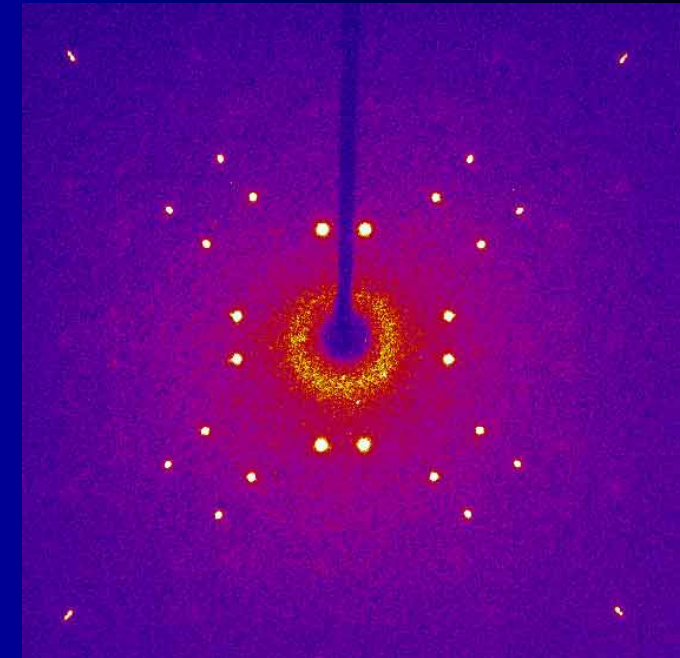


práškový vzorek

# Vstup pro vyhodnocení prášek- monokrystal

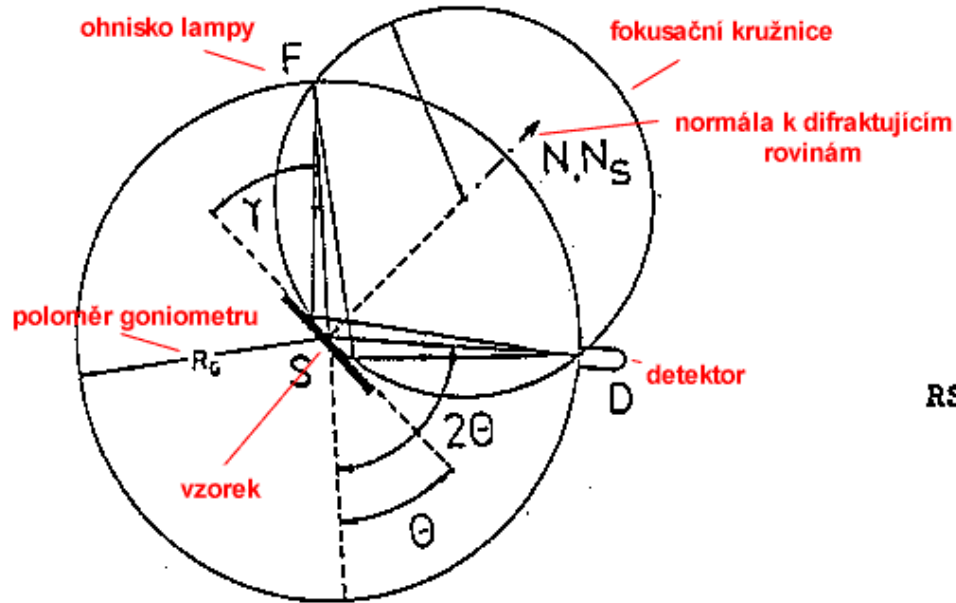


Práškový záznam – překryv reflexí,  
pouze jeden poziční parametr reflexe

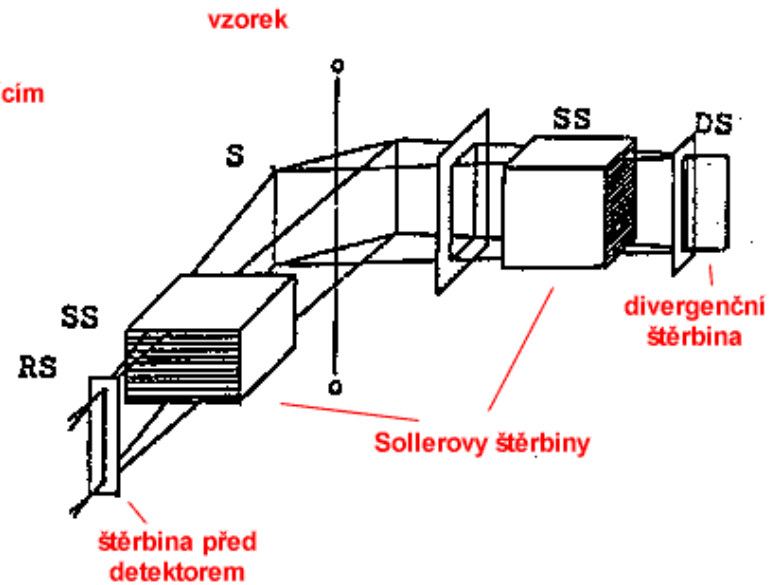


Monokrystal – plná  
informace o pozici a  
intenzitě každé reflexe

# Standardní diffraktometr pro rutinní analýzu



Schema Braggovy-Brentanovy geometrie



Systém štěrbin v BB geometrii



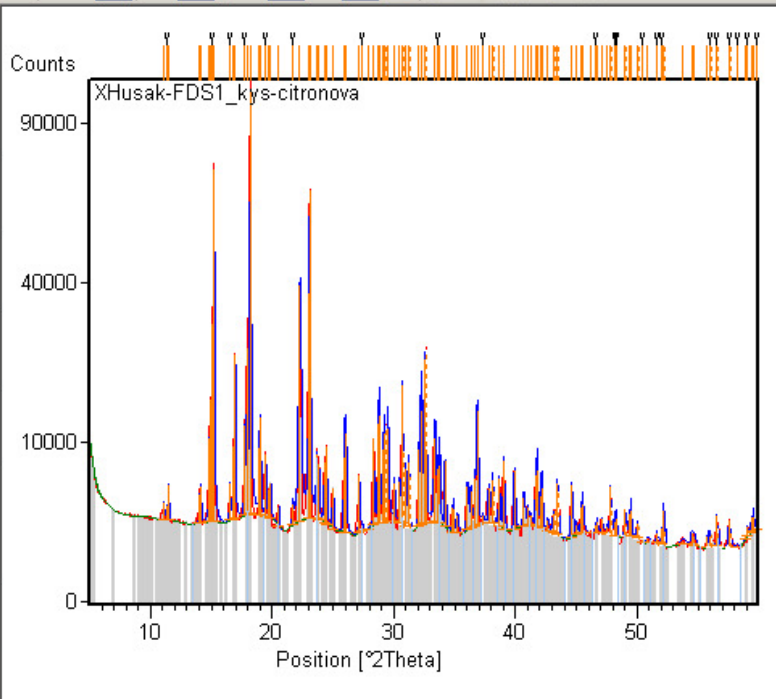
# Identifikace fáze

X'Pert HighScore Plus - [XHusak-FDS1\_kys-citronova]

File Edit View Treatment Reference Patterns Analysis Reports Tools Customize Window Help

Pos. [°2Th.]: d-spacing [Å]: Counts:

Semi-automatic Mode 0 Parameter(s) varied 0 Constraint(s)



Additional Graphics

Selected Pattern: Calcium Aluminum Oxide Sulfate 00-016-0335

Residue + Peak List

Accepted Patterns

No.	Visible	Ref. Code	Compound Name	Chemical Formula	Score	Scale	Semi...
1	<input checked="" type="checkbox"/>	00-015-0985	Citric acid hy...	C6 H8 O7 · H2 O	55	0.707	96
2	<input checked="" type="checkbox"/>	01-087-0803	Ruthenium P...	Ru (P O3)3	38	0.306	4
3	<input checked="" type="checkbox"/>	01-078-2162	Barium Bismu...	Ba Bi2 O2 I2	31	0.099	-

Candidates:

No.	Ref. Code	S.	Compound Name	Chemical Fo...	Sca...	Displa...	ML	NML	TL
1	00-016-0335	29	Calcium Alumin...	Ca4 Al6 O12...	0.052	0.000	23	8	3
2	00-033-0256	29	Yeelimite, syn	Ca4 Al6 O12...	0.052	0.000	23	8	3
3	00-051-0162	28	Calcium Alumin...	Ca4 ( AlO.9...	0.059	0.000	27	14	3
4	00-025-0798	27	Sodium Calcium...	Na6 Ca2 Al2...	0.043	0.000	14	8	1
5	01-077-1819	27	Lead Chlorate ...	Pb ( Cl O3 )2...	0.091	0.000	54	19	7
6	00-050-0605	26	Lithium Cerium ...	C4 Ce Li O8 ...	0.242	0.000	120	29	15
7	00-031-1249	26	Silver Strontium ...	Ag2 Sr Si2	0.069	0.000	14	5	1
8	00-038-1759	26	Pyridinium dichr...	C10 H12 Cr...	0.007	0.000	12	5	1
9	00-020-1635	25	Dimethyl maloni...	C5 H8 O4	0.083	0.000	39	13	4
10	00-043-0275	24	Ammonium Hydr...	N H4 H C P...	0.010	0.000	16	5	1
11	01-085-2210	24	Calcium Alumin...	Ca4 ( Al6 O1...	0.055	0.000	73	23	9
12	00-043-0633	23	Pabstite, syn	Ba Sn Si3 O9	0.042	0.000	19	6	2
13	00-021-1206	23	Tellurium Oxide ...	( Te O3 ) H2...	0.015	0.000	17	1	2
14	01-082-1844	21	Sinhalite	( Mg0.91 Fe...	0.027	0.000	28	7	3

Default IdeAll IdeCom IdeMin MinorMinerals PrintIdeAll Structures

Start ESRF\_2004 Farmacie... Eudora - [...] X'Pert Hi... 13:39 PM

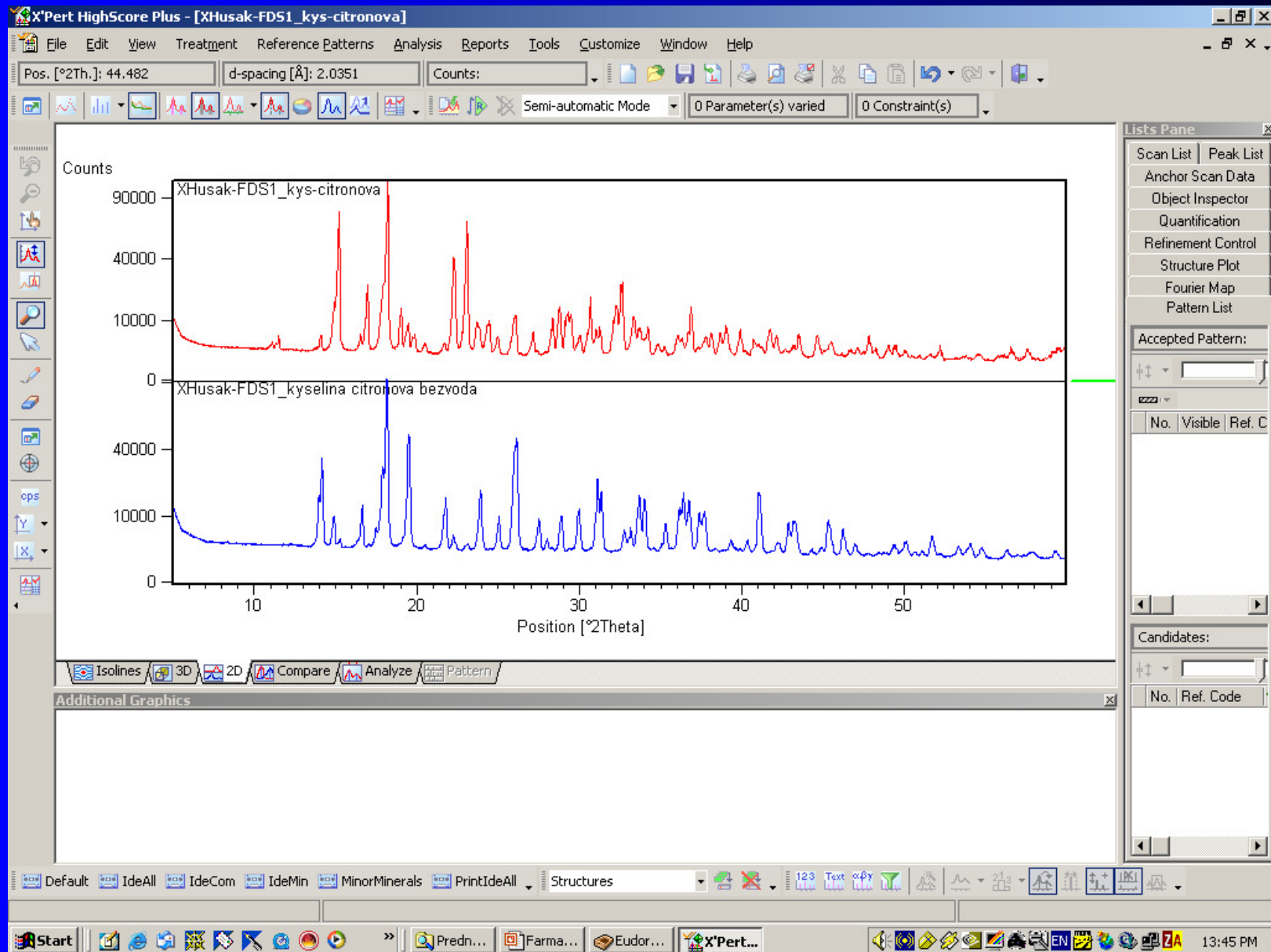
# PDF – karta

33-1161



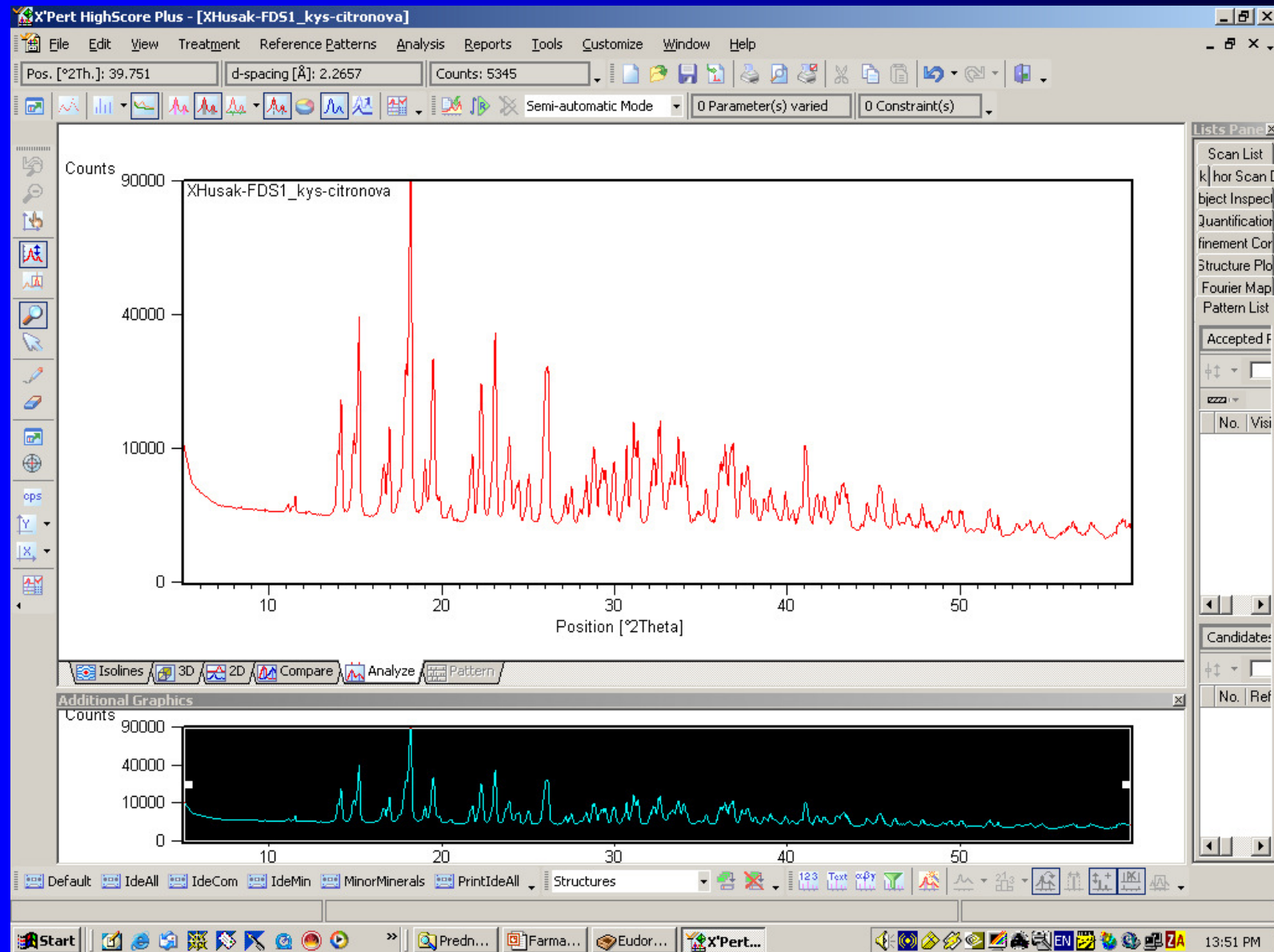
SiO <sub>2</sub>	d Å	Int	hkl	d Å	Int	hkl
Silicon Oxide	4.257	22	100	1.1532	1	311
Quartz, low, syn	3.342	100	101	1.1405	<1	204
	2.457	8	110	1.1143	<1	303
	2.282	8	102	1.0813	2	312
	2.237	4	111	1.0635	<1	400
<b>Rad.</b> CuKα <sub>1</sub> λ 1.540598 <b>Filter</b> Mono. <b>d-sp</b> Diff.	2.127	6	200	1.0476	1	105
<b>Cut off</b> <b>Int.</b> Diffractometer <b>I/I<sub>cor.</sub></b> 3.6	1.9792	4	201	1.0438	<1	401
<b>Ref.</b> Nat. Bur. Stand. (U.S.) Monogr. 25, (1981)	1.8179	14	112	1.0347	<1	214
<b>Sys.</b> Hexagonal <b>S.G.</b> P3 <sub>1</sub> 21 (152)	1.8021	<1	003	1.0150	1	223
<b>a</b> 4.9133(2) <b>b</b> <b>c</b> 5.4053(4) <b>A</b> <b>C</b> 1.1001	1.6719	4	202	0.9898	1	402
<b>α</b> <b>β</b> <b>γ</b> <b>Z</b> 3 <b>mp</b>	1.6591	2	103	0.9873	1	313
<b>Ref.</b> Ibid.	1.6082	<1	210	0.9783	<1	304
<b>D<sub>x</sub></b> 2.65 <b>D<sub>m</sub></b> 2.66 <b>SS/FOM</b> F <sub>30</sub> = 76.6(.0126,31)	1.5418	9	211	0.9762	1	320
<b>εα</b> <b>nωβ</b> 1.544 <b>εγ</b> 1.553 <b>Sign</b> + 2V	1.4536	1	113	0.9636	<1	205
<b>Ref.</b> Swanson, Fuyat, Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, 3 24 (1954)	1.4189	<1	300			
<b>Color</b> Colorless	1.3820	6	212			
Pattern at 25 C. Sample from the Glass Section at the National Bureau of Standards; ground single crystals of optical quality. Quartz group. Silicon used as internal standard. PSC: hP9. To replace 5-490. Plus 6 reflections to 0.9089.	1.3752	7	203			
	1.3718	8	301			
	1.2880	2	104			
	1.2558	2	302			
	1.2285	1	220			
	1.1999	2	213			
	1.1978	1	221			
	1.1843	3	114			
	1.1804	3	310			

# Kvantitativní fázová analýza





# Kvantitativní fázová analýza



# PDF – kvantitativní analýza

$$I_{1\max} / I_{\text{cor}} = k_1 \quad I_{2\max} / I_{\text{cor}} = k_2$$

$$I_{\text{smes}} = I_{1\max} * x_1$$

$$x_1 = (I_1/k_1) / (I_1/k_1 + I_2/k_2 + \dots + I_n/k_n)$$

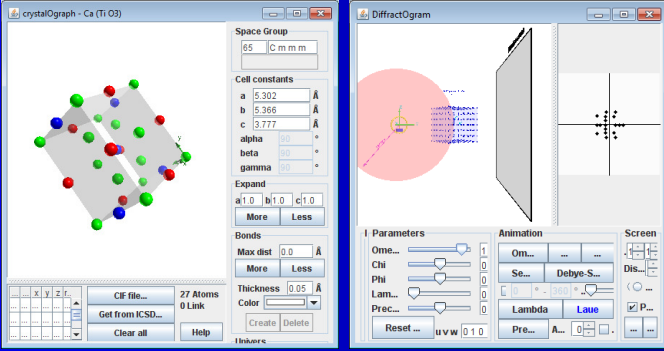
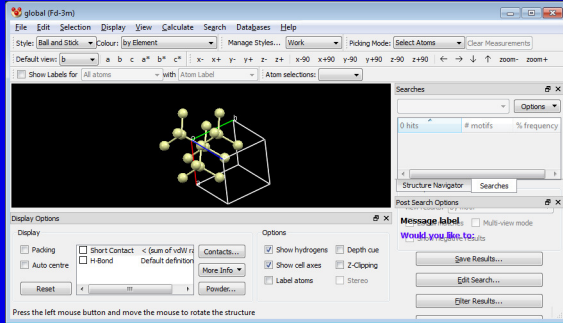
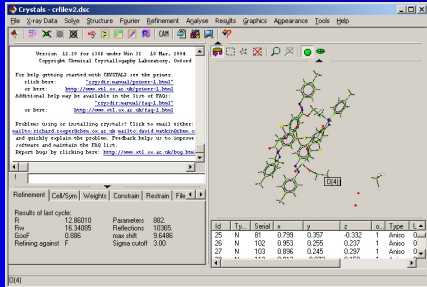
Příklad:

$$\text{Mn}_3\text{O}_4 \quad I_{211} = 100$$

$$\beta \text{MnO}_2 \quad I_{110} = 100$$

$$x \text{Mn}_3\text{O}_4 = (100/1.5) / (100/1.5 + 100/2.7) = 0.643$$

# Free software použitý v přednáškách

Název softwaru	Screenshot	WWW link pro download
<p>e-Crystallography course (Escher, diffractOgram, crystalOgraph, Charge flipping)</p>		<p><a href="http://escher.epfl.ch/eCrystallography/">http://escher.epfl.ch/eCrystallography/</a></p>
<p>CSD Mercury</p>		<p><a href="http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/">http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/</a></p>
<p>CRYSTALS</p>		<p><a href="http://www.xtl.ox.ac.uk/crystals.1.html">http://www.xtl.ox.ac.uk/crystals.1.html</a></p>