

Παράδειγμα για εξοικείωση με το πρόγραμμα Mercury
<https://www.ccdc.cam.ac.uk/support-and-resources/downloads/>

1. Από Menu, Databases → Open the Teaching Subset →
→ Περιοχή Structure Navigator (δεξιά) → YILLAG

ή άνοιξε το file YILLAG.cif από το test_case folder

2. Display options (Options) → More Info → Structure Information
Γαλακτικό οξύ (Lactic acid) CH₃CH(OH)COOH

3. α) Περιοχή: Display options (Options) → Show hydrogens
β) Περιοχή: Display options (Options) → Show cell axes
γ) Περιοχή: Display options (Display) → Packing

δ) Γραμμή: Alignment and Orientation Operations "a b c a* b* c* ..."
View along: a axis, b axis, ...

ε) Περιοχή: Display options (Display) → Reset

4. Toolbars κάτω από το Menu

- a) Style

- β) Colour

- γ) Manage Styles

- δ) Picking Mode

d [C1-C2] =

d [C2-O3] =

d [C1-O2] =

Angle [] =

Angle [] =

Angle [] =

Torsion Angle [O1 C1 C2 C3] =

Torsion Angle [] =

5. Contacts

- α) Περιοχή: Display options (Display) → H-Bond
(Στην toolbar: Picking Mode έγινε Expand Contacts)
Γαλάζιες διακεκομμένες = expanded
Κόκκινες διακεκομμένες = not-expanded
Περιοχή: Display options (Display) → Reset

β) Περιοχή: Display options (Display) → Short Contact
Define short contacts
Contacts... button
Right click on short contacts
(Menu) Calculate → Contacts

6. (Menu) Calculate

α) Calculate → Centroids

(πρώτα, στην toolbar: Picking Mode βάλτε Select Atoms)

Σχεδιάστε το centroid των ατόμων C1 C2 O1 O2 O3

β) Calculate → planes

(αφού πρώτα στην περιοχή Options επιλέξεις το Show cell axes, δοκίμασε τα hkl (1 0 0) (0 1 0) (1 1 1).

Βρες τη γωνία μεταξύ (1 0 0) και (0 1 0)

Βρες τη γωνία μεταξύ (1 0 0) και (1 1 1)

Βρες την απόσταση του centroid C1 C2 O1 O2 και plane (1 0 0)

7. (Menu) Display → Show/Hide → Centroids... Planes...

πρώτα, στην toolbar: Picking Mode βάλτε Select Atoms

Σχεδίασε το mean plane που ορίζεται από τα άτομα: C1 C2 O1 O2 O3

Βρες τη γωνία μεταξύ (1 0 0) και mean plane [C1 C2 O1 O2 O3]