

## Utilizzo di banche dati

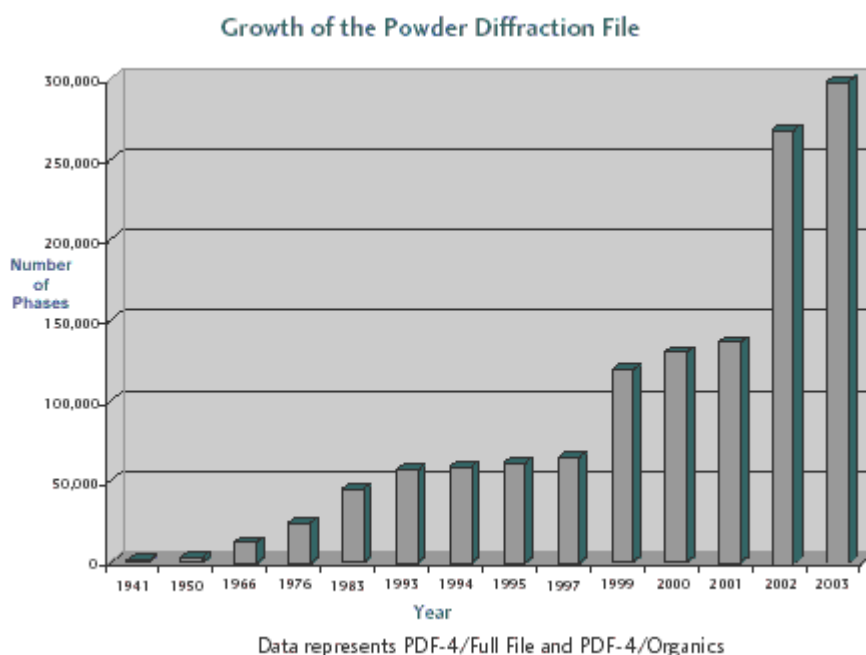
- **PDF:** archivio attualmente elettronico che supporta l'analisi di dati da diffrazione da polveri e consente l'analisi qualitativa delle fasi. <http://www.icdd.com>
- **ICSD:** archivio elettronico delle strutture inorganiche; contiene informazioni raccolte in esperimenti a polveri o cristallo singolo di materiali inorganici (sono esclusi metalli e leghe).  
<http://www.fiz-informationsdienste.de/en/DC/icsd/produkte.html>
- **CSDS:** archivio elettronico dei composti molecolari (organici o metallorganici). Prevalentemente, i dati provengono da esperimenti su cristallo singolo  
<http://www.ccdc.cam.ac.uk/prods/csd/csd.html>
- **PDB:** archivio elettronico delle strutture di proteine.  
<http://rcsb.org/pdb/holdings.html>
- **NIST - Crystal Data Pauling File:** simile a **ICSD**.  
<http://nist.gov/srd/nist3.htm>
- **CRYSTMET:** archivio elettronico per metalli, leghe ed intermetallici (estensione del Pearson's handbook).  
<http://www.tothcanada.com/crystmet.htm>
- **IZA:** database di zeoliti con disegni, dati cristallografici e spettri simulati.  
<http://www.iza-structure.org/databases>
- **Mineralogy Database:** descrizione delle specie minerali, struttura e proprietà  
<http://webmineral.com> o <http://www.minerant.be>

## Powder Diffraction File (PDF)

Il PDF è stato introdotto nel 1941 dall'*International Centre for Diffraction Data* (ICDD, ([www.icdd.com](http://www.icdd.com))).

Originariamente è nato in forma esclusivamente cartacea distribuita con cadenza annuale.

Oggi il PDF esiste in formato elettronico consultabile con opportuni programmi di ricerca e contiene quasi 300.000 fasi (2003).



E' suddiviso in vari settori: materiali organici, minerali, metalli e leghe, materiali inorganici.

Contenuto 'tradizionale' (fino al 2001): circa 40.000 fasi cristalline, senza coordinate cristallografiche. "FILE PDF2".

Contenuto attuale (dopo gli accordi con ICSD, NIST e CSD): circa 300.000 fasi cristalline, senza coordinate cristallografiche): "PDF4"

Diffusione:

Industrie e Ricerca Applicata:	Alta
Università (Mineralogia)	Alta
Università (Chimica)	Bassa

**Costo:** Licenza Base ca. 10.000 Euro (enti non-profit); si possono ordinare subsets ed aggiornamenti annuali a prezzi inferiori).

## Composizione dell'archivio PDF

Le fasi presenti nel PDF sono suddivise secondo il tipo di materiale.

*(ad esempio per l'edizione 1996)*

cementi (315)

fasi comuni, sali ecc. (3200)

materiali corrosivi (14164)

materiali esplosivi (158)

materiali di interesse forense (3012)

metalli e leghe (12150)

minerali (4278)

farmaci (122)

pigmenti e coloranti (196)

polimeri (319)

superconduttori (265)

zeoliti (787)

---

## Contenuto di ogni scheda dell PDF

numero di introduzione

formula chimica

formula di struttura

informazioni sull'esperimento effettuato

- radiazione
- lunghezza d'onda
- metodi di misura

informazioni chimico-fisiche e cristallografiche

- sistema cristallino
- parametri di cella
- punto di fusione
- densità

dati ottici (indici di rifrazione)

commenti e informazioni aggiuntive (riferimento bib., sintesi, etc.)

informazione sulla qualità dei dati riportati

informazioni diffrattometriche

(distanze interplanari e intensità relative, anche non interpretate..)

Esempio scheda nell'archivio PDF per NaCl:

NaCl	d Å	Int	h k l	d Å	Int	h k l
Sodium Chloride	3.26	13	111			
	<b>2.821</b>	100	<b>200</b>			
	1.994	35	220			
<b>Halite, syn</b>	1.701	2	311			
<b>Rad.</b> CuK $\alpha$ , $\lambda$ 1.5405 <b>Filter</b> Ni <b>d-sp</b>	1.628	15	222			
<b>Cutoff</b> <b>Int. Diffractometer</b> $I/I_{001} = 4.40$	1.410	6	400			
<b>Ref.</b> Swanson, Foyai. <i>Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, II 47 (1953)</i>	1.294	1	331			
	1.261	11	420			
	1.1515	7	422			
<b>Sys.</b> Cubic <b>S.G.</b> Fm $\bar{3}m$ (225)	1.0855	1	511			
<b>A</b> 5.6402 <b>b</b> <b>c</b> <b>AC</b>	0.9969	2	440			
<b><math>\alpha</math></b> <b><math>\beta</math></b> <b><math>\gamma</math></b> <b>Z</b> 4 <b>mp</b> 804	0.9523	1	531			
<b>Ref.</b> Ibid.	0.9461	3	600			
<b>D</b> 2.16 <b>D</b> 2.17 <b>SS/FOMF</b> <sub>100</sub> =93(011,17)	0.8917	4	620			
<b>CC</b> <b><math>\eta</math></b> 0 $\beta$ 1.542 <b>BY</b> <b>Sign</b> 2V	0.8601	1	533			
<b>Ref.</b> <i>Dana's System of Mineralogy, 7<sup>th</sup> Ed., II 4</i>	0.8503	32	622			
<b>Color</b> Colorless	0.8141	2	444			
Pattern taken at 26 C. CAS#: 7647-14-5. An ACS reagent grade sample recrystallized twice from hydrochloric acid. Halite group, halite subgroup. PSC: cF8.						

## Metodi di ricerca

Indice alfabetico:

Basato sul nome della fase (importante se si sospetta già la presenza di una certa fase con composizione chimica nota).

Indici di Hanawalt o di Fink

Tutte le sostanze note nell'archivio sono catalogate in base alle distanze interplanari corrispondenti ai picchi più intensi (e suddivisi in 40 intervalli di distanze).

**Search-Match automatico**, con controllo sul chimismo. Software di solito collegato a quello di raccolta ed elaborazione dati.

## Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)

E' un archivio che contiene oltre 60.000 strutture inorganiche; sono esclusi metalli, leghe metalliche ecc. (Pearson's database)

<http://www.icsd-usergroup.net/>

Esiste una interfaccia per la ricerca delle strutture, che può basarsi su:

- bibliografica
- composizione chimica (esatta o parziale)
- nome del composto o del minerale
- dati sul materiale (sistema cristallino, gruppo spaziale ecc.)
- tipo di raccolta dati (polveri, cristallo singolo, raggi X, neutroni, ecc.)

Informazione contenuta in una scheda ICSD:

- nome del composto o del minerale
- bibliografia
- composizione chimica
- cella elementare, dimensioni e coordinate atomiche
- classe di simmetria e gruppo spaziale
- tipo di raccolta dati
- informazioni sul campione misurato
- informazioni sulla qualità della raccolta dati (ed eventuali correzioni dopo la pubblicazione della struttura)
  
- Contiene un'informazione ricca, corredata dalle coordinate atomiche frazionarie
- E' supportato da diversi programmi numerici e grafici di analisi strutturale.

Diffusione:

Industrie e Ricerca Applicata:	Bassa
Università (Mineralogia)	Alta
Università (Chimica)	Bassa

**Costo:** Licenza Base ca 10.000 Euro (enti non-profit); si possono ordinare aggiornamenti annuali a prezzi inferiori.

## Esempio scheda nell'archivio ICSD per NaCl:

\*data for ICSD #41439  
Coll Code 41439  
Rec Date 2001/12/18  
Chem Name Sodium Chloride  
Structured Na Cl  
Sum Cl1 Na1  
ANX AX  
Min Name Halite  
D(calc) 2.16  
Title Structural and elastic properties of sodium halides at high pressure  
Author(s) Srinivasa, R.B.;Sanyal, S.P.  
Reference Physical Review, Serie 3. B - Condensed Matter (18,1978-) (1990), 42, 1810-1816  
Unit Cell 5.644 5.644 5.644 90. 90. 90.  
Vol 179.79  
Z 4  
Space Group F m -3 m  
SG Number 225  
Cryst Sys cubic  
Pearson cF8  
Wyckoff b a  
Red Cell F 3.990 3.990 3.990 60 60 60 44.947  
Trans Red 0.500 0.500 0.000 / 0.000 0.500 0.500 / 0.500 0.000 0.500  
Comments PDF 5-628  
Phase transition ar RT: 23.80 GPa  
No R value given in the paper.  
At least one temperature factor missing in the paper.

Atom	#	OX	SITE	x	y	z	SOF	H
Na	1	+1	4 a	0	0	0	1.	0
Cl	1	-1	4 b	0.5	0.5	0.5	1.	0

\*end for ICSD #41439

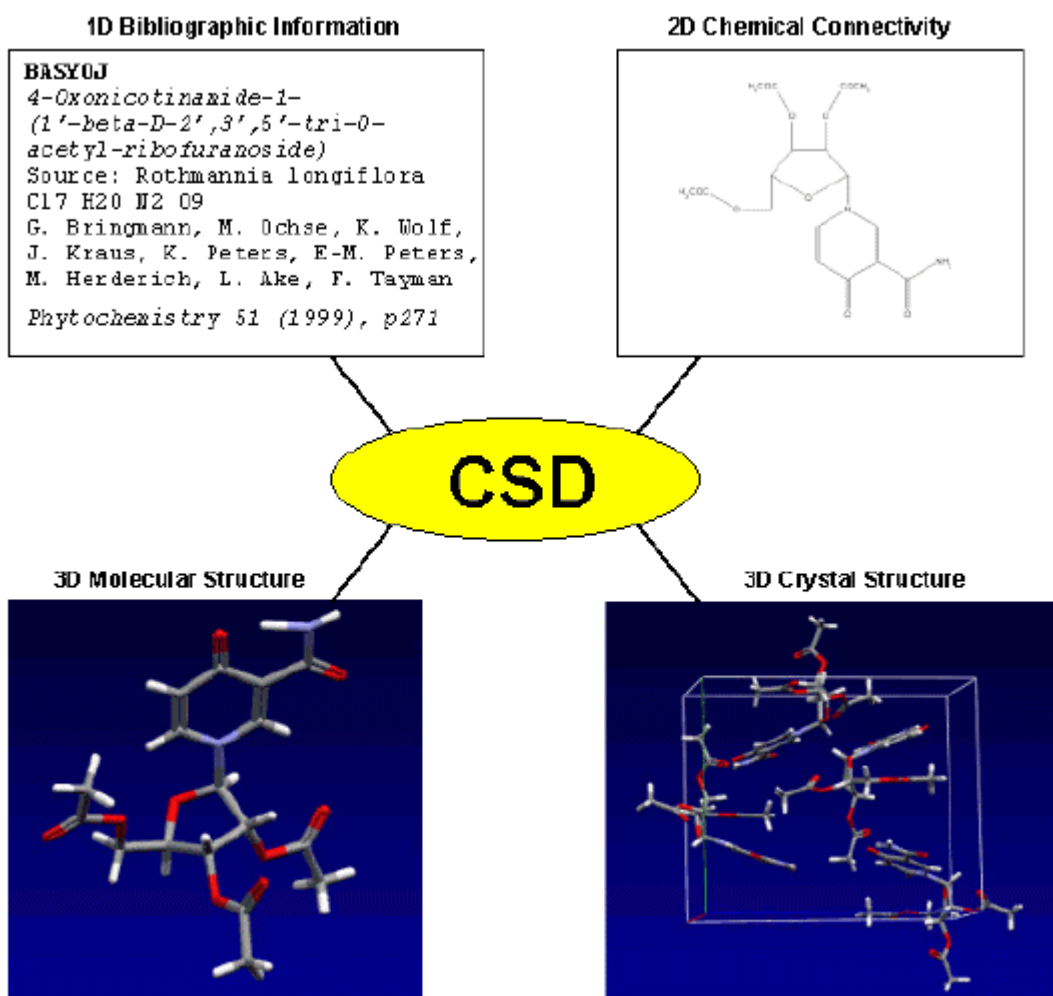
## Cambridge Structural Database (CSD)

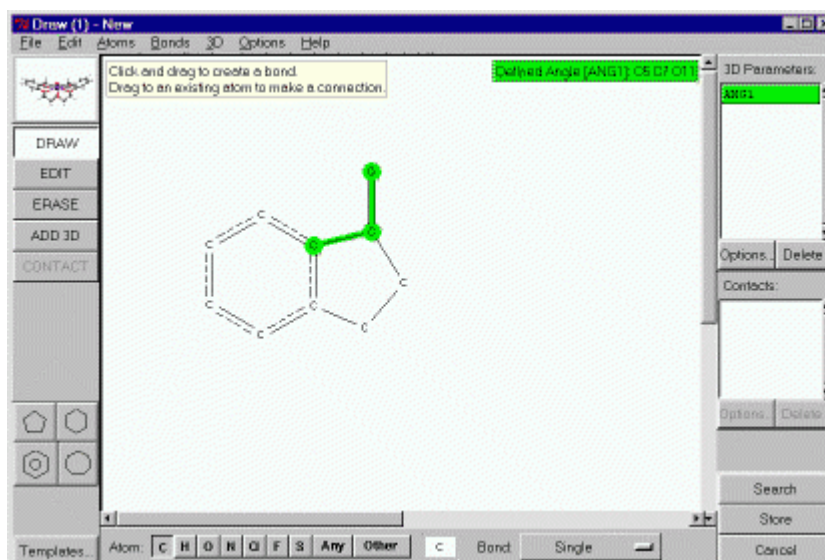
E' un archivio elettronico contenente circa **280.000** strutture di fasi cristalline organiche od organometalliche (almeno un legame C-H) + metallo-carbonili.

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/about/>

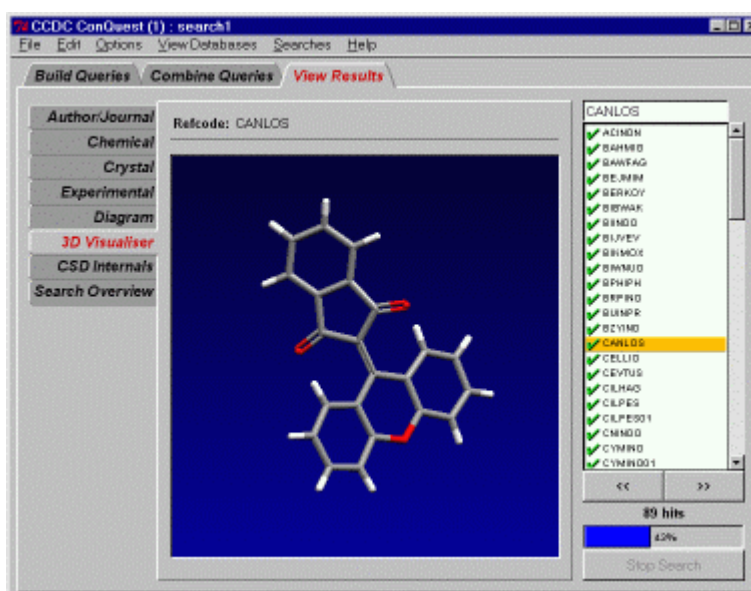
L'archivio è consultato mediante programmi appositi:

- interfaccia per la ricerca di strutture molecolari (con calcolo dei parametri geometrici) e la visualizzazione grafica
- interfaccia per l'analisi statistica delle geometrie osservate
- interfaccia per l'analisi dei contatti intermolecolari e la predizione degli impaccamenti
- interfaccia per l'analisi delle interazioni proteine-legante





*interfaccia grafica per la ricerca tramite la connettività chimica*



*visualizzazione del risultato*

- Contiene un'informazione ricca (con coordinate atomiche)
- Contiene programmi statistici e grafici di analisi strutturale.

Diffusione:

Industrie e Ricerca Applicata: Bassa

Università (Mineralogia): Nulla

Università (Chimica): Alta

**Costo:** Licenza Base ca. 30000 Euro/anno per Rete di Ricerca Italiana [circa 30 enti sottoscrittori (non-profit)]; si possono ordinare 'abbonamenti' multisessione.

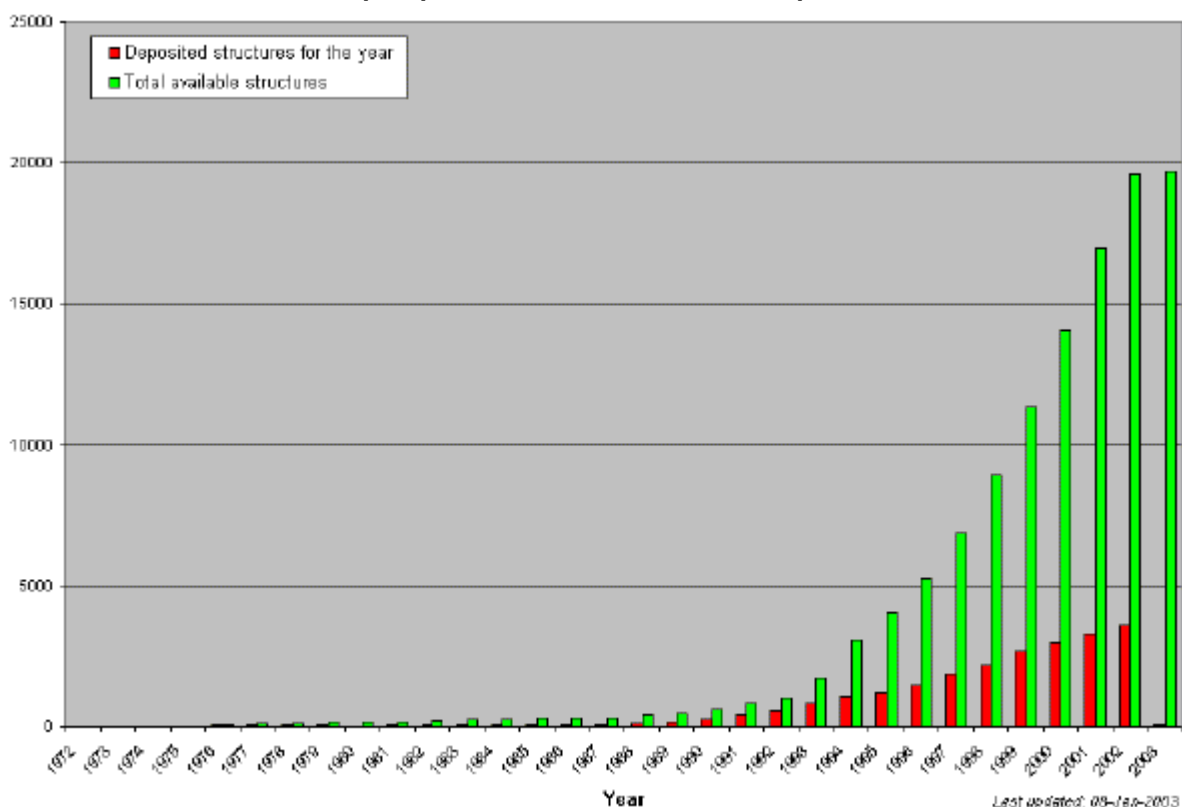


## Protein Data Bank (PDB)

E' un archivio elettronico contenente circa 15.000 strutture di proteine, acidi nucleici, complessi, carboidrati ecc, determinate sia mediante metodi cristallografici, sia mediante impiego di risonanza magnetica nucleare.

Negli ultimi anni lo sviluppo di tale archivio è stato notevole, dato l'incremento di strutture di proteine risolte con le nuove tecniche sperimentali e i nuovi metodi di risoluzione diretti, efficaci fino ad alcune migliaia di atomi nell'unità asimmetrica.

<http://pdb.ccdc.cam.ac.uk/pdb/>



### Contenuto:

- Sequenza amminoacidi
- Dati cristallografici (se disponibili)
- Coordinate frazionarie
- Strutture secondaria, terziaria, etc.
- Riferimenti bibliografici
- Metodologia
- Etc.

Tecnica	Tipo di Molecola				
	Proteine, Peptidi, e Virus	Complessi Proteine-Acidi Nucleici	Acidi Nucleici	Carboidrati	Totale
<b>Diffrazione raggi-X</b>	15325	724	636	14	16699
<b>NMR</b>	2464	88	494	4	3050
<b>Totale</b>	17789	812	1130	18	19749

- In realtà, il numero di proteine di cui si conosce la struttura è limitato, in quanto nell'archivio elettronico sono presenti varianti o mutanti della stessa proteina (ad esempio ne esistono circa 560 del lisozima), oppure molti complessi della stessa proteina con piccoli leganti.
- Per (ovvi) motivi di proprietà industriale, sono sempre più le strutture di proteine o composti simili che non vengono depositate e mantenute coperte da brevetti, etc.

Diffusione:

Industrie e Ricerca Applicata:	Bassa
Università (Mineralogia)	Nulla
Università (Chimica)	Bassa

## **Altre risorse (cartacee, elettroniche, etc.)**

### **Periodici Cristallografici:**

Acta Crystallographica, Sect. A,B,C,D,E	IUCr
Journal of Applied Crystallography	IUCr
Journal of Synchrotron Radiation	IUCr
Powder Diffraction	ICDD-AIP
Advances in X-ray Analysis	ICDD-DXC
Zeitschrift fuer Kristallographie	Oldenbourg
Newsletters of IUCr and of the Commissions	ICDD

### **Principali Periodici CHIMICI Non Cristallografici (ma che pubblicano sovente risultati strutturali):**

Journal of the American Chemical Society	ACS
Inorganic Chemistry	ACS
Organometallics	ACS
Chemistry of Materials	ACS
Angewandte Chemie	Wiley
Chemistry, A European Journal	Wiley
European Journal of Inorganic Chemistry	Wiley
Chemical Communications	RCS
J. of the Royal Chemical Society, Dalton Trans.	RCS
Journal of Material Chemistry	RSC
Inorganica Chimica Acta	Elsevier
Polyhedron	Elsevier
Journal of Organometallic Chemistry	Elsevier
Journal of Solid State Chemistry	Elsevier*

### **Società Scientifiche:**

Associazione Italiana di Cristallografia + Altre Società Nazionali  
European Crystallographic Association  
American Crystallographic Association  
Asian-Australian Crystallographic Association  
International Union of Crystallography

## Links di un qualche interesse...

### Software:

#### Crystallographic:

- GSAS (A.C. Larsen and R.B. Von Dreele) may be downloaded from <http://public.lanl.gov/gsas/> or <ftp://ftp.lanl.gov/public/gsas/>
- EXPGUI (B. H. Toby) - [http://www.ncnr.nist.gov/programs/crystallography/software/expgui/expgui\\_intro.html](http://www.ncnr.nist.gov/programs/crystallography/software/expgui/expgui_intro.html)
- LHPM-Rietica (B.A. Hunter and C.J. Howard) may be downloaded from [ftp://ftp.ansto.gov.au/pub/physics/neutron/rietveld/Rietica\\_LHPM95/](ftp://ftp.ansto.gov.au/pub/physics/neutron/rietveld/Rietica_LHPM95/) and <http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lhpm-rietica/index.html>
- EXPO (A. Altomare, B. Carrozzini, G. Cascarano, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, A.G.G. Moliterni, R. Rizzi, M.C. Burla, G. Polidori, and M. Camalli) - <http://www.irmeccba.cnr.it/>
- WinCSD (L.Akeslud, Yu.Grin, V.K.Pecharsky, and P.Y.Zavalij) <http://www.stoe.com/products/index.htm> or <http://materials.binghamton.edu/zavalij/CSD.html>
- Materials Studio and Cerius2 suites (Accelrys Inc.) - <http://www.accelrys.com/>
- Jade and jPOWD (MDI, Materials Data Inc.) - <http://www.materialsdata.com/>
- SHELX (G.M. Sheldrick) - <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html>
- BGMN (J. Bergmann) - <http://www.bgm.de/methods.html>, <http://www.bgm.de/>
- Xfit-Koalariet (R.W. Cheary & A.A. Coelho) - <http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/xfit-95/xfit.htm>.
- WLepage (T. Spek) - [http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lmgp/chekcell\\_lepage.html](http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lmgp/chekcell_lepage.html)
- LMGP suite (J. Laugier and B. Bochu) - <http://www.inpg.fr/LMGP> and <http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lmgp/>;  
ChekCell - <http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lmgp/index.html> - [chekcell](http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/lmgp/chekcell/)
- CRYSFIRE (R. Shirley) - <http://www.ccp14.ac.uk/tutorial/crys/index.html>
- VaList (A.S. Wills and I.D. Brown) - <ftp://ftp.ill.fr/pub/dif/valist/>
- CCP14: the Collaborative Computational Project Number 14 for Single Crystal and Powder Diffraction - <http://www.ccp14.ac.uk/>
  - o Software for Powder Diffraction Indexing - <http://www.ccp14.ac.uk/solution/indexing/>
- The most comprehensive collections of various crystallographic software products are found at the International Union of Crystallography Web site at <http://www.iucr.org/>

#### Other:

- Web3D repository of VRML (Virtual Reality Modeling Language) viewers - <http://www.web3d.org/vrml/browpi.htm>, for example:

- o Cortona<sup>®</sup> VRML Client plug-in Web3D viewer  
<http://www.parallelgraphics.com/products/cortona>
- o Cosmo 3D playe<sup>™</sup> plug-in VRML viewer <http://www.cai.com/cosmo/>
- Maximum entropy method - image processing and reconstruction:  
<http://www.maxent.co.uk/examples.htm>
- Adobe Acrobat Reader<sup>®</sup> for viewing data in PDF (Portable Data Format):  
<http://www.adobe.com/products/acrobat/readstep.html>

### Databases:

- List of databases related to crystallography can be found at  
<http://www.iucr.org/cww-top/data.index.html>.
- PDF (Powder Diffraction File<sup>™</sup>) by the International Centre for Diffraction Data (ICDD<sup>®</sup>) - <http://www.icdd.com/>
- NIST Crystal Data by National Institute of Standards and Technology -  
<http://www.nist.gov/srd/nist3.htm>
- ICSD (Inorganic Crystal Structure Data) by FIZ (Fachsinformationzentrum) -  
<http://www.fiz-informationsdienste.de/en/DB/icsd/produkte.html>
- CSD (Cambridge Structural Database) by Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) - <http://www.ccdc.cam.ac.uk/prods/csd/csd.html>
- CRYSTMET<sup>®</sup> (Metals and Alloys Database) by Toth Information Systems -  
<http://www.tothcanada.com/Crystmet.htm>
- PDB (Protein Data Bank) by the Research Collaboratory for Structural Bioinformatics - <http://www.rcsb.org/pdb/holdings.html>
- Nucleic Acids Database (NDB) by Rutgers University - <http://ndb-mirror-2.rutgers.edu/>
- IZA zeolite database by International Zeolite Association (IZA) structure commission - <http://www.iza-structure.org/databases/>
- Mineralogy Database - <http://webmineral.com/>
- SDPD – Structure Determination from Powder Diffraction - Database of bibliography and methods by A. Le Bail - <http://sdpd.univ-lemans.fr/iniref.html>

### People:

- Max von Laue (1879-1960) - <http://www.nobel.se/physics/laureates/1914/>
- Sir William Henry Bragg (1862-1942) and William Lawrence Bragg (1890-1971) - <http://www.nobel.se/physics/laureates/1915/>
- Wilhelm Conrad Roentgen (1845-1923) -  
<http://www.nobel.se/physics/laureates/1901/index.html>
- Jerome Karle and Herbert A. Hauptman -  
<http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1985/>
- Arthur Moritz Schönflies (1853-1928) -  
<http://www-gap.dcs.st-and.ac.uk/~history/Mathematicians/Schonflies.html>
- Hugo M. Rietveld (b. 1932) - <http://home.wxs.nl/~rietv025/> or the mirror site at  
<http://ccp14.sims.nrc.ca/ccp/web-mirrors/hugorietveld/~rietv025/index.html>

## Organizations, Companies:

- ICDD® - International Centre for Diffraction Data - <http://www.icdd.com/>
- IUCr - the International Union of Crystallography - <http://www.iucr.org/>
- Bruker AXS - <http://www.bruker-axs.com/production/indexnn.htm>
- PANalytical (formerly Philips) - <http://www-us.analytical.philips.com/products/xrd/>
- Rigaku/Molecular Structure Corporation - <http://www.rigaku.com/xrd/index.jsp>
- STOE & Cie, GmbH - <http://www.stoe.com/products/index.htm>
- Thermo ARL (formerly Scintag) - [http://www.thermo.com/eThermo/CDA/Products/Product\\_Listing/0,1086,12209-121-121,00.html](http://www.thermo.com/eThermo/CDA/Products/Product_Listing/0,1086,12209-121-121,00.html)

## Other:

- NIST standard reference materials - <http://srmcatalog.nist.gov/>
- Synchrotron and neutron facilities - <http://www.iucr.org/cww-top/rad.index.html>, e.g.:
  - o Neutron: ISIS in the UK - <http://www.isis.rl.ac.uk/>, SNS in the US - <http://www.sns.gov/>,
  - o the High Resolution Position Sensitive Detector Powder Diffractometer for Thermal Neutrons at the Paul Scherrer Institute, Switzerland <http://sinq.web.psi.ch/sinq/instr/hrpt.html>,
  - o Synchrotron: NSLS at Brookhaven National Laboratory <http://nslsweb.nsls.bnl.gov/nsls/>
- Submitting structure refinement from powder data as crystallographic papers to *Acta Crystallographica* - <http://journals.iucr.org/services/cif/powder.html>
  - o A template for preparing a powder CIF and an example of a completed powder CIF (Crystallographic Information File) are available by ftp (files [/pub/rietform.cif](#) and [/pub/rietxml.cif](#), respectively),
  - Cover illustration: A New Zinc Pyrovanadate,  $Zn_3(OH)_2V_2O_7 \cdot 2H_2O$ , from X-ray Powder Data (see Problems Solution 9, Chapter 7) - <http://journals.iucr.org/c/issues/1997/12/00/issconts.html>

## References/Teaching:

- IUCr Teaching Pamphlets: <http://www.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/pamphlets.html>
  - o E. J. W. Whittaker, The stereographic projection, <http://www.us.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/pamphlets/11/index.html>
  - o A. Authier, The reciprocal lattice, <http://www.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/pamphlets/4/index.html>
- Th. Proffen and R.B. Neder. Interactive tutorial about diffraction on the Web at <http://www.pa.msu.edu/~proffen/teaching/teaching.html>
- P. A. Heiney. High resolution x-ray diffraction. Physics department and laboratory for research on the structure of matter. University of Pennsylvania. <http://dept.physics.upenn.edu/~heiney/talks/hires/hires.html>

- Armel Le Bail's Web site dedicated to structure determination from powder data at <http://pcb4122.univ-lemans.fr/sdpd/index.html>
- IUCr journals (Acta Crystallographica and other) - <http://journals.iucr.org/index.html>
- Pearson's Handbook by ASM International <http://www.asm-intl.org/>
- E.W. Weisstein, Convolution, Eric Weisstein's world of mathematics, <http://mathworld.wolfram.com/Convolution.html>
- E.W. Weisstein, Gamma function, Eric Weisstein's world of mathematics, <http://mathworld.wolfram.com/GammaFunction.html>