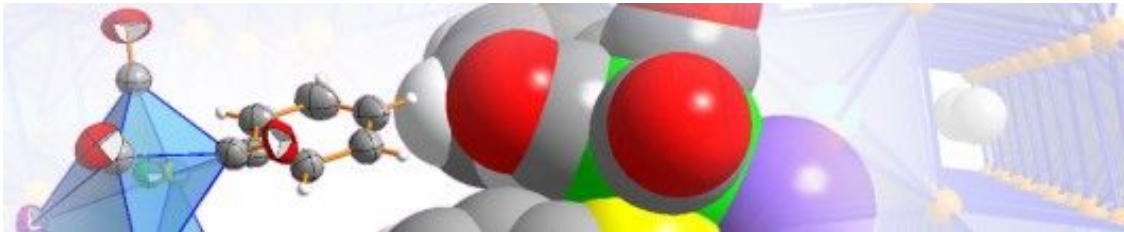


Klaus Brandenburg, Holger Putz



DIAMOND

Visualización de estructuras cristalinas y moléculas.



Inicio Rápido





Intel, Pentium and Pentium II are (registered) trademarks of Intel Corp., Santa Clara, CA, USA. AMD and Athlon are registered trademarks of AMD Corp., Sunnyvale, CA, USA. Windows, Windows NT and PowerPoint are registered trademarks of the Microsoft Corp., Redmond, WA, USA.

"POV-RayTM", "Persistence of Vision", "POV-TeamTM" and "POV-Help" are trademarks of the POV-TeamTM, Williamstown, Australia.

The POV-RayTM package which is present on the Diamond CD-ROM as a free bonus; customers of Diamond do not pay for POV-Ray in any way. You can download the official POV-Ray package without charge from <http://www.povray.org> .

The distribution present on the Diamond CD-ROM is the official version of POV-Ray; it is permitted under the terms of the General License in the file POVLEGAL.DOC. The POV-Team does not endorse the distributor or its products. The POV-Team receives no compensation for this distribution.

For detailed information about the POV-Ray license, please read the "GENERAL LICENSE AGREEMENT" (also called "POVLEGAL.DOC")



Copyright c 1997-2006 by CRYSTAL IMPACT
Dr. K. Brandenburg & Dr. H. Putz GbR
Postfach 12 51
D-53002 Bonn
Germany
E-mail: info@crystalimpact.com
World Wide Web: <http://www.crystalimpact.com>



DIAMOND

Inicio Rápido

Version 3.1f



Introducción

Si tiene los datos de una estructura cristalina (o un grupo espacial o de una celda unidad o un grupo atómico o los parámetros de un archivo CIF) y quiere...

- Crear una imagen de alta calidad para una presentación o una publicación.
- Comprender los principios de construcción de la estructura.
- Visualizar la forma de construir la estructura de varias maneras en una clase con sus estudiantes.

Excelente. Eso es lo que puede hacer con DIAMOND, un moderno paquete de software que visualiza las estructura atómicas. La nueva versión 3.XX está diseñada para realizar los primeros pasos de la manera mas sencilla y didáctica posible.

Instalación

Antes de instalar DIAMOND, deberá comprobar que, su sistema cumple los mínimos requeridos:

- Sistema operativo, Microsoft Windows 98, ME, 2000 or XP, o NT 4.0
- Tener instalado Microsoft Internet Explorer 5.01 o superior
- Un ordenador con procesador mínimo Intel Pentium II o AMD Athlon
- Al menos, 64 megabytes de RAM
- Al menos, 100 megabytes de espacio libre en disco duro.
- Tarjeta gráfica de resolución de 1024 x 768 pixels con 32,768 de colores ("La mas alta 32 bits")¹

Pro favor, inserte el disco de DIAMOND en su disquetera u tras unos segundos se abrirá el menú de instalación pulse sobre el logotipo "Install Diamond".



La instalación comenzará y le guiará a través del proceso, siga las indicaciones del programa que aparezcan en al pantalla. Si pasa un tiempo razonable y no aparece el menú de instalación puede iniciarse desde el icono de "Autoplay" situado en el directorio raíz del CD o DVD.

Una vez instalado DIAMOND, deberá instalar también POV-RayTM (si no estuviera ya instalado en su ordenador) si quiere conseguir imágenes de calida fotográfica.

Instalación de POV-RayTM

Puede instalar POV-RayTM bién desde el correspondiente botón desde el programa de isntalación o ejecutando el archivo "povwin36.exe" que encontrará en el directorio "POV-Ray" del CD o DVD de DIAMOND.



Si lo instalase desde archivos descargados de manera independiente, (por ejemplo una "demo" de DIAMOND y el programa "povwin36.exe" disponibles en la página Web de **Crystal Impact**) Basta con dirigirse al directorio donde se descargó "povwin36.exe" y

¹ Dado que la imagen resultante debe randerizarse o puede capturarse en movimiento, se aconseja una buena tarjeta gráfica y un procesador rápido.



ejecutarlo, la instalación comenzará de inmediato y le guiará a través del proceso. Si el programa estuviera instalado previamente, deberá informar a DIAMOND la ruta en el que se encuentra instalado, DIAMOND se la preguntará si fuese necesario.

Primeros pasos con DIAMOND

Empezaremos con una situación típica, los datos de una cierta estructura cristalina están en un archivo CIF² y deseamos crear la imagen correspondiente; en nuestro caso se trata del Fulleren (C₆₀) importado desde the Pauling File Binaries Edition³.

Si no lo ha hecho todavía, por favor abra el DIAMOND ahora, comenzará mostrando la pantalla de inicio, desde la que podrá realizar las operaciones más comunes como importar una estructura o abrir un archivo reciente o guardado con anterioridad. Con un simple clic. (fig. 1).

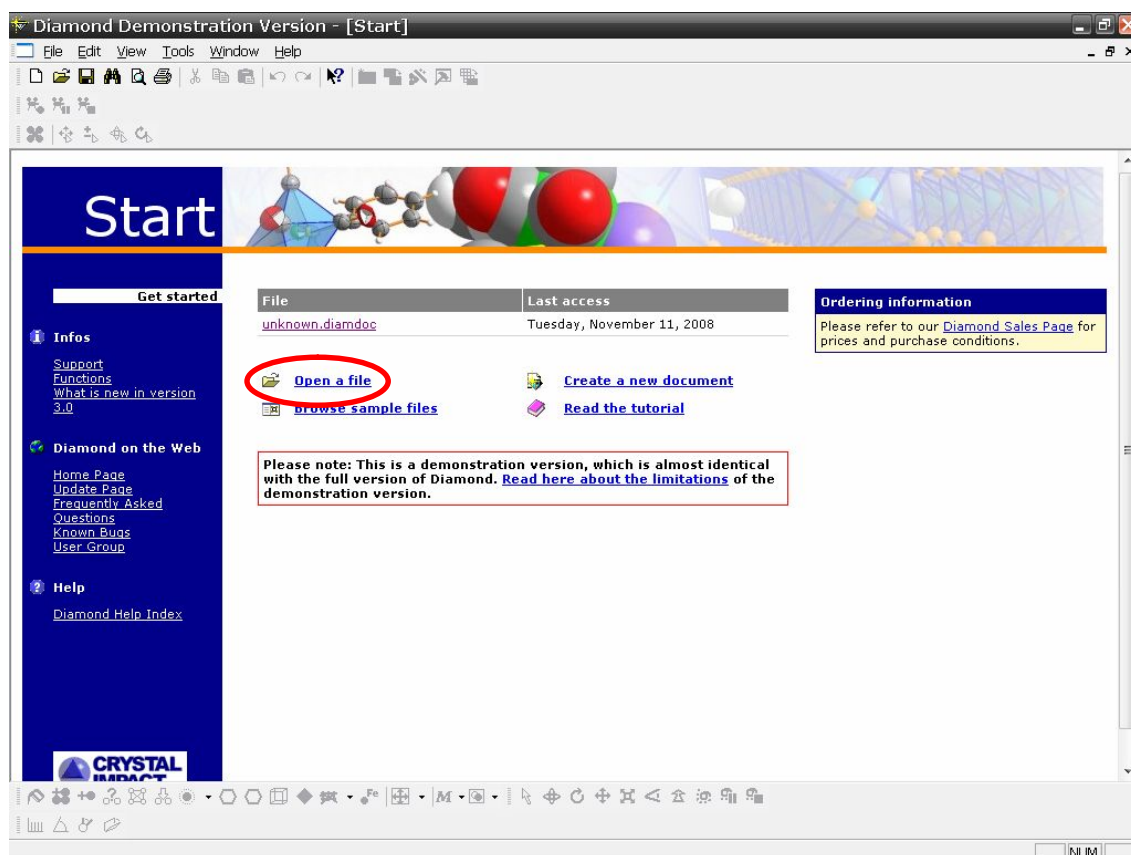


Fig. 1: la pantalla de inicio mostrando las operaciones más comunes del programa; importar o abrir archivos guardados.

Haga clic sobre "[Open a file](#)" para importar los datos de la estructura; se mostrará el cuadro de diálogo de Windows Abrir (fig.2), mediante la combobox "Tipo" nos aseguraremos que se puedan mostrar los archivos de extensión ".cif", luego seleccionaremos el archivo "c60.cif" guardado en el subdirectorio "Tutorial" de DIAMOND, posiblemente en la ruta "C:\Archivos de programa\Diamond 3 \Tutorial").

Finalmente pulsaremos sobre el botón **Abrir**.

² CIF Acrónimo de Crystallographic Information File, uno de las extensiones más comunes para el intercambio de datos en cristalografía. Por ejemplo las revistas IUCr como "Acta Crystallographica" ofrecen descargas de estos archivos de sus publicaciones. Puede obtenerse más información en la página <http://www.iucr.org/iucr-top/cif/index.html>

³ Pauling File Binaries Edition, publicado por ASM International, Materials Park, Ohio, U.S.A.

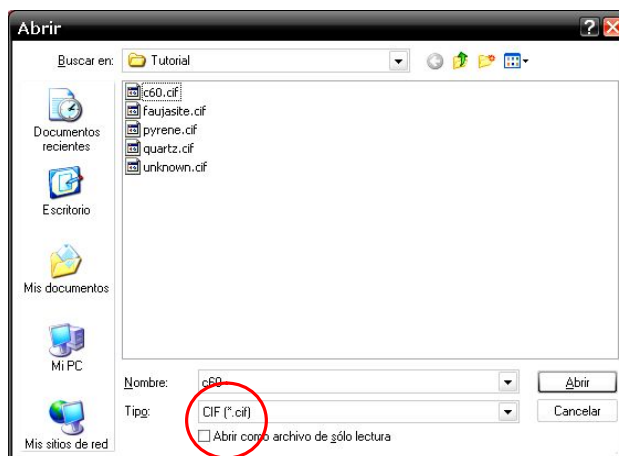


Fig. 2 Abriremos los archivos de extensión *.cif y seleccionaremos c60.cif

Si acaba de instalar DIAMOND (y las opciones del programa⁴ son las mismas que las ajustadas de fábrica), aparecerá el diálogo "File Import Assistant" (fig.3), que usaremos para controlar las etapas del procedimiento de importación. Por ejemplo reconocer el tipo de archivo...etc.

Pulse Siguiente.

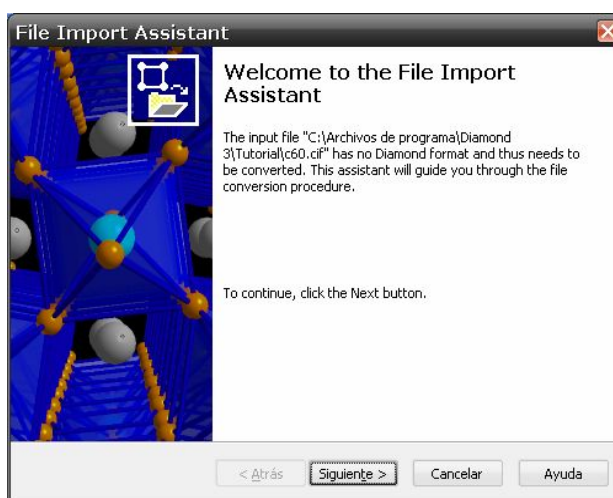


Fig. 3: El "File Import Assistant" nos guiará para realizar la importación del archivo.

Compruebe si aparece el tipo de archivo a importar en la combo box "File format" si no lo fuera despliegue el menú y selecciónelo.

También podrá ver la ruta y el número de archivos que se va a importar, en nuestro caso uno. (fig. 4).

Pulse sobre Siguiente.

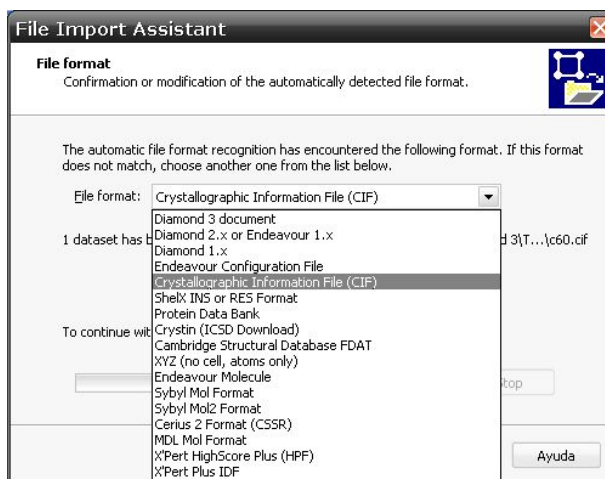


Fig. 4: En la segunda etapa de "File Import Assistant" puede verse si el tipo de los archivos y el número de ellos a importar son correctos.

⁴ Si ha variado algún parámetro, no tiene por qué preocuparse, puede restablecer las opciones iniciales desde el menú **Tools / Reset Settings...**



Puede elegir si quiere que DIAMOND acabe de dibujar la estructura de manera automática o iniciar un nuevo "Asistente para la creación de estructuras" ("Structure Picture Creation Assistant") e incluso o iniciar el dibujo, con una "Create a blank Picture".

En nuestro caso para hacerlo mas fácil posible este inicio seleccionaremos "Create a picture automatically" en el combo "If the dataset is a crystal structure" (fig. 5).

Pulse Siguiente para avanzar a la última etapa de este asistente.

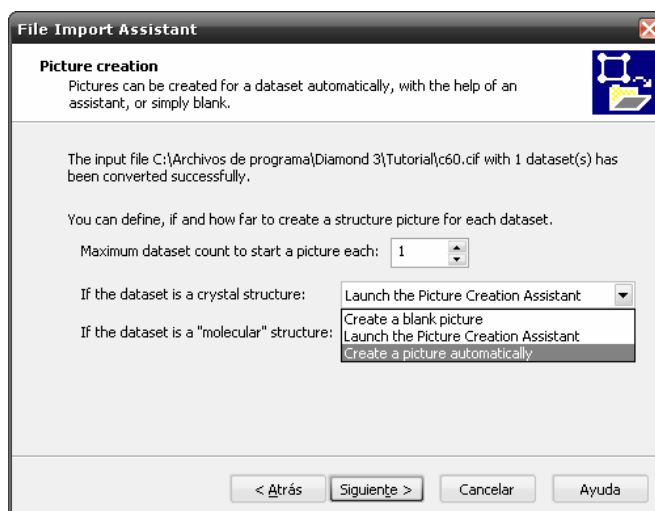


Fig. 5: En la tercera etapa del asistente puede seleccionar si permite realizar a DIAMOND el resto de pasos de forma automática o no.

Si marcamos la casilla "Do not show this assistant again" (no lo haga ahora), la operación de importación se hará directamente la próxima vez que decida cargar un archivo.

Pulsamos Finalizar.

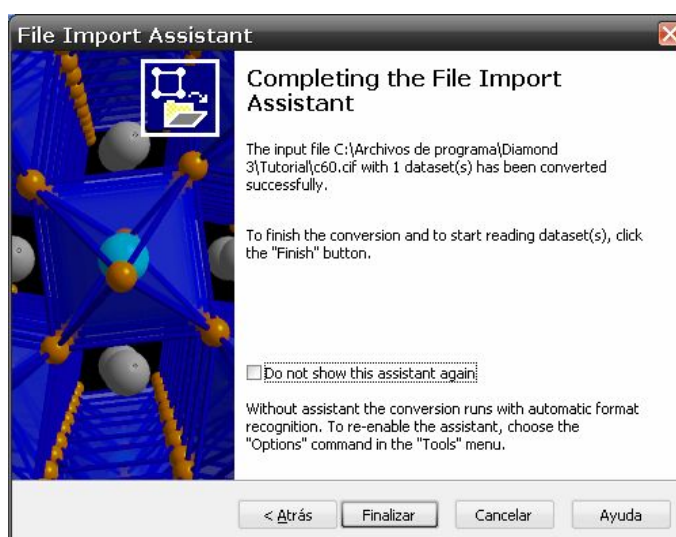


Fig. 6: En el diálogo final puede elegir el omitir este asistente, si lo hace, la próxima vez que importe un archivo de datos, la importación se realizará "en silencio" es decir automáticamente

DIAMOND importará y creará la estructura de forma automática tras unos segundos (fig. 7).

Ahora, la estructura del cristal y los datos del archivo **c60.cif** aparecerán en la interfase del programa, la exploraremos un poco para mostrar algunas opciones de presentación.

Eche un vistazo a la pantalla (fig. 7), distinguiremos dos áreas generales (1 y 2)

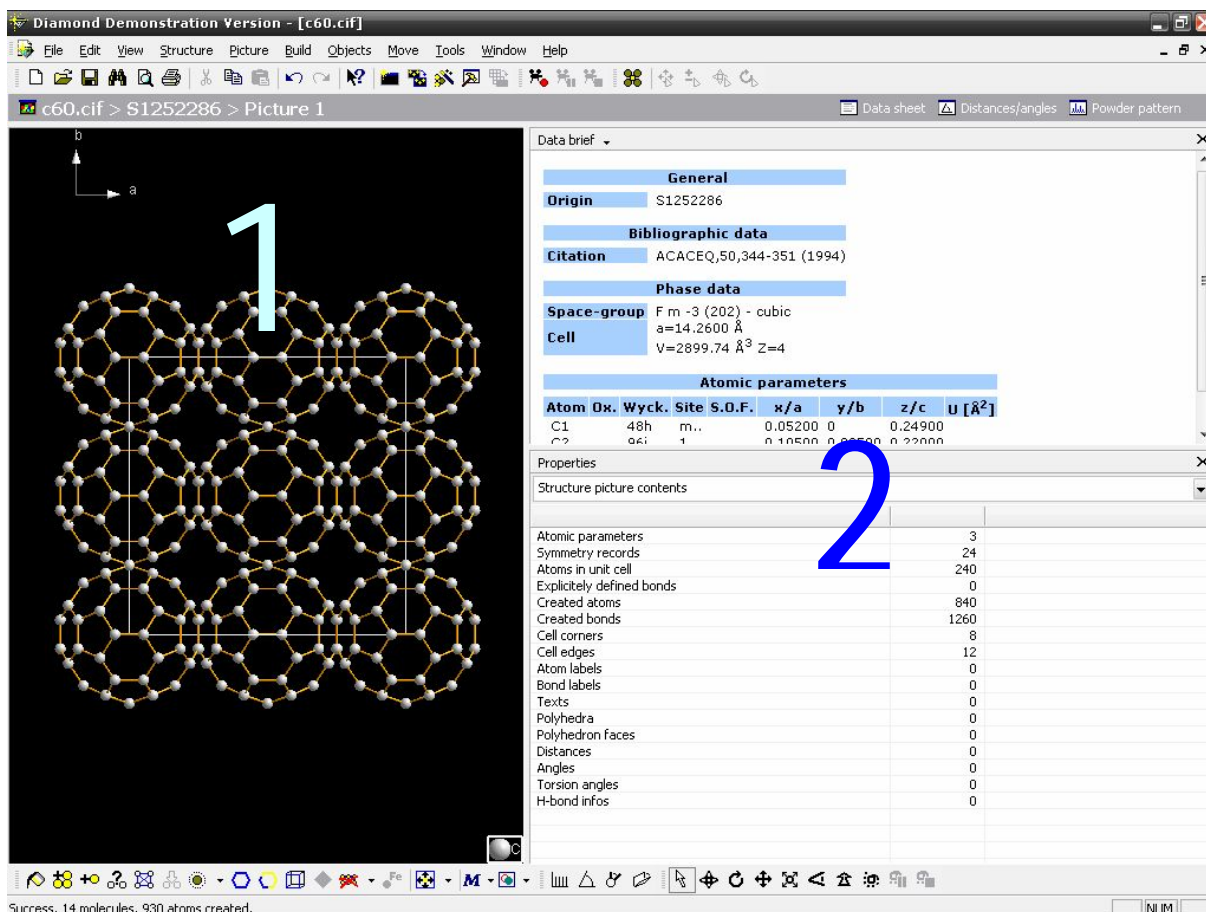


Fig. 7: The crystal structure data and display a picture have been created automatically

1. Área gráfica, la estructura de nuestro cristal o molécula aparecerá en este área. Observaremos el **Fulereo**, una estructura de celda cúbica de 240 átomos con 60 carbonos agrupados “bolas”.
2. Área de paneles a la derecha del área gráfica aparecen dos paneles de datos, uno superior “**Data brief**” muestra por defecto la ficha general del compuesto y bajo a él el panel de propiedades (“**Properties**”).

En la parte superior del área 2 por defecto se muestra la ficha general del compuesto dibujado; en este panel se pueden mostrar otras tablas relacionadas por ejemplo parámetros atómicos o distancias entre planos, ángulos medidos por el usuario, etc.

Se accede a ellas desplegando el menú situado en “**Data brief**”. (fig. 8)

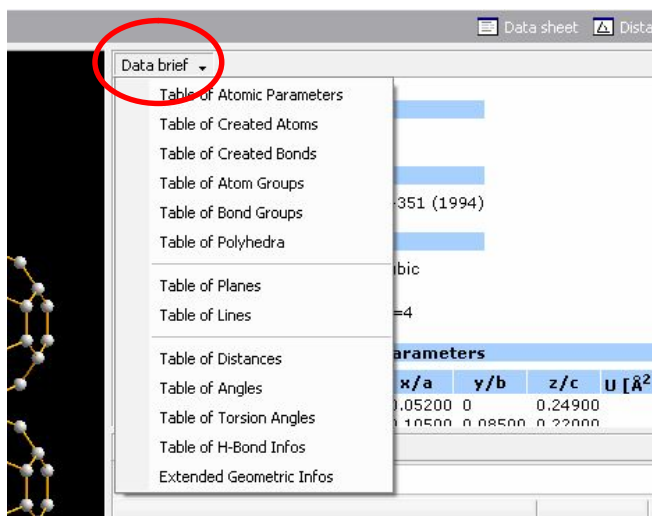


Fig. 8:



Intente desplegar la tabla de átomos "Table of created atoms" Seleccione y haga clic sobre "Data brief", luego elija "Table of Created Atoms" de la lista desplegable, y podrá ver esa información.

Ahora sitúe su ratón sobre el fondo negro del área de dibujo, pulse con el botón derecho para asegurar que es el área activa. Desde la barra de menús seleccione "Edit / Select All" o desde el teclado pulse la combinación de teclas Ctrl+Alt, observará como se seleccionan todos los átomos del dibujo (marcadores en amarillo)⁵.

Pulsando en el panel "Structure picture contents" sobre ▼ que indica un desplegable (fig.9), podremos acceder a información de la figura seleccionada o de los objetos seleccionados en ella.

- Contenido de la estructura dibujada
- Átomos creados
- Objetos seleccionados
- Distancias entre o desde átomos
- Linealidad o planaridad de los átomos seleccionados.
- Etc.

Atomic parameters								
Atom	Ox.	Wyck.	Site	S.O.F.	x/a	y/b	z/c	U [Å ²]
C1		48h	m..		0.05200	0	0.24900	
C2		96i	1		0.10500	0.08500	0.22000	

Fig. 9: Al seleccionar objetos del área gráfica sus propiedades pueden informarse en el panel de propiedades.

Si se selecciona la palabra "Automatic", la primera línea de las opciones desplegadas, el panel mostrará información correspondiente al objeto seleccionado, es el modo por defecto que en principio no conviene cambiar.

Debajo de la barra de botones se sitúa la **barra de navegación** (fig.10), que proporciona la siguiente información:

⁵ El procedimiento funciona seleccionando cualquier objeto del área gráfica, para simplificar esta guía se le indica el procedimiento que selecciona todos los objetos representados, el cristal o molécula completo.



En la parte derecha de la barra junto al icono, se indica la vista activa (en nuestro caso "Picture 1") antecedida por el nombre del archivo y un número separados por los signos > que indican una jerarquía. "c60.cif > S1252286 > Picture 1" Esto significa que el dibujo Picture 1 de la estructura S1252286 mostrada, está contenida en el documento de DIAMOND c60.cif. Porque los actuales archivos de DIAMOND de extensión (*.diamdoc) pueden contener mas de una estructura posible para el mismo cristal o mas de un dibujo para la misma estructura cristalina.



Fig. 10: La barra de navegación "Navigation bar" informa sobre el número de figuras disponibles y proporciona acceso rápido a datos como el difractograma de la figura...

Además, a la derecha de la barra se muestran tres posibles accesos directos con tres iconos (**Data sheet**, **Distances/angles**, **Powder pattern**).



Al pulsar sobre sus iconos maximizan sus paneles (fig. 11)

- **Data sheet** Es una versión extendida de los datos generales de la estructura.
- **Distances and angles** Tabla e histograma de la representación de distancias y ángulos entre varios átomos significativos de la estructura.
- **Powder pattern** El difractograma calculado desde los datos de la estructura junto al listado de reflexiones. Pueden ajustarse varios parámetros del diagrama de difracción (radiación, longitud de onda, corrección LP,..etc.)

Data sheet

General

Origin Code: S1252286

Bibliographic data

Author(s):

Publication title: ACACEQ,50,344-351 (1994)

Citation: fullerene high

Compound source: spomrod by PAULING FILE

Phase data

Formula sum: C60

Formula weight: 720.66

Crystal system: cubic

Space-group: Fm-3 (202)

Cell parameters: a=b=c=14.2600 Å

Cell ratio: a/b=1.0000 b/c=1.0000 c/a=1.0000

Cell volume: 2899.74 Å³

Z: 4

Calc. density: 1.33 g/cm³

Meas. density: 1.33 g/cm³

Melting point: 2800 °C

RAI: 0.00

RObs: 0.00

Pearson code: cf240

Formula type: N

Wyckoff sequence: 12h

Atomic parameters

Atom	Ox.	Wyck.	Site	S.O.F.	x/a	y/b	z/c	Occup.
C1	48h	m	-	0.05200	0	0	0.24900	1
C2	96i	-	-	0.10500	0.08500	0.22100	-	1
C3	96i	-	-	0.18500	0.05200	0.16500	-	1

Distances/angles

Table of distances

Atom 1	Atom 2	Count	d 1,2 [Å]
C1	C1	1x	1.4830
C1	C2	2x	1.4871
C1	C3	2x	2.3625
C2	C3	1x	1.4565
C2	C1	1x	1.4871
C2	C3	1x	2.3944
C3	C2	1x	2.4242
C3	C1	1x	1.4565
C3	C2	1x	1.4622
C1	C2	1x	1.4830
C1	C3	1x	2.3625
C2	C3	1x	2.3944

Powder pattern

Table of reflection parameters

h	k	l	h ²	k ²	l ²	h ² +k ² +l ²	Intensity
0	0	0	0	0	0	0	100
1	0	0	1	0	0	1	10
0	1	0	0	1	0	1	10
0	0	1	0	0	1	1	10
1	1	0	1	1	0	2	5
1	0	1	1	0	1	2	5
0	1	1	0	1	1	2	5
1	1	1	1	1	1	3	3

Diffractogram

Intensity vs 2θ

Fig. 11: Data sheet, Distance Angles y Power pattern del Fullereno



Si se hace clic en la barra de navegación sobre "S1252286" se desplegará un álbum de vistas en miniatura (*Thumbnail*) de las de todas la figuras relacionadas y en el panel "Data brief" se presentará una ficha de los datos mas importante de la estructura seleccionada.

Pulsando en el botón "*Picture details*" (en la base del cuadro) aparecerá una descripción de cada figura en miniatura junto a ella. (fig. 12)

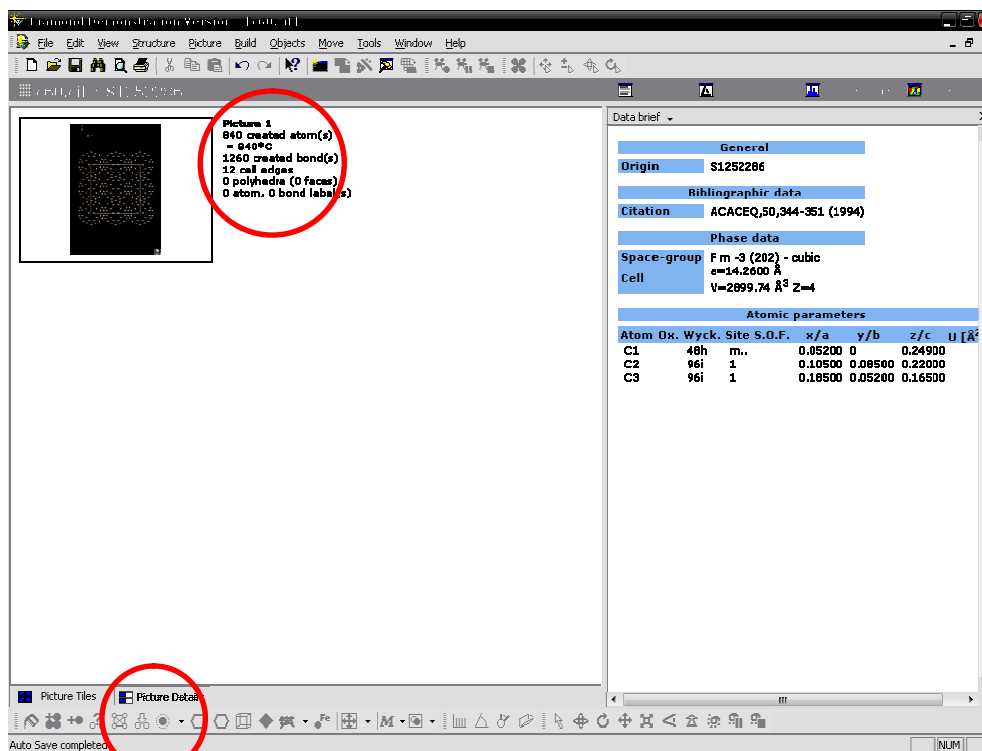


Fig. 12:

Si en la misma barra, pulsamos sobre "c60.cif" obtendremos **un listado** de todas las estructuras del archivo (fig.13), (en nuestro caso el documento posee una figura) además se obtiene una descripción rápida de la ficha general, datos bibliográficos, de fase y parámetros atómicos.

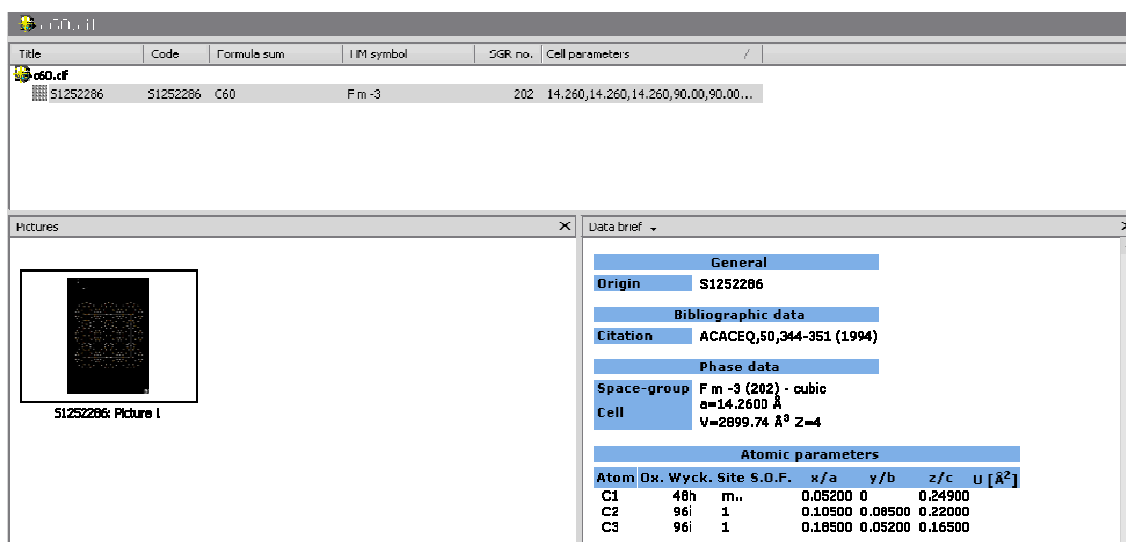


Fig. 13:



DIAMOND es un programa potente que ofrece una gran variedad de opciones mas allá de las mostradas en este inicio rápido, por ejemplo la posibilidad de mover la figura y grabar el movimiento para una presentación multimedia, para poder apreciarlas recomendamos encarecidamente la lectura del manual de usuario y de su guía paso a paso.

En caso de tener algún problema o solicitar alguna información sobre el uso del programa aparte de las proporcionadas en la ayuda en línea y el manual se puede en la página de los diseñadores en <http://www.crystalimpact.com>



CRYSTAL IMPACT GbR
Rathausgasse 30
D-53111 Bonn
Germany

☎: +49 (228) 981 36 43
☎: +49 (228) 981 36 44
E-mail: pcd-support@crystalimpact.com
<http://www.crystalimpact.com>