

- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

Bruker D8 Venture

Jan Čejka

jan.cejka@vscht.cz

108 Ústav chemie pevných látek

Budova A
P02
4200, 4285

KvaLab

- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

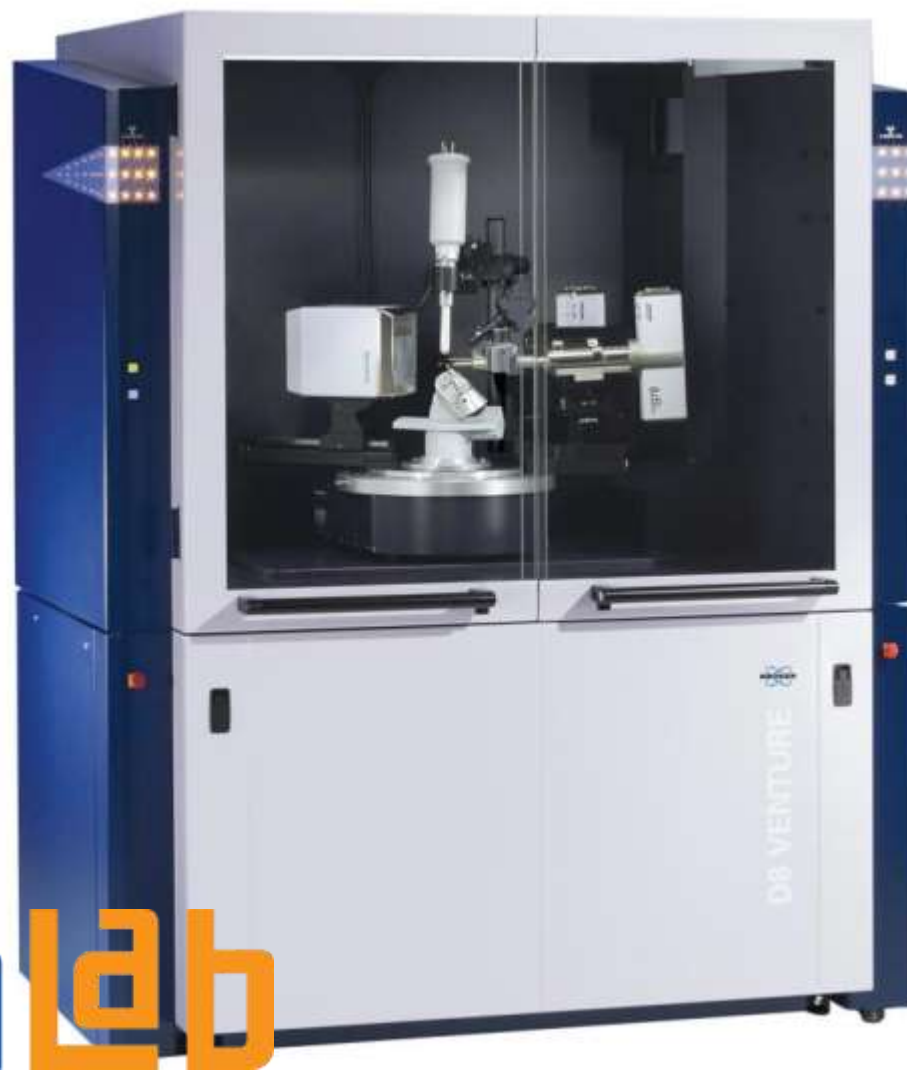
4-kruhový
 κ - goniometr
 Cu Microfocus
 Mo Microfocus
 Photon CMOS
 DTC

Budova A
 P02
 4200, 4285

www.vscht.cz

www.uct-prague.eu

KvaLab



- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

4-kruhový
 κ - goniometr
 Cu Microfocus
 Mo Microfocus
 Photon CMOS
 DTC

Budova A
 P02
 4200, 4285

www.vscht.cz
www.uct-prague.eu



- D8
- Parametry
- **Materiál**
- Výstup

Velikost
 $> 1 \mu\text{m}$
 $< 1 \text{ mm}$

Budova A
 P02
 4200, 4285

www.vscht.cz
www.uct-prague.eu



- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

Incoatec
Cu Microfocus
90 μm

Budova A
P02
4200, 4285

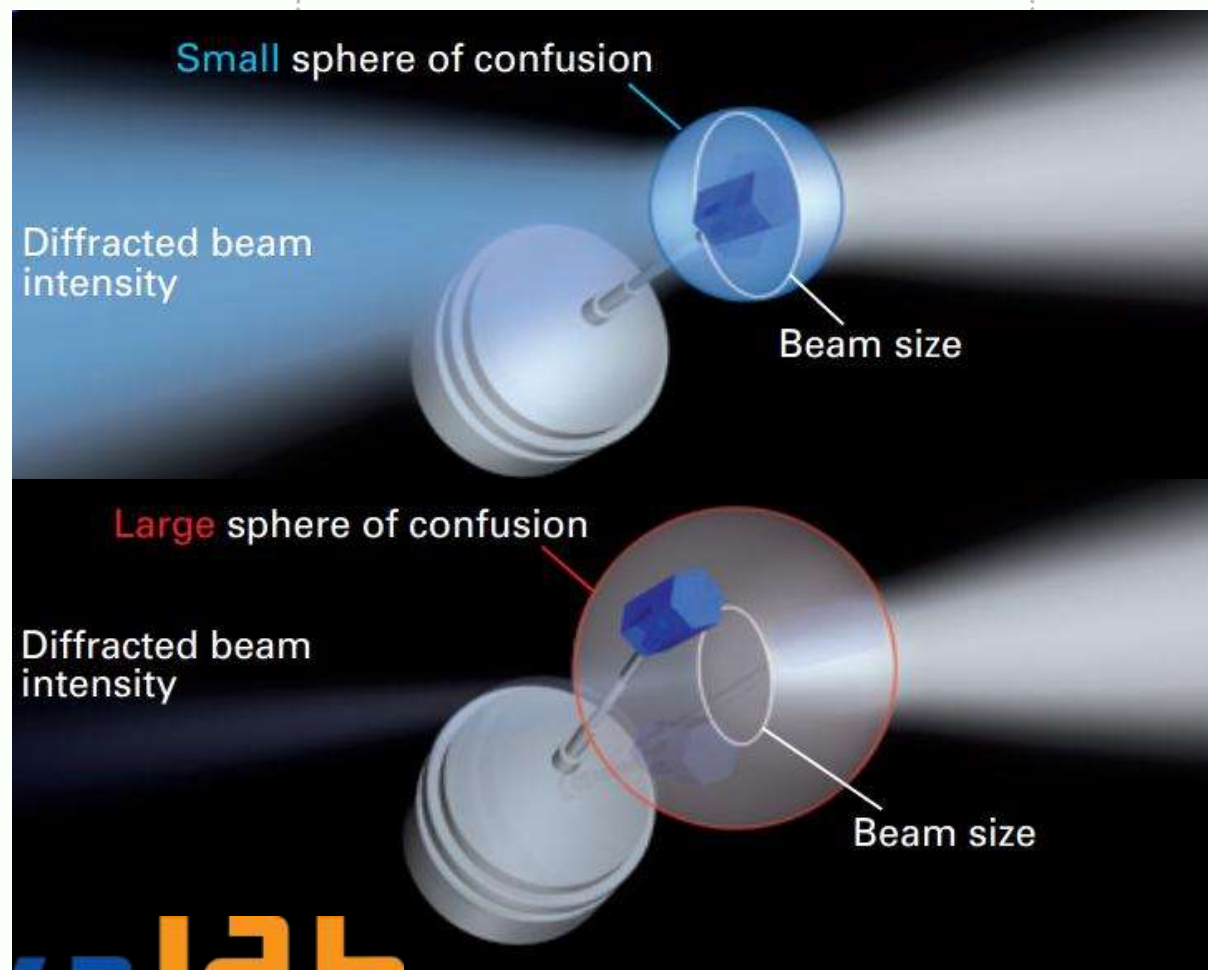
www.vscht.cz
www.uct-prague.eu



- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

Sphere of
confusion
< 7 μm

Budova A
P02
4200, 4285



- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



EVROPSKÁ UNIE
EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ
INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



OP Výzkum a vývoj
pro inovace

3D struktura

- x, y, z
- vzdálenosti
- úhly
- torzní úhly
- konfigurace

SUPBEK

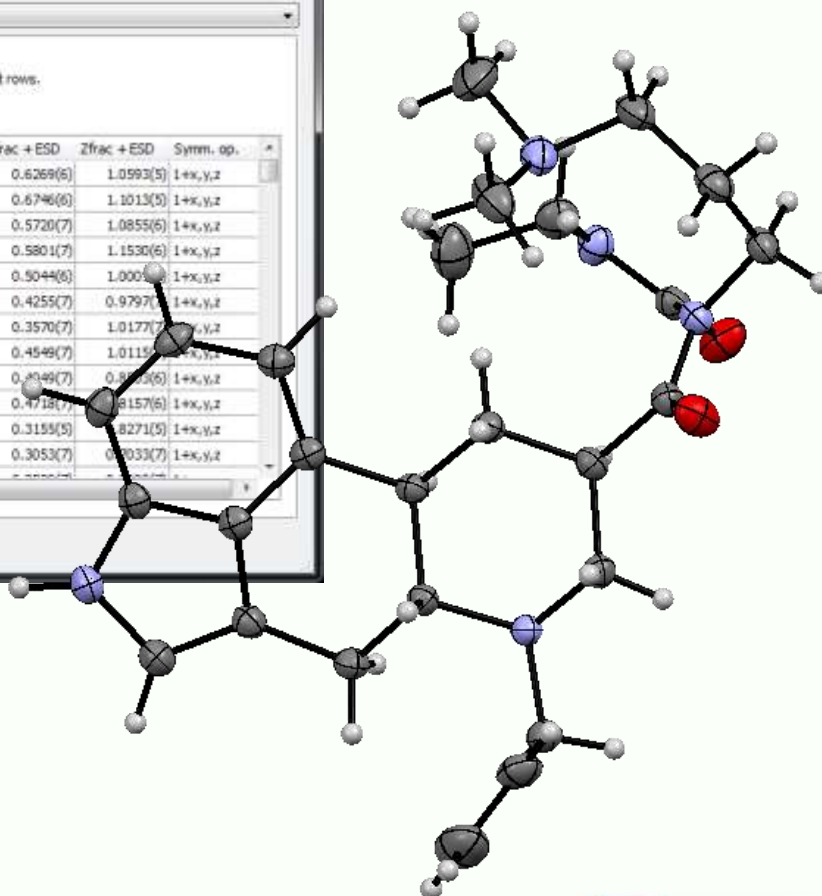
Current structure: SUPBEK

Click to select an atom; Click and drag to select multiple atoms.
Right-click on an atom for options. Click on a column heading to sort rows.

Save... Select All Deselect All

Number	Label	Charge	SybylType	Xfrac + ESD	Yfrac + ESD	Zfrac + ESD	Symm. op.
1	1 N1	0	N.3	0.8676(7)	0.6269(6)	1.0593(5)	1+x,y,z
2	2 H1	0	H	0.8280(7)	0.6746(6)	1.1013(5)	1+x,y,z
3	3 C1	0	C.2	0.9970(8)	0.5720(7)	1.0855(6)	1+x,y,z
4	4 H2	0	H	1.0556(8)	0.5801(7)	1.1530(6)	1+x,y,z
5	5 C2	0	C.2	1.0276(8)	0.5044(6)	1.0005(5)	1+x,y,z
6	6 C3	0	C.3	1.1506(9)	0.4255(7)	0.9797(5)	1+x,y,z
7	7 H3	0	H	1.1328(9)	0.3570(7)	1.0177(5)	1+x,y,z
8	8 H4	0	H	1.2440(9)	0.4549(7)	1.0115(5)	1+x,y,z
9	9 C4	0	C.3	1.1602(8)	0.4049(7)	0.8503(6)	1+x,y,z
10	10 H5	0	H	1.1960(8)	0.4718(7)	0.8157(6)	1+x,y,z
11	11 N2	0	N.3	1.2630(6)	0.3155(5)	0.8271(5)	1+x,y,z
12	12 C5	0	C.3	1.2777(9)	0.3053(7)	0.7033(7)	1+x,y,z

Close



Budova A
P02
4200, 4285

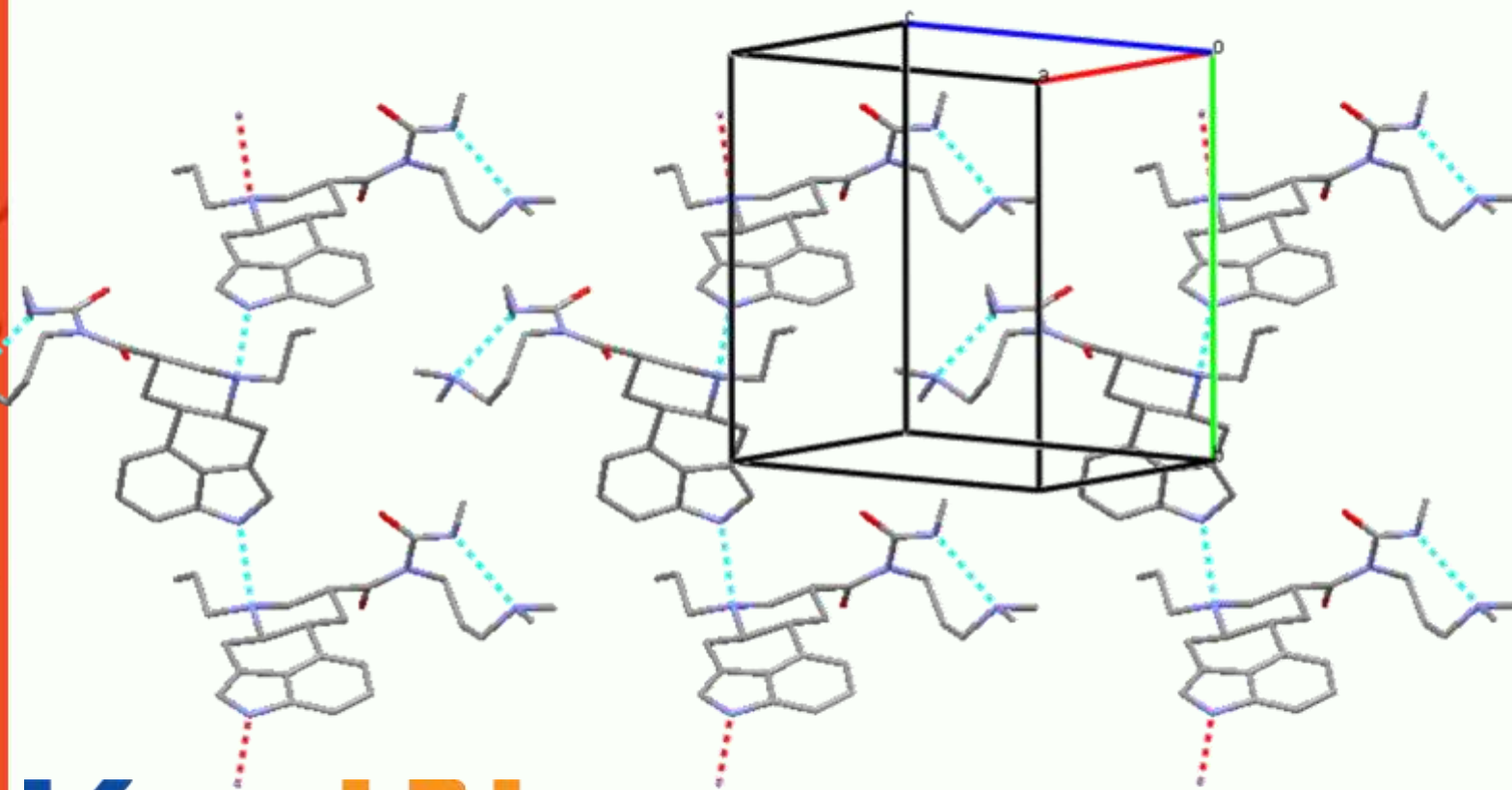
- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

3D struktura okolí molekuly

- $x y z$
- vzdálenosti
- úhly
- torzní úhly
- kontakty

Budova A
P02
4200, 4285

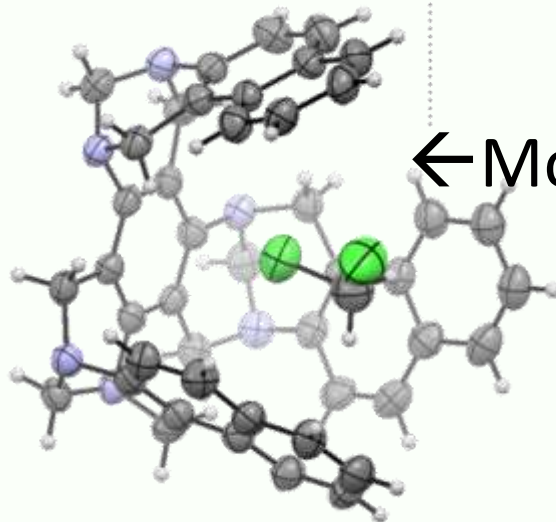
www.vscht.cz
www.uct-prague.eu



Kvalab

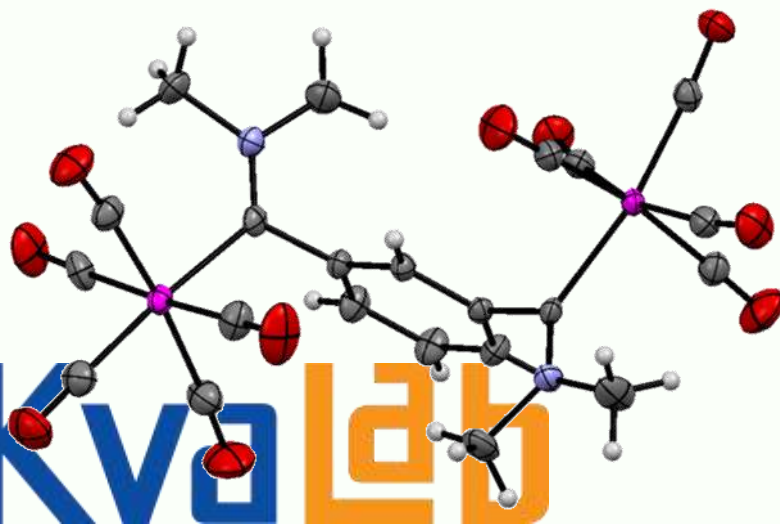
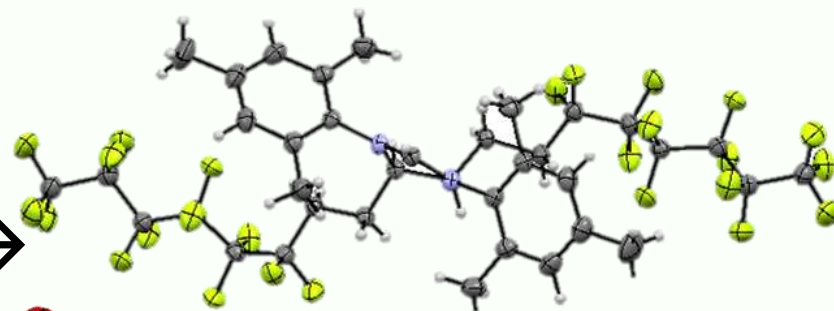


- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup



← Molekulární pinzety

Fluorová chemie →



← Karbenové komplexy

Budova A
 P02
 4200, 4285

- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup



EVROPSKÁ UNIE
EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ
INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



OP Výzkum a vývoj
pro inovace

Budova A
P02
4200, 4285

www.vscht.cz
www.uct-prague.eu

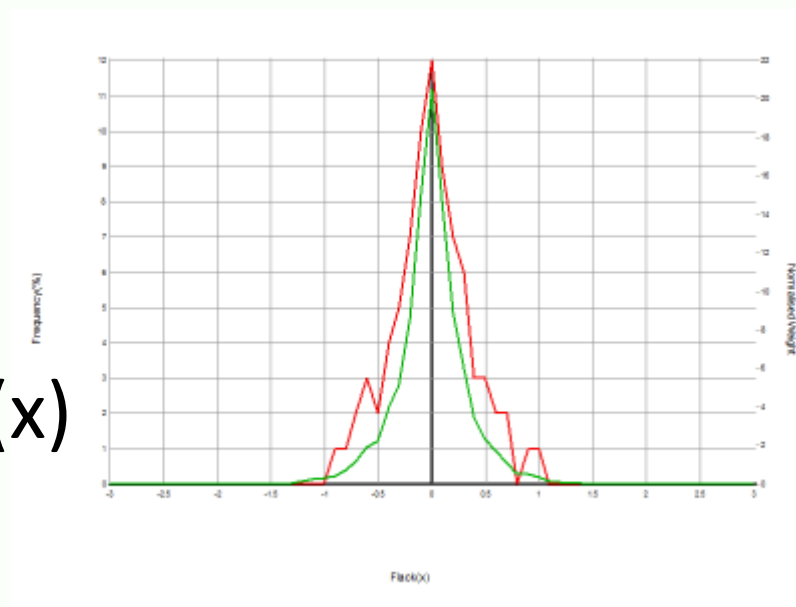
KvaLab



- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup

Absolutní konfigurace

- Flack(x)
- Hooft(y)
- Parson's Flack(x)
- Histogram mean (x)



Budova A
 P02
 4200, 4285

- D8
- Parametry
- Materiál
- Výstup



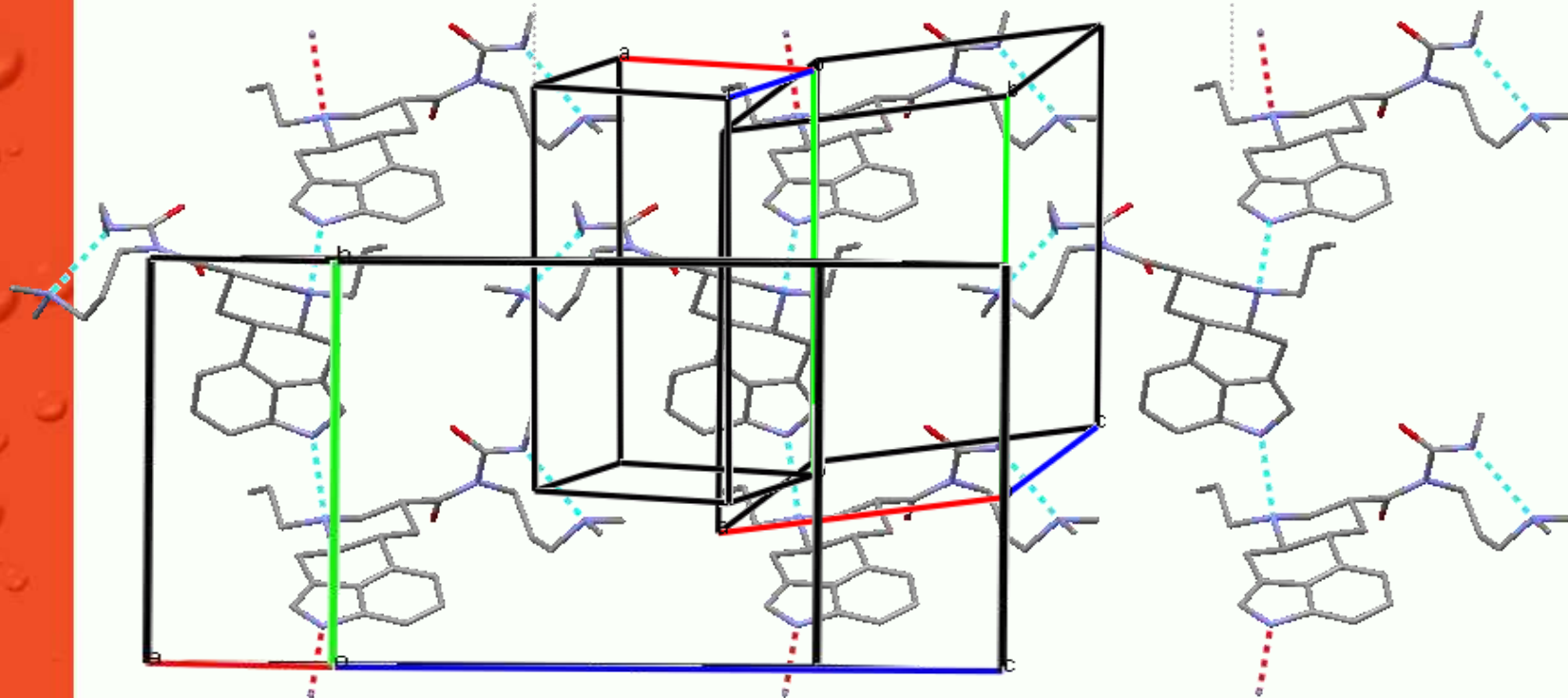
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



EVROPSKÁ UNIE
EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ
INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



OP Výzkum a vývoj
pro inovace



Budova A
P02
4200, 4285

<i>a</i>	11.781 Å
<i>b</i>	12.250 Å
<i>c</i>	14.356 Å
β	141.05°
<i>V</i>	1302.5 Å ³

<i>a</i>	9.046 Å
<i>b</i>	12.250 Å
<i>c</i>	15.335 Å
β	129.96°
<i>V</i>	1302.5 Å ³

<i>a</i>	11.781 Å
<i>b</i>	12.250 Å
<i>c</i>	15.335 Å
β	143.95°
<i>V</i>	1302.5 Å ³

<i>a</i>	9.046 Å
<i>b</i>	12.250 Å
<i>c</i>	11.781 Å
β	93.91°
<i>V</i>	1302.5 Å ³

www.vscht.cz

www.uct-prague.eu

VYSOKÁ ŠKOLA
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ
V PRAZE