

## UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

<b>Predmet:</b>	ANALIZA ZGRADBE KRISTALOV
<b>Course Title:</b>	CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
MAG Kemija, 2. stopnja	/	1.	1.
USP Chemistry, 2 <sup>nd</sup> Cycle	/	1 <sup>st</sup>	1 <sup>st</sup>

**Vrsta predmeta / Course Type:** izbirni strokovni / Elective Professional

**Univerzitetna koda predmeta / University Course Code:** K2I02

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
30	15	30 LV	/	/	75	5

**Nosilec predmeta / Lecturer:** izr. prof. dr. Amalija Golobič /  
Dr. Amalija Golobič, Associate Professor

**Jeziki / Languages:** Predavanja / Lectures: slovenski / Slovenian  
Vaje / Tutorial: slovenski / Slovenian

**Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:** Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

**Prerequisites:** The course has to be assigned to the student.

**Vsebina:**

Osnovni principi zgradbe kristalov: Tipi vezi v kristalih (ionska, kovalentna, kovinska). Molekulska - Van der Waalova vez, vodikova vez in druge interakcije med molekulami (npr.  $\pi\cdots\pi$  in  $\pi\cdots\sigma$  interakcije). Konkretni primeri kristalnih struktur za vsak tip vezi. Strukturni principi (koordinacijski poliedri in števila, elektrostatska jakost vezi, Paulingova pravila).

Teoretične matematično-fizikalne osnove rentgenske strukturne analize: Povezanost položajev in intenzitete uklonov s strukturo urejene trdne snovi – z obliko in velikostjo osnovne celice ter njeno vsebino (položaji atomov v asimetrični enoti ter njihovi odmiki

**Content (Syllabus outline):**

Basic principles of crystal structure: Types of bonds (ionic, covalent, metal). Intermolecular interactions (Van der Waals, hydrogen bonds,  $\pi\cdots\pi$  and  $\pi\cdots\sigma$  stacking). Concrete examples of crystal structure for each type of bonding. Structural principles (coordination polyhedron and number, electrostatic bond strength, Pauling rules).

Mathematical and physical fundamentals of X-ray structure analysis. The relationship between the position and intensity of reflections and the crystal structure (unit cell parameters, positional and displacement parameters of atoms in the asymmetric units and space group

od ravnovesnih leg in simetrije razporeditve atomov). Obnovitev pojmov: direktna in recipročna mreža, uklonski kot in indeksi uklonov, prostorska skupina. Uvedba novih pojmov: strukturni faktor, faza in amplituda uklonov, funkcija elektronske gostote, Lauejeva simetrija. Predstavitev faznega problema v kristalografiji ter njegovo reševanje, predvsem z metodo težkega atoma in direktnimi metodami. Izboljševanje oz. prilagajanje strukturnega modela. Interpretacija in analiza strukture.

Predstavitev in uporaba kristalografskih baz anorganskih struktur (ICSD) ter Cambridge Structural database (CSD).

Vaje: Opazovanje in prepoznavanje struktur ter ugotavljanje strukturnih podrobnosti s pomočjo računalniških programov za risanje in vizualizacijo in/ali s pomočjo gradnje tridimenzionalnih modelov.

Študenti na osnovi prejetih uklonskih podatkov monokristala s pomočjo računalniških programov rešijo fazni problem, določijo strukturo ter jo narišejo in interpretirajo. S pomočjo ICSD ali CSD preverijo, ali je struktura že znana in poiščejo sorodne strukture. V primeru novih struktur lahko pripravijo rezultate za objavo v strokovni reviji.

symmetry). Recapitulation of conceptions: Direct and reciprocal lattice, diffraction angle, indices of reflections. New concepts: Structure factor, phase and amplitude of reflections, electron density function, Laue symmetry. A solution of a phase problem in crystallography (method of a heavy atom, direct methods), refinement of structural model, structure interpretation and analysis.

Introduction and application of crystallographic databases: Inorganic crystal structure database (ICSD) and Cambridge structural database (CSD).

Tutorial: Interpretation of crystal structures by using computer programs for drawing and visualization and/or by building of three-dimensional models. Small groups of students (by the help of teacher) perform the project of crystal structure determination and interpretation on the basis of single crystal diffraction data. They search for the same or similar structure in ICSD or CSD. In the case of novel crystal structure they can prepare structural results for the publication.

### Temeljna literatura in viri / Readings:

1. W. Clegg: Crystal structure analysis: principles and practice. International Union of Crystallography, Oxford, New York : Oxford University Press, 2001, 265 pages.
2. W. Clegg: Crystal Structure Determination, Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press, 2002, 87 strani.
3. U. Mueller: Inorganic Structural Chemistry, John Wiley & Sons, pp 36-60, 93-115, 146-183 of 264.

### Cilji in kompetence:

Cilji: Razumevanje zgradbe anorganskih in organskih trdnih snovi ter strukturnih principov, ki jo določajo. Poznavanje principov uklanjanja rentgenskih žarkov na monokristalu.

Kompetence: Določitev ter interpretacija strukture urejene trdne snovi na osnovi

### Objectives and Competences:

*Objectives:* Knowledge of the structures of inorganic and organic solids and understanding of structural principles. Knowledge of principles of diffraction of X-rays on single crystals.

*Competences:* Crystal structure determination and interpretation by single crystal X-ray diffraction data.

računalniške analize uklonskih podatkov monokromatske rentgenske svetlobe na monokristalu.

#### **Predvideni študijski rezultati:**

##### Znanje in razumevanje

Razumevanje zgradbe organskih in anorganskih trdnih snovi ter strukturnih principov, ki jo določajo. Študent naj bi tudi razumel, kako je struktura kristala povezana z njegovo uklonsko sliko ter vedel, kako v praksi le-to uporabimo za določanje kristalnih struktur.

##### Uporaba

Študent pridobi osnovna znanja za strukturno analizo, se usposobi razumeti in interpretirati strukturni članek ter zna uporabljati podatke in orodja kristalografskih, strukturnih baz. Uri se v projektnem in timskem delu.

##### Refleksija

Zmožnost določitve in interpretacije eksperimentalne strukture v trdnem stanju pomaga razumeti in nudi možnost primerjave s strukturnimi rezultati drugih spektroskopskih tehnik in teoretičnih kvantno-kemijskih računov oziroma molekularne mehanike.

##### Prenosljive spretnosti

Projektno učno delo razvija samoiniciativnost študentov ter njihovo vključevanje v timsko delo. Veliko samostojnega dela z računalniškimi programi pripomore k študentovi spretnosti pri obvladovanju računalnika tudi pri drugih predmetih. Uporaba zbirk podatkov in literature, publiciranje rezultatov.

#### **Intended Learning Outcomes:**

##### Knowledge and Comprehension

Knowledge of the structures of inorganic and organic solids and understanding of structural principles. Comprehension of connection between crystal structure and its diffraction image. Crystal structure determination in practice.

##### Application

Basic knowledge of crystal structure determination. Capability of understanding and interpretation of crystallographic manuscripts. The application of tools and data from crystallographic structural databases. Training in project and team working.

##### Analysis

Capability of determination and interpretation of experimental structure of solids is helpful in understanding of structural results of spectroscopic techniques and quantum-chemical calculations or molecular mechanics.

##### Skill-transference Ability

Project work develops self-initiative of students and their comprehension in teamwork. Students get skills in working with computers. The application of databases and publishing of results.

#### **Metode poučevanja in učenja:**

#### **Learning and Teaching Methods:**

- predavanja
- praktične vaje v računalniški učilnici
- projektno delo
- individualne naloge

Lectures, tutorials in the computer classroom, project work and individual exercises.

Delež (v %) /

**Načini ocenjevanja:**

Weight (in %) **Assessment:**

Pisni izpit po uspešno opravljenem praktičnem delu.

Written exam after successfully accomplished tutorials.

Ocene: 6-10 (pozitivno) in ocene 1-5: (negativno)

- Grade: 6-10 (positive) and 1-5 (negative)

**Reference nosilca / Lecturer's references:**

1. **GOLOBIČ, Amalija\***, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, MEDEN, Anton. Solving structural problems of ceramic materials. *Croatia chemica acta*, ISSN 0011-1643, 2004, vol. 77, no. 3, str. 435-446.
2. **GOLOBIČ, Amalija\***, MALEKOVIČ, Martina, ŠEGEDIN, Primož. Catena-poly[disodium [[diformatotricopper(II)]-di-[mu]<sub>3</sub>-formato-tetra-[mu]<sub>2</sub>-formato]] : a new mode of bridging between binuclear and mononuclear formate-copper(II) units. *Acta crystallographica. C, Crystal structure communications*, ISSN 0108-2701, 2006, vol. C62, no. 3, str. m102-m104.
3. KASUNIČ, Marta, MEDEN, Anton, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, **GOLOBIČ, Amalija\***. Structure of LaTi<sub>2</sub>Al<sub>9</sub>O<sub>19</sub> and reanalysis of the crystal structure of La<sub>3</sub>Ti<sub>5</sub>Al<sub>15</sub>O<sub>37</sub>. *Acta crystallogr., B Struct. sci.*, 2011, vol. B67, no. 6, str. 455-460.