



1. PREDMET: RENTGENSKA STRUKTURNA ANALIZA

Šifra: 30-2002

Število kreditnih točk (ECTS): 12

Obseg ur: 60; predavanja 60

Program: podiplomski študij - smer Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Predmet poda osnovo uporabe rentgenske difrakcije s posebnim poudarkom na strukturnih določitvah na osnovi monokristalnih podatkov. Študenti bi naj dobili teoretske osnove rentgenske difrakcije in strukturne analize ter prikaz praktične uporabe, kot tudi možnost uporabe in omejitve difrakcijskih metod. Glede na to, da se na podiplomski študij vpisujejo študenti iz različnih usmeritev, ima predmet tudi osnove kristalografije.

3. VSEBINA

- Strukturna analiza - pomen strukture; opažanja - parametri; praškovna - monokri-stalna tehnika.
- Kristalno stanje; mreža, osnovna celica, koordinatni sistemi - singonije, Bravaisove mreže; simetrijske operacije; točkovne skupine, prostorske skupine.
- Mreža in rentgenski žarki; izvor, absorpcija in monokromatizacija rentgenskih žarkov; sipanje na elektronu, polarizacijski faktor; sipanje na atomu, atomski sipni faktor, sipanje mreže; Lauejeve enačbe, Braggova enačba, indeksi, recipročna mreža; primerjava elektronske, rentgenske in nevtronske difrakcije.
- Intenziteta uklonov, geometrijski faktorji, fizikalni faktorji; ekstinkcija; strukturni faktor, simetrija uklonov; strukturne amplitude, E-vrednosti.
- Eksperimentalne metode zbiranja podatkov, Ewaldova krogla - število podatkov; praškovne tehnike; monokristalne tehnike, štirikrožni difraktometer, detektorji.
- Določevanje strukture - leg atomov; določevanje konstant osnovne celice in prostorske skupine; fazni problem; Fourierjeva sinteza; Pattersonova funkcija; metoda težkega atoma, anormalne disperzije, izomorfne zamenjave; metoda permutacije, neenačb, simbolične addicije; statistične metode.
- Izboljševanje struktur; merila pravilnosti strukture; Fourierjeva metoda; metoda najmanjših kvadratov; težnostne funkcije; statistike napak, računalniški programi.
- Težave difrakcijskih strukturnih analiz; velike osnovne celice (anorganske - organske - proteini); perfektni - neperfektni kristali.
- Vzporedna uporabnost difrakcijskih metod; določevanje kristaliničnosti, velikosti kristalnih zrn, prednostne orientacije in tekture, radialne distribucije atomov, kvali in kvantitativna fazna analiza.
- Izven programa predavanj se z vsakim slušateljem napravi strukturna določitev nove snovi.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Predmet podaja osnove uporabe difrakcijski metod in s tem možnosti popolne karakterizacije spojin in novih snovi. S to problematiko je vezan na vse predmete, ki rabijo strukturne podatke; to so skoraj vsa področja kemije in materialov.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

OSNOVNI UČBENIK:

Giacovazzo, C. ed.: *Fundamentals of Crystallography*, IUCr, Oxford University Press, 1994.

Glusker, J. P. in Trueblood, K. N. *Crystal Structure Analysis*, Oxford University Press, 1985.

DODATNA LITERATURA:

dosegljiva preko interneta www.iucr.org

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Uspešno sodelovanje pri določitvi strukture, izdelana seminarska naloga, ustni izpit.

PRIPRAVIL: Ivan Leban in Ljubo Golič

DATUM: 03. 10. 2003