

<b>Назив предмета:</b> Напредни курс рендгенске структурне анализе кристала		
<b>Наставник или наставници:</b> Оливера Клисурић, Срђан Ракић, Стеван Јанков		
<b>Статус предмета:</b> изборни		
<b>Број ЕСПБ:</b> 15		
<b>Услов:</b> Рендгенска структурна анализа кристала		
<b>Циљ предмета</b> Оспособљавање студента за одређивање структуре кристалних супстанци и њихову карактеризацију методама дифракције рендгенског зрачења.		
<b>Исход предмета</b> Након одслушаног и научног садржаја предмета студент треба да има развијене: <ul style="list-style-type: none"> <li>– Опште способности да: <ul style="list-style-type: none"> <li>- експериментално изведе одређивање структуре монокристалних и поликристалних узорака</li> <li>- изврши валидацију и интерпретацију резултата структурне анализе</li> </ul> </li> <li>– Предметно-специфичне способности да: <ul style="list-style-type: none"> <li>- демонстрира продубљена знања о структури и симетрији кристала, дифракционим методама и дифракцији рендгенских зрака на кристалима</li> <li>- објасни везу између дифракционе слике и структуре кристала изврши карактеризацију поликристалних материјала рендгенском дифракцијом.</li> </ul> </li> </ul>		
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> Кристални системи и кристалне симетрије. Појава дифракције. Веза између дифракционе слике и размештаја молекула. Дифракција и Брагова једначина. Реципрочна решетка. Одређивање кристалног система, параметара елементарне ћелије кристала, броја стехиометријских јединица, просторне групе. Експерименталне основе дифракције рендгенског зрачења, монохроматизација зрачења, регистровање расејаног зрачења, поправке на поларизацију и апсорпцију, нормирање интензитета. Експерименталне технике за дифракциона мерења: дифракција на монокристалу, метода дифракције на прашкастом узорку, мерење на ниској и високој температури. Структурни фактор. Веза између интензитета расејаног зрачења и структурног фактора. Фазни проблем. Веза између електронске густине и структурног фактора (Фурије трансформ). Методе решавања фазног проблема (метод тешког атома, директни метод, charge flipping метод). Комплетирање и утачњавање структурног модела (метод диферентне Фурије синтезе, метод најмањих квадрата). Проблеми при утачњавању структурног модела (неодређености положаја, псеудо-симетрије, ближњење). Одређивање апсолутне конфигурације. Валидација структурног модела. Конформациона анализа (параметри набирања прстенова). Поређење кристалних структура. Кристалографски информациони фајл. Кристалографске банке података. Интерпретација резултата структурне анализе. Одређивање густине наелектрисања у молекулу. Тополошка анализа електронске густине Бадеровом квантном теоријом атома у молекулима. Анализа прашкастих узорака Ритвелдовом методом. Утачњавање структуре. Одређивање инструменталне резолуционе функције дифрактометра. Микрокристална анализа, одређивање напрезања и величине кристалита. <i>Практична настава</i> Одређивање густине кристала. Одабир, лепљење и центрирање монокристала. Рад на аутоматском дифрактометру за монокристал. Скрининг кристала. Одређивање параметара јединичне ћелије. Планирање стратегије прикупљања дифракционих података. Редукција података. Рад са рачунарским програмима за решавање и утачњавање кристалних структура. Рад са програмима за валидацију и интерпретацију података. Рад са програмима за претрагу Кембричке банке података. Презентација и дискусија резултата. Припрема прашкастих узорака. Рад на аутоматском дифрактометру за монокристал. Утачњавање структура помоћу одговарајућих софтверских пакета. Рад са базама података.		
<b>Препоручена литература</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004</li> <li>2. Љиљана Карановић, Дејан Полети: Рендгенска структурна анализа, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд 2003.</li> <li>3. W. Borchardt-Ott, Crystallography, Springer, 2011</li> <li>4. Y. Waseda, E. Matsubara, K. Shinoda, X-ray Diffraction Crystallography, Springer, 2011</li> <li>5. W. Clegg (ed.), Crystal Structure Analysis, Oxford University Press, 2009</li> <li>6. M. Ladd, R. Palmer, Structure Determination by X-ray Crystallography, Springer, 2013</li> <li>7. G.S. Girolami, X-ray Crystallography, University Science Books, 2016</li> <li>8. P. Luger, Modern X-ray Analysis on Single Crystals, 2nd ed, De Gruyter, 2013</li> <li>9. P. Muller (ed.), Crystal Structure Refinement, Oxford University Press, 2006</li> </ol>		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 5	Практична настава: 5
<b>Методe извођења наставе</b> Теоријска настава се изводи коришћењем савремених метода презентације, уз активно учешће студената, а практична настава обухвата лабораторијске вежбе и израду и презентацију семинарског рада.		
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b> Практична настава 25 поена, Семинар 45 поена (рад и одбрана), Писмени испит 30 поена		