

Назив предмета: ВИШИ КУРС РЕНДГЕНСКЕ СТРУКТУРНЕ АНАЛИЗЕ		Шифра предмета:	ДСХ-726
Наставници: др Марко В. Родић, доцент, др Оливера Р. Клисурић, ванредни професор			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 15			
Услов: Нема			
Циљ предмета Оспособљавање студента за одређивање структуре кристалних супстанци методама дифракције рендгенског зрачења.			
Исход предмета Након одслушањог и научног садржаја предмета студент ће бити у стању да: 1. демонстрира продубљена знања о структури и симетрији кристала, дифракционим методама и дифракцији рендгенских зрака на кристалима 2. експериментално изведе одређивање структуре монокристалних узорака изврши валидацију и интерпретацију резултата структурне анализе 3. користи Кембричку банку структурних података			
Садржај предмета <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 и просторне групе. Структурни фактор. Експерименталне технике за дифракциона мерења: дифракција на монокристалу, мерење на ниској и високој температури. Веза између интензитета расејаног зрачења и структурног фактора. Фазни проблем. Веза између електронске густине и структурног фактора (Фурије трансформ). Методе решавања фазног проблема. Комплетирање и утачавање структурног модела. Проблеми при утачавању структурног модела. Одређивање апсолутне конфигурације. Геометријска анализа структурног модела. Валидација структурног модела. Геометријска анализа водоничних веза и међумолекулских интеракција. Конформациона анализа набраних прстенова. Поређење кристалних структура. Анализа Хиршфелдових површина. Кристалографски информациони фајл. Кристалографске банке података. <i>Практична настава</i> Рад на аутоматском дифрактометру за монокристал. Редукција података. Рад са рачунарским програмима за решавање и утачавање кристалних структура. Рад са проблематичним структурама (кристали близанци, неуређеност положаја). Рад са програмима за геометријску интерпретацију и валидацију података. Рад са програмима за претрагу Кембричке банке података (виши ново). Презентација и дискусија резултата.			
Препоручена литература 1. Љиљана Карановић, Дејан Полети: Рендгенска структурна анализа, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд 2003. 2. С. Ракић, Д. Лазар, Ж. Цвејић, А. Капор, Основе рендгеноструктурне анализе монокристала и поликристалних прахова, Природно-математички факултет, Нови Сад, 2013. Помоћна литература: 1. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004 2. W. Borchardt-Ott, Crystallography, Springer, 2011 3. W. Clegg (ed.), Crystal Structure Analysis, Oxford University Press, 2009 4. P. Luger, Modern X-ray Analysis on Single Crystals, 2nd ed, De Gruyter, 2013 5. P. Muller (ed.), Crystal Structure Refinement, Oxford University Press, 2006			
Број часова активне наставе: 10 (75+75)		Теоријска настава: 5 (75)	Практична настава: 5 (75)
Методе извођења наставе			
Предавања, израда и одбрана пројеката на одабрану тему из градива, студијски истраживачки рад.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Урађен и одбрањен пројекат на задату тему из градива	50 поена	Усмени испит	50 поена