

Студијски програм: МАС Хемија			
Назив предмета: Рендгенска структурна анализа, МХ104			
Наставник: Марко Родић			
Статус предмета: изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: нема			
Циљ предмета Продубљивање знања о теоријским основама адиракције рендгенских зрака на кристалу, као и напредно изучавање експерименталног одређивања структуре кристала.			
Исход предмета Након одслушаног и научног садржаја предмета студен ће бити у стању да: демонстрира знања о дифракционим методама и дифракцији рендгенских зрака на кристалима; експериментално изведе експеримент на дифрактометру за монокристал; експериментално изведе одређивање и утачњавање структуре монокристала; изврши валидацију и интерпретацију резултата структурне анализе; користи Кембричку банку структурних података.			
Садржај предмета Теоријска настава Геометрија дифракције рендгенског зрачења на кристалима. Брагов закон. Реципрочна решетка и Евалдова конструкција. Расејање са атома и јединичне ћелије. Веза између електронске густине и структурног фактора. Фазни проблем. Генерисање и карактеристике рендгенског зрачења. Четворо кружни дифрактометар за монокристал. Детекција рендгенског зрачења. Стратегија прикупљања дифракционих података. Одређивање параметара јединичне ћелије и кристалног система. Интеграција и редукција податка. Одређивање просторне групе. Методе решавања фазног проблема. Комплетирање и утачњавање параметара структурног модела. Геометријска анализа структурног модела. Валидација структурног модела. Интерпретација резултата структурне анализе. Одређивање апсолутне структуре и конфигурације. Кристалографски информациони фајл. Кристалографске банке података. Презентација резултата. Практична настава Одређивање густине кристала. Одабир, лепљење и центрирање монокристала. Рад на аутоматском дифрактометру за монокристал. 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 (основни ниво). Презентација и дискусија резултата.			
Литература 1. С. Ракић, Д. Лазар, Ж. Цвејић, А. Капор, Основе рендгеноструктурне анализе монокристала и поликристалних прахова, Природно-математички факултет, Нови Сад, 2013. 2. Љ. Карановић, Д. Полети, Рендгенска структурна анализа, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд, 2003. 3. Б. Прелесник, Елементи кристалографије и рендгеноструктурне анализе, скрипта за студенте Хемијског факултета, Београд, 1988. Помоћна литература 1. W. Clegg, X-ray Crystallography, 2nd ed., Oxford University Press, 2015. 2. P. Müller (Ed.), Crystal Structure Refinement, Oxford University Press, 2006			
Број часова активног наставе 5 (75)	Теоријска настава: 3	Практична настава: 2	
Методи извођења наставе Предавања, вежбе, рад на задацима, дискусије и семинарски радови.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	писмени испит	20
практична настава	20	усмени испит	25
семинари	30		