

Röntgen-krisztallográfia

Cím: Röntgen-krisztallográfia

Előadók: Harmat Veronika, Brockhauser Sándor

Szakok: PhD (Kémia Doktori Iskola) ; MSc (vegyész, gyógyszerész)

Ütemterv: 2 óra/hét

Leírás:

A krisztallográfia száz éves története során a tudomány széles területein használt eszközévé vált a kristályos anyagok szerkezetének és tulajdonságainak mélyebb megismerésének. Felhasználási területei az anyagtudományi alkalmazásoktól vegyületek felfedezésén és tervezésén keresztül az élő szervezetek makromolekulái funkciójának tanulmányozásáig - a biológia mögötti kémia megértéséig terjednek. A módszer tudományra gyakorolt hatásának nagyságát mutatja a krisztallográfiával kapcsolatos Nobel díjak nagy száma is (28). 2014. az ENSZ döntésének értelmében a Krisztallográfia Nemzetközi Éve. A kurzuson a kismolekulás és makromolekulás krisztallográfia módszereit tárgyaljuk.

Témakörök:

- Kristályszimmetria, tércsoportok
- A reciproktér leírása és matematikai alapjai
- Kristályosítás
- A diffrakciós mintázat. Oszcillációs adatgyűjtési módszer
- A fázisprobléma megoldása
- Direkt módszerek
- Patterson függvény
- Molekuláris helyettesítés
- Izomorf helyettesítés, anomális szórás módszere
- Modellépítés
- A szerkezet finomítása és validálása

Ajánlott irodalom:

<http://harmatv.web.elte.hu/Rontgendiffrakcio-jegyzet/Rontgendiffrakc-szerk-vizsg.pdf>