

Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat

A kurzus részletes tematikája:

1. hét: A röntgensugárzás. Tulajdonságai és gyakorlati alkalmazások. A diffrakciós módszerek általában. A röntgendiffrakció és egyéb szerkezet-meghatározási módszerek. Fourier transzformáció.

2. hét: Szimmetria. Szilárd anyagok, kristályok, egykristályok, kristályrács, elemi cella, Miller indexek, szimmetria szimbólumok, szimmetria osztályok, krisztallográfiai szimmetriajelölés, szisztematikus hiányok, reciprok tér.

3. hét: Kristályok. Egykristályok növelése. Termodinamikai és kinetikai megfontolások, gyakorlati tanácsok.

4. hét: Módszerek. A röntgendiffrakciós módszerek fejlődése, detektorok típusai, fotográfiai módszerek. Négykörös egykristály diffraktométerek, térbeli detektálás.

5. hét: A szerkezet-meghatározás menete. A szerkezet-meghatározás lépései. Elemi cella, adatgyűjtés, adat/paraméter arány, a szerkezet megoldása és finomítása. Az abszolút konfiguráció és meghatározása röntgendiffrakcióval.

6. hét: Publikálás. A röntgendiffrakciós eredmények publikálása, elektronikus publikálás. A CIF. Az eredmények validálása. Jellemző kötősszögek és kötéstávolságok. Az atomok hőmozgásának hatásai. Statisztikai jellemzők.

7. hét: Számítógépes programok. A szerkezet-meghatározásban használatos számítógépes programok főbb jellemzői, APEX, WinGX, ShelX, OLEX.

8. hét: Gyakorlati foglalkozás. A CSD adatbázis megismerése, egy vegyületcsaládba tartozó szerkezetek lekérdezése, néhány szerkezet összehasonlító elemzése. Az ORTEP és a MERCURY program használata.

9. hét: Polimorfizmus. Jelentősége a gyógyszergyártásban. Szerkezeti, szabadalmi és szabályozási kérdések.

10. hét: A pordiffrakció alapjai és alkalmazási lehetőségei a gyógyszeriparban. A neutron diffrakció elve és alkalmazásai. SAXS, EXAFS módszerek.

11. hét: A fehérjekristallográfia alapjai. A fázisprobléma megoldásának lehetőségei fehérjék esetén. Fehérje szerkezetek finomítása. A Ramachandran ábrázolás. Fehérjék működése.

12. hét: Gyakorlati foglalkozás. Egy szerkezet-meghatározás elvégzése Bruker D8 Venture diffraktométer és az APEX3 vagy WINGX programcsomagok alkalmazásával

Ajánlott irodalom:

Bényei Attila, Harmat Veronika (2013) Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat (jegyzet)

J.P. Glusker, K.N. Trueblood: Crystal Structure Analysis: a Primer (IUCR Texts on Crystallography)

<http://www.iucr.org/education/pamphlets>

E-learning anyagok, előadás jegyzetek