

Prirodoslovni muzej

Ljubljana, 4. decembra 2014.

KRISTALI IN MI

IVAN LEBAN, (D.Phil, York)
upokojeni profesor UL (po ZUJF-u),
kemik, kristalograf, direktor
ivanleban47@gmail.com
@ ivanleban

Ivan Leban



67 let 42 let delovne dobe

<http://SICRIS.IZUM.SI> -

Lestvičenje

Naši v "WEB OF SCIENCE"

med 8803 vsemi slov.

znanstveniki sem na 24.

mestu, med KEMIJI sem 5.

od 518 - "po št. člankov"

KEMIJA

1. Akad. B. Stanovnik

2. Akad. M. Tišler - upokojen

3. M. Zupan - upokojen

4. B. Orel - upokojen

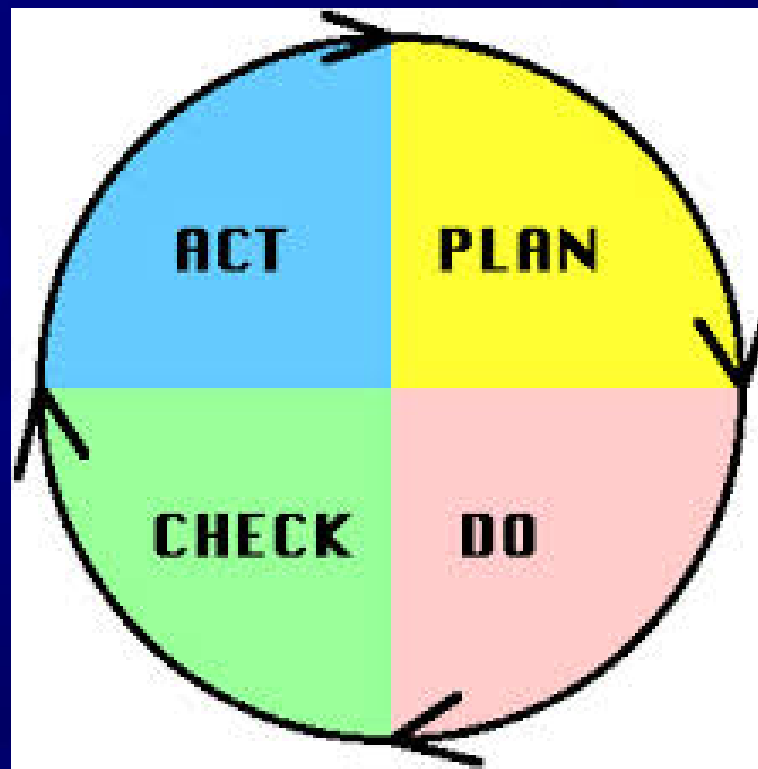
5. I. Leban – nič več v znanosti

FREELANCE JOURNALIST in pišem za DNEVNIK

Delam tudi poskuse na TVS-1, zastonj pridem tudi na šole

Z dr. A. Godcem 2 učbenika, Twitter ...

S čim se sedaj ukvarjam - KROG KAKOVOSTI



MOJI ZNANSTVENI DOSEŽKI

prof.dr. Boštjan KOBÉ, Univ. of Queensland

doc.dr. Nina Lah, UL FKKT

S sodelavci smo določili kristalne strukture:

vitamin D₂

natrijevega ciklamat – oslajevalec

kokristala flukonazola- antimikotik

ponovno artemizina - antimalarik

klindamicin fosfat - antibiotik

derivata omeprazol - zdravilo

strukture derivatov ciprofloksacina

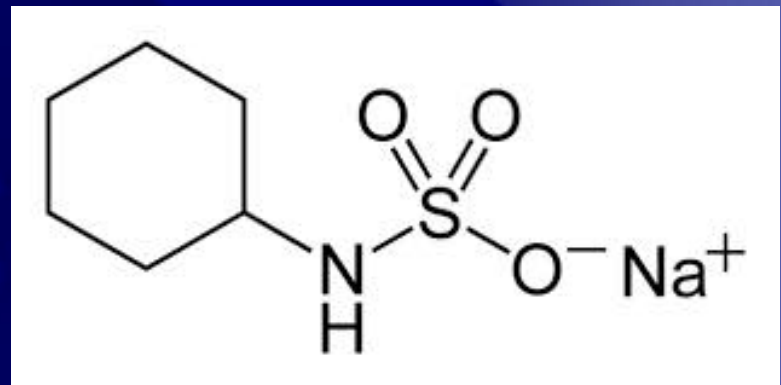
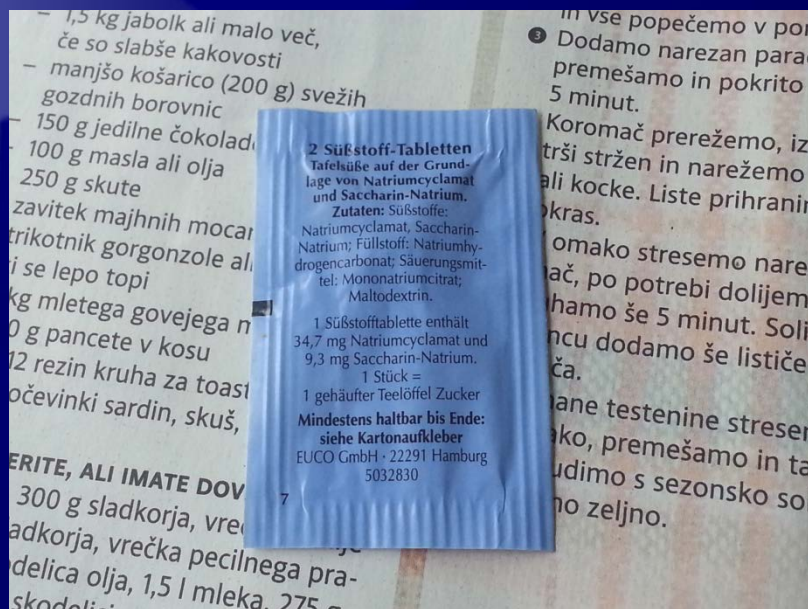
in norfloksacina (kinoloni)

Cu spojine za zaščito lesa itn.

Natrijev ciklamat – umetni oslajevalec

Acta Crystallogr B. 2007 Jun;63(Pt 3):418-25. May 16.

Structures of artificial sweeteners - cyclamic acid and sodium cyclamate with other cyclamates.
Leban I¹, Rudan-Tasic D, Lah N, Klofutar C.



Vitamin D2 - ergocalciferol vitamin topen v maščobah – ribje olje

Acta Cryst. (1976). B32, 2374

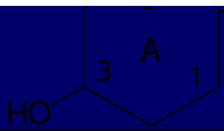
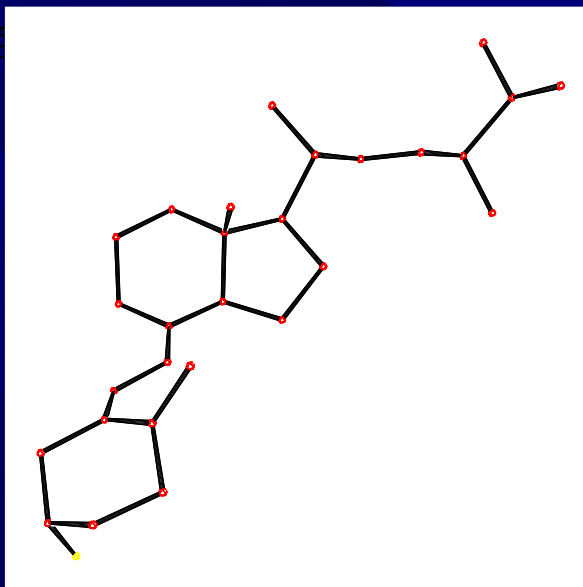
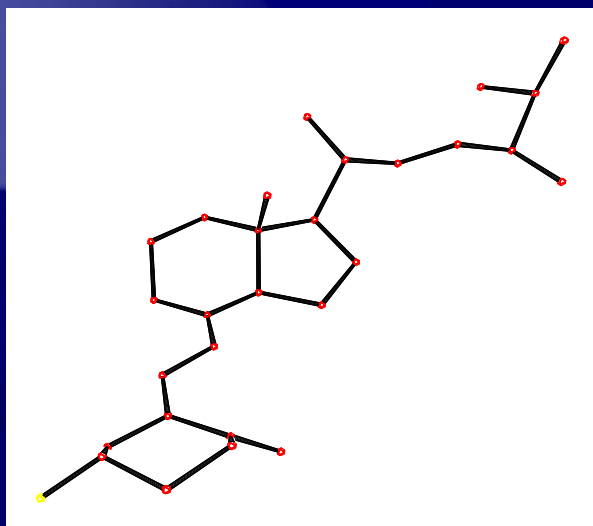
The Crystal and Molecular Structure of Ergocalciferol (Vitamin D₂)

BY S. E. HULL,* I. LEBAN,† P. MAIN, P. S. WHITE‡ AND M. M. WOOLFSON

Department of Physics, University of York, Heslington, York YO1 5DD, England

(Received 6 January 1976; accepted 9 February 1976)

The orthorhombic form of ergocalciferol (C₂₈H₄₄O) crystallizes in space group *P*2₁2₁2₁ with *Z* = 8, *a* = 21·695 (10), *b* = 6·857 (4), *c* = 35·320 (15) Å. Data were collected on a four-circle diffractometer and the structure was solved by the successive application of two novel direct-method techniques. Refinement resulted in an *R* of 9·5%. The two molecules in the asymmetric unit differ in the conformations of the rings *A* and *D*, whilst the conformations of the rings *C* and the side chains are similar. The steroid molecules are joined by hydrogen bonds (O–H···O) which form infinite helices in the direction of *b*.



NEKAJ O MOJIH UČITELJIH KEMIJE

Moji učitelji :

prof. Oprešnikova

prof. Detela (“Cvitra”) in

prof. B.S. Brčić, prof. F. Lazarini,

prof. Grafenauer, prof. J. Šiftar,

prof. J. Brenčič, prof. L. Golič

in

prof.dr. M.M. Woolfson FRS, dr. P. Main

(University of York)

NAJPREJ NEKAJ POUČNIH NASVETOV !

a) 3,5 milijarde EUR smo davkoplačevalci prostovoljno dali bankam - socialna kapica bo naredila 200 milijonov veliko luknjo.

Zakaj nismo dosledni - zakaj ne pišemo?

3500 milijonov in 200 milijonov ali pa 3,5 milijarde in 0,2 milijarde

b) Zakaj je toliko kemikov končalo v politiki?

Pa še, kaj pomeni povečanje z 0,02 na 0,04 % .

c) Ali pa, kaj pomeni “negativna rast BDP”?

Ali pa “dezinvesticija” ?

Ali pa “strateški partner”?

Ali “javno-zasebno-partnerstvo”?

ZNANOST IN POLITIKA

'When Prime minister Gladstone met Michael Faraday, he asked him whether his work on electricity would be of any use. "Yes, sir", remarked Faraday with prediction. "One day you will tax it."

Angela Merkel

Margareth Thatcher

Gianni de Michelis

John Deutsch

Chaim Weizmann

Boris Frlec

Aleksandra Kornhauser

IN ŠE NEKAJ O ŠTEVILKAH !

Kaj pomeni številka 4,13 ?

Torej:

4,13 nekje med 4,12 in 4,14

4,1 nekje med 4,0 in 4,2

4 nekje med 3 in 5

Sestanek ob 13.00h ali pa ob 13h ?

Na univerzi je to ponavadi 13.15h.

Starejši najprej pogledamo malo v zgodovino (tu se lahko veliko naučimo) – pomen razvoja znanosti!

ISAAC NEWTON (1642-1762) fizik in matematik:

If I have seen further it is by standing on the shoulders of giants.

**J. Kepler, H. Davy (sta bila tudi pri nas!)
Če imamo Kulturni turizem, bi lahko imeli tudi Znanstveni turizem**

Johannes KEPLER (1571-1630) **astrolog, astronom in matematik.**

**Kepler je privzel Kopernikov
heliocentričen sistem.**

**Leta 1594 do 1600 je bil v Gradcu profesor
astronomije in matematike,
zaradi protestantske vere je bil izgnan v
dvorec Kastelišče, ostanke dvorca lahko
najdemo na Petanjcih**

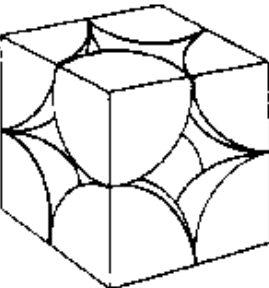
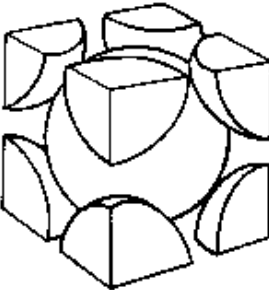
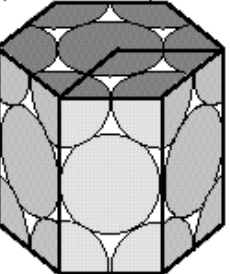
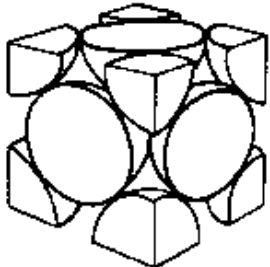
V Prekmurju je prebival le nekaj mesecev, se je "pokesal" in spreobrnil nazaj v katoliško vero. Vrnil se je v Gradec.

Leta 1600 je postal pomočnik Tycho Braheja (1546-1601) v Pragi. (danski astronom – otok Ven – observatorij 1 % BDP - leta 1572 je odkril supernovo SN 1572 - Kasiopeja)

Po Brahejevi smrti leta 1601 je postal cesarski dvorni astronom in kraljevi matematik Rudolfa II.

S čim se je ukvarjal Johannes KEPLER

- zasedenost prostora s kroglicami:

Type of Packing	Packing Efficiency	Coordination Number
Simple cubic (sc)		
	52%	6
Body-centered cubic (bcc)		
	68%	8
Hexagonal close-packed (hcp)	74%	12
Cubic close-packed (ccp or fcc)	74%	12
		
		

**Leto
1611**

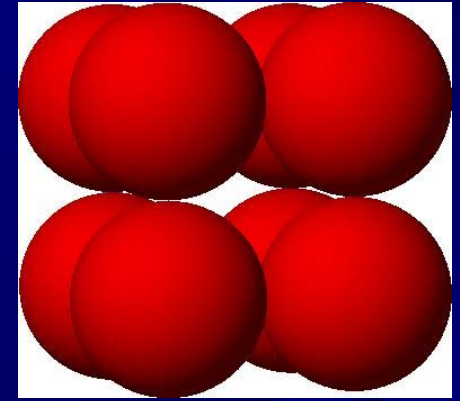
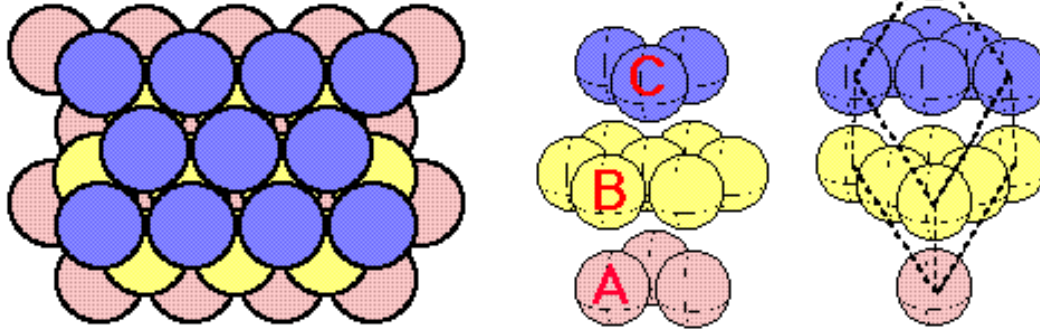
Primitivni sklad 1

Prostorsko centrirani sklad 2

Gosta sklada h in k 4

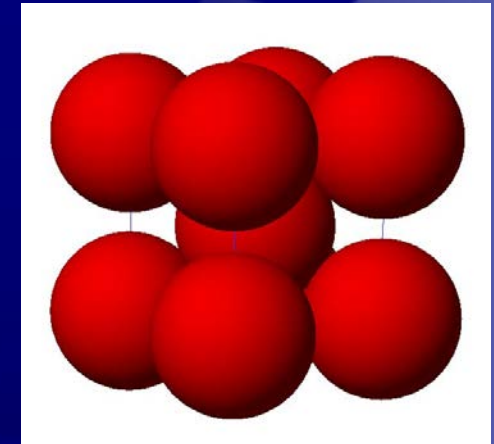
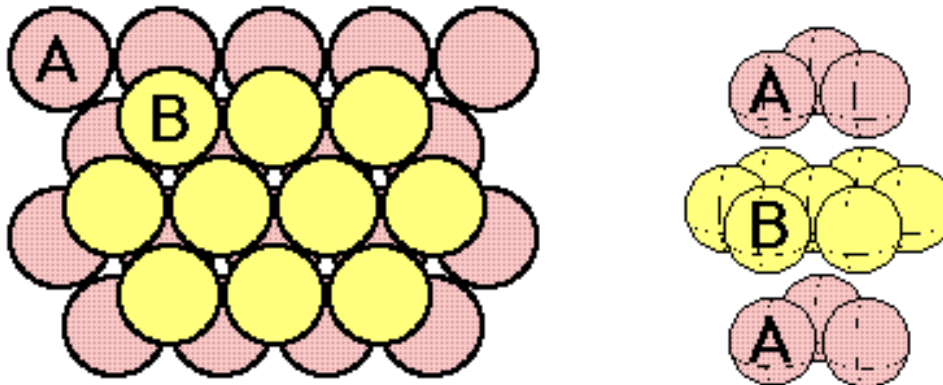
To so skladi, ki jih poznamo pri kovinah.

Cubic close packing (ABCABC...)



52 %

Hexagonal close packing (ABABAB...)



68 %

74 %

KEPLERJEVO VPRAŠANJE - iz leta 1611

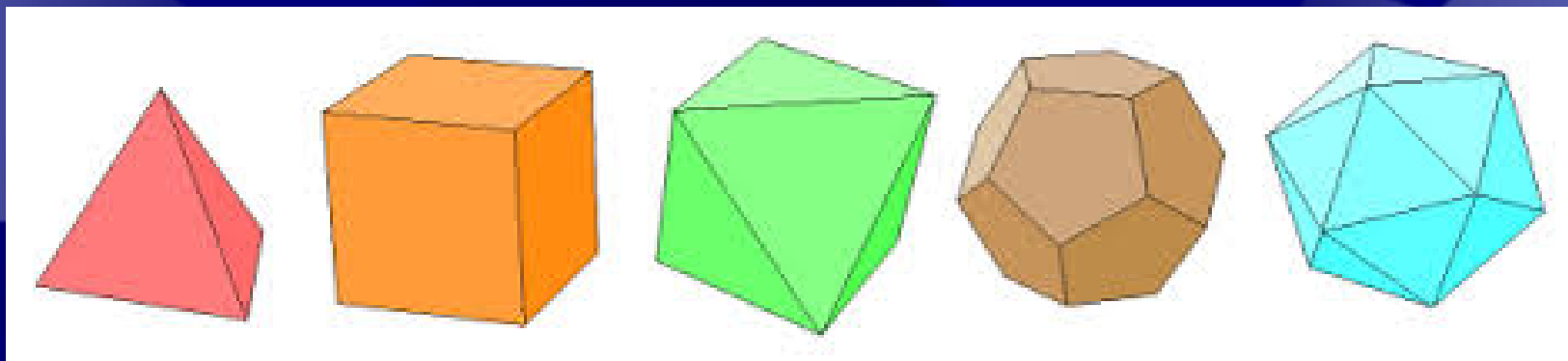
Kako se najučinkoviteje enake kroglice zložijo v veliko škatlo? Domneval je, da je to - hcp ali ccp sklad.

Verjetni dokaz te Keplerjeve domneve (99 %) je podal T.C. Hales, profesor matematike na Univerzi v Pittsburghu leta 1998 (dokaz je dan na 250 straneh?). Leta 2003 pa se je lotil strogega dokaza - (to naj bi trajalo 20 let)

PLATONOVA TELESA

tetraeder, oktaeder, kocka, dodekaeder, ikozaeder

Znana že iz antike, pravilni polieder, v vsakem oglišču se stika enako število enakih ploskev.



Kepler jih je uporabil za svoj plenatarni model.

S podobnim problemom kroglic sta se ukvarjala tudi:

Sir Walter Raleigh (1552–1618), ki je postavil podoben problem **T. Harriotu** (1560-1621) – matematik in astronom – pomagal pri navigaciji) o smiselni

RAZPOREDITVI TOPOVSKIH KROGEL na ladijskih krovih. (lep primer aplikativne matematike). Harriot je objavil delo o različnih vzorcih pakiranja krogel leta 1591 in bil eden od pionirjev atomske teorije **Sir W. Raleigh** in **Sir F. Drake** (dva pirata)

KEPLERJEVE KONJEKTURE

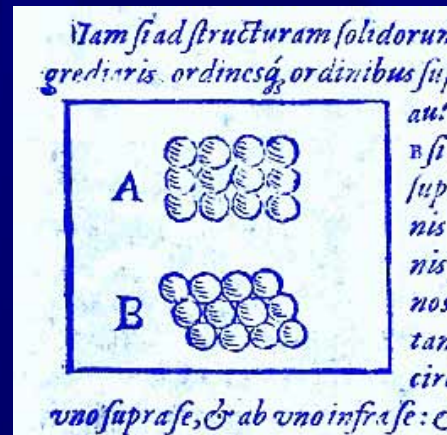
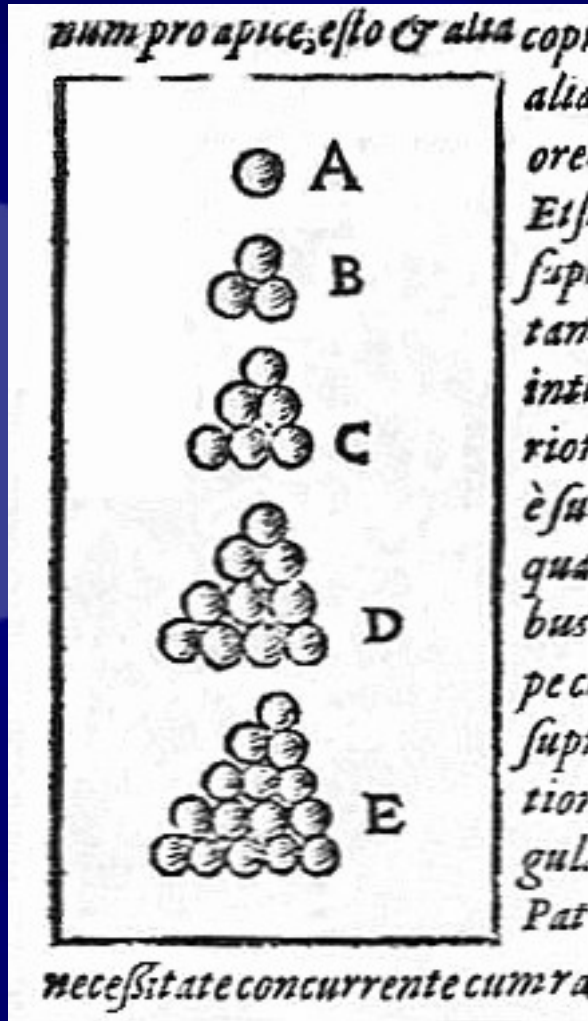
(konjektura - predlog, ki ni dokazan)

Kepler se je ukvarjal tudi s **KRISTALI**. Poskušal je razložiti **heksagonalno** obliko snežink.

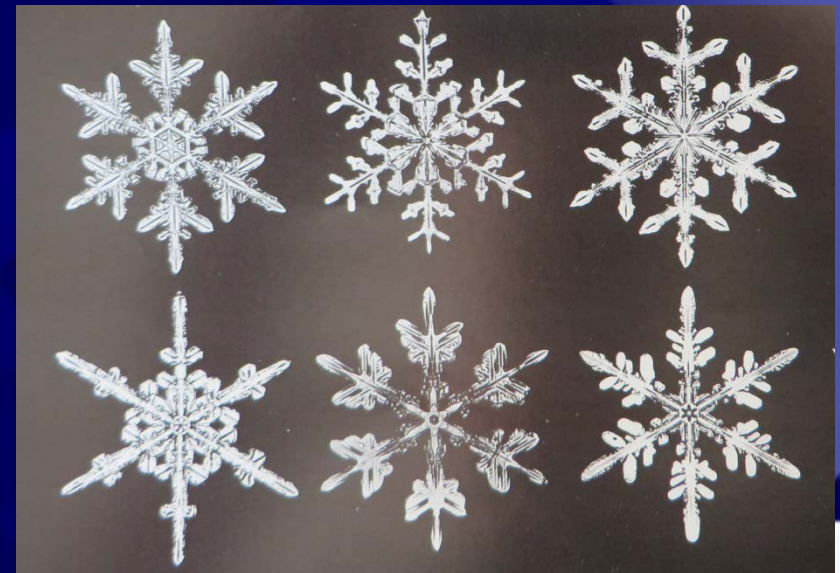
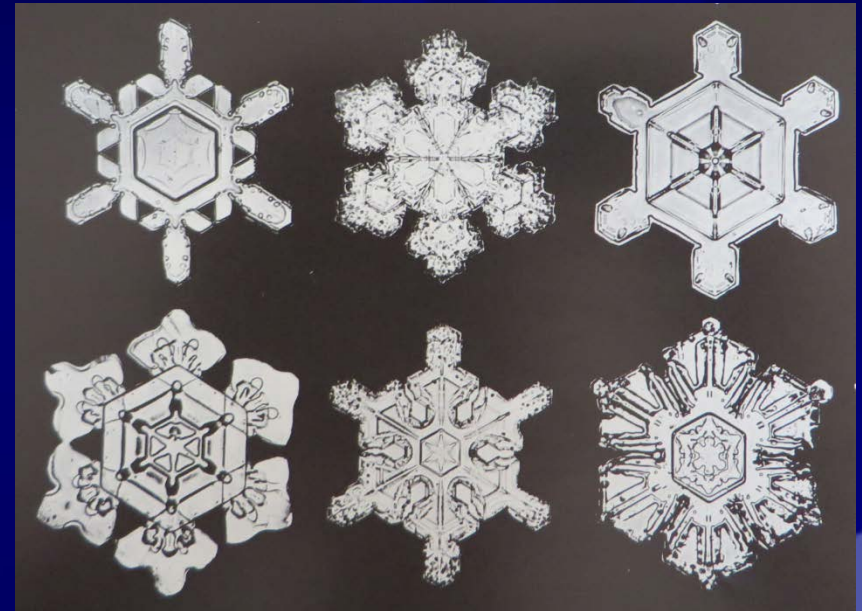
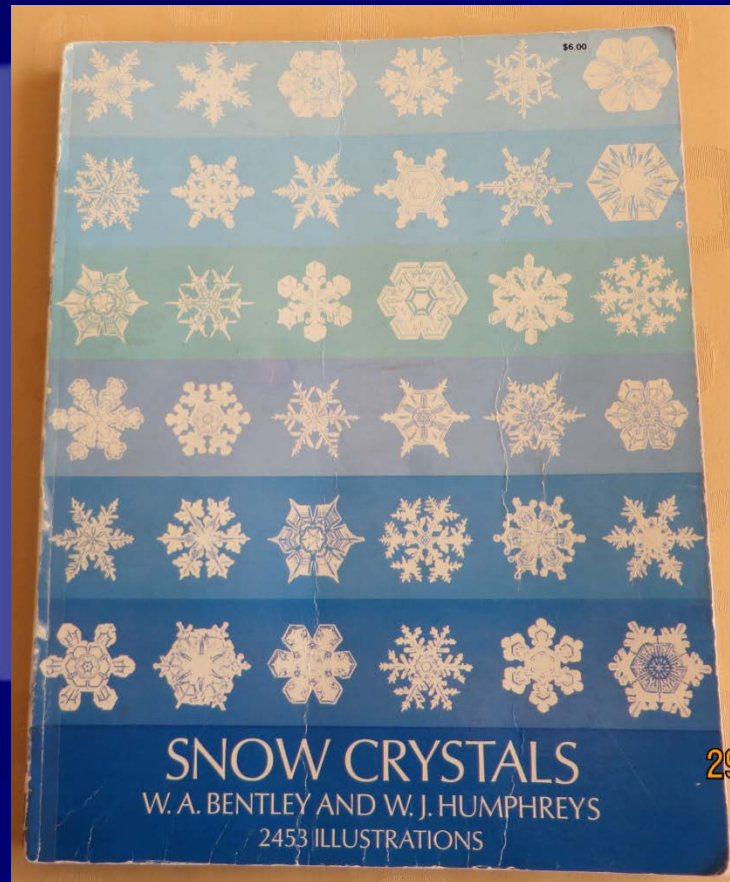
Že leta 1611 je predpostavil, da je **ZUNANJA OBLIKA** snežink posledica **pravilne notranje ureditve** nekih »majhnih delcev«, ki so kroglaste oblike.

Naj spomnimo, da je bila Daltonova atomska teorija postavljena 200 let kasneje.(1810).

Keplerjeve konjekture (domneve):



Nekaj posnetkov snežink



LETO KRISTALOGRAFIJE

Leto 2014 sta UNESCO in Združeni narodi
proglasila za

Mednarodno leto kristalografije 2014.

Astronomija in kristalografija sta bili med prvimi vedami, ki sta uporabljali **znanstvene metode**, kot jih poznamo sedaj.

Znanstvena metoda je namreč skupen naziv za tehnike preučevanja pojavov, pridobivanja novega znanja ali popravljanja in povezave že pridobljenega znanja. (opazovanje, meritve, ponovitev..)

Pošta Slovenija je s Pošto Belgije izdala dve znamki z motivom snežink ob Mednarodnem letu kristalografije – značilna heksagonalna simetrija



Nekatere povezave:

<http://www.iycr2014.org/>



United Nations
Educational, Scientific and
Cultural Organization



International
Union of
Crystallography

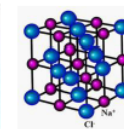
Partners for the International Year of Crystallography 2014

Brošura:

http://www.iycr2014.org/___data/assets/pdf_file/0003/87663/Slovenian_translation_cropped.pdf



Kaj je kristalografija?



Kuhinjske soli, NaCl, je kristal. Zelo čista svinčevina je posledica prav posebne, pravilne porazdelitve nastajajočih in kloridnih ionov.

Kristale lahko najdemo povsod v naravi. Kristali so minerali v pestrih skalnih formacijah (na primer kot dragi kamni, grafit). Toda kristali so tudi drugje, na primer sladkor, led in zrna kuhinjske soli. Že od antičnih časov je učejajke pritegnila lepota kristalov, njihova simetrična oblika in njihova različna obarvanost.

• Prvi kristalografi so predvsem proučevali pravilno zunanjo geometrijsko obliko kristalov.

V začetku 20. stoletja so znanstveniki predvidevali, da bi z rentgenskimi žarki lahko "videli" notranjo strukturo snovi. To je bil tudi začetek sodobne strukturne kristalografije. Rentgenski žarki so bili odkriti leta 1895. So človeškem očem nevidni žarki, vendar ko zadenejo predmete, se na atomih sipajo. Ker so v kristalu pravilno razporejeni atomi, ioni ali molekule v vseh treh razsežnostih, se žarki sipajo samo v določenih smereh in z različno jakostjo.

Stari indijski zapisi opisujejo diamante kot orožje boga Indra, ki je bil bog bojevnikov. Ker ima diamant veliko trdoto in velik lomni količnik, uklanja svetlobo in je bilo starodavno indijsko poimenovanje za diamant povezano z besedama grom in strela. Spisi iz tretjega stoletja pred našim štetjem omenjajo "oktaedrično kristalno strukturo" diamanta. In že v 4. stoletju pred našim štetjem so Indijci diamante uporabljali za konice svetrov. Diamant (kemijsko je to ogljik) je lep primer zelo enostavne in zelo simetrične kristalne strukture. Mnogo znane diamante, kot na primer Hope diamant in Koh-i-Noor so izkoplani v rudniku Golconda v Deccanu, in Koh-i-Noor je bil v kroni vladarja Jehangira. Jakobov diamant je v zbirki Nizam v Hyderabadu. Diamant Cullinan je do danes največji na svetu izkopani diamant. Izkopan je bil leta 1905 v Južni Afriki. Neobdelan je tehtal 3.106 karatov ali 621,2 grama.



Koh-i-Noor Diamond

Kristalografija danes!



KRISTALI



1 karat je 200 mg

Že spet nekaj zgodovine

Dalton	Atom	1810
Avogadro	Molekula	1811
Pluecker	Elektron	1859
Goldstein	Proton	1886
Arrhenius	Ions	1887
<u>Roentgen</u>	<u>X-rays</u>	<u>1895</u>
Chadwick	Neutron	1932

Uklon rentgenskih žarkov - metode

Prvi poskus	1912
Prva struktura NaCl, KCl	1913
Holesterol jodid	1945
Optične izomere	1950
Penicilin	1952 (1 leto)
DNK	1953
Vitamin B12	1957
Mioglobin	1962
Direktne metode	1964

(20 min)

Razvoj računalništva

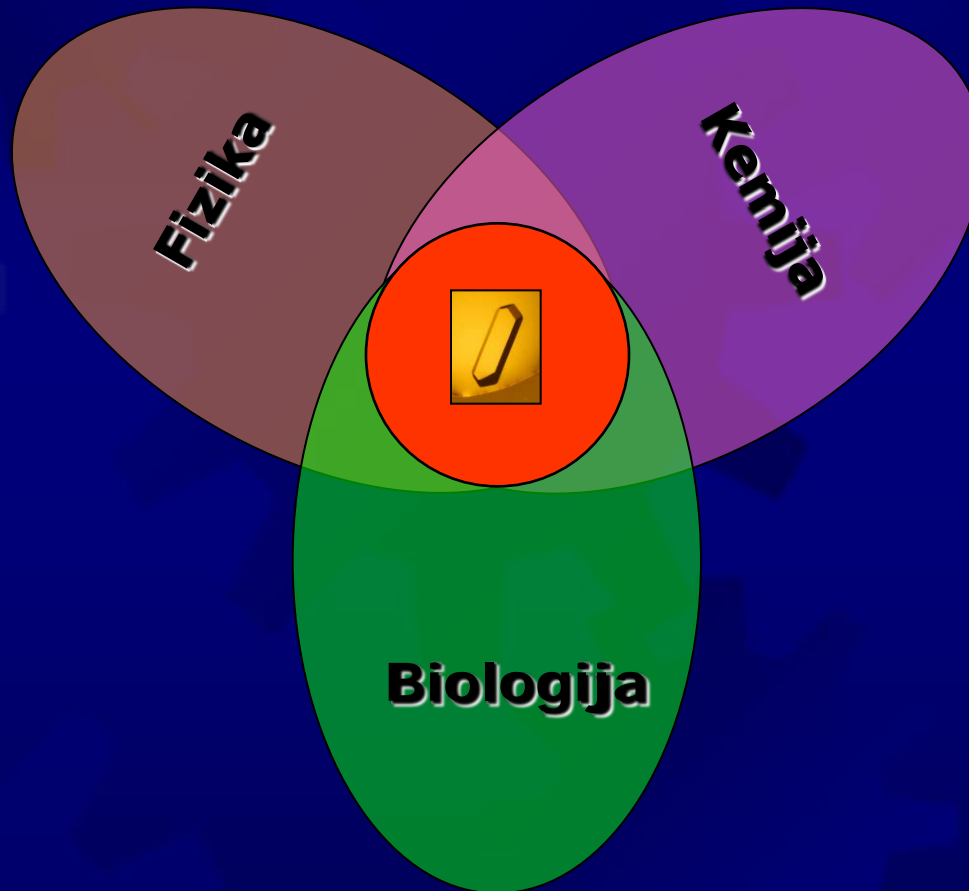
Jaquard	1752-1834	statve
Babbage	1792-1871	mehanični
Mark 1 UMIST	1948	elektronke
diode, tranzistor, silicijev čip		

luknjan trak, papirne kartice, magnetni trak, floppy, disk, cd, usb...

kalkulator	1970	HP
Sinclair Spectrum	1980	
PC	1985	
mobilna telefonija	1999	

KRISTALOGRAFIJA

- zelo interdisciplinarno področje
- tudi matematika in računalništvo



RENTGENSKA KRISTALOGRAFIJA

SVETLOBA: red velikosti atomov - X-ray

PREDMET: kristal, prah, vlakno

REZULTAT: simetrija, osnovna celica,
koordinate atomov
gre za časovno in prostorsko povprečje.

Razdalje, koti, torzijski koti, kiralnost, tipični
rezultat: C-C razdalja 1,543(2) Ang

NOVA DEFINICIJA ZA KRISTAL (1992)

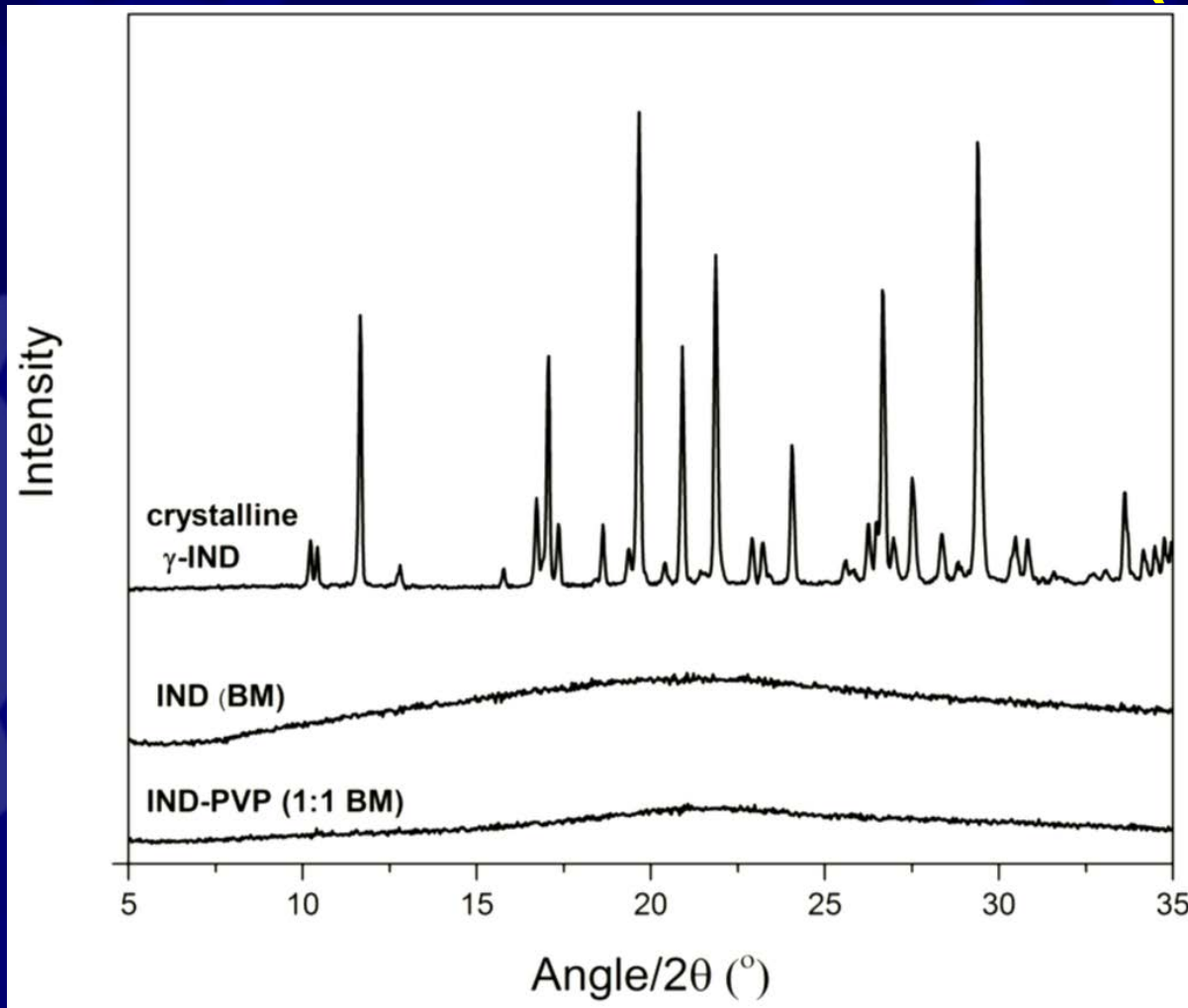
KRISTAL je snov, ki da pri difrakciji ostro difrakcijsko sliko. Večina difrakcijske intenzitete je tedaj v ostrih Braggovih vrhovih.

- **AMORFNA SNOV** (steklo)

- **PERIODIČNI KRISTALI** (230 simetrijskih prostorskih skupin, osnovna celica v 7 singonijah se periodično ponavlja)

- **APERIODIČNI KRISTALI** (kvazikristali)

NOVA DEFINICIJA ZA KRISTAL (1992)

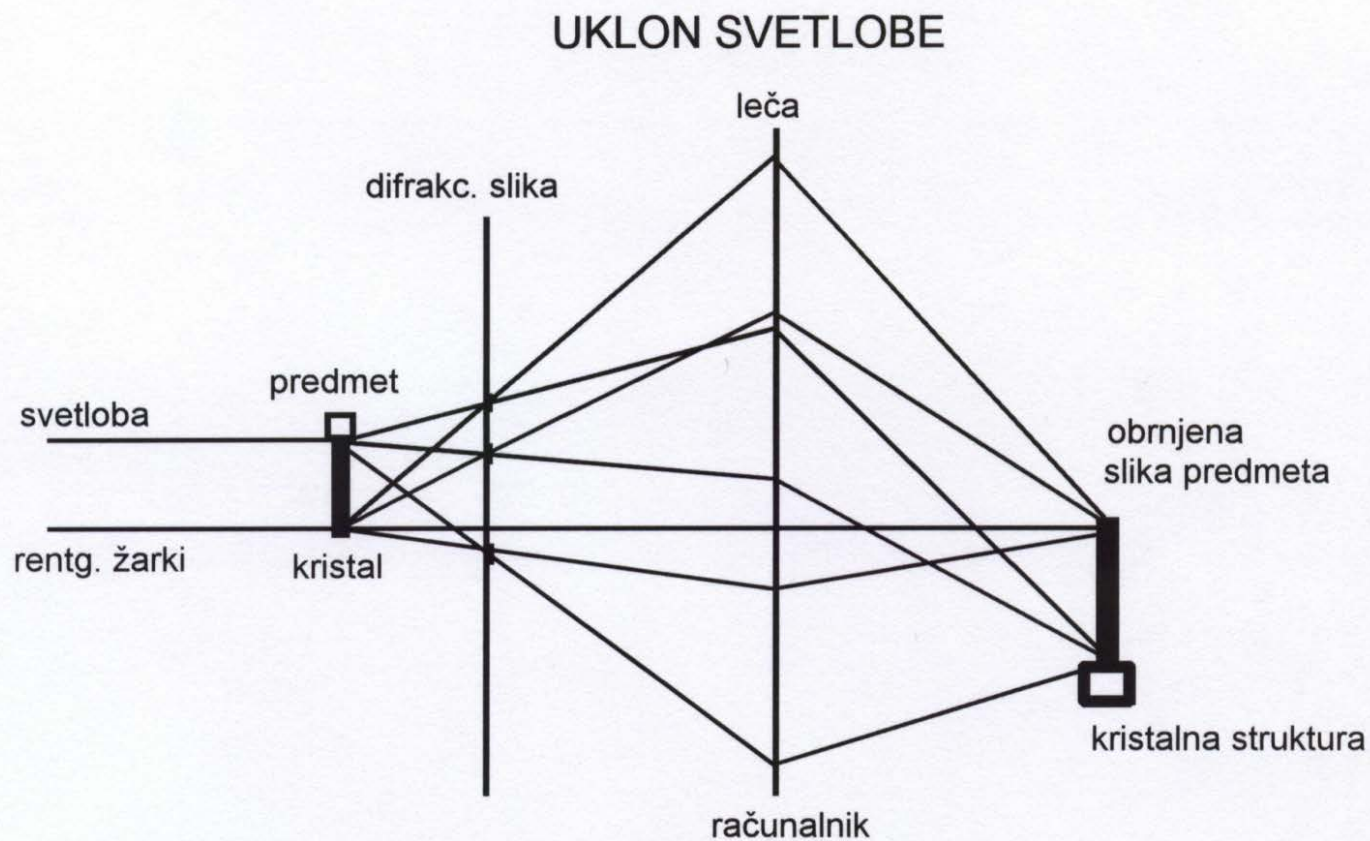


The Influence of Pressure on the Intrinsic Dissolution Rate of Amorphous Indomethacin

Pharmaceutics **2014**, 6(3), 481-493;

K. Löbmann *, K. Flouda , D. Qiu , T. Tsolakou ,
W. Wang in T. Rades

Uklon rentgenskih žarkov



UKLON RENTGENSKIH ŽARKOV

Uklon rentgenskih žarkov - formule

dobimo

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F_{hkl}| \cos 2\pi(hx + ky + lz) - \alpha'_{hkl}$$

Torej osnovne formule:

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)}$$

$$F_{hkl} = A_{hkl} + i B_{hkl}$$

$$A_{hkl} = \sum_j f_j \cos 2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)$$

$$B_{hkl} = \sum_j f_j \sin 2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)$$

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

$$F_{hkl} = |F_{hkl}| e^{i\phi_{hkl}}$$

$$|F_{hkl}| = \sqrt{A_{hkl}^2 + B_{hkl}^2}$$

$$\alpha'_{hkl} = \arctg^{-1} \left(\frac{B_{hkl}}{A_{hkl}} \right)$$

delito - gostota

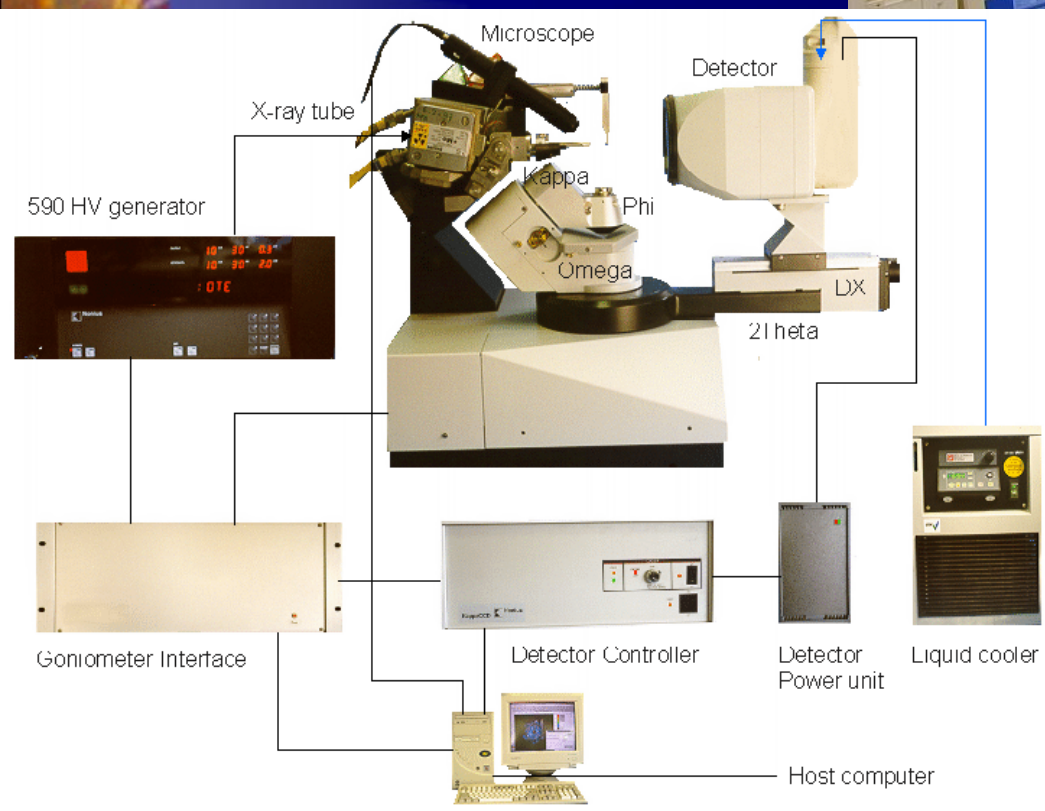
v točki x, y, z ,
$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l F_{hkl} e^{-2\pi i (hx + ky + lz)}$$

12/07/2014

vpeljava se geometrijskih faktorjev

atomi so razporejeni v prostoru, ki je opisani na

Kappa CCD difraktometer

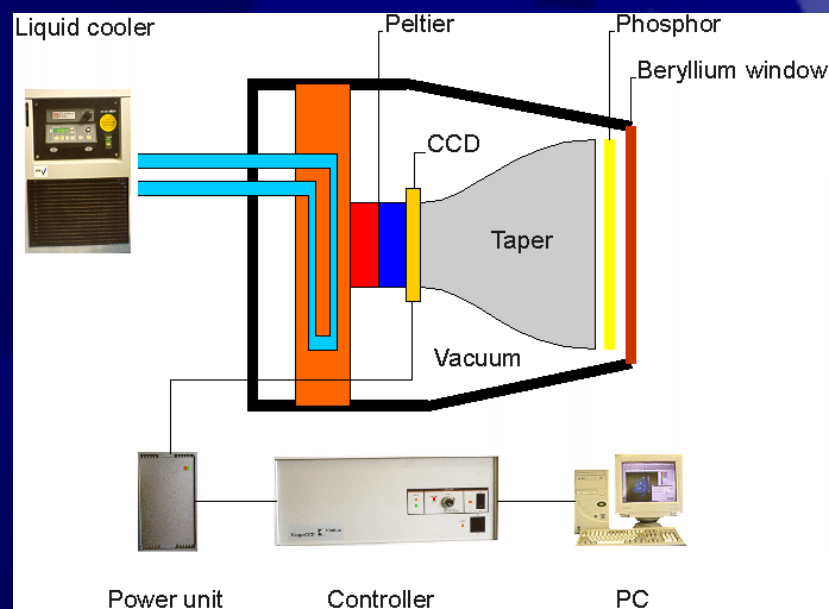


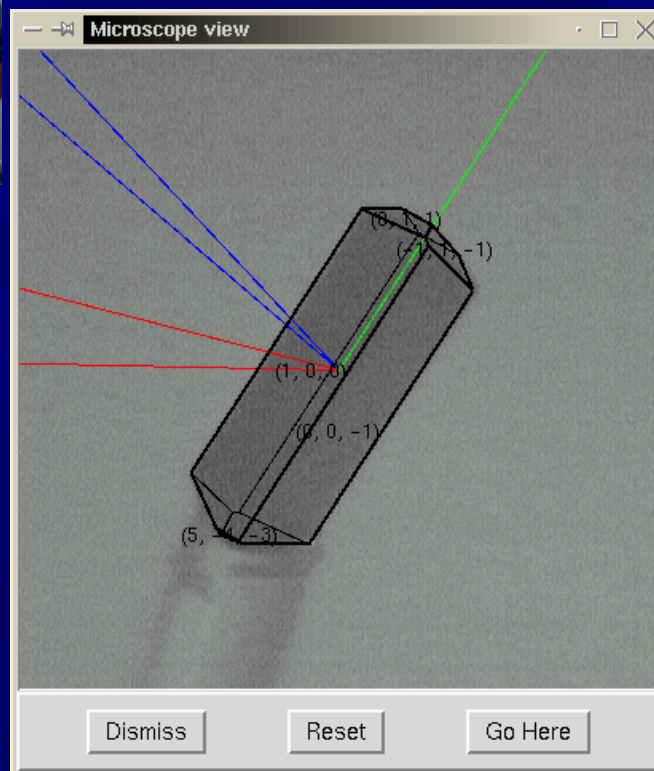
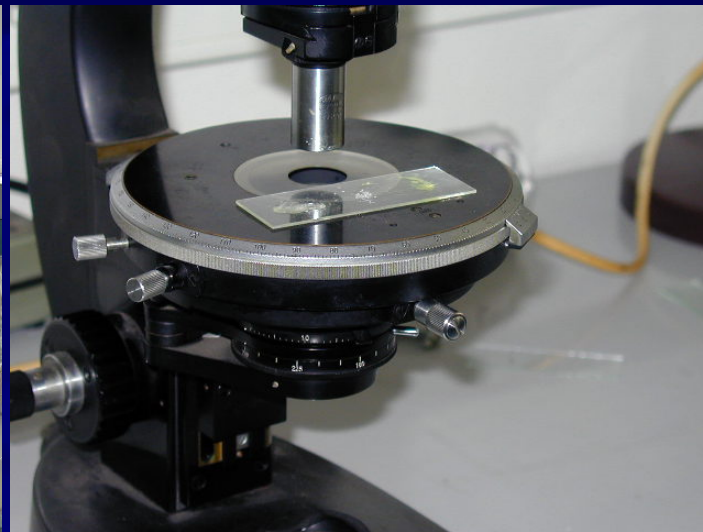
Bruker-Nonius
Bruker-Nonius 2001

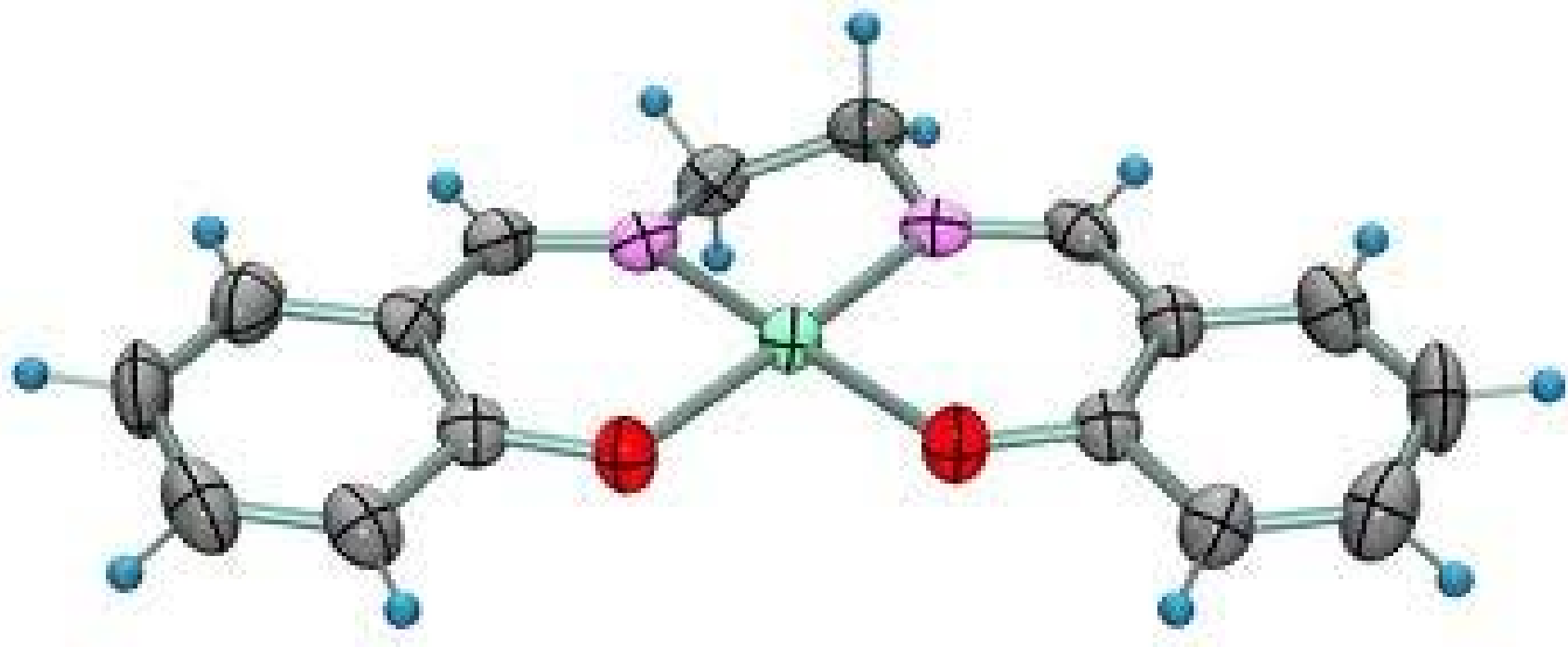


CCD detector

CCD detektor







Myoglobin

Myoglobin was the first protein visualized in three dimensions at the atomic level by X-ray crystallography, laying the foundation for a new era of biological understanding. For this discovery, John Kendrew and Max Perutz shared the 1962 Nobel Prize in Chemistry. In 1959 Max Perutz, whose methodological work had been crucial to Kendrew's success, determined the structure of hemoglobin, a protein closely related to myoglobin and the second to be analyzed by X-ray crystallography.

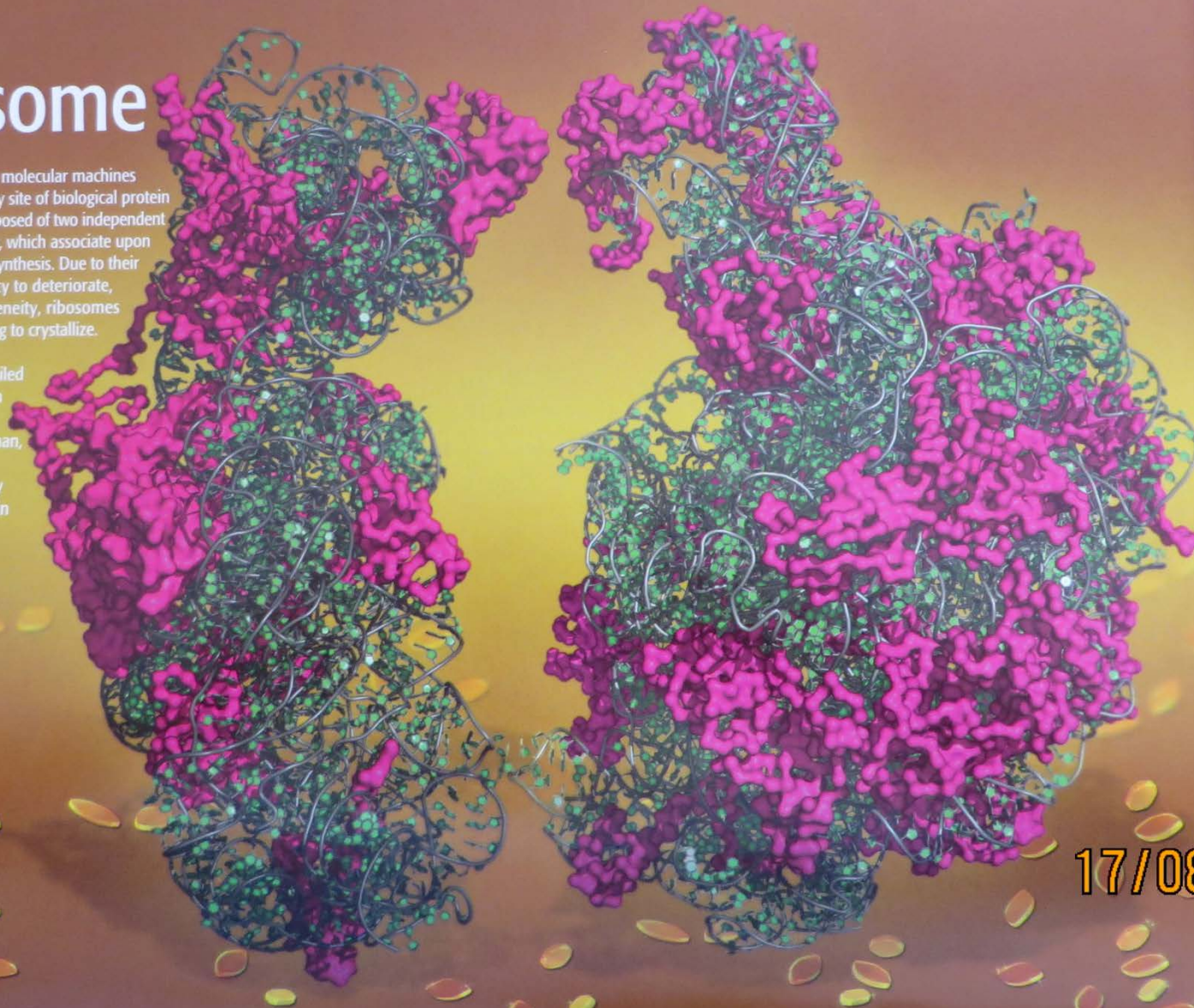


17/08/2

Ribosome

Ribosomes are complex molecular machines that serve as the primary site of biological protein synthesis. They are composed of two independent subunits of unequal size, which associate upon initiation of protein biosynthesis. Due to their enormous size, tendency to deteriorate, and functional heterogeneity, ribosomes are extremely challenging to crystallize.

For determining the detailed structure and mechanism of the ribosome Venkatraman Ramakrishnan, Thomas A. Steitz and Ada E. Yonath were jointly awarded the Nobel Prize in Chemistry in 2009.



17/08

Samo nekaj Nobelovih nagrajencev

Wilhelm Conrad	Röntgen	1901	Physics
Max	Laue	1914	Physics
William Henry	Bragg	1915	Physics
William Lawren	Bragg	1915	Physics
James	Sumner	1946	Chemistry
John	Northrop	1946	Chemistry
Wendell	Stanley	1946	Chemistry
Linus	Pauling	1954	Chemistry
John	Kendrew	1962	Chemistry
Max	Perutz	1962	Chemistry
Francis	Crick	1962	Medicine
James	Watson	1962	Medicine
Maurice	Wilkins	1962	Medicine
Dorothy	Hodgkin	1964	Chemistry
William	Lipscomb	1976	Chemistry
Aaron	Klug	1982	Chemistry
Herbert	Hauptman	1985	Chemistry
Jerome	Karle	1985	Chemistry
Robert	Huber	1988	Chemistry
Johann	Deisenhofer	1988	Chemistry
Hartmut	Michel	1988	Chemistry
Geoges	Charpak	1992	Physics
Bertam	Brockhouse	1994	Physics
Clifford	Shull	1994	Physics
John	Walker	1997	Chemistry
Roderick	Mackinnon	2003	Chemistry
Roger	Kornberg	2006	Chemistry
Ada	Yonath	2009	Chemistry
Thomas	Steitz	2009	Chemistry
Venki	Ramakrishnan	2009	Chemistry

Srečanje Nobelovcev Lindau - www.lindau-nobel.org



2010



Grofica Bettina Bernadotte

2009



Lindau , 2010

Lecture Hall

ADA E. YONATH – Weizmann Institute of Science, Israel

Kemija 2009 - za študije o strukturi in delovanju ribozoma

Ena izmed štirih nobelovk v kemiji:

Marie Curie	1911
Irène Joliot – Curie	1935
Dorothy Crowfoot Hodgkin	1964

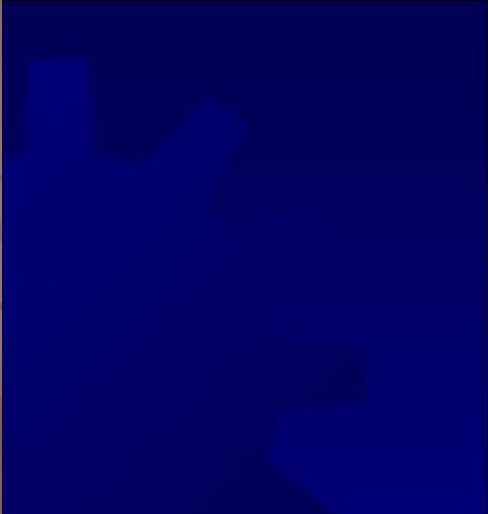
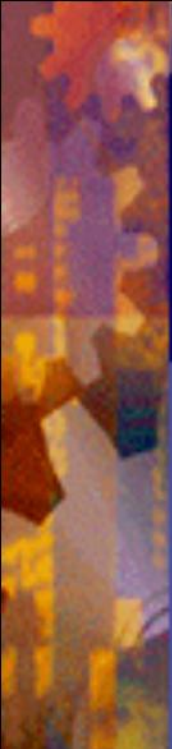


V človeškem organizmu se dnevno pretvori 60 kg ATP v ADP in obratno - to je enako cca. 2000 kcal.

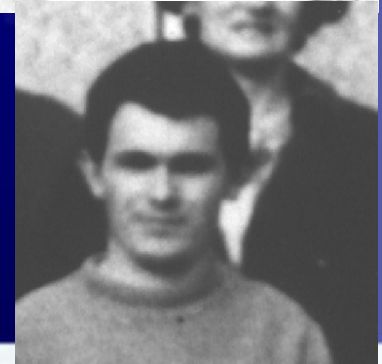
Professor Sir John Ernest WALKER (1941) je prejel Nobelovo nagrado za kemijo leta 1997 (mehanizem ATP).







NATO Advanced Study Institute, York, 1971





A
Prioritaire

SVERIGE
PORTO BETALT
PORT PAYÉ

Professor I. Leban
Dept of Chemistry
University of Ljubljana
P.O.Box 537
SI-1001 Ljubljana
Slovenien



NOBEL COMMITTEES FOR PHYSICS AND CHEMISTRY
THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES
Box 50005, S-104 05 Stockholm, Sweden

ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES
NOBEL COMMITTEE FOR CHEMISTRY

STRICTLY CONFIDENTIAL



Professor I. Leban

NEKAJ BESED O KRISTALOGRAFIJI

V “klasični kristalografiji” je veljal princip periodičnega ponavljanja osnovnih celic!

5 števena simetrija je bila “prepovedana”

Največja težava je bila, da je bil kristal definiran kot periodično translacijsko ponavljanje osnovne celice v 3D.

Toda kmalu so ugotovili, da se da prostor zapolniti tudi z dvema romboedri na neperiodičen način.



Toda v naravi obstaja tudi petštevna simetrija ?

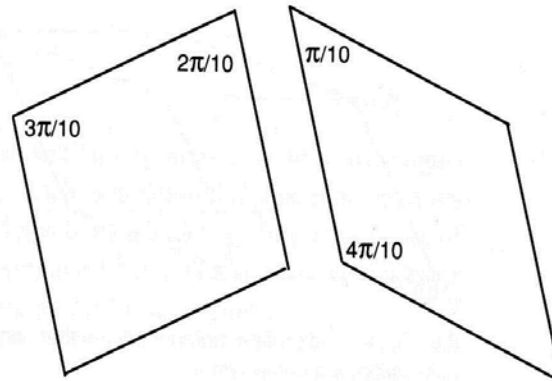


Zakaj 5-števna, zakaj ne 6-števna?

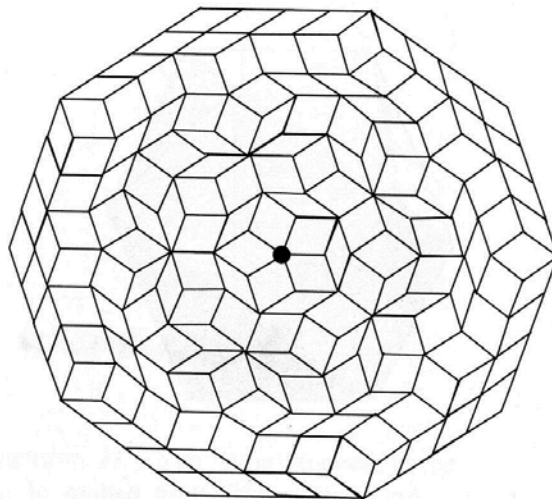
Roger PENROSE je zapolnil ravnino (prostor) z dvema rombi (Penrosove ploščice) 5 - števn

Sir ROGER PENROSE, FRS, angleški fizik, astrofizik, kozmolog, matematik, razvedrilni matematik in filozof (1931-).

Two two-dimensional tiles that can be assembled into a tiling pattern with short-range fivefold symmetry.



Penrose tiling with a tile having a 36° interior angle and another with a 72° interior angle.



Rekreacijski matematik



Penrozov trikotnik



Moebiusov trak, Kleinova steklenica



S 5-števno simetrijo se je ukvarjal tudi naš

kolega



ALAN L. MACKAY

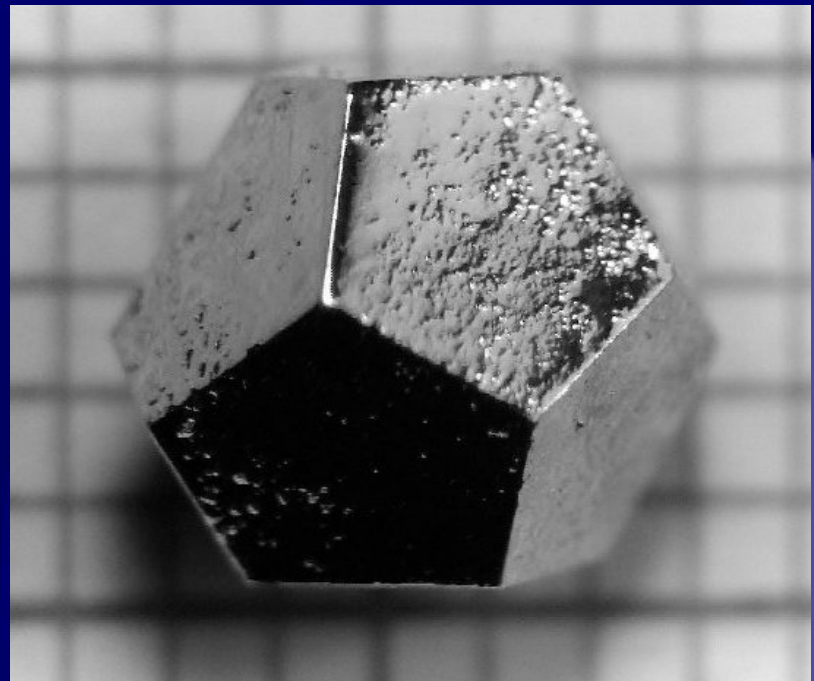
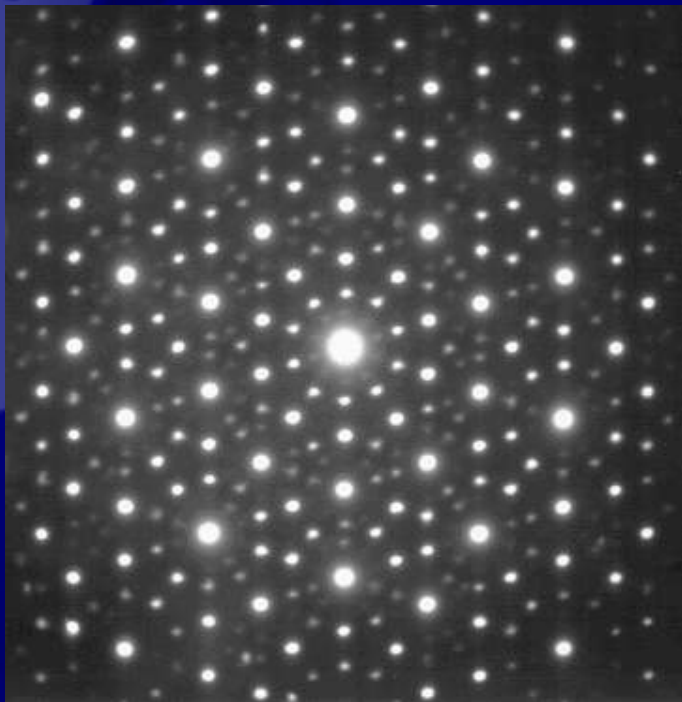
Department of
Crystall., Birkbeck College,
University of London, Malet
Street, London WC1E 7HX,
England

in je napovedal obstoj kvazi-kristalov (optična difrakcija Penrozovih ploščic).

Izvj. Jugosl. centr. krist. (Zagreb) 10, 15, (1975)

GENERALISED CRYSTALLOGRAPHY

Prof. Dan Schechtman (1941-) Haifa, received a Nobel Prize in Chemistry for 2011 – existence of quasicrystals (ikozaeder)



Photos – from Prof. A. Tonejc

**To je bila podobna zgodba kot pri
buckminster fullerenu C60**



**20 šesterkotnikov
12 peterkotnikov**

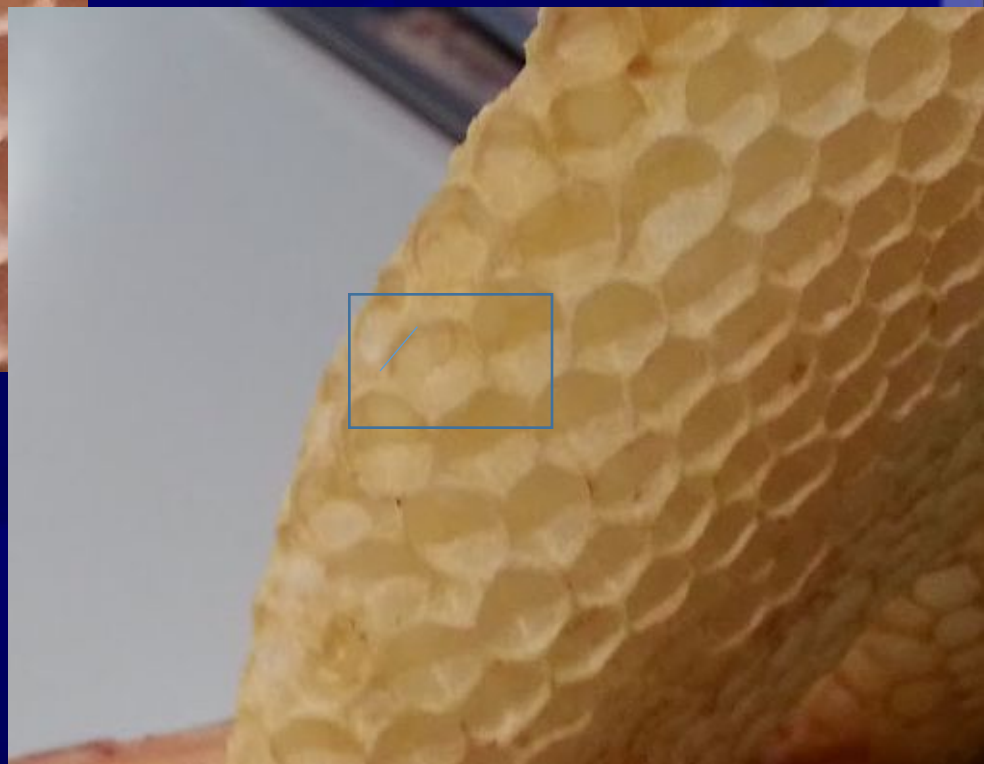


Arhitekt Buckminster Fuller (1895-1983) je projektiral kupole



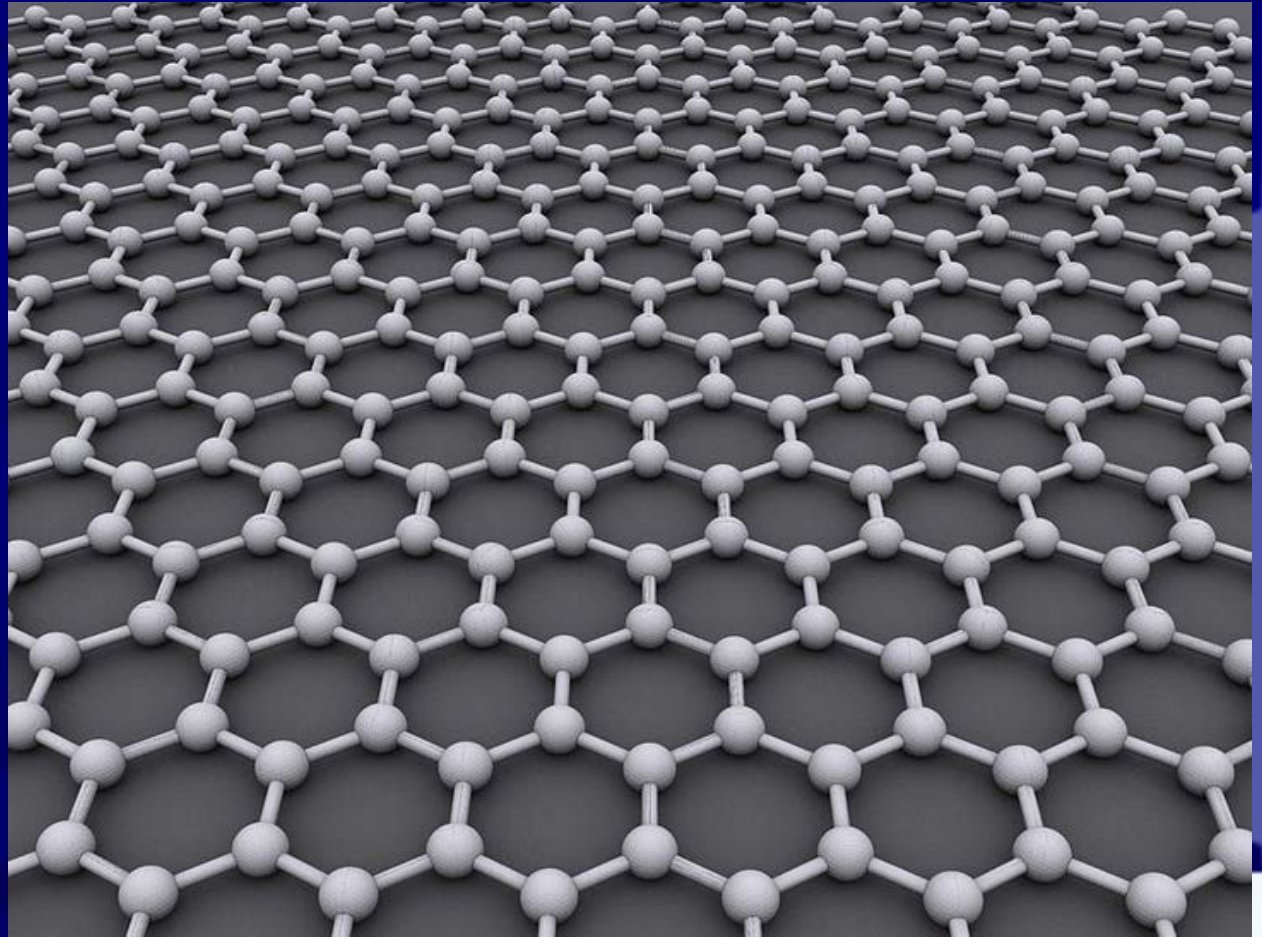
Sir Harold Walter KROTO, FRS, Robert CURL and Richard SMALLEY so prejeli za odkritje C_{60} – bucky ball - Nobelovo nagrado za kemijo 1996

Tudi čebele se na to spoznajo:



In še nekaj o Nobelovih nagradah

Andre Geim in Konstantin Novoselov leta 2010 za odkritje grafena (za malo denarja in igranje)



Na koncu test za vse:



**Res hvala
Prirodoslovnemu muzeju
Ljubljana za povabilo
In
vsem Vam
HVALA ZA POZORNOST!**