



СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ "СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ"
ФИЗИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

Утвърдена с протокол на ФС N:/

Декан:

/доц. д-р Д. Мърваков/

УЧЕБНА ПРОГРАМА

**ПО ДИСЦИПЛИНАТА: РЕНТГЕНОСТРУКТУРНИ МЕТОДИ ЗА
ИЗСЛЕДВАНЕ НА ПОДРЕДЕНИ И НЕПОДРЕДЕНИ СИСТЕМИ**

ВКЛЮЧЕНА В УЧЕБНИЯ ПЛАН НА СПЕЦИАЛНОСТ: Ф, ИФ, ЯТЕ

ВИД НА КУРСА: Изборен

СТЕПЕН НА ОБУЧЕНИЕ: Бакалавър

**КАТЕДРА: ФИЗИКА НА ТВЪРДОТО ТЯЛО И МИКРОЕЛЕКТРОНИКА,
ОБЩА ФИЗИКА**

ИЗВАДКИ ОТ УЧЕБНИЯ ПЛАН

Вид на занятията:	Семестър:	Хорариум-часа/ седмично:	Хорариум-часа Общо:
Лекции	V, VII	3	45
Семинарни упражнения			
Практически упражнения	V, VII	2	30
Общо часа:			75
Форма на контрол:	Изпит		

А. АНОТАЦИЯ.

Основна цел на курса е да даде необходимата начална теоретична и практическа подготовка на студентите за работа в научни и научно-производствени лаборатории за структурни изследвания. Рентгеноструктурният анализ е един класически метод за изследване на структурата на материалите, който непрекъснато се развива и обогатява с нови методи и средства. Същевременно спектърът на използваните материали и многообразието на техните структури лавинообразно нараства, което води до увеличаване на търсенето на добре подготвени специалисти в тази област. Микро- и субструктурата на материалите е определяща за експлоатационните им свойства и поведението им при различни условия и външни въздействия. По тази причина рентгеноструктурният анализ намира основно приложение във всички най-модерни области от физиката на материалите.

По-голямата част от курсовете, посветени на експерименталните методи във физиката включват групи от методи и целят да дадат понятие на студентите за възможностите и приложението им. В предлагания курс се търси оптимална цялостност и пълнота, които да подготвят студентите за евентуален успешен старт в лаборатории по структурен анализ. Той се състои от три логично свързани помежду си части:

- Приложна кристалография, в която се дават основните сведения за структурата на материалите, отнасящи се до подредените и неподредени системи. Особено внимание се отделя на онези въпроси от кристалографията, пряко свързани с теорията и практиката на рентгеноструктурния анализ.
- Рентгенография на кристални материали – разглежда се физиката на рентгеновите лъчи, синхротронното лъчение, както и основни сведения за апаратурата и техническите средства за осъществяване на съвременния рентгеноструктурен анализ, кинематичната и динамична теории за разсейване на рентгенови лъчи, уравненията за дифракция на рентгенови лъчи, широк набор от традиционни и нетрадиционни методи за анализ на различни структурни параметри, включително и такива, разработени от авторите.
- Рентгенография на неподредени и нископодредени системи (мека материя). Към такива системи спадат високомолекулни съединения, в това число и биополимери, неорганични и органични стъкла, композити, течни кристали, фармацевтични органични съединения, колоидни разтвори, гелове, суспенсии, емулсии и др. Разглеждат се основните принципи на малкоъгловото рентгеново разсейване и теоретични модели за интерпретация на експерименталните данни. Специално внимание се отделя на приложението на синхротронното рентгеново лъчение за изследване на бързо протичащи промени в структурата и тяхната кинетика, в това число различни фазови преходи.

В рамките на курса се обръща внимание на връзката между рентгенографските и други методи, които допълват и обогатяват информацията, получена от рентгеноструктурния анализ.

Практикумът към курса, изцяло базиран на лекционния материал, ще спомогне за затвърдяване и осмисляне на получените в лекциите знания и за създаване на умения за експериментална работа и решаване на конкретни задачи. За неговата реализация факултетът разполага с уникална апаратура и модерни методики за изследване, някои от които разработени от авторите.

С участието на един от предлагащите курса е написан учебник на български език по приложен рентгеноструктурен анализ.

Авторите на курса са доказани в международен мащаб специалисти по кристалография, рентгеноструктурен анализ и съотнасящите се към него методи..

Със спечелен конкурс са специализирали в тази област във водещи Европейски университети и институти. Автори са на голям брой публикации в областта на предлагания курс, ръководили са и ръководят редица докторанти и дипломанти по същата тематика и предлагат теми за защита на бакалавърски и магистърски тези.

В рамките на Физическия факултет курсът се базира на общите курсове по физика и на курса по Физично материалознание.

Б. СЪДЪРЖАНИЕ НА УЧЕБНАТА ПРОГРАМА:

№	Тема, вид на занятието: ЛЕКЦИИ	Брой часове
1.	Увод в рентгеноструктурния анализ: макро- и микросиметрия; основни понятия и закони от кристалографията и кристалохимията, лежащи в основата или получени от РСА; сведения за микро- и субструктурата на материалите; основни достижения в областта на РСА; сведения за най-съвременните тенденции в областта.	4
2.	Рентгенови лъчи, рентгенова техника: основи на физиката на рентгеновите лъчи и параметрите им, имащи отношение към РСА; взаимодействие на рентгеновите лъчи с веществата – разсейване, пречупване, поглъщане, йонизиращо и биологично действие; получаване на рентгенови лъчи за целите на РСА; начини за регистриране на рентгенови спектри; фокусиране, филтриране и монохроматизация на лъчението; основни параметри на апаратурата за РСА-съвременни достижения.	3
3.	Дифракция на рентгенови лъчи: основни дифракционни уравнения и приложението им за изследване на подредени системи; кинематична и динамична теория за разсейване на рентгенови лъчи; дифракция и обратна решетка - построение и формализъм на Евалд.	4
4.	Методи за изследване фазовия състав на кристални материали: метод на Дебай-Шеррер; рентгенова дифрактометрия – основни сведения, фокусировки, геометрии; качествен и количествен фазов анализ – същност, методики, възможности, особености; Милерови и дифракционни индекси; квадратични форми.	3
5.	Методи за изследване на монокристали: метод на Лауе, метод на въртящия и колебаещия се кристал; кристални проекции; мрежа на Вулф и Болдырев – приложение за обработка на лауеграми и епиграми; апаратура, експериментални методики за определяне на: класа на симетрия, ориентацията на монокристал, параметрите на елементарната клетка.	3

6.	Профилен анализ на рентгеновите дифракционни пикове: понятие за физично разширение на пиковете; ширина по Лауе и Шерер; методи за оценка на разширението и връзката му с параметрите на микро- и субструктурата на моно- и поликристални материали.	2
6.	Анализ на преимуществени кристалографски ориентации (текстури) – проекционна сфера и стандартни гномостереографски проекции; осева (неограничена текстура) – същност и методики за изследването ѝ; полюсна плътност и функция на разпределение по ориентации – синтезирането им от рентгеновия експеримент; типични примери за осева текстура и анизотропия на свойствата.	3
7.	Изследване на кристални материали при малки ъгли на падане – под и над критичния ъгъл; особености при дифрактометричната регистрация, взаимодействието на лъчението с веществата и интерпретацията на спектрите. Приложение за изследване структурата на тънки слоеве.	2
8.	Анализ на остатъчни напрежения в кристални материали: същност и класификация на остатъчните напрежения; тензор на деформации и тензор на напреженията – основа на рентгеноструктурния метод за оценка на остатъчни напрежения; анизотропия и оценка на еластичните параметри в различни кристалографски направления – завиимост от симетрията; основни модели и методи за оценка на остатъчни напрежения – същност, математичен апарат, сравнителна оценка, възможности и ограничения.	3
9.	Дифракция на рентгенови лъчи от неподредени системи: Рентгеноструктурният анализ и приложението му за изследване на меката материя. Дифузно разсейване; определяне на близкия порядък; функция на разпределение на електронната плътност; определяне степента на кристалност на частично подредени материали.	3

10.	Основни принципи на малкоъгловото рентгеново разсейване и приложения Преглед на основните структурни параметри, които могат да бъдат определени от малкоъгловото рентгеново разсейване: корелационна функция; инвариант на Porod; теория на малкоъгловото рентгеново разсейване от единична частица; приближение на Guinier; дифракция от анизотропни частици; дифракция от пръчки и дискове.	4
11.	Апаратура за малкоъглово рентгеново разсейване Щрихова колимация - камера на Кратки. Необходими корекции върху малкоъгловия спектър; камери с точкова колимация; видове детектори; позиционно чувствителни детектори; използване на синхротронната радиация за малкоъглово рентгеново анализ; малкоъглови камери за синхротронна радиация.	2
12	Математическа обработка и интерпретация на малкоъгловите рентгенови спектри. Влияние на колимационните системи; влияние на детекторите; ефект от дължината на вълната; комбинирана формула. Модел за малкоъглово разсейване от хомогенни частици с различна форма и от агрегати и субструктурни единици.	3
13	Приложение на малкоъгловото разсейване за изследване структурата на различни материали: Структурата на синтетични полимери с малкоъглово рентгеново разсейване; квазипериодични частично-кристални полимери; голям период; едномерна корелационна функция: пресмятане, определяне на основни структурни параметри от корелационната функция; малкоъглово рентгеново разсейване на биологични обекти – биополимери (белтъци и липиди); понятие за фрактални структури; определяне на фрактални размерности; течни кристали; структура на материали за нанотехнологии	6

Б. СЪДЪРЖАНИЕ НА УЧЕБНАТА ПРОГРАМА:

№	Тема, вид на занятието: УПРАЖНЕНИЯ	Брой часове
1.	Решаване на кристалографски задачи, свързани с PCA	5
2..	Международна база данни JCPDF – възможности и работа с нея Качествен и количествен фазов анализ. Определяне рентгеновата плътност на фазите	5

3.	Регистрация в симетрична и асиметрична геометрия на рентгеновия дифракционен спектър. Построяване на функцията на разпределение по ориентации	5
4.	Оценка на остаъчни напрежения чрез $\sin^2\psi$ метод	5
5.	Регистриране и анализ на широкоъглова рентгенограма на частично-кристален полимер.	5
6.	Анализ на малкоъглови рентгенови спектри, получени от синхротронно рентгеново лъчение.	5

В. Формата на контрол е: (изпит или текуща оценка) Писмен изпит и събеседване. Оценката се формира на базата на показаните знания по време на изпита (80%) и работата по време на упражненията (20%).

Г. Основна литература:

1. Записки на лекторите
2. А. Апостолов, Ив. Йорданова, В. Кръстев, Наръчник по приложна рентгенография, София, Наука и изкуство, 1988
3. H. P. Klug, L. E. Alexander, X-Ray Diffraction Procedures, John Wiley & Sons, 1974.
4. L. E. Alexander, X-Ray Diffraction Methods in Polymer Science, John Wiley & Sons, 1969.
5. G. R. Stroble, The Physics of Polymers – Concepts for Understanding Their Structure and Behavior, Springer-Verlag 1996.

Съставили програмата:

Доц. д-р Иванка Йорданова:

Доц. д-р Маня Кръстева

.....

.....

Дата: март, 2004