



## ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

email: [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
тел.: 02 987 31 67  
02 979 52 60

### Основна информация:

Име на курса: Рентгеноструктурен анализ

Лектор: Доц. д-р Руси Русев

Телефон: 0894292629

Имейл: [r.rusev93@imc.bas.bg](mailto:r.rusev93@imc.bas.bg)

Лектор: Проф. д-р Росица Николова

Телефон: 02/ 9797055, Моб. 0885 099 158

Имейл: [rosica.pn@clmc.bas.bg](mailto:rosica.pn@clmc.bas.bg)

Лектор: Проф. Борис Шивачев

Телефон: 02/ 9797055

Имейл: [blshivachev@gmail.com](mailto:blshivachev@gmail.com)

Хорариум: 30 учебни часа лекции и 30 учебни часа упражнения

### Анотация (до 150 думи):

Курсът има за цел да даде основни познания относно рентгеноструктурния анализ. Разгледани са три основни части, касаещи определянето на кристалната структура на нови вещества: симетрия на кристалните структури, рентгенова дифракция, определяне структурата на кристално вещество. Упражненията се провеждат в лабораторията по структурен анализ и времето позволява всеки от курсистите да определи кристалната структура на собствен кристал или вещества, както и да подготви данните за публикуване.

### Тематично съдържание на курса (кратко описание по теми или модули):

#### Лекции

Модул 1: **Кристална симетрия (12 часа)** – включва темите: Периодичност, трансляционна симетрия, елементарна клетка, кристални системи; Елементи на симетрия; Точкови групи на симетрия; Пространствени групи на симетрия, Браве решетки; Пространствени групи на симетрия, символи, кристалографски таблици; Основни типове кристални структури.

Модул 2: **Рентгенова дифракция (10 часа)** – включва темите: Рентгеново лъчение – основни понятия; Обратно/реципрочно пространство; Условия за дифракция, уравнение на Лауе, уравнение на Bragg, сфера на Ewald; Структурни фактори на разсейване; Систематични погасявания и пространствена група на симетрия.

Модул 3: **Определяне на кристалната структура (8 часа)** – включва темите: Монокристален и прахов метод; Дифрактометричен експеримент; Методи за определяне на кристална структура; Подготовка на данните за публикация



## ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

email: [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
тел.: 02 987 31 67  
02 979 52 60

### Лабораторни упражнения

Всички упражнения се провеждат по указания на лектора и имат за цел затвърждаване и практическото приложение на теоретичните основи от лекциите.

- 1. Кристална симетрия (8 часа)** – Периодичност, трансляционна симетрия, елементарна клетка, кристални системи; Елементи на симетрия, Точкови групи на симетрия Пространствени групи на симетрия, Браве решетки; Кристалографски таблици.
- 2. Рентгенова дифракция (4 часа)** – Обратно/реципрочно пространство; Условия за дифракция, уравнение на Laue, уравнение на Bragg, сфера на Ewald; Структурни фактори на разсейване; Систематични погасявания и пространствена група на симетрия
- 3. Оределяне на кристалната структура (4x4 =16 часа)** – Подготовка на образци и провеждане на монокристален експеримент; Представяне на софтуер за определяне, уточняване и описание на кристална структура. Кристалографски бази данни; Определяне, уточняване и описание на кристалната структура на ново вещество; Подготовка на crystal information file (.cif) за публикуване на данните.

### Форми на обучение и оценяване:

- Лекции и лабораторни упражнения;
- Самостоятелна работа с кристалографски софтуер и бази данни;
- Оценяване чрез участие в практическия курс и писмен изпит.

### Компетентности, придобити в резултат на обучението (3-5 точки):

- Познаване на основните принципи на кристалната симетрия и рентгеновата дифракция;
- Умения за провеждане на монокристални и прахови рентгенодифракционни експерименти;
- Умения за определяне и уточняване на кристални структури чрез специализиран софтуер;
- Способност за обработка, интерпретация и подготовка на кристалографски данни за научни публикации.
- 

### Литература:

1. <http://escher.epfl.ch/eCrystallography/>
2. <http://www.iucr.org/education/pamphlets/22>
4. <http://ww1.iucr.org/cww-top/edu.index.html>
5. <https://it.iucr.org>
5. <http://www.ccp14.ac.uk/>
6. <https://www.crystallography.net/cod/>

### Допълнителна информация

Наличие на лаптоп, задължително изпълнение на лабораторния практикум. Писмен изпит.