

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet:	METODE SIPANJA ZA DOLOČANJE STRUKTURE IN DINAMIKE V NANOSISTEMIH
Course Title:	METHODS OF SCATTERING FOR DETERMINING STRUCTURE AND DYNAMICS IN NANOSYSTEMS

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
MAG Kemija, 2. stopnja	/	2.	3.
USP Chemistry, 2 nd Cycle	/	2 nd	3 rd

Vrsta predmeta / Course Type: izbirni strokovni / Elective Professional

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code: K2I20

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
30	15	30 LV	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer: prof. dr. Andrej Jamnik / Dr. Andrej Jamnik, Full Professor

Jeziki / Languages: Predavanja / Lectures: slovenski / Slovenian
Vaje / Tutorial: slovenski / Slovenian

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

Prerequisites:

The course has to be assigned to the student.

Vsebina:

Uvod v metode sipanja
Lorentzov model. Lorentzova limita in limita sipanja. Interferenca.
Ozko kotno rentgensko sipanje (metoda SAXS)
Rayleigh-Debye-Gansova (RDG) teorija. Sipanje in inverzni problem sipanja. Razredčeni monodisperzni sistemi. Radij giracije, molska masa. Indirektna Fourierova transformacija - metoda IFT. Parska porazdelitvena funkcija razdalj. Notranja struktura delcev. Koncentrirani sistemi. Posplošena indirektna Fourierova transformacija - metoda GIFT. Eksperimentalni sistem. Aplikacije metode SAXS. Osnove ozkokotnega nevtronskega sipanja: kontrast in variacija kontrasta,

Content (Syllabus outline):

Introduction to scattering methods
Lorentz model. Lorentz limit and scattering limit. Interference.
Small-angle X-ray scattering (SAXS method)
Rayleigh Debye Gans (RDG) theory. Scattering problem and inverse scattering problem. Dilute monodisperse systems. Radius of gyration, molar mass. Indirect Fourier transformation (ITP method). Pair distance distribution function. Internal structure of particles. Concentrated systems. Generalized indirect Fourier transformation (GIFT method). Experimental setup. Applications of SAXS method. Basic of small-angle neutron scattering (SANS method). Contrast variation. Selective deuteration.

selektivno devteriranje.

Statično sipanje laserske svetlobe (metoda SLS)

Rayleighovo sipanje, RDG področje. Teorija fluktuacij za razredčene sisteme. Zimmov diagram. Monodisperzni in polidisperzni sistemi. Eksperimentalni sistem.

Dinamično sipanje laserske svetlobe (metoda SLS)

Difuzija in hidrodinamski radij delcev. Avtokorelacijska funkcija. Koncentracijski efekti. Inverzna Laplaceova transformacija avtokorelacijske funkcije. Rotacijski difuzijski koeficient. Ergodijski in neergodijski sistemi.

Laboratorijske vaje

Projektne vaje: Strukturne raziskave izbranih nano-strukturiranih sistemov z metodami SAXS, SLS in DLS – izvedba eksperimentov ter analiza in interpretacija meritev sipanja.

Static light scattering (SLS method)

Rayleigh scattering. RDG domain. Fluctuation theory for dilute systems. Zimm plot. Monodisperse and polydisperse systems. Experimental setup.

Dynamic light scattering (DLS method)

Diffusion coefficient and hydrodynamic radius of particles. Autocorrelation function. Concentration effects. Inverse Laplace transformation of autocorrelation function. Rotation diffusion coefficient. Ergodic and non-ergodic (arrested) systems.

Project works

Structural investigation of chosen nano-systems by SAXS, SLS and DLS – performing experiments and analysis and interpretation of experimental data.

Temeljna literatura in viri / Readings:

- O. Glatter in O. Kratky, Small Angle X-Ray Scattering, Academic Press, 2. izdaja (1983), 30 % od 510 str., ISBN 0-12-286280-5
- B. J. Berne in R. Pecora, Dynamic Light Scattering: With Application to Chemistry, Biology, and Physics, Dover Publications (2000), 20 % od 372 str., ISBN 978-0-486-41155-2

Dopolnilna literatura

- P. Lindner in T. Zemb, Neutrons, X-rays and Light: Scattering Methods Applied to Soft Condensed Matter, Elsevier (2002), 541 str., ISBN 0-444-51122-9
- R. J. Roe, Methods of X-Ray and Neutron Scattering in Polymer Science, Oxford University Press (2000), 315 str., ISBN 978-0-19-511321-1
- A. Jamnik, Metode sipanja za določanje strukture in dinamike v nanosistemih, zapiski predavanj.

Cilji in kompetence:

Cilj predmeta je spoznavanje različnih eksperimentalnih metod, ki temeljijo na sipanju rentgenskih žarkov in nevtronov pod majhnimi koti ter sipanju laserske svetlobe. Te metode se uporabljajo za določevanje strukturnih in dinamičnih značilnosti nanosistemov.

Študenti si pri predmetu pridobijo naslednje specifične *kompetence*:

- razumevanje teorijskega ozadja sipanja svetlobe
- pridobitev eksperimentalnih veščin za

Objectives and Competences:

The aim of the course is to learn the different experimental methods, which are based on the small-angle scattering of X-rays and neutrons, and laser light scattering. These methods are used to determine the structural and dynamic characteristics of nanosystems.

Students of the course gain the following specific competences:

- Understanding the theoretical background of light scattering
- The acquisition of skills for the experimental measurement of small-angle scattering and

merjenje ozkokotnega rentgenskega sipanja ter statičnega in dinamičnega sipanja laserske svetlobe

- sistematičnost pristopa pri reševanju projektne naloge
- uporaba računalniške programske opreme za analizo meritev sipanja
- usposobljenost za samostojno reševanje projektnih nalog in za izdelavo poročil

static and dynamic laser light scattering

- A systematic approach to dealing with project tasks
- The use of computer software for the analysis of experimental data
- Ability to independently solve project tasks and to write scientific reports

Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Osnovno teorijsko znanje o interakciji elektromagnetnega valovanja (vidna svetloba, rentgenski žarki) s snovjo. Razumevanje pojava sipanja na posameznih sipalnih centrih ter interference sekundarnih valov. Razumevanje pojmov, ki se uporabljajo pri teorijskih obravnavah sipanja, in zakonitosti, ki sledijo iz teh obravnav. Poznavanje eksperimentalnih sistemov za merjenje rentgenskega in laserskega sipanja. Poznavanje numeričnih metod za obdelavo in interpretacijo meritev sipanja ter možnih zaključkov o strukturnih parametrih, ki sledijo iz te analize.

Uporaba

Uporaba metod sipanja za določitev strukturnih in dinamičnih lastnosti zelo različnih sistemov, pri katerih gre za notranjo strukturiranost v koloidnem (nano) območju dimenzij (biološki sistemi - proteini, nukleinske kisline, membrane, makromolekule, polimeri, surfaktanti, mikroemulzije).

Refleksija

Občutek za povezavo med splošno teorijo in modelnimi izračuni sipanja, ki iz te sledijo, ter eksperimentalnimi rezultati. Kritično ovrednotenje rezultatov, ki sledijo iz numerične analize meritev sipanja.

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension

Basic theoretical knowledge of the interaction of electromagnetic radiation (visible light, X-rays) with the matter. Understanding the phenomenon of scattering on the individual scattering centres and the interference of secondary waves. Understanding of the concepts used in theoretical treatments of scattering, and of general laws, which follow from these treatments. Knowledge of the experimental system for measuring the X-ray and laser scattering. Knowledge of numerical methods for the data treatment and interpretation of experimental data, and of possible conclusions about the structural parameters that follow from this analysis.

Application

The use of scattering methods to determine the structural and dynamic properties of very different systems which show internal structure of colloidal (nano) dimensions (biological systems - proteins, nucleic acids, membranes, macromolecules, polymers, surfactants, microemulsions).

Analysis

Connection between the general scattering theory and model calculations that follow from this theory, and the experimental results. Critical evaluation of the results arising from the numerical analysis of experimental scattering data.

Prenosljive spretnosti

Zbiranje in uporaba znanstvenih člankov pri projektne (raziskovalnem) delu. Poročanje o predelani literaturi, predstavitev rezultatov projektne vaj, ter pisanje poročila v obliki znanstvenega članka.

Skill-transference Ability

Collection and use of scientific articles in the project research work. Reporting on the used literature, presentation of the results of project work and report writing in the form of a scientific article.

Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminarji, projektne laboratorijske vaje.

Learning and Teaching Methods:

Lectures, seminars, and laboratory practice.

Načini ocenjevanja:

Delež (v %) /

Weight (in %)

Assessment:

<ul style="list-style-type: none"> - Pisni izpit - Predstavitev rezultatov projektne vaj 	50	- Written examination
	50	- Presentation of the results of project practical work
Ocenjevanje: 6-10 (pozitivno); 1-5 (negativno).		Marks: 6-10 (positive); 1-5 (negative).

Reference nosilca / Lecturer's references:

- J. Orehek, I. Dogša, M. Tomšič, A. Jamnik, D. Kočar, D. Stopar, Structural investigation of carboxymethyl cellulose biodeterioration by *Bacillus subtilis* subsp. *subtilis* NCIB 3610, Int. Biodeterioration & Biodegradation 77, 2013, 10-17.
- A. Vrhovšek, O. Gereben, A. Jamnik, L. Pusztai, Hydrogen bonding and molecular aggregates in liquid methanol, ethanol, and 1-propanol, J. Phys. Chem. B 115, 2011, 13473-13488.
- A. Lajovic, M. Tomšič, G. Fritz-Popovski, L. Vlček, A. Jamnik, Exploring the structural properties of simple aldehydes: A Monte Carlo and small-angle x-ray scattering study, J. Phys. Chem. B 113, 2009, 9429-9435.