

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
**«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им.
Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.О. декана _____ Малышев А.И.

«____ » _____ 20__г.

Рабочая программа дисциплины
«Кристаллография»

Уровень высшего образования

бакалавриат

Направление подготовки
03.03.02 - Физика

Профиль подготовки
«Кристаллофизика»

Квалификация (степень) выпускника
бакалавр

Форма обучения - очная

Нижний Новгород

2017 Год

(год поступления 2016)

1. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Кристаллография» относится к обязательным дисциплинам вариативной части профессионального цикла основной образовательной программы по направлению 03.03.02 – Физика, профиль «Кристаллофизика», изучается на 3 году обучения в 5 семестре. Курс кристаллографии является первым курсом блока учебных дисциплин по физике конденсированного состояния и, в частности, физике твердого тела. Он является также необходимым при изучении студентами ряда спецкурсов по физике кристаллов, дифракционным методам исследования твердого тела, физике полупроводников и др. Для усвоения данного курса необходимо изучить следующие дисциплины в рамках образовательных программ бакалавра по направлениям Физика и Электроника и наноэлектроника:

- Аналитическая геометрия;
- Векторный и тензорный анализ;
- Матричная алгебра;
- Основы термодинамики.

Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Кристаллография» являются: знакомство студентов с современными взглядами на атомное строение твердых тел, методами описания симметрии, атомного строения и внешней оканки кристаллов, формирование достаточно полного представления об основных методах аналитической геометрии кристаллического пространства, теории точечной и пространственной симметрии кристаллов и кристаллохимии.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень освоения – при наличии в карте компетенций)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
(ОПК-2) Способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости модели	31 (ОПК-2) Знать физико-математический аппарат описания строения кристаллов. У1 (ОПК-2) Уметь выявлять необходимый способ описания строения кристаллов для исследования конкретного вида объектов. В1 (ОПК-2) Владеть навыками применения физико-математического аппарата описания строения кристаллов.
(ПК-1) способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	31 (ПК-1) Знать основные постулаты строения кристаллов. У1 (ПК-1) Уметь определять тип исследуемых объектов – твердых тел. В1 (ПК-1) Владеть методологией описания структуры кристаллов.

3. Структура и содержание дисциплины «Кристаллография»

Объем дисциплины составляет 6 зачетных единиц, всего 216 часов, из которых 66 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (16 часа занятия лекционного типа, 48 часа занятия семинарского типа, в том числе 2 часа – мероприятия текущего контроля. 2 часа – мероприятия промежуточной аттестации,), 150 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

Содержание дисциплины «Кристаллография»

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	
1 семестр очное						
Введение	1	1			1	
Аналитическая геометрия кристаллического пространства	41	3	10		13	28
Точечная симметрия кристаллов	74	4	18		22	52
Пространственная симметрия кристаллических структур	62	4	14		18	44
Основы кристаллохимии	35	3	6		9	26
Заключение	1	1			1	
В т.ч. текущий контроль					2	
Промежуточная аттестация – экзамен						

Содержание разделов дисциплины.

1. Введение. Определение и основные свойства кристаллов, их роль в науке, технике и технологиях.

2. Аналитическая геометрия кристаллического пространства. Основные постулаты кристаллического пространства. Трансляции. Кристаллическая решетка. Элементарная ячейка. Кристаллографические системы координат Узлы и их индексы. Узловые прямые и их описание. Индексы узловых прямых. Узловые плоскости. Индексы плоскостей. Первая основная теорема решетчатой кристаллографии. Обратная решетка и ее свойства. Вторая основная теорема решетчатой кристаллографии. Применение обратной решетки для описания дифракции волн на кристаллических решетках. Преобразование индексов плоскостей и координат точек кристаллического пространства при изменении базиса кристаллографической системы

координат. Основные расчетные формулы решетчатой кристаллографии. Кристаллографические проекции.

3. Точечная симметрия кристаллов. Понятие о симметрии физических систем. Основные положения теории групп. Понятие о точечной симметрии кристаллов. Матричный метод описания симметрии кристаллов. Умножение операций точечной симметрии кристаллов. Точечные группы симметрии (некубические). Теорема Эйлера. Кубические точечные группы симметрии кристаллов. Сингонии. Международные обозначения точечных групп симметрии. Кристаллические многогранники и их свойства. Простые формы кристаллов. Влияние точечной симметрии кристаллов на геометрию кристаллической решетки. Предельные группы симметрии. Принцип суперпозиции Кюри и принцип Неймана.

4. Пространственная симметрия кристаллических структур. Решетки Бравэ. Операции пространственной симметрии атомных структур кристаллов и операторный метод их описания. Умножение операций пространственной симметрии атомных структур кристаллов. Пространственные группы симметрии кристаллических структур. Правильные системы точек пространственных групп.

5. Основы кристаллохимии. Химические связи в кристаллах. Принцип плотнейшей упаковки. Двухслойная и трехслойная упаковки одинаковых шаров. Пустоты. Симметрия двухслойной и трехслойной упаковок. Координаты шаров и пустот в двухслойной и трехслойной упаковках. Плотнейшие упаковки шаров двух сортов. Полиэдрический метод описания атомных структур кристаллов. Понятие о структурном типе. Структурные типы кристаллов химических элементов. Структурные типы с общей формулой A_X . Полиморфизм, изоморфизм, морфотропия. Элементы кристаллохимии молекулярных кристаллов. Псевдосимметрия кристаллических структур.

6. Заключение. Новые материалы. Фуллерены. Квазикристаллы. Углеродные нанотрубки. Кристаллы белковых веществ.

План практических занятий.

1. Кристаллографические системы координат, символы узлов, узловых рядов и плоскостей (2 ч.)
2. Обратная решетка и расчетные формулы кристаллографии (2 ч.).
3. Закон зон (2 ч.).
4. Основные положения теории групп (2 ч.).
5. Операции и элементы симметрии (2 ч.).
6. Матричный метод описания операций симметрии (2 ч.).
7. Точечные группы симметрии (6 ч.)...
8. Простые формы кристаллов (2 ч.).
9. Принципы суперпозиции Кюри и Неймана (2 ч.).
10. Решетки Бравэ (2 ч.).
11. Операторный метод описания операций симметрии (2 ч.).
12. Операции пространственной симметрии кристаллических структур (4 ч.).
13. Пространственные группы симметрии (4 ч.).
14. Плотнейшие упаковки (2 ч.).

4. Образовательные технологии.

Занятия по дисциплине проходят в лекционной форме и в форме практических занятий, на которых проводятся обсуждения рассматриваемых проблем в свете последних научных достижений в данной области. Самостоятельная работа включает в себя выполнение домашних заданий и теоретическую подготовку к занятиям по материалам лекций и рекомендованной литературе, приведенной в конце данной программы.

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студентов предусматривает выполнение домашних заданий, решение задач, изучение рекомендованной литературы и подготовку к экзамену.

Оценочные средства для контроля текущей успеваемости включают в себя устный опрос на занятиях и в процессе лекций, активность в обсуждении качественных вопросов.

Для контроля промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины «Кристаллография» используются нижеприведенные вопросы и задачи.

Вопросы для контроля

1. Каковы основные постулаты кристаллического пространства?
2. Определите понятия трансляций и кристаллической решетки.
3. Как преобразуются индексы узловых рядов и узловых плоскостей при изменении базиса кристаллографической системы координат?
4. Сформулируйте Первую Основную теорему решетчатой кристаллографии.
5. Сформулируйте Вторую Основную теорему решетчатой кристаллографии.
6. Сформулируйте основные свойства обратной решетки.
7. Приведите основные расчетные формулы решетчатой кристаллографии.
8. Сформулируйте основные принципы построения кристаллографических проекций.
9. Приведите основные положения теории групп.
10. В чем заключается матричный метод описания симметрии кристаллов.
11. Сформулируйте теоремы умножения операций микросимметрии кристаллов.
12. Приведите примеры точечных групп симметрии кристаллов.
13. Как связаны понятия: особые направления в кристалле и сингонии?
14. Приведите примеры простых форм и нарисуйте их гномостереографические проекции.
15. Каковы возможные виды решеток Бравэ для кристаллов низших сингоний.
16. В чем состоит операторный метод описания пространственных операций симметрии кристаллов?
17. Каковы принципы построения графиков пространственных групп кристаллов?
18. Перечислите Предельные группы симметрии, каковы их особенности?

Задачи для контроля

1. Найти индексы узловой плоскости, проходящей через три узла кристаллической решетки $[[110]], [[101]], [[011]]$.
2. Через две точки (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) кристаллического пространства с некоторым базисом $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ проведена прямая. При каких условиях данная прямая параллельна какому-либо узловому ряду?
3. Найти индексы плоскости (hkl) , в которой лежат узловые ряды $[110]$ и $[111]$.
4. Показать эквивалентность зеркально-поворотной оси третьего порядка и инверсионной оси шестого порядка.
5. Проверить, будут ли выполняться соотношения: 1) $2_x \times 2_y = 2_y \times 2_x$; 2) $m_x \times m_y = m_y \times m_x$; 3) $2_z \times m_z = m_z \times 2_z$; 4) $3_z^1 \times m_z = m_z \times 3_z^1$.
6. Какие координаты получит точка (x, y, z) после действия следующей операции симметрии? 1) m_y ; 2) 2_z ; 3) 2_{xz} ; 4) 2_{yz} ; 5) 4_x^1 ; 6) 4_z^1 ; 7) 4_z^{-1} ; 8) 3_z^{-1} .

7. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии: отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в этой плоскости.

8. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии: отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в одной из перпендикулярных плоскостей симметрии.

9. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии: поворот вокруг оси четвертого порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии.

10. Вывести точечные группы симметрии и записать их символы двумя способами. Генераторы заданы следующими операциями симметрии: два последовательных поворота вокруг осей второго порядка, составляющих между собой угол 45° .

11. Вывести точечные группы и записать их символы по Шенфлису и Герману-Могену. Генераторы заданы элементами симметрии: 1) 4_z и 2_x ; 2) 2_z , 2_x и $\bar{1}$; 3) 6_z , 2_x и $\bar{1}$.

12. К кристаллу с точечной группой симметрии T приложено однородное электрическое поле вдоль направления: 1) [100]; 2) [110]; 3) [111]; 4) [hk0]; 5) [hkk]; 6) [hkl]. Найти симметрию кристалла в поле.

13. Нарисовать график и записать общую правильную систему точек для пространственных групп: $P2_12_12_1$; $I222$.

6. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (в приложении).

6.1 Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования, описание показателей и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования

(ОПК-2) Способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости модели

Индикаторы компетенции	ОЦЕНКИ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретической математики. Невозможно оценить полноту	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимальный допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено подготовки. Допущено несколько	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме,

	знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	ошибки.		негрубых ошибок	несущественных ошибок		превышающим программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения .. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом . Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрированный творческий подход к решению нестандартных задач
Шкала оценок по проценту правильн	0 – 20 %	20 – 50 %	50 – 70 %	70-80 %	80 – 90 %	90 – 99 %	100%

о выполненных контрольных заданий							
-----------------------------------	--	--	--	--	--	--	--

(ПК-1) способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин

Индикаторы компетенции	ОЦЕНКИ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимальный допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающее программы подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продемонстрированы основные умения. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи . Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения .. Решены все основные задачи . Выполнены все задания в полном объеме.

							недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом . Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрированы базовые навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач
Шкала оценок по проценту правильно выполненных контрольных заданий	0 – 20 %	20 – 50 %	50 – 70 %	70-80 %	80 – 90 %	90 – 99 %	100%

6.2 Описание шкал оценивания

Критерии оценок экзамена:

Оценка *отлично* – исчерпывающее владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, твёрдое знание основных положений дисциплины, умение применять концептуальный аппарат при анализе актуальных проблем. Логически последовательные, содержательные, конкретные ответы на все вопросы экзаменационного билета и на дополнительные вопросы, свободное владение источниками. Практическая часть курса успешно выполнена.

Оценка *хорошо* – достаточно полные знания программного материала, правильное понимание сути вопросов, знание определений, умение формулировать тезисы и аргументы. Ответы последовательные и в целом правильные, хотя допускаются неточности, поверхностное знакомство с отдельными теориями и фактами, достаточно формальное отношение к рекомендованным для подготовки материалам. Практическая часть курса успешно выполнена.

Оценка *удовлетворительно* – фрагментарные знания, расплывчатые представления о предмете. Ответ содержит как правильные утверждения, так и ошибки, возможно, грубые. Испытуемый плохо ориентируется в учебном материале, не может устранить неточности в своем ответе даже после наводящих вопросов. Практическая часть курса успешно выполнена.

Оценка неудовлетворительно – отсутствие ответа хотя бы на один из основных вопросов, либо грубые ошибки в ответах, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией. Практическая часть курса не выполнена или выполнена не в полном объеме.

6.3 Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по модулю, характеризующих этапы формирования компетенций.

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие процедуры и технологии:

- индивидуальное собеседование,
- письменные ответы на вопросы.

Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие процедуры и технологии: практические контрольные задания. Типы практических контрольных заданий:

- установление последовательности (описать алгоритм выполнения действия),
- указать возможное влияние факторов на последствия реализации умения и т.д.

6.4 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций и (или) для итогового контроля сформированности компетенции. (В приложении)

6.5 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания. (В приложении)

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Кристаллография»

а) основная литература:

- 1 Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Основы кристаллографии. М.: Физматлит, 2004, 500 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59410&DB=1> (30 экз)
2. Задачи по кристаллографии. Головачев В. П., Сафьянов Ю. Н., Чупрунов Е. В., Фадеев М. А., Хохлов А. Ф. М.: Физматлит, 2003. - 208 с.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59115&DB=1> (195 экз)

б) дополнительная литература:

1. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. - Геометрическая кристаллография: М.: Изд-во МГУ, 1986. – 165 с.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=102106&DB=1> (11 экз)
2. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая микрокристаллография. М.: Изд. МГУ, 1976, 238 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=102107&DB=1> (36 экз)
3. Костов И. Кристаллография. М.: Мир, 1965, 528 с.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=100118&DB=1> (10 экз)
4. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000, 494 с.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=44686&DB=1> (20 экз)

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы
<http://phys.unn.ru/library.asp?contenttype=Library>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Кристаллография»

Материально-техническое обеспечение дисциплины «Кристаллография» обусловлено наличием необходимого количества учебников в библиотеке, некоторые из них представлены

на сайте физического факультета в электронном виде. Кроме того, при необходимости выполнения некоторых математических расчетов студенты могут воспользоваться техническими возможностями терминал-класса с установленным лицензионным программным обеспечением.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций и ПрОП ВПО по направлению «03.03.02 – Физика», профиль «Кристаллофизика».

Автор: доцент каф. КЭФ, к.ф.-м.н. Овсецина Т.И.

Рецензент (ы) _____

Заведующий кафедрой _____

Программа рекомендована на заседании кафедры КрЭФ от
_____, год, протокол №_____

Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета от
_____, год, протокол №_____