

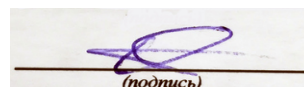
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Кафедра микроэлектроники и общей физики

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета



И.С.Огнев

« 23 » мая 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины
«Основы кристаллографии и кристаллохимии»**

Направление подготовки

11.03.04 Электроника и нанoeлектроника

Направленность (профиль)

«Интегральная электроника и нанoeлектроника»

Форма обучения

очная

Программа рассмотрена
на заседании кафедры
от «17» апреля 2023 года, протокол № 5

Программа одобрена НМК
физического факультета
протокол № 5 от «25» апреля 2023 года

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целями преподавания дисциплины «Основы кристаллографии и кристаллохимии» являются:

- формирование у студентов естественнонаучного мировоззрения путем знакомства с основами теории абстрактных групп и теории точечной и пространственной симметрии кристаллических структур;
- формирование умений и навыков использования теоретических знаний в области теории точечной и пространственной симметрии кристаллических структур для объяснения имеющихся и предсказания новых физических свойств и явлений в кристаллических структурах.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Основы кристаллографии и кристаллохимии» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 и является частью модуля «Общий физический практикум».

Дисциплина «Основы кристаллографии и кристаллохимии» опирается на содержание дисциплины «Аналитическая геометрия и линейная алгебра», «Векторный и тензорный анализ». Полученные в курсе «Основы кристаллографии и кристаллохимии» знания необходимы для изучения дисциплин «Физика конденсированного состояния», «Физические основы электроники», «Материалы электронной техники», «Основы технологии электронной компонентной базы».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ООП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
Общепрофессиональные компетенции		
ОПК-1. Способен использовать положения, законы и методы естественных наук и математики для решения задач инженерной деятельности.	ИД_ОПК-1.1. Знает фундаментальные законы природы и основные физические и математические законы.	Знать: <ul style="list-style-type: none"> - основы теории абстрактных групп; - основные элементы точечной и пространственной симметрии; - решетки Браве; - понятия прямой и обратной решетки; - группы точечной симметрии; - основные понятия кристаллохимии; - об основных типах кристаллических структур; - кристаллические структуры основных полупроводниковых материалов
	ИД_ОПК-1.2. Способен применять физические законы и математические методы для решения задач теоретического и прикладного характера.	Уметь: <ul style="list-style-type: none"> - анализировать любую точечную группу симметрии; - строить условные и примитивные элементарные ячейки решеток Браве.
	ИД_ОПК-1.3. Демонстрирует навыки использования знаний физики и математики при решении практических задач.	Владеть: <ul style="list-style-type: none"> -навыками описания и построения условных и примитивных элементарных ячеек основных полупроводниковых кристаллических структур; - навыками анализа кристаллохимических характеристик полупроводниковых структур.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 акад. часов.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Контактная работа лекции
			Контактная работа					самостоятельная работа	
			лекции	практические	лекции	практические	лекции		
1	Кристаллические решетки	3	5	4		1		8	Задания для самостоятельной работы, Коллоквиум
2	Обратная решетка.	3	2	2				8	Задания для самостоятельной работы, Коллоквиум
3	Элементы теории групп симметрии	3	4	4		1		20	Задания для самостоятельной работы. Коллоквиум
4	Химическая связь в кристаллах.	3	2	2				10	Задания для самостоятельной работы.
5	Основные понятия кристаллохимии	3	2	3		1		12	Задания для самостоятельной работы
6	Основные типы кристаллографических структур	3	2	2				12,7	Задания для самостоятельной работы,
							0,3		Зачет
	Всего		17	17		3	0,3	70,7	

Содержание разделов дисциплины:

1. Кристаллические решетки.

Задачи курса в процессе подготовки специалиста в области микроэлектроники.

Анизотропия и симметрия внешней формы, физические свойства и структура кристаллов. Простые и сложные кристаллические решетки. Решетка Бравэ и ее основные векторы. Примитивные и условные элементарные ячейки. Элементарная ячейка Вигнера-Зейтца. Кристаллические структуры и решетки с базисом. Кристаллографические символы узлов, узлового ряда, плоскости (индексы Миллера).

2. Обратная решетка.

Определение обратной решетки. Элементарная ячейка обратной решетки. Зоны Бриллюэна. Обратные решетки для структур кубической сингонии.

3. Элементы теории групп симметрии.

Элементы теории абстрактных групп. Операции точечной симметрии. Теоремы о сочетании операций точечной симметрии. Группы точечной симметрии. Группа

трансляции. Операции пространственной симметрии. Сочетание точечной и пространственной симметрии. Сингонии и кристаллические системы. Решетки Бравэ. Несобственные операции пространственной симметрии. Теоремы о сочетании операций пространственной симметрии. Пространственные группы симметрии кристаллических структур.

4. Химическая связь в кристаллах.

Металлическая, ионная, ковалентная, водородная связи, силы Ван-дер-Ваальса.

5. Основные понятия кристаллохимии.

Атомные и ионные радиусы. Координационное число и координационный многогранник. Число атомов в ячейке. Стехиометрическая формула вещества. Поляризация ионов. Пределы устойчивости структур. Плотнейшие упаковки. Политипия. Изоморфизм и полиморфизм.

6. Основные типы кристаллографических структур.

Структура меди. Структура магния. Структура каменной соли. Структура алмаза. Структура сфалерита (цинковой обманки) и вюрцита. Структура перовскита. Структура флюорита CaF_2 . Структура корунда. Структура графита. Структура шпинели.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

Академическая лекция(или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

Практическое занятие – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- для формирования текстов методических материалов для лабораторных работ, промежуточной и текущей аттестации, а также отчетов студентов по лабораторным работам – пакеты Microsoft Office и Open/Libre Office;
- для расчёта формул – программа Wolfram Mathematica;

– для обработки результатов данных Excel.

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

В процессе осуществления образовательного процесса по дисциплине используются:

автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT»
http://www.lib.uniylar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Р. Ф. Балабаева. Кристаллография и дефекты в кристаллах. Ярославль: ЯрГУ, 1986.
<http://www.lib.uniylar.ac.ru/edocs/iuni/19860701.pdf> (электронный ресурс)
2. Б. К. Вайнштейн. Кристаллография и жизнь. М.: Физмалит, 2012.

б) дополнительная литература

1. Н. Ашкрофт. Физика твердого тела. Т. 1: Физика твердого тела. М.: Мир, 1979.
2. Н. Ашкрофт. Физика твердого тела. Т. 2: Физика твердого тела. М.: Мир, 1979.
3. Физика твердого тела : учеб. пособие для вузов. / под ред. А. С. Рудого, А. В. Проказникова. Ярославль: ЯрГУ, 2009.
<http://www.lib.uniylar.ac.ru/edocs/iuni/20090709.pdf> (электронная версия)

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения практических занятий (семинаров);
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде ЯрГУ.

Автор:

старший преподаватель кафедры микроэлектроники

и общей физики, к.ф.-м.н.

Романов Д.Н.

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Основы кристаллографии и кристаллохимии»**

**Фонд оценочных средств
для проведения текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации студентов
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания или иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Задания для самостоятельной работы

(данные задания выполняются студентом самостоятельно и преподавателем в обязательном порядке проверяются) Проверяется сформированность компетенции ОПК-1 (индикаторы ИД_ОПК-1.2, ИД_ОПК-1.3).

Задания по теме № 1 «Кристаллические решетки»:

1. Построить элементарные ячейки Вигнера-Зейтца для о.ц.к. и структуры типа алмаз.

Задания по теме № 2 «Обратная решетка»:

1. Построить элементарную ячейку обратной решетки для структуры алмаз и цинковой обманки.
2. Если b_1, b_2, b_3 базисные векторы обратной решетки то справедливы соотношения:

$$b_1(b_2 \times b_3) = \frac{(2\pi)^3}{a_1(a_2 \times a_3)}, \quad a_1 = 2\pi \frac{b_2 \times b_3}{b_1(b_2 \times b_3)}, \quad \text{где } a_1, a_2, a_3 \text{ базисные векторы прямой решетки.}$$

Задания по теме № 3 «Элементы теории групп симметрии»:

Доказать теоремы о сочетании операций точечной симметрии:

Теорема 1. Равнодействующей двух пересекающихся плоскостей симметрии является ось симметрии (совпадает с линией пересечения плоскостей) с элементарным углом поворота, равным удвоенному углу между плоскостями.

Теорема 2. Точка пересечения четной оси симметрии с перпендикулярной ей плоскостью всегда является центром симметрии.

Теорема 3. Если перпендикулярно оси симметрии n -го порядка проходит ось симметрии 2-го порядка, то всего имеется n таких осей второго порядка, перпендикулярных оси n -го порядка и расположенных через угол π/n плоскости, перпендикулярной оси n -го порядка.

Теорема 4. Если вдоль оси n -го порядка проходит плоскость симметрии, то таких плоскостей имеется всего n , проходящих через ось n -го порядка. Угол между соседними плоскостями равен π/n .

Теорема 5. (Теорема Эйлера). Равнодействующей двух пересекающихся осей симметрии является третья ось, проходящая через точку их пересечения.

Теорема 6. Взаимодействие двух осей симметрии 2-го порядка, пересекающихся под углом α , порождает поворотную ось симметрии с элементарным углом $\beta = 2\alpha$.

Доказать теоремы о сочетании операций пространственной симметрии:

Теорема 7. Последовательное отражение в двух параллельных плоскостях симметрии равносильно трансляции на параметр $t = 2a$, где a – расстояние между плоскостями.

Теорема 7 а (обратная). Любую трансляцию можно заменить отражением в двух параллельных плоскостях, отстоящих друг от друга на расстоянии $a = t/2$, где t – параметр трансляции.

Теорема 8. Плоскость симметрии и перпендикулярная ей трансляция с параметром t порождают новые вставленные плоскости симметрии, параллельные порождающей, аналогичные ей по типу и отстоящие от нее на расстоянии $t/2$.

Теорема 9. Плоскость симметрии m и трансляция t , составляющая с плоскостью угол α , порождают плоскость скользящего отражения, параллельную порождающей плоскости и отстоящую от нее в сторону трансляции на $(t/2) \sin(\alpha)$. Величина скольжения вдоль порожденной плоскости равна $t \cos \alpha$.

Теорема 10. Отражение в двух пересекающихся плоскостях симметрии можно заменить вращением вокруг оси симметрии, совпадающей с линией пересечения этих плоскостей. Угол поворота вокруг этой оси равен удвоенному углу между плоскостями.

Теорема 10а (обратная). Ось симметрии, простую или винтовую, можно заменить парой плоскостей симметрии, простых или скользящего отражения, пересекающихся под углом, соответствующим порядку оси.

Теорема 11. Трансляция, перпендикулярная оси симметрии, порождает такую же ось симметрии, параллельную порождающей и смещенную на $t/2$ в направлении трансляции.

Эта теорема относится к любым осям симметрии – простым, винтовым и инверсионным, в том числе и к оси $\bar{1}$, т. е. к центру симметрии.

Теорема 12. Ось симметрии с углом поворота α и перпендикулярная к ней трансляция t порождают такую же ось симметрии, параллельную данной, отстоящую от нее на расстояние $t/(2\sin(\alpha/2))$ и расположенную на линии, перпендикулярной к трансляции t в ее середине.

Теорема 13. Винтовая ось симметрии с углом поворота α и переносом t_1 и перпендикулярная к ней трансляция t порождают винтовую ось с тем же углом и тем же переносом, параллельную данной, отстоящую от нее на $t/(2\sin(\alpha/2))$ и расположенную на линии, перпендикулярной к трансляции t в ее середине.

Теорема 14. Ось симметрии с углом поворота α и трансляция t , составляющая с ней угол β , порождают винтовую ось симметрии.

Теорема 15. Винтовая ось симметрии с углом поворота α и переносом t_1 и трансляция t , составляющая с винтовой осью угол β , порождают винтовую ось симметрии с тем же углом поворота.

Теорема 16. Инверсионно-поворотная ось с углом поворота α и перпендикулярная к ней трансляция t порождают ту же инверсионно-поворотную ось, параллельную порождающей.

Следствие: центр симметрии и трансляция t порождают новый центр симметрии, смещенный относительно данного в направлении трансляции t на половину ее величины.

Теорема 17. Инверсионно-поворотная ось с углом поворота α и трансляция t , составляющая с этой осью угол β , порождают инверсионную ось с тем же поворотом α , параллельную данной.

Доказать, что в кристаллах могут быть только поворотные оси C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 .

Задания по теме № 4 «Химическая связь в кристаллах»:

Силы Ван-дер-Ваальса

Задания по теме № 5 «Основные понятия кристаллохимии»:

1. Железо имеет структуру *о.ц.к.* при температуре ниже 910°C и *г.ц.к.* – выше 910°C . В обеих структурах атомный радиус железа одинаков. Рассчитать отношение удельных весов железа в этих двух структурах при 910°C .
2. В структуре *г.ц.к.* объемы полостей (так называемых междоузлий) между атомами

- малы: а) определить положение самого большого междоузлия; б) рассчитать максимальный объем посторонней сферической примеси, которую можно поместить в самое большое междоузлие, считая что атомы в этой структуре имеют сферическую форму; в) сколько соседних атомов будет касаться атом примеси?
3. Рассчитать те же величины как и в задании 2 для структуры *о.ц.к.* и алмаз.

Задания по теме № 6 «Основные типы кристаллографических структур»:

1. Написать координаты всех атомов элементарной ячейки решетки алмаз.
2. Рассчитать угол между связями в кристаллическом кремнии.
3. Показать каким соотношением определяется расстояние d между двумя соседними плоскостями типа (hkl) в простой кубической решетке с ребром a .
4. У каких плоскостей в структуре *г.ц.к.* и *о.ц.к.* наибольшая плотность упаковки атомов? В каких направлениях в этих плоскостях линейная плотность атомов максимальна?
5. Покажите, что плотность упаковки для *г.ц.к.* составляет 0.74, а для алмаза – 0.34.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

На зачёте проверяется сформированность компетенции ОПК-1 (индикатор ИД_ОПК-1.1).

Список вопросов к зачету:

1. Простые и сложные кристаллические решетки.
2. Решетка Бравэ.
3. Примитивные и условные элементарные ячейки.
4. Элементарная ячейка Вигнера-Зейтца.
5. Кристаллографические символы узлов, узлового ряда, плоскости (индексы Миллера).
6. Определение обратной решетки.
7. Элементарная ячейка обратной решетки. Связь ее с прямой решеткой.
8. Зоны Бриллюэна.
9. Обратные решетки для структур кубической сингонии.
10. Основы теории абстрактных групп.
11. Операции точечной симметрии.
12. Теоремы о сочетании операций точечной симметрии.
13. Группы точечной симметрии.
14. Группа трансляции. Операции пространственной симметрии.
15. Сочетание точечной и пространственной симметрии.
16. Сингонии и кристаллические системы.
17. Несобственные операции пространственной симметрии. Теоремы о сочетании операций пространственной симметрии.
18. Пространственные группы симметрии кристаллических структур.
19. Металлическая химическая связь.
20. Ионная химическая связь.
21. Ковалентная химическая связь.
22. Водородная связи и силы Ван-дер-Ваальса.
23. Атомные и ионные радиусы. Пределы устойчивости структур.
24. Координационное число и координационный многогранник для основных кристаллических структур.
25. Число атомов в ячейке. Стехиометрическая формула вещества. Поляризация ионов.
26. Плотнейшие упаковки. Политипия.
27. Изоморфизм и полиморфизм.
28. Основные типы кристаллических структур: меди, магния, каменной соли, алмаза,

сфалерита (цинковой обманки) и вюрцита, перовскита, флюорита CaF_2 , корунда, графита, шпинели.

Правила выставления оценки

По итогам зачёта выставляется одна из оценок: «зачет» или «незачет».

Оценка «зачет» выставляется студенту, который **знает** основы теории абстрактных групп; основные элементы точечной и пространственной симметрии; решетки Браве; понятия прямой и обратной решетки; группы точечной симметрии; основные понятия кристаллохимии; об основных типах кристаллических структур; кристаллические структуры основных полу-проводниковых материалов; **умеет** анализировать любую точечную группу симметрии; строить условные и примитивные элементарные ячейки решеток Браве; **владеет** навыками описания и построения условных и примитивных элементарных ячеек основных полупроводниковых кристаллических структур; навыками анализа кристаллохимических характеристик полу-проводниковых структур; навыками самостоятельной работы с источниками информации.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, у которого знания, умения и навыки ниже, чем при пороговом уровне, соответствующем оценке «зачет».

Приложение № 2 к рабочей программе дисциплины «Основы кристаллографии и кристаллохимии»

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Основы кристаллографии и кристаллохимии» являются лекции с использованием демонстрационного эксперимента. По большинству тем предусмотрены практические занятия, на которых происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным физическим задачам и отработка навыков работы с математическим аппаратом.

Для успешного освоения дисциплины очень важна самостоятельная работа студентов над конспектами прослушанных лекций и разделами курса для самостоятельного изучения. Следует уделять большое внимание подготовке к практическим (семинарским) занятиям. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, практических занятиях или из учебной литературы при самостоятельной проработке разделов курса.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала, приобретенных практических навыков работы и проведения расчетов, в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде коллоквиума в 3-ом семестре и самостоятельных работ (в аудитории) в течение практических (семинарских) занятий в семестре. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения.

Зачет принимается по экзаменационным билетам, каждый из которых включает в себя три теоретических вопроса. На самостоятельную подготовку к зачету выделяется не менее 3 дней, во время подготовки к зачету предусмотрена групповая консультация.

Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины «Основы кристаллографии и кристаллохимии» самостоятельно студенту крайне сложно. Это связано со сложностью изучаемого материала и большим объемом курса. Поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым. Без упорных и регулярных занятий в течение семестра сдать экзамен по итогам изучения дисциплины студенту практически невозможно.