КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет (назва факультету)

крязатверджую»

Кафедра загальної фізики

Ваступник декана навча тьної роботи Monato.B. факультет 2022 року РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЗНИЮ ДИСЦИПЛІНИ¹ Кристалічна будова твердих тіл ВЕ 2.1.1 (повна назва навчальної дисципліни) для студентів галузь знань 10 Природничі науки (шифр і назва) 104 Фізика та астрономія спеціальність (шифр і назва спеціальності) бакалавр освітній рівень (молодший бакалавр, бакалавр, магістр) освітня програма Фізичне матеріалознавство/Неметалічне матеріалознавство (назва освітньої програми) спеціалізація (за наявності) (назва спеціалізації) вид дисципліни вибіркова Форма навчання очна Навчальний рік Семестр 5 Кількість кредитів ECTS Мова викладання, навчання українська та оцінювання Форма заключного контролю залік Викладачі: зав. кафедри загальної фізики, професор Боровий М.О. (Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

КИЇВ - 2022

¹ Робоча програма навчальної дисципліни є нормативним документом вищого навчального закладу і містить виклад конкретного змісту навчальної дисципліни, послідовність, організаційні форми її вивчення та їх обсяг, визначає форми та засоби поточного і підсумкового контролів.

Розробники²:

Боровий Микола Олександрович, доктор фіз.-мат. наук, професор,

зав. кафедри загальної фізики

(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕН

(підпис)

(Боровий М.О.) (прізвище та ініціали)

Протокол № 7 від 19 травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

протокол №11 від 10 червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії

(Оліх (прізвище

² Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії — для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді навчального закладу коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

ВСТУП

1. Мета дисципліни — отримання глибоких та систематичних знань щодо атомнопросторової структури кристалів, методів її опису та представлення. Зокрема, засвоєння принципів розгляду структури ідеальних кристалів, побудови точкових і просторових груп симетрії кристалів, а також зумовлених ними фізичних властивостей кристалічних твердих тіл. Ознайомлення з основними типами кристалічних структур. З'ясування особливостей структури реальних кристалів, зумовлених утворенням різних типів структурних дефектів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

- 1. Знати закони класичної електродинаміки, оптики та атомної фізики, а також основи математичного аналізу та теорії функції комплексної змінної.
- 2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів аналітичної геометрії та лінійної алгебри, векторного та тензорного аналізу для опису перетворень координат.

3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

У рамках курсу <u>Кристалічна будова твердих тіл</u> розглядаються основні принципи опису атомно-просторової структури кристалічних твердих тіл, а саме, побудова і властивості точкових та просторових груп симетрії кристалів, фізичні властивості кристалів, зумовлені симетрією кристалічної гратки, а також дефекти атомно-просторової структури реальних кристалів. <u>Навчальна задача</u> курсу полягає в оволодінні методами опису атомно-просторової структури кристалів і принципами їх практичного застосування для розв'язку задач структурного аналізу, пов'язаних з визначенням основних параметрів кристалічної гратки. <u>Результати навчання</u> полягають в набутті навичок застосування методів опису симетрії кристалів для аналізу фізичних властивостей твердих тіл та визначення атомно-просторової структури реальних кристалів методами нейтроно-, рентгеноструктурного аналізу, електронографії та EXAFS. Методи викладання: лекції, залік. Методи оцінювання: опитування в процесі лекції, контрольні роботи після основних розділів спецкурсу, залік. Підсумкова оцінка складається з семестрових модульних оцінок (60%) та оцінки підсумкового контролю знань (40%).

4. Завдання (навчальні цілі) — засвоєння сучасних теоретичних підходів до опису атомнопросторової структури кристалів, що базуються та аналізі точкових та просторових груп симетрії, оволодінні методами та принципами як розв'язку задач структурної кристалографії, так і їх застосування в експериментальному структурному аналізі методами рентгенівської, нейтронної та електронної дифракції.

Згідно вимог проекту Стандарту вищої освіти України перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОПП «Фізичне матеріалознавство/Неметалічне матеріалознавство» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальних:

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК5. Здатність приймати обгрунтовані рішення.

Фахових:

ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.

ФК9. Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.

ФК10. Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для

розробки заходів оцінювання)

Код	Результат навчання . знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*) Результат навчання Знати принципи опису атомнопросторової структури ідеальних кристалів, зокрема, побудову точкових та просторових груп симетрії кристалів, фізичні властивості кристалів, зумовлені симетрією кристалічної гратки.	Методи викладання і навчання лекції	Методи оцінювання Модульна контрольна робота	Відсоток у підсумкові й оцінці з дисципліни 14
1.2	Виконувати математичне формулювання основних принципів опису симетрії кристалів. Знати і володіти основними методами розв'язку задач структурної кристалографії щодо визначення параметрів та характеристик кристалічної гратки. Засвоїти методи моделювання кристалічних структур з використанням програмного пакету Vesta-3.	лекції	Модульна контрольна робота	16
2.1	Знати принципи формування та фізичні характеристики різних видів міжатомного зв'язку в кристалах і зумовлені ними основні типи кристалічних структур. Вміти визначати основні кристалографічні параметри, що характеризують різні структурні типи. Розуміти принципи експериментального визначення параметрів кристалічної структури методами рентгеноструктурного аналізу.	лекції	Модульна контрольна робота	14
2.2	Знати фізичні механізми утворення різних типів дефектів кристалічної	лекції	Модульна контрольна	16

^{*} заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

структури. Знати і володіти	робота
основними методами розв'язку задач	
щодо визначення фізичних умов	
генерації дефектів у твердих тілах та	
фізичних характеристик дефектів у	
кристалах різних структурних типів.	

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	2.2
Програмні результати навчання	1.1	1,2	2.1	2.2
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні	+		+	
положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної,				
релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та				
термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової				
оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення,				
аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів				
різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування				
складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики				
та астрономії.				
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики:		+		+
аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні				
експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.				
ПРН4. Вміти застосовувати базові математичні знання, які		+		+
використовуються у фізиці та астрономії: з аналітичної				
геометрії, лінійної алгебри, математичного аналізу,				
диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірностей				
та математичної статистики, теорії груп, методів математичної				
фізики, теорії функцій комплексної змінної, математичного				
моделювання				
ПРН8. Мати базові навички самостійного навчання: вміти	+		+	
відшуковувати потрібну інформацію в друкованих та				
електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти,				
тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і				
прикладних завдань.				
ПРН27. Мати базові навички експериментального дослідження		+		+
функціональних матеріалів різноманітного призначення, вміти				
обирати оптимальні методи та засоби їхнього дослідження				

Структура курсу

Курс складається з 2-х змістових модулів: 1.) «Основи структурної кристалографії», який містить 7 лекцій; 2.) «Основні типи кристалічних структур та особливості кристалічної будови реальних кристалів», який складається з 8 лекцій

7. Схема формування оцінки:

7.1. Форми оцінювання студентів: (зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю / оцінювання із зазначенням Міп. — рубіжної та Мах. кількості балів чи відсотків)

- семестрове оцінювання:

Модульна контрольна робота 1 (18 балів -30 балів). Формує загальну оцінку першого змістового модулю.

Модульна контрольна робота 2 (18 балів -30 балів). Формує загальну оцінку другого змістового модулю.

- підсумкове оцінювання у формі заліку

Підсумкове оцінювання у формі заліку¹: (обов'язкове проведення залікового

оцінювання в письмовій формі)

	3M1/Частина 1 (за наявності)	3M2/Частина 2 (за наявності)	Залік	Підсумкова оцінка
Мінімум	<u>18</u>	<u>18</u>	<u>24</u>	<u>60</u>
Максимум	<u>30</u>	<u>30</u>	40	<u>100</u>

у випадку комплексного екзамену слід вказати питому вагу складових Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше 36 балів. (слід чітко прописати умови, які висуваються викладачами даної дисципліни).

Оцінка за залік не може бути меншою 24 балів для отримання загальної позитивної оцінки за курс.

7.2. Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням, у тому числі, результатів навчання, опанування яких перевіряється конкретним оцінюванням).

7.3. Шкала відповідності

 Відмінно / Excellent
 90-100

 Добре / Good
 75-89

 Задовільно / Satisfactory
 60-74

 Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail
 35-59

 Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail
 0-34

 Зараховано / Passed
 60-100

 Не зараховано / Fail
 0-59

¹ Семестрову кількість балів формують бали, отримані студентом у процесі теоретичного засвоєння матеріалу з усіх розділів дисципліни, семінарських занять, виконання практичних, лабораторних, індивідуальних, підсумкових контрольних робіт, творчих робіт впродовж семестру, передбачених робочою навчальною програмою (100 балів - для залікових дисциплін, у випадку, якщо дисципліна завершується екзаменом, то розподіл здійснюється за таким алгоритмом: 60 балів (60%) – семестровий контроль і 40 балів (40%) – екзамен).

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

		Кількість годин			
№ п/п	Назва теми	лекції	лаборат орні	Самості йна робота	
	Частина 1.				
	Змістовий модуль 1. Основи структурної кр	ристалогр	афії	T	
1	Тема 1. Структура твердих тіл. Кристал як континуум та дисконтинуум. Кристалічний многогранник та просторова гратка. Елементарна комірка. Індекси вузлів, прямих та площин. Кристалографічна зона. Параметри Вейсса та індекси Міллера. Прямий і обернений кристалографічний комплекс. Проекційні зображення кристалів Сферична стереографічна, гнономічна та гномостереографічна проекції. Сітка Вульфа.	2	-	4	
2	Тема 2. Прості елементи симетрії. Площина симетрії. Вісь симетрії. Порядок осі. Центр інверсії. Складні елементи симетрії. Інверсійна та дзеркально-поворотна осі. Матричне зображення операцій симетрії. Поєднання елементів симетрії. Кристалографічні категорії. Кристалографічні системи координат. Сингонії. Класи симетрії.	2	-	4	
3	Тема 3. Поняття математичної групи. Абелеві та циклічні групи. Представлення груп. Базис та розмірність представлення груп. Незвідні представлення. Характери.	2	-	4	
4	Тема 4. Точкові групи. Побудова точкових груп. Символіка точкових груп. Розподіл основних типів природніх кристалів по точковим групам.	2	-	4	
5	Тема 5. Трансляційна симетрія у кристалах. Гратка Браве. Вибір елементарної комірки Браве. Типи комірок Браве. Елементи симетрії при наявності трансляції. Площина ковзаючого відбивання. Гвинтові осі. Поєднання елементів симетрії дисконтинуума.	2	-	4	
6	Тема 6. Просторові групи. Правильні системи точок. Значність та кратність. Методи побудови правильних систем точок для деяких просторових груп. Символіка просторових груп. Міжнародні таблиці з кристалографії.	2	-	4	
8	Тема 7. Означення елементарних трансляцій оберненої гратки. Основні властивості оберненої гратки. Використання оберненої гратки у кристалографії та фізиці твердого тіла. Комірка Вігнера-Зейца. Поняття про зони Бриллюена.	2	-	4	
	Підсумкова модульна контрольна робота 1 Частина 2. Змістовий модуль 2. Основні типи кристалічних стр	руктур та	особливос	mi	

	кристалічної будови реальних крис	талів		
9	Тема 8 . Реальні розміри атомів у твердому тілі. Атомні та іонні радіуси. Координаційне число та координаційний многогранник. Типи атомного зв'язку у кристалах. Стійкість кристалічної гратки. Критерії стійкості для кубічної, тетраедричної та октаедричної координації атомів.	2	-	4
10	Тема 9. Щільні упаковки у кристалах. Коефіцієнт компактності. Тетраедричні та октаедричні порожнини. Гексагональна щільна упаковка. Багатошарові структури. Політипія. Основні структурні типи. Структура чистих елементів - металів (A1, A2, A3).	2	-	4
11	Тема 10. Характеристика структури діаманту (А4). Особливості структури графіту (А9). Типи структур бінарних сполук - кам'яної солі (В1), СsCl, флюориту, сфалериту (В3) та вюрциту (В4). Структурний тип перовскиту (Е2 ₁) . Характеристика структури корунду(Д5) та шпінелі (Н1 ₁).	2	-	4
12	Тема 11. Типи структурних дефектів у кристалах. Точкові дефекти. Вакансії та атоми у міжвузловині. Дефекти за Френкелем та за Шоткі. Конфігураційна ентропія кристалів. Рівноважна концентрація дефектів за Френкелем та за Шоткі. Механізми генерації точкових дефектів.	2	-	4
13	Тема 12. Іонна провідність кристалів. Механізми іонної провідності. Суперіонні провідники. Центри забарвлення у іонних кристалах. Лінійні дефекти. Дислокації. Крайова та гвинтова дислокації. Вектор Бюргерса. Позначення дислокацій. Потужність дислокації. Основні типи дислокацій у кубічних кристалах.	2	3	4
14	Тема 13. Рух дислокацій: консервативний та переповзання. Механізми утворення дислокацій. Джерело Франка-Ріда. Струнна модель дислокації. Енергія краєвої та гвинтової дислокації. Взаємодія дислокацій Методи експериментального дослідження дислокацій.	2	-	4
15	Тема 14. Двовимірні дефекти. Дефекти упаковки та їх типи. Двійникування. Вирощування кристалів, методи вирощування. Механічні властивості кристалів. Напруги та деформації в кристалах. Пластична деформація. Спайність, твердість. Теплове розширення кристалів.	2	-	4
	Тема 15. Симетрія та діелектричні властивості. Магнітні властивості. Сегнетоелектричні властивості. Теплопровідність. Подвійне променезаломлення та поляризація світла у кристалах. Застосування поляризованого світла для вивчення властивостей кристалів. П'єзоелектричний ефект.	2	-	4

Електрооптичний ефект. П'єзооптичний ефект.			
Підсумкова модульна контрольна робота			
ВСЬОГО	30	0	60

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 3 кредити = **90** годин $cod.^2$, в тому числі:

Лекцій **– 30** *год*.

Семінари – 0 год.

Практичні заняття - 0 год.

Лабораторні заняття – 0 год.

Тренінги – **0** год.

Консультації - 0 год.

Самостійна робота - 60 год.

ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ СТУДЕНТІВ:

- 1. Кристалічний многогранник та просторова гратка. Елементарна комірка. Індекси вузлів, прямих та площин.
- 2. Кристалографічна зона. Параметри Вейсса та індекси Міллера.
- 3. Прямий і обернений кристалографічний комплекс. Сферична стереографічна, гнономічна та гномостереографічна проекції. Сітка Вульфа.
- 4. Прості елементи симетрії. Площина симетрії. Вісь симетрії. Порядок осі. Центр інверсії.
- 5. Складні елементи симетрії. Інверсійна та дзеркально-поворотна осі.
- 6. Матричне зображення операцій симетрії.
- 7. Теореми про сполучення точкових елементів симетрії.
- 8. Кристалографічні категорії. Кристалографічні системи координат. Сингонії. Класи симетрії.
- 9. Поняття математичної групи. Абелеві та циклічні групи. Представлення груп. Базис та розмірність представлення груп. Незвідні представлення. Характери.
- 10. Точкові групи. Побудова точкових груп. Символіка точкових груп.
- 11. Розподіл основних типів природніх кристалів по точковим групам.
- 12. Трансляційна симетрія у кристалах. Гратка Браве. Вибір елементарної комірки Браве. Типи комірок Браве.
- 13. Елементи симетрії при наявності трансляції. Площина ковзаючого відбивання. Гвинтові осі.
- 14. Теореми про сполучення елементів симетрії дисконтинуума.
- 15. Просторові групи. Правильні системи точок. Значність та кратність.
- 16. Методи побудови правильних систем точок для деяких просторових груп.
- 17. Символіка просторових груп. Міжнародні таблиці з кристалографії.
- 18. Означення елементарних трансляцій оберненої гратки. Основні властивості оберненої гратки.
- 19. Використання оберненої гратки у кристалографії та фізиці твердого тіла. Комірка Вігнера-Зейца. Поняття про зони Бриллюена.
- 20. Реальні розміри атомів у твердому тілі. Атомні та іонні радіуси. Координаційне число та координаційний многогранник.
- 21. Типи атомного зв'язку у кристалах. Стійкість кристалічної гратки. Критерії стійкості для кубічної, тетраедричної та октаедричної координації атомів.
- 22. Щільні упаковки у кристалах. Коефіцієнт компактності. Тетраедричні та октаедричні порожнини.

² Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

- 23. Гексагональна щільна упаковка.
- 24. Багатошарові структури. Політипія.
- 25. Основні структурні типи. Структура чистих елементів металів (А1, А2, А3).
- 26. Характеристика структури діаманту (А4).
- 27. Особливості структури графіту (А9).
- 28. Типи структур бінарних сполук кам'яної солі (B1), CsCl, флюориту, сфалериту (B3) та вюрциту (B4).
- 29. Структурний тип перовскиту (Е2₁).
- 30. Характеристика структури корунду(Д5) та шпінелі (Н1₁).
- 31. Типи структурних дефектів у кристалах. Точкові дефекти. Вакансії та атоми у міжвузловині. Дефекти за Френкелем та за Шоткі.
- 32. Конфігураційна ентропія кристалів. Рівноважна концентрація дефектів за Френкелем та за Шоткі. Механізми генерації точкових дефектів.
- 33. Іонна провідність кристалів. Механізми іонної провідності. Суперіонні провідники.
- 34. Центри забарвлення у іонних кристалах.
- 35. Лінійні дефекти. Дислокації. Крайова та гвинтова дислокації. Вектор Бюргерса. Позначення дислокацій.
- 36. Потужність дислокації. Основні типи дислокацій у кубічних кристалах.
- 37. Рух дислокацій: консервативний та переповзання.
- 38. Механізми утворення дислокацій. Джерело Франка-Ріда. Струнна модель дислокації.
- 39. Енергія краєвої та гвинтової дислокації.
- 40. Взаємодія дислокацій.. Методи експериментального дослідження дислокацій.
- 41. Двовимірні дефекти. Дефекти упаковки та їх типи. Двійникування.
- 42. Вирощування кристалів, методи вирощування.
- 43. Механічні властивості кристалів. Напруги та деформації в кристалах. Пластична деформація. Спайність, твердість.
- 44. Теплове розширення кристалів.
- 45. Симетрія та діелектричні властивості. Сегнетоелектричні властивості.
- 46. Магнітні властивості.
- 47. Теплопровідність.
- 48. Подвійне променезаломлення та поляризація світла у кристалах.
- 49. Застосування поляризованого світла для вивчення властивостей кристалів.
- 50. П'єзоелектричний ефект. Електрооптичний ефект. П'єзооптичний ефект.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА3:

Основна: (базова)

- 1. Л.О. Бірюкович. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія. Київ, КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018.
 - https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/25313/3/Biriukovich KKM.pdf
- 2. Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. Геометрична кристалографія. Львів, ЛНУ ім. Івана Франка, Ч1 Ч3, 2012.
 - https://gppkk.nmu.org.ua/ua/navchalno_ped/geom_cryst.pdf
- 3. І.М. Фодчук, О.О. Ткач. Основи кристалографії. Чернівці, ЧНУ ім. Юрія Фельковича, 2006.
 - https://shron1.chtyvo.org.ua/Fodchuk_Ihor/Osnovy_krystalohrafii.pdf?PHPSESSID=6gm2mg7ip2pf5aqoumsm4vqml1

_

³ В тому числі Інтернет ресурси

Додаткова:

- 1. М.П. Шакільська. Кристалографія, М. «Вища школа», 1984, 378с. Бібліотека фізичного факультету.
- 2. В.І. Новіков, К.М. Козик. Кристалографія та дефекти кристалічних грат. М., "Металургія". 1990, 336с.
- 3. В.М. Вігдорович, Г.Ф. Ухлінів. Структура ідеальних та реальних кристалів. М.,1980.
- 4. Штрайтвольф Р. Теорія груп у фізиці твердого тіла. М., "Світ", 1971.
- 5. Сучасна кристалографія (у чотирьох томах):
- 6. Т1. Б.К.Вайнштейн .Симетрія кристалів Методи структурної кристалографії.. М.: Наука, 1979.
- 7. Т2. Б.К.Вайнштейн, В.М.Фрідкін, В.Л.Інденбом. Структура кристалів. М.: Наука 1979.
- 8. Т3. А.А.Чернов, Є.І.Гіваргізов, Х.С.Багдасаров, В.А.Кузнєцов, Л.М.Дем'янець, О.М.Лобачов. М Освіта кристалів. М.: Наука, 1980.
- 9. Т4. Л.А.Шувалов, А.А.Урусовська, І.С.Желудєв. Фізичні властивості кристалів. М: Наука, 1981.