

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра нанотехнологий и микросистемной техники

**Авторы-составители: Семенова Оксана Рифовна
Волынцев Анатолий Борисович**

Рабочая программа дисциплины

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Код УМК 64390

Утверждено
Протокол №9
от «13» мая 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Кристаллография

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в обязательную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **28.03.01** Нанотехнологии и микросистемная техника
направленность Материалы микро- и наносистемной техники

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Кристаллография** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность : Материалы микро- и наносистемной техники)

ПК.1 Способен исследовать и контролировать структуру вещества на атомно-молекулярном уровне с помощью различных инструментальных методов

Индикаторы

ПК.1.1 Использует структурные и физико-химические принципы, определяющие строение реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность: Материалы микро- и наносистемной техники)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	4
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	28
Проведение практических занятий, семинаров	14
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Письменное контрольное мероприятие (3)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (4 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Кристаллография

Симметрия структуры кристаллов

Геометрическая кристаллография

Эмпирические законы кристаллографии. Симметрия кристаллов. Стандартные кристаллофизические и кристаллографические координатные системы. Прямой и обратный точечный комплекс. Полюсные фигуры и шаблоны. Кристаллографические проекции (линейные, сферические и стереографические).

Решетчатое строение кристаллов

Вектор решетки. Базис решетки. Простые и сложные решетки. Элементарная ячейка, примитивная ячейка. Выбор решетки. Переход от одного базиса к другому. Решетки Бравэ. Базис структуры. Индексы узла, узловой прямой и узловой плоскости. Формы. Уравнение плоскости. Объяснение эмпирических законов кристаллографии с помощью пространственной решетки. Решетка и структура. Метрический тензор и метрическая матрица. Длины осей и углы между ними. Период идентичности. Угол между прямыми. Объем элементарной ячейки.

Обратный (сопряженный) базис

Обратная решетка. Объем прямой и обратной элементарной ячеек. Одна особенность кубических кристаллов. Соответствие между узлами обратной решетки и узловыми плоскостями прямой решетки. Свойства вектора H обратной решетки. Межплоскостное расстояние. Зона плоскостей. Индексы прямых и плоскостей в гексагональной системе. Связь индексов плоскостей с индексами нормали. Области Вороного и ячейки Вигнера-Зейтца. Ячейки Вигнера - Зейтца в обратной решетке. Углы между плоскостями, между плоскостью и прямой. Формулы преобразования при замене векторов базиса: индексов прямых, индексов плоскостей, обратного базиса, метрической матрицы.

Структура ионных кристаллов

Плотные упаковки, коэффициент упаковки. Пустоты в шаровых упаковках. Многослойные упаковки. Применение теории упаковок для объяснения структуры кристаллов. Атомные и ионные радиусы. Геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами. Влияние поляризации ионов на структуру кристаллов. Структура металлических кристаллов.

Применение алгебры тензоров и теории групп в кристаллографии

Линейные операторы и матрицы

Ортогональные преобразования. Свойства операций симметрии. Определение и примеры групп. Абстрактные группы. Конечные и бесконечные группы, абелевы группы, циклические группы. Порядок элемента, порядок группы. Генераторы. Подгруппы, сопряженные элементы, класс, инвариантные группы, прямые произведения. Изоморфные группы. Матричные представления групп. След матрицы.

Вывод точечных групп кристаллов

Точечные группы. Обозначения. Порядок следования символов. Правильные системы точек. Эквивалентные направления и плоскости, формы. Операции симметрии, включающие трансляции. Пространственные группы. Пространственные группы и структура кристаллов.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Семенова О. Р. Кристаллография: учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки бакалавров "Нанотехнологии и микросистемная техника", "Прикладная математика и физика", "Физика"/О. Р. Семенова.-Пермь,2017, ISBN 978-5-7944-2902-2.-136.-Библиогр.: с. 132
<https://elis.psu.ru/node/436364>
2. Шаскольская М. П. Кристаллография: учебное пособие для студентов вузов/М. П. Шаскольская.- Москва: Высшая школа, 1984.-375.-Библиогр.: с. 371. - Предм. указ.: с. 372-375
3. Варской Б. Н., Федорова Н. М., Семенова О. Р. Задачник по кристаллографии/Б. Н. Варской, Н. М. Федорова, О. Р. Семенова.-Пермь,2012, ISBN 978-5-7944-1917-7.-1.
<http://www.campus.psu.ru/library/node/20510>

Дополнительная:

1. Кристаллография: зарождение, рост и морфология кристаллов : учебное пособие для бакалавриата и магистратуры / Н. И. Леонюк, Е. В. Копорулина, Е. А. Волкова, В. В. Мальцев. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 152 с. — (Бакалавр и магистр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-04738-7. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/438395>

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://www.iprbookshop.ru/84366.html> Бойко, С. В. Кристаллография и минералогия. Основные понятия

<http://www.iprbookshop.ru/67480.html> Белов, Н. П. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Кристаллография** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС) ;
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения:

1. Операционная система "ALT Linux".
2. Приложение позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов «Adobe Acrobat Reader DC».
3. Программы, демонстрации видео материалов (проигрыватель)«WindowsMediaPlayer».
4. Программа просмотра интернет контента (браузер) «Google Chrome» или аналогичных.
5. Офисный пакет приложений «LibreOffice».

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (student.psu.ru).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

- система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).
- система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.
- система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.

Практические занятия проходят в аудитории, оснащенной презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской. Практические занятия по разделам "Геометрическая кристаллография", "Решетчатое строение кристаллов", "Структура ионных кристаллов" рекомендуется организовать в Лаборатории рентгеноструктурного анализа, оснащенной специализированным оборудованием. Состав оборудования определен в Паспорте лаборатории.

Групповые (индивидуальные) консультации проводятся в аудитории, оснащенной меловой (и) или

маркерной доской.

Текущий контроль осуществляется в аудитории, оснащенной меловой (и) или маркерной доской.

К помещениям для самостоятельной работы студентов относятся:

- Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.
- Помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Кристаллография**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.1

Способен исследовать и контролировать структуру вещества на атомно-молекулярном уровне с помощью различных инструментальных методов

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.1.1 Использует структурные и физико-химические принципы, определяющие строение реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне</p>	<p>Знать: основные свойства стереографических и гномостереографических проекций, типы решеток Бравэ, понятие зоны плоскостей; свойства операций симметрии, сочетание элементов симметрии; методы определения базиса структуры кристалла, геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами, способы определения плотности и объема кристалла.</p> <p>Уметь: работать с сеткой Вульфа, применять стереографические проекции для решения задач по геометрической кристаллографии, переходить от одного базиса к другому, определять индексы прямой и плоскости в кристаллической решетке, период идентичности, строить прямую и обратную решетки для заданной структуры; находить коэффициент упаковки структуры, уметь определять координационное число решетки.</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Студент не знает основные свойства стереографических и гномостереографических проекций, типы решеток Бравэ, понятие зоны плоскостей; свойства операций симметрии, сочетание элементов симметрии; методы определения базиса структуры кристалла, геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами, способы определения плотности и объема кристалла. Не умеет работать с сеткой Вульфа, не умеет применять стереографические проекции для решения задач по геометрической кристаллографии, переходить от одного базиса к другому, определять индексы прямой и плоскости в кристаллической решетке, период идентичности, не может самостоятельно строить прямую и обратную решетки для заданной структуры; находить коэффициент упаковки структуры, не умеет определять координационное число решетки. Не владеет аппаратом тензорной алгебры для аналитического представления точечных групп кристаллов, методом получения и вывода точечных групп кристаллов и их свойств.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Студент не знает основные свойства стереографических и гномостереографических проекций. Знает типы решеток Бравэ, понятие зоны плоскостей; свойства операций симметрии, сочетание элементов симметрии; методы</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
	<p>Владеть: аппаратом тензорной алгебры для аналитического представления точечных групп кристаллов, методом получения и вывода точечных групп кристаллов и их свойств.</p>	<p>Удовлетворительн определения базиса структуры кристалла, геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами, способы определения плотности и объема кристалла. Студенту для работы с сеткой Вульфа требуется помощь преподавателя, не умеет применять стереографические проекции для решения задач по геометрической кристаллографии, умеет переходить от одного базиса к другому, способен самостоятельно определять индексы прямой и плоскости в кристаллической решетке, период идентичности, строить прямую и обратную решетки для заданной структуры; находить коэффициент упаковки структуры, умеет определять координационное число решетки. Способен представить в матричной форме некоторые операторы симметрии.</p> <p>Хорошо Студент знает основные свойства стереографических и гномостереографических проекций, типы решеток Бравэ, понятие зоны плоскостей; свойства операций симметрии, сочетание элементов симметрии; методы определения базиса структуры кристалла, геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами, способы определения плотности и объема кристалла. Для работы с сеткой Вульфа требуется помощь преподавателя, студент применяет стереографические проекции для решения задач по геометрической кристаллографии с подсказками. Студент умеет переходить от одного базиса к другому, определять индексы прямой и плоскости в кристаллической решетке, период идентичности, строить прямую и обратную решетки для заданной структуры; находить коэффициент упаковки структуры, умеет определять координационное число решетки. Владеет аппаратом тензорной</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>алгебры для аналитического представления точечных групп кристаллов, методом получения и вывода точечных групп кристаллов и их свойств, но с подсказками и консультациями преподавателя.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Студент знает основные свойства стереографических и гномостереографических проекций, типы решеток Бравэ, понятие зоны плоскостей; свойства операций симметрии, сочетание элементов симметрии; методы определения базиса структуры кристалла, геометрические пределы устойчивости структур с различными координационными числами, способы определения плотности и объема кристалла. Умеет работать с сеткой Вульфа, применять стереографические проекции для решения задач по геометрической кристаллографии, переходить от одного базиса к другому, определять индексы прямой и плоскости в кристаллической решетке, период идентичности, строить прямую и обратную решетки для заданной структуры; находить коэффициент упаковки структуры, умеет определять координационное число решетки. Владеет аппаратом тензорной алгебры для аналитического представления точечных групп кристаллов, методом получения и вывода точечных групп кристаллов и их свойств.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : СУОС 1

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 45 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 45 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.1 Использует структурные и физико-химические принципы, определяющие строение реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Геометрическая кристаллография Письменное контрольное мероприятие	Знания о симметрии кристаллов. Знание свойств элементов симметрии. Практические навыки работы с сеткой Вульфа при решении задач геометрической кристаллографии. Знание о базисе структуры кристалла.
ПК.1.1 Использует структурные и физико-химические принципы, определяющие строение реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Решетчатое строение кристаллов Письменное контрольное мероприятие	Знание о прямой и обратной решетке кристалла. Знание о индицировании прямых и плоскостей в кристаллах. Знание о координационном числе решетки. Знание о коэффициенте упаковки структуры.
ПК.1.1 Использует структурные и физико-химические принципы, определяющие строение реальных твердых тел на атомно-молекулярном уровне	Вывод точечных групп кристаллов Письменное контрольное мероприятие	Умение приводить матричное представление операций симметрии. Знание о сочетании элементов симметрии кристаллов. Знание о точечных группах кристаллов.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Геометрическая кристаллография

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **17**

Показатели оценивания	Баллы
-----------------------	-------

Практические навыки работы с сеткой Вульфа при решении задач геометрической кристаллографии	17
Знание свойств элементов симметрии	8
Знание формул геометрической кристаллографии	7
Знание о методах проектирования кристаллических многогранников	4
Знания о симметрии кристаллов	4

Решетчатое строение кристаллов

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **14**

Показатели оценивания	Баллы
Знание о прямой и обратной решетке кристалла.	8
Знание о индцировании прямых и плоскостей в кристаллах.	8
Знание о координационном числе решетки.	7
Знание о коэффициенте упаковки структуры.	7

Вывод точечных групп кристаллов

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **14**

Показатели оценивания	Баллы
Умение приводить матричное представление операций симметрии.	14
Знание о сочетании элементов симметрии кристаллов.	10
Знание о точечных группах кристаллов.	6