

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Затверджено

На засіданні кафедри фізики металів
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 9 від 29.08.2022 р.)

Завідувач кафедри



проф. Мудрий С. І.

Силабус
з навчальної дисципліни «Фізична кристалографія»,
що викладається в межах
ОНП «Експериментальна фізика»
другого (магістерського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності 104 Фізика та астрономія

Львів 2022

Назва дисципліни	Фізична кристалографія
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра фізики металів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 104 Фізика та астрономія
Викладачі дисципліни	Лектор: Щерба Іван Дмитрович, професор кафедри фізики металів, доктор фізико-математичних наук; лабораторні заняття проводить: Присяжнюк Віктор Іванович, асистент кафедри фізики металів.
Контактна інформація викладачів	ivan.shcherba@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/scherba viktor.prysyazhnyuk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/prysyazhnyuk
Консультації по дисципліні відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі консультації через електронну пошту або он-лайн засобами Microsoft Teams, Telegram.
Сторінка дисципліни	https://physics.lnu.edu.ua/course/fizychna-krystalohrafiya-fizyka-ta-astronomiya
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Фізична кристалографія» є нормативною дисципліною для підготовки магістрів за спеціальністю 104 Фізика та астрономія для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Дану дисципліну розроблено таким чином, щоб надати здобувачам освіти відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв’язання комплексних проблем у галузі кристалографії. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене виконання лабораторних робіт.
Мета та цілі дисципліни	Метою даної дисципліни є дати знання майбутнім магістрам про кристалічну будову та властивості матеріалів; залежність зовнішньої форми кристалів від внутрішнього розміщення частинок; симетрію кристалів, класи симетрії, види симетрії; форму кристалів, розміщення атомів в елементарній комірці; ґратки Браве; взаємодію між частинками; дифракцію рентгенівських променів; формули структурної кристалографії; дефекти в кристалах; анізотропію фізичних властивостей; вирощування кристалів. Навчити студентів самостійно виконувати розрахунки і побудови, необхідні для розв’язування задач фізичної кристалографії.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Фодчук І. М., Ткач О.О. Основи кристалографії. Чернівці. 2006. - 108 с. 2. Пчелінцев В.О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія. Суми. 2008. -226 с. 3. Бірюкович Л.О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія. Підручник. КПІ ім. Ігоря Сікорського. Київ. 2018. -234 с. Допоміжна: 4. Словотенко Н.О., Бакуменко І.Т. Геометрична кристалографія. Ч.1: Навчальний посібник. ЛНУ імені Івана Франка, 2015. -96 с. 5. Словотенко Н.О., Бакуменко І.Т. Геометрична кристалографія. Ч.2: Навчальний посібник. ЛНУ імені Івана Франка, 2015. -88 с.

	<p>6. Словотенко Н.О., Бакуменко І.Т. Геометрична кристалографія. Ч.3: Навчальний посібник. ЛНУ імені Івана Франка, 2015. -56 с.</p> <p>7. Колінько С.О., Бутенко Т.І., Ващенко В.А. Конспект лекцій з дисципліни «Кристалографія». ЧДТУ. Черкаси. 2020. -99 с.</p> <p>Додаткові матеріали також буде запропоновано для кожної теми окремо.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>Crystal Lattice Structures: http://physics.lnu.edu.ua/conferences/kryst/Space.htm http://physics.lnu.edu.ua/conferences/kryst/Prototype.htm http://physics.lnu.edu.ua/conferences/kryst/Pearson.htm http://physics.lnu.edu.ua/conferences/kryst/Strukturbercht.htm</p> <p>American Mineralogist Crystal Structure Database: http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php</p> <p>Структурна база COD+: https://crystallography.io/</p> <p>Crystallography Open Database: http://www.crystallography.net/cod/ https://nanocrystallography.org/</p> <p>Кембріджська кристалографічна база даних: https://www.ccdc.cam.ac.uk/</p> <p>Програма «PowderCell»: https://www.iucr.org/resources/other-directories/software/powder-cell</p> <p>Програма «Diamond» https://www.crystalimpact.com/diamond/</p> <p>Програмний пакет GASP: https://github.com/henniggroup/gasp</p> <p>Програмний пакет CALYPSO: http://www.calypso.cn/</p>
Тривалість курсу	один семестр
Обсяг курсу	90 годин, з яких 32 годин аудиторних занять (з них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних робіт) та 58 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення даної дисципліни студент повинен:</p> <p><u>знати:</u></p> <p>Кристалографічні проекції, прості і складні елементи симетрії, додавання елементів симетрії, розміщення частинок в кристалічній ґратці і взаємодію між ними, типи упаковки, фазові структурні переходи, поліморфізм, ізоморфізм, основні типи структур, тверді розчини, хімічні сполуки, гетеро сплави, залежність фізичних властивостей від розміщення частинок в елементарній комірці.</p> <p><u>вміти:</u></p> <p>Описувати зовнішню форму кристалів, будувати кристалографічні</p>

	<p>проекції граней, ребер та елементів симетрії; за елементами симетрії визначати енергію кристалу, знаходити зв'язок між експериментальними даними з дифракції рентгенівських променів з розміщенням атомів в елементарній комірці, визначити кількість частинок в елементарній комірці, їх просторове розміщення для основних структурних типів.</p> <p>Вміти застосовувати структурні формули кристалографії для визначення фазового складу речовини, параметри кристалічної ґратки, знаходити зв'язок між параметрами прямої і оберненої ґратки.</p> <p>Вміти використовувати знання структури для пояснення фізичних властивостей матеріалів.</p>
Ключові слова	Кристалографія, кристал, симетрія, ґратка Браве, елементарна комірка, структура, дефект, анізотропія, грань, ребро, вершина
Формат курсу	Очний
	Проведення лекцій, лабораторних занять та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у таблиці 1
Підсумковий контроль, форма	Залік в кінці 3-го семестру.
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики (механіки, молекулярної фізики, електрики, оптики та атомної фізики) та деяких більш спеціалізованих курсів (фізика твердого тіла, спектроскопія атомів, молекул і кристалів). Вміти застосовувати, набуті раніше, знання з програмування та комп'ютерного моделювання для оволодіння новими програмним пакетом. Володіти навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури в мережі Інтернет та науко-метричних базах даних.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	<p>Використовуються такі методи навчання:</p> <p>а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт;</p> <p>б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами та графіками;</p> <p>в) <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об'єктів.</p>
Необхідне обладнання	Персональні комп'ютери, операційні системи (Windows, Linux), загальноновживані комп'ютерні програми, спеціалізовані комп'ютерні програми для моделювання структури та властивостей кристалів, проектор та екран.
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою.</p> <p>Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лабораторні: 60% семестрової оцінки, максимальна кількість балів 60 (1 лабораторна робота – 10 балів); • контрольна робота (1 в кінці семестру): 40% семестрової оцінки, максимальна кількість балів 40. <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100.</p> <p>Академічна доброчесність здобувачами вищої освіти передбачає самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання. Списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної</p>

	<p>недоброчесності в письмовій чи усній роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів обману.</p> <p>Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків, визначених для виконання усіх видів робіт, передбачених курсом.</p> <p>Література. Усю література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надано викладачами виключно в освітніх цілях без права її передавання третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p>Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на лабораторних та поточному тестуванні. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнень на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання на контрольні роботи</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Аморфні та кристалічні тверді тіла. 2. Анізотропія кристалів 3. Види симетрії. 4. Вирощування кристалів із газової фази. 5. Гномостереографічна проекція. 6. Границі стійкості структур. 7. Гратки Браве. Симетрія ґраток Браве. 8. Електронна будова, хімічний зв'язок та фізичні властивості інтерметалідів з тетрагонально-антипризматичною координацією. 9. Додавання елементів симетрії. 10. Евтектики. 11. Електронна будова елементів і періодична система. 12. Елементарна комірка. 13. Елементи симетрії кристалів: прості та складні. 14. Елементи симетрії. 15. Закон абсолютних кутів і його використання для діагностики матеріалів. 16. Закон цілих чисел. 17. Зовнішня форма кристалів та її зв'язок з розміщенням частинок і взаємодією між ними. 18. Ізоморфізм. 19. Індокси Мілера 20. Координаційне число. 21. Координаційні багатогранники. 22. Мінерали. 23. Моделювання кристалічних структур 24. Моно- та полікристали 25. Нанокристали і нанотехнології. 26. Оборнена ґратка та її властивості. 27. Основні структурні типи кристалів. 28. Параметри Вейса. 29. Періодична будова кристалів. Плоскі сітки. 30. Поворотні вісі симетрії. 31. Поліморфізм. 32. Політинізм.

	<p>33. Прості і складні зовнішні форми кристалів. 34. Прості форми кристалів: нижчої, середньої і вищої категорії. 35. Пряма ґратка та її властивості. 36. Реальна будова кристалів. 37. Ріст кристалів. 38. Рух дислокацій та їх взаємодія. 39. Символи граней, ребер, напрямків. 40. Символічні позначення видів симетрії – міжнародні символи Шинфліса 41. Символічні позначення видів симетрії – символи Шубнікова. 42. Сингонії. 43. Структура галогенів 44. Структура окислів. Структура гранатів. 45. Тверді розчини 46. Трансляції. 47. Формули структурної кристалографії. 48. Хімічна взаємодія між частинками. 49. Хімічні сполуки. 50. Щільність упаковки, порожнини.</p>
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу «Фізична кристалографія»

Тижні	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Література та ресурси в Інтернеті	Завдання	Термін викон.
1-2	Тема 1. Предмет кристалографії. Розвиток кристалографії в Україні та Львівському Університеті. Структура твердих тіл. Загальні характеристики кристалічних твердих тіл.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 1, 2 Д – 4, 5	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
3-4	Тема 2. Зовнішня форма кристалів. Зв'язок зовнішньої форми з внутрішньою будовою. Кристалічний багатогранник. Прості і складні зовнішні форми кристалів. Закон цілих чисел.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 1, 3 Д – 5, 6	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
5-6	Тема 3. Елементи симетрії кристалів. Прості. Складні. Взаємодія елементів симетрії. 32 види симетрії. Індеси Мілера, параметри Вейса. Закон сталості кутів.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 1, 2 Д – 4, 6	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
7-8	Тема 4. Періодична будова кристалів. Кристалографічні проекції. Плоскі сітки. Сітки Вульфа. Зв'язок між сферичною, стереографічною і гномонічною проекціями.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 1, 2 Д – 6, 7	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
9-10	Тема 5. Формули структурної кристалографії. Міжплощинні віддалі. Пряма і обернена ґратки.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 2,3 Д – 5, 6, 7	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
11-12	Тема 6. Точкові і Лауевські групи симетрії. Класифікація точкових груп.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 7 год.	Б – 1, 3 Д – 4, 5	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
13-14	Тема 7. Основні структурні типи кристалів. Політинізм, поліморфізм, ікосаедричні структури.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 8 год.	Б – 1, 2 Д – 5, 7	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні
15-16	Тема 8. Кристалографія наноструктур. Елементарні комірки карбонових нанотрубок, фулеренів та квазікристалів.	Лекція – 2 год. Лабор. робота – 2 год. Самост. робота – 8 год.	Б – 2, 3 Д – 5, 6	Підготовка до лаб. роботи.	2 тижні