

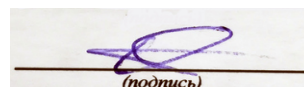
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

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

#### 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  $\text{CaF}_2$ . 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](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  $\pi/n$  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  $\pi/n$ .

**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  $\alpha$ , порождают 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  $\alpha$ , 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  $\alpha$  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  $\alpha$  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  $\alpha$  и трансляция  $t$ , составляющая с ней угол  $\beta$ , порождают винтовую ось симметрии.

**Теорема 15.** Винтовая ось симметрии с углом поворота  $\alpha$  и переносом  $t_1$  и трансляция  $t$ , составляющая с винтовой осью угол  $\beta$ , порождают винтовую ось симметрии с тем же углом поворота.

**Теорема 16.** Инверсионно-поворотная ось с углом поворота  $\alpha$  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  $\alpha$  и трансляция  $t$ , составляющая с этой осью угол  $\beta$ , порождают инверсионную ось с тем же поворотом  $\alpha$ , 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  $910^\circ\text{C}$  и *г.ц.к.* – выше  $910^\circ\text{C}$ . В обеих структурах атомный радиус железа одинаков. Рассчитать отношение удельных весов железа в этих двух структурах при  $910^\circ\text{C}$ .
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  $\text{CaF}_2$ , 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.