

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины
Кристаллография ФТД.Б.2

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Физика сложных систем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Недопекин О.В.

Рецензент(ы):

Садыков Э.К.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. Недопекин О.В. Кафедра общей физики
Отделение физики, Oleg.Nedopekin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

познакомить магистрантов с основами кристаллографии и современными моделирования в кристаллографии

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " ФТД.Б.2 Факультативы" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

факультатив для студентов желающих познакомиться с основами кристаллографии

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Элементы кристаллографии. Поверхностные эффекты, катализ, диффузия на поверхности. Интерфейсы.

2. должен уметь:

строить модели кристаллов и интерфейсов кристаллов, Вычислять термодинамические и механические свойства кристаллов с использованием современного программного обеспечения.

3. должен владеть:

методами численного моделирования кристаллов с использованием современного программного обеспечения

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 1. | Тема 1. Симметрия кристаллов □ иерархия групп симметрии □ Pearson symbol and Wyckoff positions. Miller indices. □ Работа с базами данных материалов, модуль Infomatica □ Построение структур, геометрический анализ. MEDEA'S BUILDERS, GEOMETRY ANALYSIS, EMPTY SPACE FINDER | 2 | 1-3 | 0 | 0 | 0 | |
| 2. | Тема 2. Interface notations (sigma notation). Соединение кристаллических решеток разной симметрии. □ Interface Builder □ поверхностная энергия □ энергия разлома | 2 | 3-5 | 0 | 0 | 0 | |
| 3. | Тема 3. Анализ стабильности кристаллов □ MedeA MT | 2 | 6-8 | 0 | 0 | 0 | |
| 4. | Тема 4. Фазовый переход при повышение давления (неустойчивость структуры при повышение давления - комплексные частоты, отрицательные собственные значения матрицы коэффициентов упругости) | 2 | 9-12 | 0 | 0 | 0 | |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|---|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 5. | Тема 5. □ Ферромагнитный порядок <-> антиферромагнитный порядок <-> парамагнетик. Алгоритм поиска точки перехода (точка пересечение кривых свободной энергии $F=F(T)$ для разных типов структур) □ магнитная анизотропия, ее вычисление с помощью MedeA-VASP | 2 | 12-15 | 0 | 0 | 0 | |
| | Тема . Итоговая форма контроля | 2 | | 0 | 0 | 0 | зачет |
| | Итого | | | 0 | 0 | 0 | |

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Симметрия кристаллов □ иерархия групп симметрии □ Pearson symbol and Wyckoff positions. Miller indices. □ Работа с базами данных материалов, модуль Infomatica □ Построение структур, геометрический анализ. MEDEA'S BUILDERS, GEOMETRY ANALYSIS, EMPTY SPACE FINDER

Тема 2. Interface notations (sigma notation). Соединение кристаллических решеток разной симметрии. □ Interface Builder □ поверхностная энергия □ энергия разлома

Тема 3. Анализ стабильности кристаллов □ MedeA MT

Тема 4. Фазовый переход при повышении давления (неустойчивость структуры при повышении давления - комплексные частоты, отрицательные собственные значения матрицы коэффициентов упругости)

Тема 5. □ Ферромагнитный порядок <-> антиферромагнитный порядок <-> парамагнетик. Алгоритм поиска точки перехода (точка пересечение кривых свободной энергии $F=F(T)$ для разных типов структур) □ магнитная анизотропия, ее вычисление с помощью MedeA-VASP

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

лекции, практическая работа на компьютерах, самостоятельная работа студентов

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Симметрия кристаллов – иерархия групп симметрии – Pearson symbol and Wyckoff positions. Miller indices. – Работа с базами данных материалов, модуль Infomatica – Построение структур, геометрический анализ. MEDEA'S BUILDERS, GEOMETRY ANALYSIS, EMPTY SPACE FINDER

Тема 2. Interface notations (sigma notation). Соединение кристаллических решеток разной симметрии. – Interface Builder – поверхностная энергия – энергия разлома

Тема 3. Анализ стабильности кристаллов – MedeA MT

Тема 4. Фазовый переход при повышении давления (неустойчивость структуры при повышении давления - комплексные частоты, отрицательные собственные значения матрицы коэффициентов упругости)

Тема 5. – Ферромагнитный порядок <-> антиферромагнитный порядок <-> парамагнетик. Алгоритм поиска точки перехода (точка пересечение кривых свободной энергии $F=F(T)$ для разных типов структур) – магнитная анизотропия, ее вычисление с помощью MedeA-VASP

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Приложение 1

7.1. Основная литература:

Ю.К.Егоров-Тисменко Кристаллография и кристаллохимия, М, КДУ, 2005

Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. Кристаллография. М., МГУ, 1992.

Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов Научный редактор - чл.-корр. РАН, профессор В.С.Урусов. Учебник для высшей школы - М. ГЕОС, 2000, 410 с.

Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. Геометрическая кристаллография. М., МГУ, 1986.

Ковба Л.М., Трунов В.К. Рентгенофазовый анализ. М., МГУ, 1976.

7.2. Дополнительная литература:

Банн Ч. Кристаллы. Их роль в природе и науке. М., Мир, 1970.

Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М., АН СССР, 1947.

Вентцель М.К. Сферическая тригонометрия. М., Геодиздат, 1948.

Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М., Высшая школа, 1972.

Шаскольская М.П. Кристаллография. М., Высшая школа, 1984.

Шафрановский И.И. Симметрия в природе. Л., Недра, 1985.

7.3. Интернет-ресурсы:

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Освоение дисциплины "Кристаллография" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика сложных систем .

Автор(ы):

Недопекин О.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Садыков Э.К. _____

"__" _____ 201__ г.