

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»  
Институт электронных и информационных систем  
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
учебной дисциплины  
**КРИСТАЛЛОФИЗИКА**  
по направлению подготовки  
11.04.04 Электроника и наноэлектроника  
Направленность (профиль) Микро- и наноэлектронные устройства

СОГЛАСОВАНО  
Начальник отдела обеспечения  
деятельности ИЭИС  
П.В.Лысухо  
«03» апреля 2019 г.

Разработал  
Профессор кафедры ФТМ  
М.А.Захаров  
«01» 01 2019 г.

Принято на заседании кафедры ФТМ  
Протокол № 5 от 01.02.2019 г.  
Заведующий кафедрой ФТМ  
Б.И.Селезнев  
«01» 02 2019 г.

## **1 Цели и задачи освоения учебной дисциплины**

Цель освоения учебной дисциплины: формирование компетентности студентов в области кристаллофизики и кристаллографии, способствующей становлению их готовности к решению задач профессиональной деятельности.

Задачи:

- а) изучение теории кристаллических решеток и методов их классификации;
- б) изучение теории групп и методов ее применения к анализу симметрии конкретных кристаллов;
- в) изучение теории обратной решетки;
- г) изучение термодинамического описания реальных кристаллов на основе дискретных и континуальных решеточных моделей;
- д) изучение методов экспериментального определения кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей;
- е) изучение классической и квантовомеханической теории динамики кристаллической решетки;
- ж) изучение зонной теории;
- и) подготовить студентов к активному использованию приобретенных знаний и умений в области кристаллофизики и кристаллографии как при изучении смежных дисциплин подготовки магистра, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

## **2 Место учебной дисциплины в структуре ОПОП**

Учебная дисциплина «Кристаллофизика» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, учебного плана основной профессиональной образовательной программы направления подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника и направленности (профилю) Микро- и наноэлектронные устройства (далее – ОПОП). В качестве входных требований выступают сформированные ранее компетенции обучающихся, приобретенные ими в рамках следующих дисциплин, изученных студентами при подготовке по направлению 11.03.04 Электроника и наноэлектроника: «Квантовая механика и статистическая физика», «Физическая химия материалов электронной техники», «Физика конденсированного состояния». Освоение учебной дисциплины является компетентностным ресурсом для дальнейшего изучения и выполнения научно-исследовательской работы (НИР), предусмотренной данной магистерской программой.

## **3 Требования к результатам освоения учебной дисциплины**

Перечень компетенций, которые формируются в процессе освоения учебной дисциплины:

*Профессиональные компетенции:*

ПК-1 Готов формулировать цели и задачи научных исследований в соответствии с тенденциями и перспективами развития электроники и наноэлектроники, а также смежных областей науки и техники, способностью обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач.

Результаты освоения учебной дисциплины представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Результаты освоения учебной дисциплины

Код и наименование компетенции	Результаты освоения учебной дисциплины (индикаторы достижения компетенций)		
ПК-1 Готов формулировать цели и задачи научных исследований в соответствии с тенденциями и перспективами развития электроники и наноэлектроники, а также смежных областей науки и техники, способностью обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач	Знать принципы построения и функционирования изделий микро- и наноэлектроники	Уметь рассчитывать предельно допустимые и предельные режимы работы изделий микро- и нано-электроники	Владеть навыками выбора теоретических и экспериментальных методов исследования изделий микро- и наноэлектроники

## 4 Структура и содержание учебной дисциплины

### 4.1 Трудоемкость учебной дисциплины

Таблица 2 – Трудоемкость учебной дисциплины для очной формы обучения

Части учебной дисциплины (модуля)	Всего	Распределение по семестрам
		I семестр
1. Трудоемкость учебной дисциплины (модуля) в зачетных единицах (ЗЕТ)	6	6
2. Контактная аудиторная работа в академических часах (АЧ)	45	45
3. Курсовая работа/курсовый проект (АЧ) (при наличии)	-	-
4. Внеаудиторная СРС в академических часах (АЧ)	135	135
5. Промежуточная аттестация (зачет; дифференцированный зачет; экзамен) (АЧ)	экзамен 36	экзамен 36

### 4.2 Содержание учебной дисциплины

#### Тема 1 – Введение.

##### Первичные понятия и геометрическое описание кристаллических структур.

Кристаллофизика, цели и задачи курса. Краткий исторический обзор. Кристаллическая структура твердых тел. Кристаллическая решетка. Термодинамическое описание агрегатных состояний вещества: сравнение и анализ, фазовые диаграммы. Конденсированное состояние вещества. Нулевые колебания и особенности гелия. Основные векторы, трансляционная

симметрия кристаллов. Вектор трансляций. Примитивная элементарная ячейка. Простые и сложные решетки. Решетки с базисом. Решетка Бравэ и ее свойства.

### **Тема 2 – Основы теории групп и ее терминология.**

Определение группы, четыре свойства элементов группы. Подгруппы, порядок группы, таблица умножения (квадрат Кэли), абелевы группы, циклические группы, прямое произведение групп, изоморфизм и гомоморфизм групп. Понятие точечных операций симметрии, матричные представления. Примеры. Группа  $D_3$ .

### **Тема 3 – Некоторые трехмерные решетки Бравэ и плотные упаковки кристаллов.**

Трехмерные решетки Бравэ кубической сингонии: простая кубическая решетка, объемноцентрированная кубическая решетка (ОЦК) и гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК). Условная (непримитивная) элементарная ячейка и ее связь с примитивной элементарной ячейкой. Симметричный выбор тройки основных векторов ГЦК и ОЦК решеток. Простая гексагональная решетка. Симметричная ячейка (ячейка Вигнера-Зейтца). Важные примеры: структура типа алмаза, структура типа цинковой обманки, структура типа хлорида цезия, структура типа хлорида натрия, гексагональная плотноупакованная структура (ГПУ). Типы плотных упаковок, степень упаковки, сравнение степени упаковки для ПКР, ОЦК и ГЦК решеток. Идеальный случай упаковки ГПУ-структурь. Золотое сечение.

### **Тема 4 – Классификация решеток Бравэ и сингоний.**

14 трехмерных решеток Бравэ и 7 кристаллических систем (сингоний), их связь и анализ. Кубическая, тетрагональная, ромбическая, моноклинная, триклинная, тригональная и гексагональная сингонии и их иерархия.

### **Тема 5 – Точечная симметрия кристаллов.**

Простейшие точечные операции симметрии (простой поворот, зеркальный поворот, инверсия, отражение в плоскость и т.д.) и их матричные представления. Обозначения Шенфлиса и международные обозначения. Связь точечной и трансляционной симметрии кристаллов: ограничения порядка поворотных осей в кристаллических структурах. Группы  $C_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $C_{nv}$ ,  $C_{nh}$ .

### **Тема 6 – Точечная симметрия кристаллов (продолжение). Пространственная симметрия кристаллов.**

Группы  $D_n$ ,  $D_{nh}(D_{nv})$ ,  $D_{nd}$ . Группы симметрии кристаллов кубической сингонии  $T$ ,  $T_d$ ,  $T_h$ ,  $O$ ,  $O_h$ . 32 точечных группы симметрии кристаллов. Понятие пространственных (федоровских) групп.

### **Тема 7 – Обратная решетка и ее свойства.**

Определение обратной решетки. Обратная решетка как решетка Бравэ. Решетка обратная к обратной. Прямая решетка. Примеры обратных решеток для простой кубической, ОЦК и ГЦК решеток. Первая зона Бриллюэна. Атомные плоскости и их свойства. Индексы Миллера атомных плоскостей. Связь семейств атомных плоскостей и векторов обратной решетки. Некоторые правила обозначения направлений в кристаллах. Примеры.

### **Тема 8 – Определение кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей.**

Формулировка Брэгга условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле. Формулировка Лауэ условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле. Эквивалентность

формулировок Брэгга и Лауз. Экспериментальные методы, основанные на условии Лауз: построение Эвальда, метод Лауз, метод вращающегося кристалла, порошковый метод (метод Дебая-Шеррера). Дифракция на моноатомной решетке с базисом. Геометрический структурный фактор. Дифракция на полиатомном кристалле. Атомный форм-фактор.

### **Тема 9 – Термодинамическое описание кристаллов на основе решеточных моделей.**

Дискретные и континуальные решеточные модели кристаллов, приближение самосогласованного поля, метод Гиббса. Процедура минимизации функционала свободной энергии Гельмгольца в рамках обобщенной решеточной модели (ОРМ). Описания двухфазных равновесий бинарных растворов в рамках ОРМ, спинодальный распад.

### **Тема 10 – Классическая теория динамики кристаллической решетки.**

Гармоническое приближение. Удельная теплоемкость кристалла и закон Дюлонга-Пти. Нормальные моды одномерной моноатомной решетки Бравэ и закон дисперсии. Нормальные моды одномерной решетки с базисом. Акустическая и оптическая ветви закона, энергетическая щель.

### **Тема 11 – Квантовая теория гармонического кристалла.**

Теплоемкость при высоких и низких температурах. Интерполяционные схемы Дебая и Эйнштейна. Плотность фононных уровней.

### **Тема 12 – Ангармоническая теория.**

Тепловое расширение кристаллов и ангармоническое приближение. Теория Ми-Грюнайзена. Параметр Грюнайзена и уравнение состояния ангармонического кристалла.

### **Тема 13 – Элементы зонной теории.**

Теорема Блоха. Задача Кронига-Пенни. Движение электрона в периодическом поле, понятие эффективной массы. Приближение сильной связи. Функции Ванье. Приближение слабосвязанных электронов.

## **4.3 Трудоемкость разделов учебной дисциплины и контактной работы**

Таблица 3 – Трудоемкость разделов учебной дисциплины и контактной работы

№	Наименование разделов (тем) учебной дисциплины (модуля), УЭМ, наличие КП/КР	Контактная работа (в АЧ)			Внеауд. CPC (в АЧ)	Формы текущего контроля		
		Аудиторная		В т.ч. CPC				
		ЛЕК	ПЗ					
1.	Первичные понятия и геометрическое описание кристаллических структур	1	2		10	опрос		
2.	Основы теории групп и ее терминология	1	3	1	10	опрос		
3.	Некоторые трехмерные решетки Бравэ и плотные упаковки кристаллов		2	1	10	решение задач, опрос		
4.	Классификация решеток Бравэ и сингоний	1	3	1	10	опрос		
5.	Точечная симметрия кристаллов	1	2	1	10	опрос		
6.	Точечная симметрия кристаллов (продолжение). Пространственная симметрия кристаллов		2	1	10	решение задач, опрос		
7.	Обратная решетка и ее свойства	1	2		10	решение задач, опрос		

8.	Определение кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей	1	2		1	10	опрос
9.	Термодинамическое описание кристаллов на основе решеточных моделей		4		1	10	опрос
10.	Классическая теория динамики кристаллической решетки	1	2			10	решение задач, опрос
11.	Квантовая теория гармонического кристалла	1	4		1	10	решение задач, опрос
12.	Ангармоническая теория	1	2			10	решение задач, опрос
13.	Элементы зонной теории		6		1	15	опрос
	Промежуточная аттестация						экзамен
<b>ИТОГО</b>		<b>9</b>	<b>36</b>		<b>9</b>	<b>135</b>	

#### **4.4 Лабораторные работы и курсовые работы/курсовые проекты**

4.4.1 Перечень тем лабораторных работ:

Лабораторные работы не предусмотрены учебным планом.

4.4.2 Примерные темы курсовых работ/курсовых проектов:

Курсовые работы/курсовые проекты не предусмотрены учебным планом.

### **5 Методические рекомендации по организации освоения учебной дисциплины**

Таблица 4 – Методические рекомендации по организации лекций

<i>№</i>	<i>Темы лекционных занятий (форма проведения)</i>	<i>Трудоемкость в АЧ</i>
1.	Первичные понятия и геометрическое описание кристаллических структур (информационная лекция)	1
2.	Основы теории групп и ее терминология (информационная лекция)	1
3.	Классификация решеток Бравэ и сингоний (информационная лекция)	1
4.	Точечная симметрия кристаллов (информационная лекция)	1
5.	Обратная решетка и ее свойства (информационная лекция)	1
6.	Определение кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей (информационная лекция)	1
7.	Классическая теория динамики кристаллической решетки (информационная лекция)	1
8.	Квантовая теория гармонического кристалла (информационная лекция)	1
9.	Ангармоническая теория (информационная лекция)	1
<b>ИТОГО</b>		<b>9</b>

Таблица 5 – Методические рекомендации по организации практических занятий

<i>№</i>	<i>Темы практических занятий (форма проведения)</i>	<i>Трудоемкость в АЧ</i>
1.	Первичные понятия и геометрическое описание кристаллических структур (решение задач с обсуждением результатов)	2
2.	Основы теории групп и ее терминология (решение задач с обсуждением результатов)	3
3.	Некоторые трехмерные решетки Бравэ и плотные упаковки кристаллов (решение задач с обсуждением результатов)	2
4.	Классификация решеток Бравэ и сингоний (решение задач с обсуждением)	3

	результатов)	
5.	Точечная симметрия кристаллов (решение задач с обсуждением результатов)	2
6.	Точечная симметрия кристаллов (продолжение). Пространственная симметрия кристаллов (решение задач с обсуждением результатов)	2
7.	Обратная решетка и ее свойства (решение задач с обсуждением результатов)	2
8.	Определение кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей (решение задач с обсуждением результатов)	2
9.	Термодинамическое описание кристаллов на основе решеточных моделей (решение задач с обсуждением результатов)	4
10.	Классическая теория динамики кристаллической решетки (решение задач с обсуждением результатов)	2
11.	Квантовая теория гармонического кристалла (решение задач с обсуждением результатов)	4
12.	Ангармоническая теория (решение задач с обсуждением результатов)	2
13.	Элементы зонной теории (решение задач с обсуждением результатов)	6
<b>ИТОГО</b>		<b>36</b>

Учебная дисциплина «Кристаллофизика» состоит из взаимосвязанных разделов, по которым предусмотрены лекционные и практические занятия.

#### ***Методические рекомендации по теоретической части учебной дисциплины***

Теоретическая часть учебной дисциплины направлена на формирование системы знаний об основных понятиях и методах кристаллофизики и кристаллографии.

Основное содержание теоретической части излагается преподавателем на лекционных занятиях, а также усваивается студентом при знакомстве с дополнительной литературой, которая предназначена для более глубокого овладения знаниями основных дидактических единиц соответствующего раздела.

Как правило, в начале лекции проводится опрос (не более 20 мин.) для экспресс-оценки уровня усвоения теоретического материала студентами. Опрос состоит из вопросов, полный список которых содержится в Фонде оценочных средств (ФОС) данной учебной дисциплины.

Пример вопросов по теме 1:

1. Однозначным образом определяется:
  - а) объем примитивной ячейки;
  - б) объем условной элементарной ячейки;
  - в) форма примитивной элементарной ячейки;
  - г) форма условной элементарной ячейки;
  - д) правильного ответа нет.

#### ***Методические рекомендации по практическим занятиям***

Цель практических занятий – закрепление теоретического материала и выработка у студентов умения решать задачи по практическим аспектам учебной дисциплины.

Практические занятия строятся следующим образом:

- 20% аудиторного времени отводится на объяснение решения типовой задачи у доски;

- 70% аудиторного времени – самостоятельное решение задач студентами;
- 10% аудиторного времени в конце текущего занятия – разбор типовых ошибок при решении задач.

Большинство задач содержится в учебном пособии: Захаров М.А. Динамика кристаллической решетки: гармоническое приближение и ангармонизмы: учеб.-метод. пособие / М.А.Захаров; НовГУ. – В.Новгород, 2007. – 48 с. и в фонде оценочных средств (ФОС) данного учебного модуля.

## **6 Фонд оценочных средств учебной дисциплины**

Фонд оценочных средств представлен в Приложении А.

## **7 Условия освоения учебной дисциплины**

### **7.1 Учебно-методическое обеспечение**

Учебно-методического обеспечения учебной дисциплины (модуля) представлено в Приложении Б.

### **7.2 Материально-техническое обеспечение**

Таблица 7 - Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

№	Требование к материально-техническому обеспечению	Наличие материально-технического оборудования и программного обеспечения
1.	Наличие учебной аудитории	Учебная мебель, доска
2.	Мультимедийное оборудование	1 компьютер, выход в интернет
3.	Программное обеспечение	Microsoft Windows 7 Professional; Dreamspark (Imagine) № 6002662113, 6002662119, 6002662110, 6002662108, 370aef61-476a-4b9f-bd7c-84bb13374212 Акт предоставления прав № Tr023734 от 29.04.2015: «Права на программы для ЭВМ DreamSpark Premium Online 3 Years», срок: 3 года (с апреля 2015 г. по апрель 2018 г.) Поставщик: ЗАО «СофтЛайн Трейд» Kaspersky Endpoint Security Standard; Лицензия № 1C1C-160801-082918-943-340 (кол-во объектов: 700 users), поставщик: ООО «Системная интеграция», срок пользования ПО: с 01.08.2016г. по 16.08.2018г.

**Приложение А**  
(обязательное)  
**Фонд оценочных средств учебной дисциплины «Кристаллофизика»**

**1 Структура фонда оценочных средств**

Фонд оценочных средств состоит из двух частей:

а) открытая часть - общая информация об оценочных средствах (название оценочных средств, проверяемые компетенции, баллы, количество вариантов заданий, методические рекомендации для применения оценочных средств и пр.), которая представлена в данном документе, а также те вопросы и задания, которые могут быть доступны для обучающегося;

б) закрытая часть - фонд вопросов и заданий, которая не может быть заранее доступна для обучающихся (вопросы к контрольной работе, коллоквиуму и пр.) и которая хранится на кафедре.

**2 Перечень оценочных средств текущего контроля и форм промежуточной аттестации**

Таблица А.1 – Перечень оценочных средств

№	Оценочные средства для текущего контроля	Разделы (темы) учебной дисциплины	Баллы	Проверяемые компетенции
1.	Контрольные опросы	Все темы	10x13	ПК-1
2.	Решение задач	Темы: 3, 6, 7, 10, 11, 12	20x6	
<i>Промежуточная аттестация</i>				
	Экзамен		50	ПК-1
	<b>ИТОГО</b>		<b>300</b>	

**3 Рекомендации к использованию оценочных средств**

1) Таблица А.2 – Контрольный опрос

Критерии оценки	Количество вариантов заданий	Количество вопросов
Способен дать правильные ответы на вопросы	1	10

Примерные вопросы:

**Вопросы по теме 1**

1. Дать определение трансляционной симметрии кристаллов.
2. Дать определение основных векторов кристаллической решетки.
3. Дать определение вектора трансляций.
4. Дать определение примитивной элементарной ячейки.
5. Дать определение условной элементарной ячейки.
6. Дать определение простой кристаллической решетки.

7. Дать определение сложной кристаллической решетки.
8. Дать определение решетки Бравэ.
9. Перечислить основные свойства решетки Бравэ.
10. Изобразить диаграммы состояния изотопов гелия.

### **Вопросы по теме 2**

1. Дать определение группы.
2. Дать определение порядка группы.
3. Дать определение симметричной (абелевой) группы.
4. Дать определение циклической группы.
5. Дать определение точечной операции симметрии.
6. Дать определение матричного представления точечной операции симметрии.
7. Дать определение таблицы умножения группы.
8. Дать определение прямого произведения групп.
9. Дать определение пространственной симметрии кристаллов.
10. Указать количество точечных групп кристаллов и количество пространственных (федоровских) групп кристаллов.

### **Вопросы по теме 3**

1. Изобразить элементарные ячейки простой кубической решетки, ОЦК и ГЦК.
2. Перечислить основные свойства условных элементарных ячеек.
3. Изобразить и описать симметричный выбор тройки основных векторов для ОЦК решетки.
4. Изобразить и описать симметричный выбор тройки основных векторов для ГЦК решетки.
5. Изобразить элементарные ячейки простой гексагональной решетки.
6. Дать определение ячейки Вигнера-Зейтца.
7. Изобразить структуру типа цинковой обманки и структуру типа алмаза.
8. Изобразить структуру типа хлорида цезия и структуру типа хлорида натрия.
9. Изобразить гексагональную плотноупакованную структуру (ГПУ).
10. Сравнить степени упаковки для ПКР, ОЦК и ГЦК решеток.

### **Вопросы по теме 4**

1. Перечислить и изобразить решетки Бравэ, входящие в тетрагональную сингонию.
2. Перечислить и изобразить решетки Бравэ, входящие в ромбическую сингонию.
3. Перечислить и изобразить решетки Бравэ, входящие в моноклинную сингонию.
4. Перечислить и изобразить решетки Бравэ, входящие в триклинную и тригональную сингонии.
5. Классификация сингоний по кристаллохимическим системам.
6. Перечислить сингонии, входящие в высшую кристаллохимическую систему.
7. Перечислить сингонии, входящие в среднюю кристаллохимическую систему.
8. Перечислить сингонии, входящие в низшую кристаллохимическую систему.
9. Дать определение поворотных осей высших порядков.
10. Дать определение поворотных осей низших порядков.

## **Вопросы по теме 5**

1. Перечислить основные точечные операции симметрии.
2. Перечислить элементы группы  $C_n$ .
3. Перечислить элементы группы  $S_{2n}$ .
4. Перечислить элементы группы  $C_{nv}$ .
5. Перечислить элементы группы  $C_{nh}$ .
6. Поворотные оси каких порядков могут реализовываться в кристаллах?.
7. Записать матричные представления для элементов группы  $C_n$ .
8. Записать матричные представления для элементов группы  $S_{2n}$ .
9. Записать матричные представления для элементов группы  $C_{nv}$ .
10. Записать матричные представления для элементов группы  $C_{nh}$ .

## **Вопросы по теме 6**

1. Перечислить элементы группы  $D_n$ .
2. Перечислить элементы группы  $D_{nh}(D_{nv})$ .
3. Перечислить элементы группы  $D_{nd}$ .
4. Перечислить элементы группы  $T$ .
5. Перечислить элементы группы  $T_d$ .
6. Перечислить элементы группы  $T_h$ .
7. Перечислить элементы группы  $O$ .
8. Перечислить элементы группы  $O_h$ .
9. Перечислить 32 точечных группы симметрии кристаллов.
10. Привести примеры международных обозначений точечных операций симметрии.

## **Вопросы по теме 7**

1. Дать первое определение обратной решетки (по Ашкрофту и Мерми).
2. Дать второе определение обратной решетки (по Ашкрофту и Мерми).
3. Перечислить основные свойства обратной решетки.
4. Дать определение первой зоны Бриллюэна.
5. Дать определение атомной плоскости.
6. Перечислить основные свойства атомных плоскостей.
7. Дать определение семейства атомных плоскостей.
8. Перечислить основные свойства семейства атомных плоскостей.
9. Индексы Миллера атомных плоскостей.
10. Правила обозначения направлений в кристаллах..

## **Вопросы по теме 8**

1. Общие особенности дифракции рентгеновских лучей на кристалле.
2. Формула конструктивной интерференции Брэгга-Бульфа.
3. Дать формулировку Брэгга условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле.
4. Дать формулировку Лауэ условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле.
5. Построение Эвальда.
6. Метод Лауэ.
7. Метод врачающегося кристалла.

8. Метод Дебая Шеррера.
9. Что такое геометрический структурный фактор?
10. Что такое атомный структурный фактор?

### **Вопросы по теме 9**

1. Общие особенности термодинамического подхода Гиббса.
2. Термодинамические потенциалы для систем с сохраняющимся числом частиц.
3. Термодинамические потенциалы для систем с переменным числом частиц.
4. Приближение самосогласованного поля и конфигурационная энергия.
5. Записать свободную энергию Гельмгольца в рамках простой решеточной модели.
6. Записать свободную энергию Гельмгольца в рамках обобщенной решеточной модели.
7. Объемные эффекты в кристаллах и условие плотной упаковки.
8. Понятие энергии смешения.
9. Основные стадии фазового перехода первого рода.
10. Что такое спинодальный распад?

### **Вопросы по теме 10**

1. Основные недостатки модели статической решетки.
2. Общие особенности гармонического приближения.
3. Закон Дюлонга-Пти.
4. Приближение ближайших соседей.
5. Закон дисперсии одномернойmonoатомной решетки Бравэ, его график.
6. Закон дисперсии трехмерной monoатомной решетки Бравэ, его график.
7. Закон дисперсии одномерной решетки с базисом, его график.
8. Акустическая и оптическая ветви закона дисперсии, энергетическая щель.
9. Понятие мягкой моды.
10. Закон дисперсии трехмерной решетки с базисом, его график.

### **Вопросы по теме 11**

1. Теплоемкость кристалла при высоких температурах.
2. Теплоемкость кристалла при низких температурах.
3. Интерполяционная схема Дебая.
4. Интерполяционная схема Эйнштейна.
5. Характеристическая температура Дебая, характеристическая энергия Дебая.
6. Характеристическая температура Эйнштейна, характеристическая энергия Эйнштейна.
7. Первая связь интерполяционных схем Дебая и Эйнштейна (по Вонсовскому и Кацнельсону).
8. Вторая связь интерполяционных схем Дебая и Эйнштейна (по Вонсовскому и Кацнельсону).
9. Общий сравнительный анализ схем Дебая и Эйнштейна.
10. Понятие плотности фононных уровней.

### **Вопросы по теме 12**

1. Основные недостатки гармонического приближения.
2. Общие идеи ангармонического приближения.
3. Уравнение состояния кристалла в строго гармоническом приближении.
4. Ангармоническая модель и тепловое расширение кристаллов.

5. Константа ангармонизма.
6. Закон дисперсии в модели Ми-Грюнайзена.
7. Первое уравнение Ми.
8. Второе уравнение Ми.
9. Уравнение Ми-Грюнайзена.
10. Применение модели Ми-Грюнайзена к анализу тепловых свойств реальных кристаллических структур.

### **Вопросы по теме 13**

1. Теорема Блоха .
2. Задача Кронига-Пенни.
3. Приближение сильной связи.
4. Приближение слабосвязанных электронов.

2) Таблица А.3 – Решение задач

<i>Критерии оценки</i>	<i>Количество вариантов заданий</i>
Способен правильно выбрать нужную формулу и правильно ее применить	1

Примерные темы:

Для группы точечной симметрии (см. варианты задания):

- а) определить все элементы группы;
- б) найти матричные представления для элементов данной группы;
- в) путем непосредственного матричного умножения убедится в условии полноты группы;
- г) построить таблицу умножения (квадрат Кэли) данной точечной группы;
- д) найти все собственные и несобственные подгруппы данной группы;
- е) исследовать основные свойства данной группы.

Варианты задания

- 1)  $C_4$
- 2)  $C_{4v}$
- 3)  $C_{4h}$
- 4)  $T_h$
- 5)  $D_{3h}$
- 6)  $S_6$
- 7)  $D_4$
- 8)  $O_h$
- 9)  $O$
- 10)  $C_{6v}$
- 11)  $D_{4h}$
- 12)  $T_d$
- 13)  $S_4$
- 14)  $C_{3h}$

- 15)  $D_{3d}$   
 15)  $C_{3v}$   
 16)  $D_{4d}$   
 17)  $D_{6d}$   
 18)  $T$   
 19)  $D_{2h}$   
 20)  $D_{6h}$

3) Таблица А.4 – Экзамен

<i>Критерии оценки</i>	<i>Количество вариантов заданий</i>	<i>Количество вопросов</i>
Правильные ответы на теоретические вопросы	10	3 в билете
Правильное решение задачи		

Экзамен состоит из двух частей: теоретической и практической. Теоретическая часть экзамена содержит два вопроса из тем дисциплины. Практическая часть экзамена состоит из задачи.

Вопросы для самостоятельной подготовки к экзамену по учебной дисциплине «Кристаллофизика»

1. Трансляционная симметрия кристаллов. Тройка основных векторов, элементарная ячейка. Простые и сложные решетки (решетка с базисом). Базисные вектора.
2. ПКР, ОЦК и ГЦК решетки. Симметричная тройка основных векторов для кубических решеток.
3. Решетка Бравэ и ее свойства. Примитивная и условная элементарные ячейки. Примеры.
4. Симметричная ячейка (ячейка Вигнера-Зейтца) и ее построение. Примеры.
5. Некоторые типы кристаллических структур.
6. Упаковки кристаллов. Вычисление степени упаковки кристалла на примере ПКР, ОЦК, ГЦК и простой гексагональной решетки. Золотое сечение.
7. Точечная симметрия кристаллов. Определение группы и основные определения теории групп (элементы, порядок, подгруппы [собственные и несобственные], таблица умножения [квадрат Кэли]).
8. Точечная группа симметрии кристалла и ее элементы. Матричные представления элементов симметрии – поворот (простой), отражение в плоскость, поворот (зеркальный), инверсия.
9. Пространственная симметрия кристаллов. Теорема о связи допустимого порядка поворотной оси и трансляционной симметрии кристалла. Группы  $C_n$ ,  $S_{2n}$ ,  $C_{nv}$ ,  $C_{nh}$ .
10. Группы  $D_n$ ,  $D_{nh}(D_{nv})$ ,  $D_{nd}$ .
11. Группы  $T$ ,  $T_d$ ,  $T_h$ ,  $O$ ,  $O_h$ . 32 точечных группы симметрии кристаллов.
12. Классификация решеток Бравэ – 14 решеток, 7 сингоний, 3 кристаллических системы.

13. Обратная решетка и ее свойства. Обратная решетка как решетка Бравэ, выбор тройки основных векторов. Решетка обратная к обратной.
14. Нахождение обратных решеток к ПКР, ОЦК, ГЦК и простой гексагональной решеткам. Первая зона Бриллюэна.
15. Атомные плоскости и их семейства. Теорема (прямая и обратная) о связи семейства атомных плоскостей прямой решетки и некоторыми векторами обратной решетки. Индексы Миллера, обозначения направлений.
16. Экспериментальное исследование структуры кристаллических тел. Формулировки Брэгга и Лауэ, доказательство их эквивалентности.
17. Построение Эвальда. Метод Лауэ, метод вращающегося кристалла, порошковый метод.
18. Геометрический структурный фактор. Атомный структурный фактор.
19. Термодинамика кристаллов. Дискретная решеточная модель, критические явления.
20. Термодинамика кристаллов. Обобщенная решеточная модель, критические явления.
21. Классическая теория гармонического кристалла.
22. Квантовая теория гармонического кристалла.
23. Теория Ми-Грюнайзена.
24. Теорема Блоха. Задача Кронига-Пенни.
25. Приближение сильной связи. Приближение слабосвязанных электронов.

Все материалы для проведения промежуточного контроля хранятся на кафедре.

#### **Пример экзаменационного билета**

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого  
Институт электронных и информационных систем  
Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

#### **ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ №**

Учебная дисциплина «**Кристаллофизика**»

Для направления подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника  
Направленность (профиль) Микро- и наноэлектронные устройства

1. Группы  $D_n$ ,  $D_{nh}(D_{nv})$ ,  $D_{nd}$ .
2. Геометрический структурный фактор. Атомный структурный фактор.
3. Задача. Построить таблицу умножения (квадрат Кэли) для группы  $T$ .

Принято на заседании кафедры \_\_\_\_\_  
«\_\_\_\_» 20 \_\_\_\_ г.

Протокол № \_\_\_\_\_  
Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ (ФИО)

**Приложение Б**  
(обязательное)

**Карта учебно-методического обеспечения  
учебной дисциплины «Кристаллофизика»**

Таблица Б.1 – Основная литература\*

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Печатные источники		
1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник: для вузов. - М.: Книжный дом "Университет", 2005. - 584с.	5	
2. Хамермеш Моргон. Теория групп и ее применение к физическим проблемам = Group theory and its application to physical problems / Пер. с англ. Ю.А.Данилова. – 2-е изд.,ст пер. – М.: Эдиториал УРСС, 2002. – 587с.	1	
3. Петрашень М. И. Применение теории групп в квантовой механике / М. И. Петрашень, Е. Д. Трифонов. - изд. стер. - М. : Либроком, 2017. - 279 с	2	
4. Моделирование диаграмм состояния бинарных растворов: методические указания[электронный ресурс] / Авт.-сост. М.А.Захаров; НовГУ им. Ярослава Мудрого.- В.Новгород, 2007. - 90 с.	10	Режим доступа: <a href="https://novsu.bibliotech.ru/Reader/Book/-363">https://novsu.bibliotech.ru/Reader/Book/-363</a>
Электронные ресурсы		
Электронный каталог НБ МГУ		<a href="http://window.edu.ru/resource/125/72125">http://window.edu.ru/resource/125/72125</a>

\*См. требования п. 4.3.3 ФГОС З++ (как правило, при использовании в образовательном процессе печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра на каждого из изданий, указанных в рабочих программах дисциплин (модулей), на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину (модуль)).

Таблица Б.2 – Дополнительная литература

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Печатные источники		
1. Кривуша Л.С. Кристаллография, кристаллохимия и минералогия : учеб. пособие. - Днепропетровск : Gaudeteamus, 2002. – 231 с.	1	
2. Епифанов Г. И. Физика твердого тела : учеб. пособие для вузов / Г. И. Епифанов. - 3-е изд., испр. - СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2010. – 287 с.	5	
3. Василевский А. С. Физика твердого тела : учеб. пособие для вузов / А. С. Василевский. - М. : Дрофа, 2010. – 206 с.	2	
Электронные ресурсы		
Электронная библиотека по физике		<a href="https://mexalib.com/?id=55">https://mexalib.com/?id=55</a>

Зав. кафедрой Б.И. Сапожник  
 подпись И.О.Фамилия  
 « 01 » 02 2019 г.

**Приложение В**  
(обязательное)

**Лист актуализации рабочей программы  
учебной дисциплины «Кристаллофизика»**

Рабочая программа актуализирована на 20 \_\_\_/20 \_\_\_ учебный год.

Протокол № \_\_\_ заседания кафедры от «\_\_\_» 20 \_\_\_ г.

Разработчик: \_\_\_\_\_

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа актуализирована на 20 \_\_\_/20 \_\_\_ учебный год.

Протокол № \_\_\_ заседания кафедры от «\_\_\_» 20 \_\_\_ г.

Разработчик: \_\_\_\_\_

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа актуализирована на 20 \_\_\_/20 \_\_\_ учебный год.

Протокол № \_\_\_ заседания кафедры от «\_\_\_» 20 \_\_\_ г.

Разработчик: \_\_\_\_\_

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Таблица В.1 Перечень изменений, внесенных в рабочую программу:

Номер изменения	№ и дата протокола заседания кафедры	Содержание изменений	Зав.кафедрой	Подпись