

Міністерство освіти і науки України  
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника  
Фізико-технічний факультет  
Кафедра матеріалознавства і новітніх технологій

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Проректор \_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2022 р.

## **РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

### **Кристалографія та кристалохімія**

|                  |                                       |
|------------------|---------------------------------------|
| Освітня програма | Прикладна фізика та наноматеріали     |
| Спеціальність    | 105 Прикладна фізика та наноматеріали |
| Галузь знань     | 10 Природничі науки                   |

Івано-Франківськ  
2022

Робоча програма спецкурсу «Кристалографія та кристалохімія»  
для підготовки здобувачів третього рівня вищої освіти – доктора філософії  
спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали. „\_\_\_” \_\_\_\_\_, 2022 р.  
– \_\_\_ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)  
Яремій Іван Петрович, професор кафедри матеріалознавства і новітніх  
технологій, доктор фізико-математичних наук, професор.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри матеріалознавства і новітніх  
технологій

Протокол № 1 від “29” серпня 2022 р.

Завідувач кафедри матеріалознавства і новітніх технологій

“29” серпня 2022 р. \_\_\_\_\_ Богдан ОСТАФІЙЧУК

Схвалено методичною комісією фізико-технічного факультету.

Протокол від “30” серпня 2022 р. № 1

“30” серпня 2022 р.

Голова \_\_\_\_\_  
(підпис)

Михайло ЯЦУРА  
(прізвище та ініціали)

© Прикарпатський національний  
університет імені Василя Стефаника,  
2022 рік

## 1. Опис навчальної дисципліни

| Найменування показників  | Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень | Характеристика навчальної дисципліни |                       |
|--|--|--------------------------------------|-----------------------|
|  |  | денна форма навчання                 | заочна форма навчання |
| Кількість кредитів – 3   | Галузь знань 10 Природничі науки                                 | За вибором                           |                       |
| Модулів – 1  | Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали              | <b>Рік підготовки:</b>               |                       |
| Змістових модулів – 2  |  | 2021-й                               | -й                    |
| Індивідуальне науково-дослідне завдання<br>_____<br>(назва)  |  | <b>Семестр</b>                       |                       |
| Загальна кількість годин –90   |  | 3-й                                  | -й                    |
| Тижневих годин для денної форми навчання:<br><br>аудиторних – 2<br>самостійної роботи студента – 4 | третій освітньо-науковий рівень – доктор філософії               | <b>Лекції</b>                        |                       |
|  |  | 20 год.                              | год.                  |
|  |  | <b>Практичні, семінарські</b>        |                       |
|  |  | 10 год.                              | год.                  |
|  |  | <b>Лабораторні</b>                   |                       |
|  |  | __ год.                              | __ год.               |
|  |  | <b>Самостійна робота</b>             |                       |
| 60 год.  | год.   |                                      |                       |
| <b>Індивідуальні завдання:</b>   |  |                                      |                       |
| __ год.  |  |                                      |                       |
| <b>Вид контролю:</b>   |  |                                      |                       |
| __екзамен__  |  |                                      |                       |

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить:  $40/80=0,5$

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

**Мета:** ознайомити аспірантів із кристалічною будовою твердих тіл. Розглянути підходи до систематизації та класифікації кристалів та структур кристалів. Вияснити зв'язок між кристалічною структурою твердих тіл та їх фізичними властивостями.

**Завдання:** в результаті вивчення дисципліни аспірант має набути знання про загальні характеристики властивостей та будову кристалів, основні кристалографічні поняття, закони; зв'язок між кристалічною структурою твердих тіл та їх фізичними властивостями.

У результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен:

**знати:** загальні характеристики властивостей та будову кристалів, основні кристалографічні поняття, закони; елементи симетрії кристалічних многогранників та структури кристалів, кристалографічні позначення: символи вузлів, напрямів, площин, символіку Браве точкових груп та ін., кристалографічні категорії, сингонії, ґратки Браве, методи дослідження внутрішньої будови твердих тіл, основні поняття кристалохімії і кристалофізики, типи зв'язку в кристалах та його вплив на фізичні властивості.

**вміти:** правильно використовувати набуті знання і навички на практиці та при роботі у науково-дослідних лабораторіях, визначати симетрію кристалічних многогранників, індиціювати площини, напрями, вузли, записувати формули симетрії кристалів, будувати кристалічну ґратку за вказаним базисом, пояснити зв'язок між особливостями кристалічної будови речовин з особливостями їх фізичних властивостей.

## 3. Програма навчальної дисципліни

### Змістовий модуль 1. Симетрія кристалів та структури кристалів

Вступ. Предмет кристалографії і кристалофізики.

#### **Симетрія кристалів**

Анізотропія і симетрія кристалів. Структура кристала і просторова ґратка. Закон постійності кутів кристалів. Формула Вульфа-Брега. Метод кристалографічного індиціювання. Символи вузлів, рядів, площин. Закон цілих чисел. Кристалографічні проекції.

Елементи симетрії кристалічних многогранників. Операції і елементи симетрії I роду. Неможливість осей п'ятого порядку. Операції і елементи симетрії II роду. Теореми про поєднання операцій симетрії.

Кристалографічні категорії, сингонії і системи координат. Класи симетрії. Загальні визначення і системи позначень. Формули симетрії. Міжнародні (інтернаціональні) символи класів симетрії. Точкові групи симетрії.

Форми кристалів. Визначення символів граней і ребер. Закон зон. Символи кристалів гексагональної і тригональної сингоній. Символи Міллера-Браве. Символи симетричних граней. Фізично різні форми кристалів.

### **Симетрія структури кристалів**

Просторові елементи симетрії. Гратки Браве. Трансляції. Елементи симетрії кристалічних структур. Просторові групи симетрії.

Основні формули структурної кристалографії.

## **Змістовий модуль 2. Кристалохімія та кристалофізика**

### **Кристалохімія**

Атомні і іонні радіуси. Координаційне число і координаційний многогранник. Кількість атомів в комірці. Визначення стехіометричної формули речовини.

Поляризація іонів. Типи зв'язку в структурах. Межі стійкості структур. Щільні упаковки частинок в структурах.

Фазові переходи. Політипія. Ізоморфізм. Поліморфізм.

### **Фізичні властивості кристалів**

Граничні групи симетрії. Основний принцип симетрії в кристалофізиці. Вказівні поверхні.

Тензорне опис фізичних властивостей кристалів. Кристалофізичні системи координат. Антисиметрія. Скалярні фізичні властивості. Векторні властивості.

Піроелектричний ефект. Діелектричні властивості кристалів. Магнітні властивості кристалів. Теплові властивості кристалів. Напруги та деформації в кристалах. Оптичні властивості кристалів. П'єзоелектричний ефект. Пружні властивості кристалів.

## **Змістовий модуль 3. Фізика реальних кристалів та ріст кристалів**

### **Фізика реальних кристалів**

Механічні властивості. Пластична деформація. Спайність та твердість.

Атомні порушення структури кристала. Класифікація дефектів структури. Точкові дефекти. Дислокації. Рух дислокації. Енергія дислокації. Дислокаційні реакції. Дислокації у деяких реальних кристалічних структурах.

Поле напруженої дислокації. Взаємодія дислокацій між собою та з точковими дефектами.

Методи спостереження дислокацій

### **Ріст кристалів**

Зародження кристалів. Основні уявлення про ріст кристалів. Рівноважна форма кристалів. Реальні форми росту кристалів.

Макроскопічні дефекти кристалів. Закономірні зростки та двійники.

Епітаксія. Короткі відомості про методи вирощування кристалів.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

| Назви змістових модулів і тем  | Кількість годин |               |      |      |      |    |
|--|-----------------|---------------|------|------|------|----|
|  | денна форма     |               |      |      |      |    |
|  | усього          | у тому числі  |      |      |      |    |
| лек.   |                 | пр.<br>(сем.) | лаб. | інд. | с.р. |    |
| 1  | 2               | 3             | 4    | 5    | 6    | 7  |
| <b>Змістовий модуль 1. Симетрія кристалів та структури кристалів</b>       |                 |               |      |      |      |    |
| Тема 1. Структура кристала і просторова гратка. Кристалографічні проекції. |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| Тема 2. Елементи симетрії кристалічних многогранників.                     |                 | 2             | 1    |      |      | 6  |
| Тема 3. Кристалографічні категорії, сингонії і системи координат.          |                 | 2             | 1    |      |      | 6  |
| Тема 4. Симетрія структури кристалів                                       |                 | 2             | 1    |      |      | 6  |
| Тема 5. Експериментальне визначення структури кристалів                    |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| <b>Змістовий модуль 2. Кристалохімія та кристалофізика</b>                 |                 |               |      |      |      |    |
| Тема 6. Кристалохімія  |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| Тема 7. Загальні підходи до опису фізичних властивостей кристалів          |                 | 2             | 1    |      |      | 6  |
| Тема 8. Опис конкретних властивостей кристалів                             |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| <b>Змістовий модуль 3. Фізика реальних кристалів та ріст кристалів</b>     |                 |               |      |      |      |    |
| Тема 9. Фізика реальних кристалів  |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| Тема 10. Ріст кристалів  |                 | 2             | 1    | –    | –    | 6  |
| <b>Усього годин</b>  | 90              | 20            | 10   | –    | –    | 60 |

#### 5. Теми семінарських занять

| № з/п  | Назва теми   | Кількість годин |
|--|--|-----------------|
| <b>Змістовий модуль 1. Симетрія кристалів та структури кристалів</b> |  |                 |
| 1  | Структура кристала. Просторова гратка. Кристалографічне індиціювання. Координатні системи. Задачі геометричної кристалографії. | 2               |
| 2  | Просторові групи симетрії. Міжнародна символіка.   | 2               |
| <b>Змістовий модуль 2. Кристалохімія та кристалофізика</b>           |  |                 |

|  |  |           |
|--|--|-----------|
| 3  | Кількість формульних одиниць в комірці.<br>Густина кристала. Щільні упаковки кульок.<br>Кристалохімічні радіуси. | 2         |
| 4  | Фізичні властивості кристалів.   | 2         |
| <b>Змістовий модуль 3. Фізика реальних кристалів та ріст кристалів</b> |  |           |
| 5  | Дефекти в кристалах. Вирощування кристалів.  | 2         |
|  | <b>Усього годин</b>  | <b>10</b> |

### 6. Самостійна робота

| № з/п | Назва теми  | Кількість годин |
|-------|---|-----------------|
| 1     | Кристалографічні проекції.  | 6               |
| 2     | Одиничні особливі напрямки. Поділ на сингонії   | 6               |
| 3     | Форми кристалів. Визначення символів граней і ребер. Закон зон. Символи кристалів гексагональної і тригональної сингоній. Символи Міллера-Браве. Символи симетричних граней. Фізично різні форми кристалів. | 6               |
| 4     | Експериментальне визначення структури кристалів. Формула Вульфа-Брега.  | 6               |
| 5     | Основні формули структурної кристалографії  | 6               |
| 6     | Межі стійкості структур. Щільні упаковки частинок в структурах.   | 6               |
| 7     | Поліморфізм. Ізоморфізм. Політипія.   | 6               |
| 8     | Фазові переходи.  | 6               |
| 9     | Механічні напруги в кристалах.  | 6               |
| 10    | Ріст кристалів. Методи вирощування кристалів.   | 6               |
|       | <b>Усього годин</b>   | <b>60</b>       |

### 7. Методи контролю

- Перевірка засвоєння теоретичного матеріалу, в т. ч методом тестування.
- Перевірка якості виконання практичних робіт.
- Екзамен.

### 8. Розподіл балів, які отримують аспіранти

|  |    |    |    |    |
|--|----|----|----|----|
| Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота |    |    |    |    |
| Змістовий модуль №1  |    |    |    |    |
| T1   | T2 | T3 | T4 | T5 |
| 5  | 5  | 5  | 5  | 5  |

|  |    |    |                     |     |         |
|--|----|----|---------------------|-----|---------|
| Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота |    |    |                     |     | Екзамен |
| Змістовий модуль №2  |    |    | Змістовий модуль №3 |     |         |
| T6   | T7 | T8 | T9                  | T10 |         |
| 5  | 5  | 5  | 5                   | 5   | 50      |

T1, T2 ... – теми змістових модулів.

### Шкала оцінювання: національна та ECTS

| Сума балів за всі види навчальної діяльності | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою                              |   |
|--|-------------|--|---|
|  |             | для екзамену, курсового проєкту (роботи), практики         | для заліку  |
| 90 – 100                                     | <b>A</b>    | відмінно   | зараховано  |
| 80 – 89                                      | <b>B</b>    | добре  |   |
| 70 – 79                                      | <b>C</b>    |  |   |
| 60 – 69                                      | <b>D</b>    | задовільно   |   |
| 50 – 59                                      | <b>E</b>    |  |   |
| 26 – 49                                      | <b>FX</b>   | незадовільно з можливістю повторного складання             | не зараховано з можливістю повторного складання             |
| 0-25   | <b>F</b>    | незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни | не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни |

### 9. Методичне забезпечення

- 1) Лекції, завдання для практичних робіт.
- 2) Програмне забезпечення: навчально-контролюючі програми з кожної теми курсу.

### 10. Рекомендована література

#### Базова

1. М.П. Шаскольская Кристаллография. М.: Высшая школа, 1976.
2. Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.
3. П.М. Зоркий Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд.МГУ, 1986.
4. В.С. Урусов Теоретическая кристаллохимия. М.:Изд.МГУ, 1987.
5. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. Кристаллография, М.: Изд-во МГУ, 1992.
6. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография, М.: Изд-во «Высш.шк.», 1972.
7. Грінченко В.Ф. Кристаллографія. Частина 1. К.: Вид-во «Київський університет», 1996, 98 с.



8. Грінченко В.Ф., Митрохин О.В., Грінченко О.В. Кристаллографія. Частина 2. К.: Вид-во «Київський університет», 1999, 48 с.

9. Бакуменко І.Т. Кристаллографія, Львів: Видавн. центр ЛНУ ім. І. Франка. 2000, 76 с.

#### **Допоміжна**

1. И.И.Шафрановский История кристаллографии XIX век. Ленинград: Наука, 1980.

2. Шафрановский И.И, Алявдин В.Ф. Краткий курс кристаллографии, 1984, 206 с.

3. Шафрановский И.И. Симметрия в природе, 1985, 168 с.

4. Куровець М. Кристаллографія і мінералогія, ч.1, 1996, 234 с.

5. Мокиевский В.А. Морфология кристаллов, 1983, 295 с.

6. П.М. Зоркий Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд.МГУ, 1981.

7. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М.: Metallurgy, 1990. 336 с.

8. Нардов В. В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Изд-во ЛГУ, 1974. 142 с.

9. Голдсмит Г. Дж. Задачи по физике твердого тела. М.: «Наука», 1976. 432 с.