

Программа
краткосрочного повышения квалификации преподавателей и научных работников
высшей школы по направлению
«Методы и технологии получения наноструктурных материалов»
на базе учебного курса

«Кристаллография кристаллов и нанотрубок»

Цель: приобретение слушателями теоретических знаний, практических навыков и умения строить и анализировать структуры кристаллов

Категория слушателей: преподаватели и научные работники высшей школы

Срок обучения: 36 часов

Форма обучения: с частичным отрывом от работы

Режим занятий: 8 часов в день

Целью данного курса является ознакомление с теоретическими основами и приобретение практических навыков и умения строить и анализировать структуры кристаллов. Изложены основы структурной кристаллографии, закономерности строения обратного пространства кристаллических объектов, основы теорий точечной и пространственной симметрии, рассмотрены основные типы кристаллических структур, строение наночастиц и элементы кристаллографии нанотрубок.

Требования к уровню освоения учебного курса

Преподаватели должны:

- Знать:
 - основы физической и дифракционной кристаллографии;
 - особенности обратного пространства кристаллических объектов;
 - основы теорий точечной и пространственной симметрии;
 - основные структурные типы и их систематику;
 - особенности кристаллографии наночастиц и методы кристаллографического описания структуры нанотрубок.
- Иметь навыки:
 - определения индексов плоскостей и направлений, сингонии и типа симметрии кристалла и его структурного типа, построения объемных изображений структуры кристалла и ее проекций по базису и элементам симметрии;
 - сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в области кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок;
 - включения приобретенных знаний о кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок в уже имеющуюся систему знаний и применения этих знаний в процессе преподавания дисциплин нанотехнологического цикла;
 - переноса полученных знаний о кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок на смежные предметные области и использования этих знаний в процессе преподавания дисциплин нанотехнологического цикла.

- Иметь представление:
 - о построении ячеек Вигнера-Зейтца;
 - об определении компонент векторов обратной решетки;
 - о построении зон Бриллюэна;
 - об определении матриц операторов точечной симметрии;
 - об определении группы операторов симметрии.

Научные работники должны:

- 1.Знать:
 - основы физической и дифракционной кристаллографии;
 - особенности обратного пространства кристаллических объектов;
 - особенности кристаллографии наночастиц и методы кристаллографического описания структуры нанотрубок.
- 2.Иметь навыки:
 - определения индексов плоскостей и направлений;
 - определение компонент векторов обратной решетки;
 - построения ячеек Вигнера-Зейтца и зон Бриллюэна;
 - определения элементов симметрии атомных полиэдров;
 - симметричного анализа структуры элементарной ячейки кристалла;
 - построения структуры элементарной ячейки кристалла по базису и элементам симметрии
 - сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в области кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок;
 - включения приобретенных знаний о кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок в уже имеющуюся систему знаний и применения этих знаний в самостоятельных методических разработках;
 - переноса полученных знаний о кристаллографии кристаллов, наночастиц и нанотрубок на смежные предметные области и использования этих знаний для построения междисциплинарных методических разработок.
- 3.Иметь представление:
 - об основах теорий точечной и пространственной симметрии;
 - об определении матриц операторов точечной симметрии;
 - об определении группы операторов симметрии;
 - об основных структурных типах и их систематике.

Учебный курс «Кристаллография кристаллов и нанотрубок» состоит из дистанционной и очной частей.

Дистанционная часть учебного образовательного курса обеспечивает слушателя необходимым объёмом знаний по выбранной тематике, включая подготовку слушателя к проведению практических занятий. Задача дистанционной составляющей учебного курса – подготовить слушателя к очному посещению лаборатории в Казанском государственном техническом университете им. А.Н. Туполева.

В дистанционной (теоретической) части учебного курса изложены основы структурной кристаллографии, закономерности строения обратного пространства кристаллических объектов, основы теорий точечной и пространственной симметрии, рассмотрены основные типы кристаллических структур, строение наночастиц и элементы кристаллографии нанотрубок. Теоретическая часть учебного курса состоит из пяти лекций:

Лекция № 1: Структурная кристаллография

Основные понятия кристаллографии: элементарная ячейка, базисные векторы, кристаллическая решетка, ее вектор и параметры, сингонии. Ячейка Вигнера-Зейтца. Решетки Бравэ. Индексы направлений и зон, оси зон, межплоскостные расстояния. Особенности индексации в гексагональной сингонии.

Лекция № 2: Обратное пространство кристаллов

Физический смысл обратного пространства. Обратная решетка монокристалла, базисные векторы обратной решетки, вектор обратной решетки. Зоны Бриллюэна. Обратное пространство кристаллических объектов: монокристалл, дебаевский порошок, аксиальная и ограниченная текстуры. Получение изображения обратной решетки методом микродифракции электронов.

Лекция № 3: Симметрия кристаллов

Порядок и беспорядок, принцип симметрии. Точечная симметрия, операторы точечной симметрии, их матрицы. Произведение операторов симметрии, точечная группа симметрии. Пространственная симметрия, операторы пространственной симметрии, пространственная группа симметрии. Построение структуры элементарной ячейки по базису и элементам симметрии.

Лекция № 4: Кристаллические структуры

Структурные мотивы: координационный, каркасный, кольцевой, островной, цепной, слоистый, цилиндрический, сферический, политипия. Теория плотнейших упаковок: плотноупакованные ГПУ- и ГЦК-структуры, ОЦК- и кубическая решетки, координация атомов в кристаллической структуре. Жидкие кристаллы, их виды: термотропные и лиотропные ЖК; смектический, нематический и холестерический ЖК, формула параметра порядка ЖК. Сверхрешетки и их типы. Структурный тип: понятие структурного типа, его обозначение, описание структурного типа. Основные структурные типы элементов и бинарных соединений: A1, A2, A3, B1, B2, их решетки, пространственная группа, типичные фазы. Дефекты кристаллической структуры: точечные дефекты (вакансии, внедрения и примеси, дефекты по Шотки и Френкелю, краудион, фокусон), линейные, поверхностные и объемные дефекты (краевая и винтовая дислокации, вектор Бюргерса, перемещение дислокаций, двойникование).

Лекция № 5: Кристаллография наночастиц

Понятие нанокластера, виды нанокластеров: металлические, коллоидные, твердотельные, матричные; кластерные кристаллы и фуллериты. Фуллерен и: кластерные структуры на его основе, многослойные сферические фуллереноподобные нанокластеры. Нанотрубки, их разновидности, геометрические типы и политипные модификации. кристаллографическое описание структур круговых и спиральных нанотрубок.

Очная (практическая) часть учебного курса заключается в приобретении навыков практического определения основных кристаллографических характеристик, а также построения и анализа ячеек и структур. Основные задания на практических занятиях:

- построение ячеек Вигнера-Зейтца;
- определение индексов плоскостей и направлений;
- определение компонент векторов обратной решетки;
- построение зон Бриллюэна;
- определение элементов симметрии многогранников;
- определение матриц операторов точечной симметрии;
- определение группы операторов симметрии;
- построение структуры элементарной ячейки кристалла по базису и элементам симметрии.

Методические рекомендации по реализации учебной программы

На дистанционную и очную части учебного курса отводится по 18 часов соответственно. Полное содержание лекций в электронной дистанционной части учебного курса находится на сайте www.nanoobr.ru. Для контроля степени освоения теоретической части учебного курса (лекций) используются тестовые вопросы для самопроверки и контрольные вопросы.

Тестовые вопросы к курсу

«Кристаллография кристаллов и нанотрубок»

Лекция 1: Структурная кристаллография

1. Параметрами решетки называются
 - а) базисные вектора **a**, **b**, **c**;
 - б) объем и масса элементарной ячейки;
 - в) длины базисных векторов и углы между ними.
2. Какая из сингоний является наивысшей?
 - а) гексагональная;
 - б) кубическая;
 - в) триклинная.
3. Вектором решетки называется вектор
 - а) из начала элементарной ячейки к атому внутри ее;
 - б) из начала кристалла к любому узлу решетки;
 - в) из начала кристалла к любому его атому.
4. Какой сингонии соответствуют условия: $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$?
 - а) ромбической;
 - б) тригональной;
 - в) гексагональной.
5. Какое соотношение между параметрами в ромбической сингонии?
 - а) $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$;
 - б) $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$;
 - в) $a \neq b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$.

Лекция 2: Обратное пространство кристаллов

1. Обратное пространство какого объекта представляет собой систему концентрических сфер?
 - а) монокристалл;
 - б) текстура;
 - в) порошок.
2. По физическому смыслу обратное пространство является

- а) уменьшенное в 2π раз пространство волновых векторов рассеяния;
 - б) пространство волновых векторов рассеяния;
 - в) пространство волновых векторов.
3. Вектор обратной решетки это
- а) вектор к узлу обратной решетки;
 - б) базисный вектор обратной решетки;
 - в) вектор между узлами обратной решетки.
4. Обратное пространство аксиальной текстуры представляет собой
- а) решетку;
 - б) системы концентрических окружностей;
 - в) систему концентрических сфер.
5. 1-я зона Бриллюэна это
- а) элементарная ячейка в обратном пространстве кристалла;
 - б) ячейка Вигнера-Зейтца в структуре кристалла;
 - в) ячейка Вигнера-Зейтца в обратном пространстве кристалла.

Лекция 3: Симметрия кристаллов

1. В кристаллографии обычных кристаллов отсутствует ось
- а) 4-го порядка;
 - б) 5-го порядка;
 - в) 6-го порядка.
2. Матрица оператора точечной симметрии содержит
- а) косинусы углов ориентации элемента симметрии по отношению к объекту;
 - б) косинусы углов между декартовыми осями до и после действия на них оператора симметрии;
 - в) косинусы углов ориентации одного элемента симметрии по отношению к другому.
3. Символ “d” в обозначении пространственной группы симметрии означает скольжение вдоль
- а) базисных векторов;
 - б) диагонали грани на ее половину;
 - в) диагонали грани на ее четверть.
4. Ось 3-го порядка не содержит
- а) куб;
 - б) прямоугольная призма;
 - в) тетраэдр.
5. Среди пространственных операторов симметрии отсутствуют
- а) винтовые оси;
 - б) плоскости зеркального отражения;
 - в) центр симметрии.

Лекция 4: Кристаллические структуры

1. Структурный тип A1 имеет ячейку
 - а) ОЦК;
 - б) ГЦК;
 - в) ГПУ.

2. Наиболее плотной упаковкой является
 - а) кубическая;
 - б) ГЦК;
 - в) ОЦК.

3. Кристаллы, принадлежащие одному структурному типу, имеют
 - а) одинаковый химический состав;
 - б) одинаковый тип решетки Бравэ;
 - в) отличия лишь в химическом составе и размерах ячеек.

4. Структурный тип A2 имеет ячейку
 - а) ОЦК;
 - б) ГЦК;
 - в) ГПУ.

5. Буква "B" в обозначении структурного типа означает
 - а) элементы;
 - б) типы со стехиометрией AB;
 - в) типы со стехиометрией AB₂.

Лекция 5: Кристаллография наночастиц

1. Наночастицами принято называть объекты не более
 - а) 1 нм;
 - б) 10 нм;
 - в) 100 нм.

2. Фуллерен это
 - а) твердотельный нанокластер;
 - б) мицелла;
 - в) матричный нанокластер.

3. Хиральная нанотрубка - это
 - а) цилиндрическая нанотрубка;
 - б) спиральная нанотрубка;
 - в) конусная нанотрубка.

4. Политипные модификации нанотрубок различаются
 - а) химическим составом;
 - б) внутренним диаметром;
 - в) взаимными сдвигами и разворотами слоев.

5. Генератор цилиндрической решетки – это число
 - а) комплексное;
 - б) целое;

в) действительное.

Контрольные вопросы для проверки материала в количестве 25 вопросов

- 1) Дайте определение элементарной ячейке.
- 2) Что такое «вектор решетки»?
- 3) В чем особенность ячейки Вигнера-Зейтца?
- 4) Что такое «сингония»?
- 5) Какая сингония является наивысшей по симметрии?
- 6) Чем обратное пространство кристаллографии отличается от используемого в физике пространства волновых векторов?
- 7) Расскажите, как определяются индексы Миллера семейства плоскостей.
- 8) Расскажите об особенностях индексации плоскостей в гексагональной сингонии.
- 9) Принцип плотнейшей упаковки.
- 10) Какой тип решетки является наиболее плотно упакованным?
- 11) Объясните понятие «порядок» применительно к атомной структуре вещества.
- 12) Какие оси симметрии могут иметь место в обычных кристаллах?
- 13) Объясните механизм действия винтовой оси точечной симметрии.
- 14) Как действует оператор трансляции?
- 15) Что является элементами матрицы оператора точечной симметрии?
- 16) Что называется произведением операторов симметрии?
- 17) Дайте определение группы симметрии.
- 18) В чем сходны и чем различаются структуры кристаллов, принадлежащие одному структурному типу?
- 19) Расскажите о международной системе обозначения структурного типа.
- 20) Какие типы кластеров вы знаете?
- 21) Каково соотношение чисел пентагонов и гексагонов в фуллерене?
- 22) Какие разновидности нанотрубок вы знаете?
- 23) Какие геометрические типы нанотрубок вы знаете?
- 24) Чем различаются политипные модификации нанотрубок?
- 25) Какие параметры используют для описания цилиндрических решеток?

В конце очной части учебного курса слушатели готовят отчеты по **темам контрольных рефератов**, которые используются для контроля степени усвоения всего учебного курса на базе практических занятий с применением знаний из дистанционной части курса.

Темы контрольных рефератов по курсу
«Кристаллография кристаллов и нанотрубок»

1. Кристаллические объекты, используемые в технологии современной микроэлектроники.
2. Кристаллические структуры металлов, используемых в современной микроэлектронике.
3. Проблематика, связанная с дефектами структуры кристаллических материалов, используемых в современной микроэлектронике.
4. Кристаллы-диэлектрики, используемые в современной микроэлектронике.
5. Симметрия в мире кристаллов.
6. Высокосовершенные монокристаллы кремния: структура, методы получения, применение в микроэлектронике.
7. Кристаллические наночастицы как основа элементной базы нанoeлектроники.
8. Природные диэлектрические нанотрубки.
9. Синтетические нанотрубки – перспективная основа нанoeлектроники.
10. Нанoeлектронные устройства на основе кристаллических наночастиц.

Учебно-тематический план

№	Название учебного курса и лекций	Всего, час.	в том числе (указать часы)			Форма контроля
			Дистанционные лекции (самостоятельное изучение, дистанционное общение с преподавателем, вопросы-ответы через email, форум, чат и др.)	Самостоятельная работа. Подготовка ответов на контрольные вопросы	Очный практикум или другое практическое задание	
	<u>«Кристаллография кристаллов и нанотрубок»</u>	36 ч.	17,5 ч.	2,5 ч.	16 ч.	Контрольные вопросы (электронная зачётка) Реферат
1	Лекция 1: Структурная кристаллография.		3,5 ч.	0,5 ч.		
2	Лекция 2: Обратное пространство кристаллов.		3,5 ч.	0,5 ч.		
3	Лекция 3: Симметрия кристаллов.		3,5 ч.	0,5 ч.		
4	Лекция 4: Кристаллические структуры.		3,5 ч.	0,5 ч.		
5	Лекция 5: Кристаллография наночастиц.		3,5 ч.	0,5 ч.		
	Итоговый контроль			Контрольные вопросы (электронная зачётка)	Реферат	

**Список литературы (основной и дополнительной),
а также других видов учебно-методологических материалов и пособий,
необходимых для изучения (конспектов лекций, видеолекций, лазерных
дисков и др.).**

Список литературы в кол-ве – 5.

1. Галеев И.Г. Конденсированное состояние вещества. Консп. лек., Казань, КГТУ, 1997, 29 с.
2. Синельников Б.М. Физическая химия кристаллов с дефектами. М., ВШ, 2005, 136 с.
3. Чупрунов Е.В., Фаддеев М.А. Кристаллография. Физматиз., М., 2000, 496 с.
4. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.: Госгеолтехиздат, 1955.
5. Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Metallurgia, 1982.

**Полное содержание лекций в электронной дистанционной части
учебного курса на сайте www.nanoobr.ru**