

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И. о. декана Геологического факультета

член-корреспондент РАН

_____/Н.Н.Еремин/

«__» _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Физика минералов

Автор-составитель: Коцуг Д.Г.

Уровень высшего образования:

Бакалавриат

Направление подготовки:

05.03.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

Геохимия

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № _____, _____)

Москва

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*)

Год (годы) приема на обучение: 2022

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины физика минералов является – получение знаний по связи основных физических свойств минералов с идеальной кристаллической структурой минералов, с реальной (дефектной) структурой минералов, с электронным строением твердого тела.

Задачи:

- изучение основ физических теорий твердого тела;
- изучение типов дефектов строения кристаллов минералов;
- применение полученных знаний для объяснения физических свойств реальных кристаллов минералов;
- изучение физических основ методов исследования минералов;
- решение ряда практических задач по расчету физических свойств минералов.

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Информация, получаемая слушателями в рамках данной дисциплины, используется при диагностике минералов для уточнения понятия минерал, минеральный вид; в генетической минералогии для уточнения понятия минеральной разновидности, представления о реальном строении минералов, о типоморфизме минералов; в поисковой минералогии для совершенствования минералогических методов поисков полезных ископаемых; в технологической минералогии при изучении изменчивости технологических свойств минералов, а также методов их направленного изменения; в геммологии при идентификации драгоценных камней, их синтетических аналогов, природных и искусственных имитаций.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, профессиональный цикл, профессиональные дисциплины по выбору.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

освоение дисциплин «Физика», «Высшая математика», «Общая химия», «Физическая химия», «Минералогия» «Кристаллография».

Дисциплина необходима в качестве предшествующей для дисциплин «Методы исследования минералов», «Технологическая минералогия», «Термодинамика минералов», а также для научно-исследовательской работы и выполнения выпускных квалификационных работ.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников:

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы (показатели) достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
ОПК-3.Б Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки	Б.ОПК-3. И-1. Использует типовые подходы и методы при решении задач профессиональной деятельности. Б.ОПК-3. И-3. Владеет базовыми навыками	Знает: основы теории колебаний, основные типы дефектов структуры минералов, основы теорий электронного строения минералов, теоретические основы физических методов исследования минералов; Умеет: использовать данные колебательной спектроскопии для

	обработки и интерпретации информации при решении стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.	идентификации минералов, интерпретировать окраску минералов, выбирать адекватный комплекс физических методов исследования для решения научных и прикладных задач минералогии.
СПК-1.Б Способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации в области наук геохимического цикла.	Б.СПК-1. И-1. Владеет методами поиска и анализа данных физических методов изучения минералов, в том числе – с применением современных информационно-коммуникационных технологий.	Знает: классификацию основных типов структурных дефектов минералов. Умеет: использовать данные спектроскопических методов для идентификации минералов и структурных дефектов. Владеет: информацией о реальном строении минералов, о возможностях и ограничениях физических методов исследования минералов.

4. Объем дисциплины (модуля) составляет **5** з.е., в том числе **58** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (**45** часов – занятия лекционного типа, **13** часов – занятия семинарского типа), **122** академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации - экзамен.

5. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия, не предполагает электронного обучения и использования дистанционных образовательных технологий (за исключением форс-мажорных обстоятельств – пандемии и т.п.)

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы * (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Реальные кристаллы, дефекты в минералах, методы изучения.		22		7	29	Подготовка к контрольному опросу, 61 час.
Раздел 2. Электронное строение минералов.		23		6	29	Подготовка к контрольному опросу, 61 час.
Промежуточная аттестация, <u>экзамен</u>						
Итого	180	58				122

Содержание разделов дисциплины:

В первой части учебного курса на основе теории колебательных процессов описаны теплоемкость, ее зависимость от температуры, теплопроводность и тепловое расширение твердых тел. Рассмотрены теоретические основы и области применения методов колебательной спектроскопии. Приведены основные типы структурных дефектов – нульмерные, одномерные, двумерные и трехмерные, рассмотрено взаимодействие различных дефектов. Дан вывод основных законов диффузии, описаны методы измерения коэффициентов диффузии. Дан обзор основных методов изучения структурных дефектов.

Вторая часть дисциплины посвящена квантово-механическому описанию строения атома и теориям, описывающим электронное строение твердых тел – теории кристаллического поля, теории молекулярных орбиталей, теории валентных связей и зонной теории. Даны теоретические основы ряда физических методов исследования минералов. Рассмотрено применение указанных теорий для описания спектров поглощения и люминесценции минералов, объяснения окраски минералов. Приведены примеры применения теорий для объяснения физических свойств минералов.

Содержание семинаров.

Структура молекулярных кристаллов. Расчет стабильного состояния ионной пары Na^+Cl^- . Энергия разрыва химической связи. Точечные дефекты. Расчет энергии образования вакансий. Изоморфные замещения. Расчет плотности нестехиометричных минералов. Расчет коэффициента диффузии. Теория строения атомов. Расчет радиусов боровских орбит. Расчет энергии ионизации атомов. Построить зависимость $\sqrt{\nu}$ от Z для K_α , K_β и K_γ -линий. Построить зависимость $\sqrt{\nu}$ от Z для L_α , L_β и L_γ -линий. Определение перекрытия линий в рентгеновских спектрах. Получение термов основного состояния атомов и ионов. Получение термов возбужденных состояний атомов и ионов. Термы элементов группы железа.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные опросы.

Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля/ Темы контрольного опроса:

1. При образовании кристаллов энергия поглощается или выделяется?
2. Какой тип структуры характерен для «вандерваальсовых» кристаллов?
3. Чему равна частота колебаний атома в гармоническом приближении?
4. Чем отличаются колебания атомов в одноатомной цепочке от колебаний гармонического осциллятора?
5. К чему приводит введение в линейную цепочку второго сорта атомов?
6. Чем отличается тепловая энергия твердого тела от внутренней?
7. Чему равна теплоемкость, исходя из классической теории теплоемкости?
8. Из чего состоит дефект Френкеля?
9. Из чего состоит дефект Шоттки?
10. Почему кристалл с дефектами является энергетически выгодным?
11. По каким позициям в структуре кристалла двигаются атомы при диффузии?
12. Как зависит от времени расстояние, на которое диффундирует атом?
13. Какие дефекты относятся к линейным (одномерным)?

14. Как взаимно ориентированы вектор Бюргерса и линия дислокации в краевой дислокации?
15. Что такое двумерный дефект?
16. Какие линейные дефекты есть на границе двух зерен?
17. На каком явлении основаны рентгеновские методы изучения дефектов?
18. Можно ли с помощью рентгеновских методов обнаружить точечные дефекты?
19. В чем заключается недостаток классической модели Резерфорда?
20. Что нового внес в модель строения атома Бор?
21. Какое значение волновой функции имеет физический смысл?
22. Для каких значений главного квантового числа n могут быть p -орбитали?
23. Учитывается ли электронное строение лигандов в теории кристаллического поля?
24. Изменяется ли энергия d -электронов на орбиталях при помещении иона в кристаллическое поле?
25. Сколько молекулярных орбиталей образуют две атомные орбитали?
26. При каком перекрытии атомных орбиталей образуются σ орбитали?
27. Каким процессом в твердом теле пренебрегают в случае адиабатического приближения?
28. В чем заключается смысл одноэлектронного приближения?

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

1. Образование кристаллов. Термодинамические характеристики. Межатомные связи.
2. Кристаллы с Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием, энергия взаимодействия, примеры кристаллов. Кристаллы с ковалентным взаимодействием.
3. Ионные кристаллы, энергия взаимодействия, постоянная Маделунга.
4. Тепловые колебания, гармоническое приближение.
5. Тепловые колебания идеальной одноатомной цепочки.
6. Тепловые колебания идеальной двухатомной цепочки.
7. Типы колебаний, применение колебательной спектроскопии.
8. Тепловая энергия кристаллов, классическая модель теплоемкости.
9. Теплоемкость при низкой температуре, физический смысл температуры Дебая.
10. Флуктуации энергии колебаний атомов в кристаллах.
11. Тепловое расширение и теплопроводность твердых тел, связь с ангармоничностью колебаний.
12. Равновесная концентрация точечных дефектов Шоттки.
13. Равновесная концентрация точечных дефектов Френкеля.
14. Собственные точечные дефекты, искажения кристаллической структуры, нарушение электронейтральности, способы компенсации зарядов.
15. Примесные дефекты, искажения кристаллической структуры, нарушение электронейтральности, способы компенсации зарядов.
16. Диффузия, способы движения атомов в кристаллах, вероятность диффузии по междоузельным позициям.
17. Диффузия, способы движения атомов в кристаллах, вероятность диффузии по вакансионным позициям.
18. Перемещение атомов на большие расстояния, коэффициент диффузии, зависимость от температуры.
19. Законы диффузии, первый закон Фика.
20. Законы диффузии, второй закон Фика.
21. Типичные случаи диффузии: стационарная диффузия, диффузия из постоянного источника.

22. Типичные случаи диффузии: диффузия из непостоянного источника.
23. Краевые дислокации, искажения структуры, вектор Бюргерса, примеры векторов Бюргерса.
24. Винтовые дислокации, искажения структуры, вектор Бюргерса.
25. Упругие свойства дислокаций
26. Энергия дислокаций.
27. Движение дислокаций.
28. Восхождение (переползание) дислокаций, образование порогов. Зарождение дислокаций, источник Франка-Рида.
29. Пересечение дислокаций, образование ступенек, перегибов.
30. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами, облака Коттрела.
31. Двумерные дефекты, границы между субзернами и зернами.
32. Рентгеновские методы изучения дислокаций.
33. Рентгеновская томография.
34. Декорирование дислокаций, метод травления.
35. Высокорастворяющая электронная и ионная микроскопии.
36. Сканирующая зондовая микроскопия.
37. Теория строения атома, модель Бора.
38. Квантово-механическое описание электронного строения атома. Орбитали, квантовые числа.
39. Многоэлектронные атомы, электронные конфигурации, орбитальный, спиновый и полный моменты.
40. Правила Хунда, термы многоэлектронных атомов.
41. Орбитальные и атомные радиусы. Ионные радиусы. Закономерности изменения атомных и ионных радиусов химических элементов.
42. Теория кристаллического поля, расщепление уровней d -орбиталей в октаэдрическом и тетраэдрическом полях.
43. Слабое, среднее и сильное взаимодействие центрального катиона с кристаллическим полем.
44. Ионы группы железа. Расщепление термов $3d$ -элементов в октаэдрическом поле.
45. Параметры кристаллического поля, высокоспиновые и низкоспиновые состояния.
46. Взаимодействие орбиталей центрального иона с лигандами в случае низкой локальной симметрии, характеры неприводимых представлений.
47. Вероятность переходов между уровнями, правила отбора.
48. Теория молекулярных орбиталей, образование волновой функции
49. Взаимодействие атомных орбиталей: образование связывающих, антисвязывающих, несвязывающих молекулярных орбиталей.
50. Образование молекулярных орбиталей в линейных молекулах типа A_2 .
51. Образование молекулярных орбиталей в линейных молекулах типа AB_2 .
52. Образование молекулярных орбиталей в угловых молекулах AB_2 .
53. Метод валентных связей, виды sp -гибридизации.
54. Зонная теория, адиабатическое и одноэлектронное приближение.
55. Зонная теория, метод атомных орбит.
56. Зонная теория, метод коллективизированных орбит.
57. Металлы, диэлектрики, полупроводники, собственные и примесные полупроводники, электронные уровни в запрещенной зоне, электронные переходы.
58. Спиновые системы, система с одним неспаренным электроном.
59. Парамагнитный ион в кристаллическом поле, тонкое взаимодействие.
60. Сверхтонкая и суперсверхтонкая структура спектра ЭПР.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: (письменный/устный опрос) основ теории колебаний, основные типы дефектов структуры минералов, основы теорий электронного строения минералов, теоретические основы физических методов исследования минералов.	Знания отсутствуют или весьма фрагментарны	Знания есть, но отсутствует их систематичность	Знания систематические, но имеются пробелы	Систематические знания в достаточном объеме
Умения: (письменный/устный опрос) использовать данные колебательной спектроскопии для идентификации минералов, интерпретировать окраску минералов, выбирать адекватный комплекс физических методов исследования для решения научных и прикладных задач минералогии.	Умения отсутствуют	Демонстрирует умения только по отдельным пунктам	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности не принципиального характера: умение интерпретировать спектроскопическую информацию, определять ее достоверность, подбирать необходимый метод исследования.	Успешное умение интерпретировать спектроскопическую информацию, определять ее достоверность, подбирать необходимый метод исследования.
Владения: (письменный/устный опрос) информацией о реальном строении минералов, о возможностях и ограничениях физических методов исследования минералов, методами обработки спектроскопической информации.	Навыки владения методами физики минералов отсутствуют.	Фрагментарное владение отдельными методами физики минералов.	В целом сформированные навыки использования данных физики минералов для интерпретации физических свойств реальных минералов, но имеются пробелы	Владение методами физики минералов для диагностики минералов, решения генетических задач, уточнения технологических свойств минералов.

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

1. Кошуг Д.Г., Кротова О.Д. Физика минералов. М., ИНФРА-М. 2017, 348 с.

- дополнительная литература:

1. Драго Р. Физические методы в неорганической химии. М.: Недра. 1981, тт. 1, 2.
2. Епифанов В.И. Физика твердого тела. М.: Высшая школа. 1977, 288 с.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир. 1966, 416 с.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука. 1978, 792 с.
5. Коттрел А. Теория дислокаций. М.: Мир. 1969, 96 с.
6. Марфунин А.С. Введение в физику минералов. М.: Недра. 1974.
7. Марфунин А.С. Спектроскопия, люминесценция и радиационные центры в минералах. М.: Недра. 1974.
8. Платонов А.Н. Природа окраски минералов. Киев. Наукова думка. 1976.
9. Платонов А.Н., Таран М.Н., Балицкий В.С. Природа окраски самоцветов. М.: Недра. 1984.
10. Плюснина И.И. Инфракрасная спектроскопия минералов. М.: Изд. МГУ, 1982.
11. Прямые методы исследования дефектов в кристаллах. Под ред. Елистратова?????. М. М.: Мир. 1965, 352 с.
12. Пушаровский Д.Ю. Минералогическая кристаллография. М.: Изд. Геокарт-Геос. 2020. 342 с.
13. Гончаров Г.Н., Зорина М.Л., Сухаржевский С.М. Спектроскопические методы в геохимии. Л: изд. Ленинградский университет. 1982.

Б) Перечень программного обеспечения:

- лицензионное

пакеты программ типа Microsoft Office Excel (при необходимости).

- нелицензионное и свободного доступа

пакет программ Open Office, Интернет браузер, любые свободно распространяющиеся программы, требующиеся для освоения дисциплины.

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

- реферативная база данных издательства Elsevier: www.sciencedirect.com
- реферативная база данных издательства Springer: www.springer.de

Г) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости)

- поисковая система научной информации www.scopus.com
- электронная база научных публикаций www.webofscience.com

Д) Материально-техническое обеспечение:

Учебная аудитория с мультимедийным проектором, экран, компьютер

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели): Ответственный за курс — Кошуг Дмитрий Гурьевич

11. Разработчики программы:

Кошуг Дмитрий Гурьевич, заведующий кафедрой минералогии