

СИЛАБУС

КРИСТАЛОГРАФІЯ І ДЕФЕКТИ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ

Тип: нормативна

Курс (рік навчання): 2-й

Семестр: 3-й

Кредити: 6

Викладач: Степанова Любов Петрівна, канд. техн. наук, доцент; Джуган Олександр Андрійович, старший викладач; Лисиця Олена Володимирівна, старший викладач.

Розподіл годин: загальна кількість 180 годин (28 лекцій, 28 лабораторних занять, 166 годин самостійної роботи).

Лекції, лабораторні роботи, індивідуальні завдання.

Мета: опанування студентами знань, щодо зовнішньої та внутрішньої будови кристалів, дефектів кристалічної структури реальних кристалів та їх впливу на властивості матеріалів.

Завдання: розвинення знань та практичних навичок студентів у визначенні особливостей кристалічної будови металів та сплавів. Поглиблення розуміння процесів кристалізації та властивостей сплавів металевих систем, опанування закономірностей будови кристалічних структур. Засвоєння основ геометричної та структурної кристалографії.

Вміст курсу: освоєння основних принципів побудови кристалографічних проєкцій; визначення елементів та запис формули симетрії кристалів; методи визначення кристалографічних символів; типи елементарних комірок; щільнопаковані структури; дефекти кристалічної будови.

Структура курсу:

1. Вступ. Основні історичні етапи розвитку кристалографії, як науки. Основні чотири напрямки вивчення кристалографії. Геометрична кристалографія. Структурна кристалографія і кристалохімія, кристалофізика та фізико-хімічна кристалографія. Задачі і зв'язки всіх напрямків. Можливості формування оптимальної структури для забезпечення необхідних властивостей матеріалів.

2. Зв'язок кристалографії із іншими науками. Види кристалів: моно- і полікристалами. Умови росту і спосіб одержання монокристалів, їх особливості. Формування зеренної структури в полікристалічних матеріалах. Текстура, сутність та умови утворення в полікристалах.

3. Основні властивості кристалів: огранка, симетрія, анізотропія. Поліморфізм та ізоморфізм. Закон Вульфа щодо утворення певної форми кристала. Поняття континуума і дисконтинуума. Поняття нескінченного атомного ряду і вектора трансляції. Вузли ґратки і кристалографічна площа. Просторова ґратка, трансляційна комірка. Геометричні і лінійні параметри елементарної комірки.

4. Закон постійності кутів. Особливості кристалографічних проекцій. Поняття прямого і оберненого точкового комплексу. Правило для одержання комплексу. Приклади точкового комплексу для гексаедра, октаедра, тетраедра. Особливості проектування кристалів. Елементи сферичної проекції: вісь, сферична поверхня проекції, нульовий меридіан. Поліус грані. Полярна відстань і довгота, кутові інтервали зміни сферичних координат. Способи зображення поліусів граней. Стереοграфічна проекція. Стереοграфічні проекції напрямків і площин в залежності від їх орієнтації. Способи зображення.

5. Властивості стереοграфічної проекції і її використання для вирішення задач. Гномостереοграфічна проекція, її застосування. Устрій координатної сітки Вульфа, принцип її побудови і способи визначення заданих проекцій. Приклади задач для визначення кількісних співвідношень між елементами кристала проектуванні.

6. Симетрія кристалів. Симетричні перетворення: відображення в точці або інверсія; дзеркальне відображення в площині; поворот на певний кут; складна взаємодія інверсії і повороту. Елементи симетрії: центр симетрії, площа, прості поворотні і інверсійні осі. Правило для визначення центра і площини симетрії. Мінімальний кут повороту для суміщення кристала. Порядок осі симетрії. Закон симетрії.

7. Інверсійні осі. Взаємодія інверсійних осей із іншими елементами симетрії. Використання стереοграфічної проекції для проектування елементів симетрії. Особливості позначення їх на проекції. Взаємодія елементів симетрії. Теорема Ейлера. Основні теореми для визначення формули симетрії. Використання стереοграфічної проекції для вирішення задач при визначенні сумарної дії при складанні елементів симетрії.

8. Міжнародне позначення точкової групи кристала. Позначення елементів симетрії, використання теорем складання. Проектування елементів симетрії, установка кристалів при проектуванні відносно координатних осей. Одиничні і симетрично рівні напрямки в кристалах. Прості форми і комбінації.

9. Елементи симетрії просторових нескінчених структур (дисконтинуума); трансляція, площини ковзаючого відбиття, гвинтові осі. Порядок осі. Точкові і просторові групи. Історія питання. Роль Федорова і Шенфліса. Принцип Неймана. Зв'язок між симетрією і анізотропією властивостей.

10. Особливості використання кристалографічних символів для позначення вузлів, напрямків і площин. Позначення сукупностей симетрично рівних напрямків і площин. Залежність кількості площин в сукупності від сингонії. Індеси Мілера-Браве в гексагональній сингонії.

11. Кристалографічна зона, умова зональності Вейса. Зони в кристалах. Визначення площини по заданим індексам напрямків(мнемонічне правило перехресного множення). Визначення кута між площинами. Формули для розрахунків міжплощинних відстаней для різних сингоній. Типи двовірних ґраток. Ретикулярна щільність площин. Визначення найбільш щільно пакованих площин в ґратках металів.

12. Визначення типу просторової ґратки Браве і правило вибору елементарної комірки. Примітивна, базоцентрована, об'ємноцентрована і гранецентрована комірки, розташування атомів. Базис кристалічної структури. Визначення базисної матриці для типових кристалічних структур. Причини відсутності деяких типів комірок в ґратках різних сингоній.

13. Координаційний багатогранник і визначення координаційного числа ґраток металів. Підрахунки коефіцієнта компактності. Розташування атомів, базисна матриця в складних структурах (ГЦП, графіту, алмазу). Визначення атомних радіусів. Іонні і ковалентні радіуси. Вплив кристалохімічних факторів на кристалічну структуру. Поліморфні перетворення. Взаємна орієнтація ґраток модифікацій при поліморфному перетворенні в залізі, титані і кобальті. Об'ємний ефект в олові. Зміна властивостей.

14. Характеристика найбільш щільних пакувань в ГЦП і ГЦК ґратках. Правила їх визначення в кристалічних структурах. Октаедричні і тетраедричні порожнини в ґратках. Їх розташування і розміри. Особливість октаедричних пор в ГЦП ґратці, їх вплив на процеси дифузії. Структурні типи фаз в металічних системах. Епітаксiальні структури. Кристалічна орієнтація епітаксiального шару і підкладки. Критерій оцінки можливості епітаксiї. Характеристики епітаксiї в металічних фазах.

15. Поняття макро- і мікроскопічного розміру дефекту. Точкові нульвимірні дефекти. Власні і домішкові дефекти. Зміщення атомів навколо вакансії. Утворення вакансій за механізмом Шоттки. Дефект Френкеля. Поняття стоків. Міжвузлові атоми. Енергія утворення вакансій і міжвузлових атомів. Зв'язок із температурою плавлення металів.

16. Конфігураційна і коливальна ентропія. Рівноважна концентрація вакансій. Енергія активації міграції вакансій. Міграція міжвузлових атомів. Вакансійний механізм міграції домішкових атомів заміщення. Роль октаедричних і тетраедричних пор в міграції атомів впровадження при їх переміщенні.

17. Комплекси точкових дефектів: дівакансії і тетравакансії, вакансійні пори, гантель краудіон. Зміна концентрації вакансій при гартуванні і відпалу. Методи визначення концентрації вакансій.

18. Основні типи дислокацій. Поняття зсуву, як спосіб утворення дислокації. Спотворення в ґратці навколо екстра площини. Позитивна і негативна дислокації. Крайова дислокація як границя області зсуву в кристалі.

19. Ковзання крайової дислокації. Атомний механізм переміщення крайової дислокації. Площини ковзання дислокацій і швидкість їх переміщення. Переповзання крайової дислокації як консервативне

переміщення із переносом маси. Утворення порогів при переповзанні крайової дислокації.

20. Гвинтова дислокація. Утворення атомної площини у вигляді гелікоїда. Розташування атомів в ядрі гвинтової дислокації. Відміна гвинтової дислокації від крайової. Ковзання гвинтової дислокації. Множинне поперечне ковзання. Змішані криволінійні дислокації. Утворення плоскої дислокаційної петлі усередині кристала. Призматичні дислокації. Будова кристала в області призматичної дислокації.

21. Побудова контура Бюргерса навколо дислокації і визначення вектора Бюргерса. Особливості вектора Бюргерса, його інваріантність. Запис вектора Бюргерса і розрахунки потужності на прикладах примітивної, об'ємноцентрованої і гранецентрованої ґраток.

22. Визначення густини дислокацій, чисельні значення густини дислокацій для моно- і полікристалів після відпалу і холодної пластичної деформації. Вплив густини дислокацій на міцність матеріалів. Методи виявлення дислокацій: просвічувальна електронна мікроскопія, метод ямок травлення, спостереження дислокацій в інфрачервоному мікроскопі, рентгенівська топографія.

23. Взаємодія дислокацій різного знаку. Утворення дислокаційних стінок. Повні і часткові дислокації, приклади для різних типів ґраток. Запис дислокаційних реакцій при взаємодії дислокацій. Реакції об'єднання, розщеплення і перекомутації. Геометричний і енергетичний критерії дислокаційних реакцій в основних ґратках металів.

24. Утворення дефектів пакування в ГЦК і ГЦП ґратках. Запис дефектів пакування впровадження і віднімання, геометрична схема розташування площин в області дефектів пакування. Енергія дефектів пакування, експериментальне спостереження дефектів пакування в електронному мікроскопі.

25. Двійникування як механізм пластичної деформації. Розташування атомів в області двійника. Кристалографічна система площин і напрямків при двійникуванні. Експериментальне виявлення двійників в структурі сплавів.

26. Будова мало куткових границь субзерен, утворення дислокаційних стінок, відстань між дислокаціями в стінках. Полігональна структура. Будова когерентної міжфазної границі, її відміна від некогерентної. Вплив дисперсійних частинок із когерентним зв'язком на властивості сплавів. Принцип Конобеєвського-Данкова при утворенні зародків із когерентною границею.

Курс складається з 6.0 кредитів. Паралельно з лекційним курсом студенти виконують лабораторні роботи, кожна з яких присвячена засвоєнню теоретичного матеріалу та при виконанні індивідуального завдання.

Результати навчання:

загальні компетентності:

- K3.01.** Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- K3.02.** Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- K3.03.** Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
- K3.04.** Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми.
- K3.05.** Здатність приймати обґрунтовані рішення.

спеціальні (фахові) компетентності:

КС.04. Здатність працювати в групі над великими інженерними проектами у сфері матеріалознавства

КС.06. Здатність використовувати практичні інженерні навички при вирішенні професійних завдань.

КС.07. Здатність застосовувати знання і розуміння наукових фактів, концепцій, теорій, принципів і методів, необхідних для підтримки діяльності в сфері матеріалознавства.

КС.08. Здатність застосовувати знання і розуміння міждисциплінарного інженерного контексту і його основних принципів у професійній діяльності.

Очікувані програмні результати навчання:

ПРН 1. Демонструвати володіння логікою та методологію наукового пізнання.

ПРН 2. Знати та вміти використовувати знання фундаментальних наук, що лежать в основі відповідної спеціалізації матеріалознавства, на рівні, необхідному для досягнення інших результатів освітньої програми.

ПРН 7. Володіти навичками, які дозволяють продовжувати вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ПРН 8. Уміти застосувати свої знання для вирішення проблем в новому або незнайомому середовищі.

ПРН 10. Здатність поєднувати теорію і практику для розв'язування інженерного завдання.

ПРН 11. Демонструвати навички спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

ПРН 21. Уміти здійснювати пошук літератури, консультуватися і критично використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань відповідно до спеціалізації.

Освоїти основи геометричної кристалографії, що розглядає закономірності зовнішньої форми кристалів, та структурної кристалографії, що вивчає атомну будову кристалів. Визначити основні типи кристалічних

граток та їх характеристики. З'ясувати основні види та геометрію дефектів будови кристалічних ґраток. Поглиблення знань, щодо ролі внутрішньої кристалічної будови у формуванні властивостей різних матеріалів.

1. Демонструвати володіння логікою та методологію наукового пізнання.

2. Знати та вміти використовувати знання фундаментальних наук, що лежать в основі відповідної спеціалізації матеріалознавства, на рівні, необхідному для досягнення інших результатів освітньої програми.

3. Володіти засобами сучасних інформаційних та комунікаційних технологій в обсязі, достатньому для навчання та професійної діяльності.

4. Передавати свої знання, рішення і підґрунтя їх прийняття фахівцям і неспеціалістам в ясній і однозначній формі.

7. Володіти навичками, які дозволяють продовжувати вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

8. Уміти застосувати свої знання для вирішення проблем в новому або незнайомому середовищі.

9. Уміти експериментувати та аналізувати дані.

10. Здатність поєднувати теорію і практику для розв'язування інженерного завдання.

11 Демонструвати навички спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

13. Знати інженерні дисципліни, що лежать в основі спеціальності, на рівні, необхідному для досягнення інших результатів програми, в тому числі певна обізнаність в їх останніх досягненнях.

14 Описувати будову металів, неметалів, композитів та функціональних матеріалів методи модифікації їх властивостей. Кваліфіковано вибирати матеріали для виробів різного призначення.

16. Знати та застосовувати принципи проектування нових матеріалів.

21. Уміти здійснювати пошук літератури, консультуватися і критично використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань відповідно до спеціалізації.

24. Уміти використовувати базові методи аналізу речовин, матеріалів та відповідних процесів з коректною інтерпретацією результатів.

27. Знання основних груп матеріалів та здатність обґрунтовано здійснювати їх вибір для конкретного використання.

Оцінювання: за результатами засвоєння дисципліни та виконання лабораторних робіт складається іспит. При оцінюванні враховується здатність самостійно обирати оптимальні варіанти дослідження властивостей сплавів. При цьому перевага надається оригінальним рішенням спрямованим на досягнення певного рівня ефективності.

У разі відвідування всіх занять і своєчасного виконання всіх видів робіт може здійснюватися контроль навчання за умови активної роботи студентів на лекціях.

Для студентів денної форми навчання проводиться усне опитування на лабораторних заняттях, аудиторна контрольна робота, тестування.

Для кінцевого контролю використовується наступна схема оцінювання розподілу балів (за засвоєння тем курсу) з отриманням підсумкової середньозваженої оцінки:

Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота					Підсумковий тест (іспит)	Підсумкова середньозважена оцінка
Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2			100	100
T1	T2	T1	T2	T3		
50	50	20	60	20		

T1, T2 ... T12 – теми змістових модулів.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для іспиту, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
85-89	B	добре	
75-84	C		
70-74	D	задовільно	
60-69	E		
35-59	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
1-34	F	незадовільно з обов’язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов’яз-ковим повторним вивченням дисципліни

У разі невідвідування занять з певних тем та несвоєчасного виконання розділів оцінка може знижуватись шляхом віднімання певної кількості балів у відповідності до вищевказаної таблиці. Зниження оцінки може бути скомпенсоване шляхом відпрацювання пропущених занять та виконання додаткових завдань.

Академічна доброчесність: студент повинен виконувати роботи самостійно, не допускається залучення при розв'язанні індивідуальних завдань інших студентів. У разі виявлення ознак плагіату робота не зараховується і дисципліна не вважається зарахованою.

Література:**Базова**

1. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. / Новиков И.И., Розин К.М. - М.: Металлургия, 1990,- 336с.
2. Шаскольская М.П. Кристаллография. . / Шаскольская М.П. -М: Высшая школа, 1976, -391с.
3. Розин К.М., Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур. / Розин К.М., Гусев Э.В - М.:Металлургия, 1985,- 167с.
4. Васильев Д.М. Физическая кристаллография, Учебное пособие / Васильев Д.М. –М.:Металлургия,1981-256с.

Допоміжна

1. Вегман Е.Ф. Кристаллография, минералогия, петрография и рентгенография : [учебное пособие для вузов] / Руфанов Ю.Г., Федорченко Н.Н. - М. Металлургия, 1990. - 262 с.
2. Келли А. Кристаллография и дефекты в кристаллах, пер. с англ. Келли А., Гровс Г.-М.: Мир, 1974. – 490с.
3. Уманский Я.С. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия: учебник [для студ. высш. учеб. заведений] / Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.И. - М. Металлургия, 1982. - 631 с.
4. Солодовников С.Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии (словарь-пособие). Новосибирск: ИНХСОРАН, 2005. 113 с.

13. Інформаційні ресурси

1. Google Академія <http://scholar.google.com.ua/>
2. Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>
3. Материаловедение <http://www.materialscience.ru/>
4. Кристаллографія <http://twi.mpei.ac.ru/ochkov/TM/lection1.htm>