

СИЛАБУС
навчальної дисципліни (обов'язкова)
КРИСТАЛОГРАФІЯ ТА ДЕФЕКТИ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ
Обсяг освітнього компоненту (кредитів – 5/годин - 150)

Освітня програма «Прикладне матеріалознавство»
першого рівня вищої освіти
Спеціальність – 132 Матеріалознавство

ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКЛАДАЧА



Смоляков Олександр Васильович, доктор фіз-мат наук, доцент, професор кафедри фізичного матеріалознавства

Контактна інформація:

0661178772, телефон викладача,

E-mail asmolyakov972@gmail.com

Час і місце проведення консультацій:

1 корпус, аудиторія 163 та онлайн за графіком консультацій кафедри

ОПИС КУРСУ

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.

МЕТА, КОМПЕТЕНТНОСТІ ТА РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

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

Компетентності та результати навчання, формування яких забезпечує вивчення дисциплін:

У результаті вивчення компоненту студент повинен отримати:

загальні компетентності:

K3.05. Здатність приймати обґрунтовані рішення

K3.07. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій

K3.08. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово

спеціальні (фахові) компетентності:

КС.01. Здатність застосовувати відповідні кількісні математичні, фізичні і технічні методи і комп'ютерне програмне забезпечення для вирішення інженерних матеріалознавчих завдань

КС 03. Здатність продемонструвати розуміння питань використання технічної літератури та інших джерел інформації в галузі матеріалознавства

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

КС.05. Здатність застосовувати системний підхід до вирішення інженерних матеріалознавчих проблем

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

КС.08. Здатність застосовувати і інтегрувати знання і розуміння міждисциплінарного інженерного контексту і його основних принципів

КС.09. Здатність застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем

Очікувані програмні результати навчання:

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

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

РН.13. Розуміти будову металевих, неметалевих, композиційних та функціональних матеріалів та обирати оптимальні методи модифікації їх властивостей.

В результаті вивчення дисципліни студенти повинні мати:

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

ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ

Вивчення навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» базується на знаннях окремих розділів таких дисциплін, як математика та фізика.

ПЕРЕЛІК ТЕМ (ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН) ДИСЦИПЛІНИ

Таблиця 1 – Загальний тематичний план аудиторної роботи

| Номер тижня | Теми лекцій, год. | Теми лабораторних робіт, год. |
|--|--|---|
| 1 | 2 | 3 |
| Змістовий модуль 1 . Геометрична і структурна кристалографія. | | |
| 1 | Вступ. Основні властивості кристалів: огранка, симетрія, анізотропія. (2 год.) | |
| 2 | Сферичні, стереографічні та гномостереографічні проекції. (2 год.) | Лр. № 1. Кристалографічні проекції. (4 год.) |
| 3 | Точкові елементи симетрії. Теореми про взаємодію елементів симетрії. (2 год.) | |
| 4 | Просторові ґратки кристалів. Трансляційна симетрія. (2 год.) | Лр. № 2. Стереографічна сітка Вульфа та розв'язання за її допомогою кристалографічних задач. (4 год.) |
| 5 | Кристалографічні системи та категорії. Ґратки Браве. (2 год.) | |
| 6 | Метод кристалографічного індиціювання. (2 год.) | Лр. № 3. Симетрія кристалів, (4 год.) |
| 7 | | |
| 8 | Елементи симетрії просторових нескінчених структур (дисконтинуума). Просторові групи симетрії. (4 год.) | Лр. № 4. Визначення кристалографічних символів вузлів, напрямків та площин в кристалічних ґратках. (4 год.) |
| Змістовий модуль 2 Дефекти кристалічної будови | | |
| 9 | Характеристика найбільш щільних пакувань в ГЦП і ГЦК ґратках. Поняття макро- і мікроскопічного розміру дефекту. (2 год.) | |
| 10 | Точкові дефекти. Конфігураційна і коливальна ентропія. Комплекси точкових дефектів (2 год.) | Лр. № 5. Типи елементарних комірок Браве та їх кількісні характеристики. (4 год.) |
| 11 | Основні типи дислокацій. Ковзання та переповзання дислокацій. (2 год.) | |

| | | |
|----|---|---|
| 12 | Контур та вектор Бюргерса. Визначення густини дислокацій. (4 год.) | Лр. № 6. Визначення найбільш щільнопакованих напрямків і площин в основних ґратках металів. види щільнопакованих структур. (4 год.) |
| 13 | | |
| 14 | Взаємодія дислокацій різного знаку. Утворення дефектів пакування в ГЦК і ГЦП ґратках (2 год.) | Лр. № 7. Кристалографічний аналіз дислокацій та їх кількісні характеристики. (6 год.) |
| 15 | Двійникування як механізм пластичної деформації. Будова мало кутових границь субзерен. (2 год.) | |

САМОСТІЙНА РОБОТА

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. 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. (2 тиждень)
2. 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 площина. Просторова ґратка, трансляційна комірка. Геометричні і лінійні параметри елементарної комірки. (3 тиждень)
3. Закон постійності кутів. Особливості кристалографічних проєкцій. Поняття прямого і оберненого точкового комплексу. Правило для одержання комплексу. Приклади точкового комплексу для гексаедра, октаедра, тетраедра. (4 тиждень)
4. Особливості проектування кристалів. Елементи сферичної проєкції: вісь, сферична поверхня проєкції, нульовий меридіан. Поліус грані. Полярна відстань і довгота, кутові інтервали зміни сферичних координат. Способи зображення полюсів граней. Стереографічна проєкція. Стереографічні проєкції напрямків і площин в залежності від їх орієнтації. Властивості стереографічної проєкції і її використання для вирішення задач. Гномостереографічна проєкція, її застосування. Устрій координатної сітки Вульфа, принцип її побудови і способи визначення заданих проєкцій. Приклади задач для визначення кількісних співвідношень між елементами кристала проектуванні. (5 тиждень)
5. Елементи симетрії: центр симетрії, площина, прості поворотні і інверсійні осі. Правило для визначення центра і площини симетрії. Мінімальний кут повороту для суміщення кристала. Порядок осі симетрії. Закон симетрії. Відсутність осей симетрії із порядком $n = 5$ та $n \in 7$. Інверсійні осі. Взаємодія інверсійних осей із іншими елементами симетрії. Використання стереографічної проєкції для проектування елементів симетрії. Особливості позначення їх на проєкції. Взаємодія елементів симетрії. Теорема Ейлера. Основні теореми для визначення формули симетрії. Використання стереографічної проєкції для вирішення задач при визначенні сумарної дії при складанні елементів симетрії. Міжнародне позначення точкової групи кристала. (6 тиждень)
6. 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. 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. (7 тиждень)
7. 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 сингонії. (8 тиждень)
 8. Визначення типу просторової ґратки Браве і правило вибору елементарної комірки. Примітивна , базоцентрована, б 11 об'ємноцентрована і гранецентрована комірки, розташування атомів. Базис кристалічної структури. Визначення базисної матриці для типових кристалічних структур. (9 тиждень)
 9. Координаційний багатогранник і визначення координаційного числа ґраток металів. Підрахунки коефіцієнта компактності. Розташування атомів, базисна матриця в складних структурах (ГЦП, графіту, алмазу). 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. (10 тиждень)
 10. 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. (11 тиждень)
 11. Міграція міжвузлових атомів. Вакансійний механізм міграції домішкових атомів заміщення. Роль октаедричних і тетраедричних пор в міграції атомів впровадження при їх переміщенні. Комплекси точкових дефектів: дівакансії і тетравакансії, вакансійні пори, гантель краудіон. Зміна концентрації вакансій при гартуванні і відпалу. Методи визначення концентрації вакансій. (12 тиждень)
 12. 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. (13 тиждень)
 13. 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. (14 тиждень)
 14. Двійникування як механізм пластичної деформації. Розташування атомів в області двійника. Кристалографічна система площин і напрямків при двійникуванні. Експериментальне виявлення двійників в структурі сплавів. Великокутові і малокутові границі зерен. Моделі будови великокутових границь, кут і розорієнтаціїґраток суміжних зерен. Вектор і кут розорієнтування. Границі нахилу і кручення. Види переміщення великокутових границь зерен. Рушійна сила при міграції границь. (15 тиждень)

РЕКОМЕНДОВАНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТА НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНІ ДЖЕРЕЛА

Навчально-методичні розробки:

1. Конспект лекцій з дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» - <https://moodle.zp.edu.ua/course/view.php?id=3566>
2. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт - <https://moodle.zp.edu.ua/course/view.php?id=3566>

3. Навчальні моделі кристалів, макети просторових ґраток, сітка Вульфа.

Літературні джерела:

1. Методичні вказівки та завдання до виконання лабораторних і контрольних робіт із дисципліни «Кристалографія та дефекти кристалічної будови» для студентів спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної та заочної форми навчання / Укл. Л.П.Степанова, В.Я.Грабовський, О.В. Лисиця–Запоріжжя: ЗНТУ, 2019.-82с

2. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія [Електронний ресурс] : підручник для студ. спеціальності 132 Матеріалознавство / Л. О. Бірюкович ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 2.832 Кбайт). – К. : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 234 с.

3. Зиман З. 3. Основи структурної кристалографії: Навчальний 362 посібник для студентів вищих навчальних закладів. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2008. – 212 с.

4. Геометрична кристалографія. Ч. 1: навч. посібник для студентів ОКР «Бакалавр» напряму 6.040103 – геологія / укл.: Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015. – 96 с.

5. Геометрична кристалографія. Ч. 2: навч. посібник для студентів ОКР «Бакалавр» напряму 6.040103 – геологія / укл.: Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015. – 88 с.

6. Пчелінцев В.О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія: Навчальний посібник. – Суми: Вид-во СумДУ, 2007. – 226 с.

7. Конспект лекцій з дисципліни «Кристалографія» для здобувачів освітнього ступеня бакалавра спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної форми навчання / [Упоряд.: С.О. Колінько., Т.І. Бутенко, Ващенко В.А.]; М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол. ун-т. – Черкаси: ЧДТУ, 2020. – 99 с.

8. Оліх О.Я. Дефекти у напівпровідникових та діелектричних кристалах. – Вінниця : ФОП Корзун Д.Ю., 2016. – 152 с.

9. Основи матеріалознавства. Частина 1. Властивості матеріалів та методи їх дослідження. Конспект лекцій для студентів хімічного факультету / Укладачі: Юрченко О.М., Кормош Ж.О., Парасюк О.В. – Луцьк: Вежа-друк. – 44 с

10. Рентгеноструктурний аналіз у матеріалознавстві: навч.-метод. посіб.: [для вищ. навч. закл.] / С. І. Мудрий, Ю. О. Кулик, А.С. Якимович. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2017. – 226 с.

11. Холявко В. В. Фізичні властивості та методи дослідження матеріалів [текст]: навчальний посібник для студентів галузі знань 13 – Механічна

інженерія спеціальності 132 – Матеріалознавство денної та заочної форм навчання / В. В. Холякко, І. А. Владимирський, О. О. Жабинська. – Київ: Центр учбової літератури, 2016. – 156 с.

12. Основи кристалографії: навчальний посібник/ Укл.: І.М. Фодчук, О.О. Ткач. – Чернівці: ЧНУ, 2007 – 108. с.

ОЦІНЮВАННЯ

Оцінювання: за результатами засвоєння дисципліни складається екзамен.

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 тестування на лабораторних заняттях, аудиторна контрольна робота.

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 | T3 | T4 | T5 | T6 | T7 | T8 | T9 | T10 | T11 | T12 | T13 | | |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 8 | 8 | 8 | 8 | 10 | 8 | 8 | | |

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

Позитивними оцінками для всіх форм контролю є оцінки від 60 до 100 балів за 100-бальною шкалою та оцінка «зараховано» за двобальною. Межею незадовільної оцінки за результатами підсумкового контролю є оцінка нижче 60 балів за 100-бальною шкалою або оцінка «не зараховано» за двобальною шкалою. Отримання оцінки 60 балів та вище або оцінки «зараховано» передбачає отримання позитивних оцінок за всіма, визначеними програмою освітнього компонента, обов'язковими видами поточного, проміжного (рубіжного) контролю.

ПОЛІТИКИ КУРСУ

Політика курсу ґрунтується на тісній взаємодії викладача і студента, регулярному спілкуванні з метою допомоги при вивченні курсу. При цьому передбачається обов'язкове відвідування занять і виконання запланованих завдань у встановлені терміни. Виконання завдань пізніше встановленого терміну допускається лише після відпрацювання студентом передбачених навчальним планом робіт. Студент повинен дотримуватися політики академічної доброчесності. Академічна доброчесність визначається Кодексом

академічної доброчесності Національного університету «Запорізька політехніка» https://zp.edu.ua/uploads/dept_nm/Nakaz_N253_vid_29.06.21.pdf .

ТЕХНІЧНІ ВИМОГИ ДЛЯ РОБОТИ НА КУРСІ

Щоб мати доступ до навчально-методичних розробок курсу, необхідно мати особистий доступ до університетської навчальної платформи Moodle.

