



КРИСТАЛОХІМІЯ ТУГОПЛАВКИХ СПЛУК

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Перший (бакалаврський)
Галузь знань	13 Механічна інженерія
Спеціальність	132 Матеріалознавство
Освітня програма	Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів
Статус дисципліни	Нормативна
Форма навчання	заочна/ дистанційна/змішана
Рік підготовки, семестр	2 курс, весняний семестр
Обсяг дисципліни	3,5 кредити/105 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Залік/ДКР
Розклад занять	http://rozklad.kpi.ua/
Мова викладання	Українська/Англійська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: к. т. н., доцент, Бірюкович Ліна Олегівна, linabiruk@ukr.net , 0501979102 Практичні: к. т. н., доцент, Бірюкович Ліна Олегівна, linabiruk@ukr.net , 0501979102
Розміщення курсу	https://classroom.google.com/u/1/c/MTg3MDA4NTc1NzQ0

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Матеріали! Ось, що дозволяє втілювати науково-технічний прогрес у життя! Сучасна техніка потребує матеріалів, які б мали складний комплекс фізичних, хімічних, експлуатаційних та технологічних характеристик. Серед них тугоплавкі та композиційні матеріали, основою яких є тугоплавкі сполуки, мають надважливе значення.

Тугоплавкі сполуки – дуже широкий клас сполук, властивості яких визначаються особливостями електронної будови елементів, що їх утворюють, типом хімічного зв'язку, що виникає між ними, і, як наслідок, будовою кристалічної структури. Тому уміти управляти процесами формування властивостей цікаво і важливо, як в удосконаленні існуючих, так і у створенні нових матеріалів на основі тугоплавких сполук.

Вивчатиметься кристалічна будова тугоплавких сполук, яка визначає природу фізико-механічних властивостей тугоплавких сполук і композиційних матеріалів на їх основі.

105 годин обсягу дисципліни “Кристалохімія тугоплавких сполук” включають 4 години лекційних занять, 4 години практичних занять і 97 годин СРС.

Метою дисципліни є формування у студентів фахових компетентностей спеціальності таких як:

- здатність застосовувати знання і розуміння наукових фактів, концепцій, теорій, принципів і методів, необхідних для підтримки діяльності в сфері матеріалознавства;

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

- здатність застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних, механічних, функціональних та технологічних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем.

Предмет дисципліни “Кристалохімія тугоплавких сполук” – вивчення структури, хімічного зв’язку та фізико-хімічних властивостей тугоплавких сполук, у зв’язку з широким застосуванням їх в композиційних матеріалах та покриттях.

Програмні результати навчання:

- Розуміти будову металевих, неметалевих, композиційних та функціональних матеріалів та обирати оптимальні методи модифікації їх властивостей. Кваліфіковано вибирати матеріали для виробів різного призначення.
- Знаходити потрібну інформацію у літературі, консультиватися і використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань відповідно до спеціалізації.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Дисципліни, знання з яких необхідні для вивчення дисципліни “Кристалохімія тугоплавких сполук”:

- Фізика
- Хімія
- Фізична хімія
- Кристалографія, кристалохімія та мінералогія.

Знання, що студент отримує під час вивчення дисципліни «Кристалохімія тугоплавких сполук» необхідні для поглибленого вивчення таких нормативних дисциплін:

- Фізика конденсованого стану матеріалів
- Матеріалознавство тугоплавких матеріалів
- Механічні властивості матеріалів
- Основи теорії процесів консолідації порошкових та наноструктурованих матеріалів.

3. Зміст навчальної дисципліни

Вступ. Організація очного/дистанційного навчання

Розділ 1. Електронна будова та загальні відомості про тугоплавкі сполуки

Розділ 2. Кристалохімічні особливості тугоплавких сполук

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базові:

1. Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук [Текст]: навч. посіб. / Л. О. Бірюкович. – Київ: Центр навчальної літератури, 2017. – 112 с.
2. Кристалохімія тугоплавких сполук: практикум [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності 132 «Матеріалознавство», освітньої програми «Нанотехнології та комп’ютерний дизайн матеріалів» / КПІ ім. Ігоря Сікорського; уклад. Л. О. Бірюкович. – Електронні текстові дані (1 файл: 0,24 Мбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. – 40 с. – Режим доступу: <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/36843>.
3. Бірюкович Л. О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія [Електронний ресурс]: підручник для студ. спеціальності 132 Матеріалознавство / Л. О. Бірюкович; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 3.35 Кбайт) – Київ: КПІ ім. Ігоря

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

Сікорського, 2018. – 234 с. – Режим доступу: https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/25313/3/Biriukovich_KKM.pdf.

4. Програмне забезпечення для виконання практичних робіт за дистанційної та змішаної форми навчання CrysX-3d-Viewer:
https://www.bragitoff.com/crysx-3d-viewer/?__cf_chl_jschl_tk=406c2defaaca8ff4d7dadbd237797b74b36922d36-1599315383-0-AXdX7UMuhxuhywbIC0xii0TrIZM7TiVTp6RunUpp1qByGIZh0Fb3U3SFSyrlC3gm9EzZUIBc-WMsWwomEI_FNdUqSqKtCeET1zUj4fZgAZ23vUQcuAPbn8IT4TVNHawWHfFA6kw7JelLMv97aYePKCk_p8fqcP32CeU8QXBGYP4z84vUx9K3jVttbGQvcOSEaXwXRafTqWCLM9-fRrikgkGcogIWTP1jGCZ9yYNkpeKBRQHR_wHR29mDfetgdi3Vf8cljBIG02XBpHyvYH6aCMkrh2vNoi4nj7KuYQpc3shmt

Додаткові:

5. Самсонов Г. В. Конфигурационная модель вещества [Текст] / Г. В. Самсонов, И. Ф. Прядко, Л. Ф. Прядко. – Киев : Наукова думка, 1971. – 228 с.
6. Самсонов Г. В. Физическое материаловедение карбидов [Текст] / Г. В. Самсонов, Т. Ш. Упадхая, В. С. Нешпор. – Киев : Наукова думка, 1974. – 440 с.
7. Самсонов Г. В. Нитриды [Текст] / Г. В. Самсонов. – Киев : Наукова думка, 1969. – 377 с.
8. Самсонов Г. В. Бориды [Текст] / Г. В. Самсонов, Т. И. Серебрякова, В. А. Неронов. – Москва : Атомиздат, 1975. – 376 с.
9. Самсонов Г. В. Силициды [Текст] / Г. В. Самсонов, Л. А. Дворина, Б. М. Рудь. – Москва : Металлургия, 1979. – 272 с.
10. Косолапова Т. Я. Неметаллические тугоплавкие соединения [Текст] / Т. Я. Косолапова, Т. В. Андреева, Т. С. Бартническая. – Москва : Металлургия, 1985. – 224 с.
11. Гольдшмидт Х. Дж. Сплавы внедрения [Текст] : в двух томах / Х. Дж. Гольдшмидт. – Москва : Мир, 1971.
12. Самсонов Г. В. Неметаллические нитриды [Текст] / Г. В. Самсонов. – Москва : Металлургия, 1969. – 264 с.

Монографії зазначені у списку додаткових навчальних матеріалів знаходяться у бібліотеці НТУУ КПІ ім. Ігоря Сікорського і надаються для ознайомлення і глибшого розуміння природи властивостей тугоплавких сполук та їх взаємозв'язку із кристалічною структурою.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

5.1. Лекційні заняття

Вступ. Організація очного/дистанційного навчання

СРС. Вступ. Організація очного/дистанційного навчання. Проведення лекційних і практичних занять. Вимоги до протоколу практичних робіт. Рейтингова система оцінювання.

Розділ 1. Електронна будова та загальні відомості про тугоплавкі сполуки

Заняття 1. Тугоплавкі сполуки. Класифікація. Фази впровадження. Розмірний фактор. Області гомогенності, їх позначення на діаграмах стану, кристалохімічні особливості.

Література [1] с. 8-9, 18-25, [11].

Заняття 2. Електронна будова тугоплавких сполук. Моделі конденсованого стану речовини. Конфігураційна модель речовини. Поняття стабільних конфігурацій. Стабільні конфігурації та типи хімічного зв'язку. Зв'язок електронної будови та фізико-хімічних властивостей.

Література. [1] с. 9-18, [5] с. 11-26, [6] с. 407-412.

СРС: Електронна будова та поліморфізм.

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

Розділ 2. Кристалохімічні особливості тугоплавких сполук

СРС. Карбіди перехідних металів. Типи діаграм стану Me-C. Кристалічна та електронна будова. Основні структурні типи. Зв'язок будови та властивостей.

Література. [1] с. 27-42, [6] с. 69-9, [11].

СРС. Нітриди перехідних металів. Типи діаграм стану Me-N. Кристалічна та електронна будова. Основні структурні типи. Зв'язок будови та властивостей.

Література. [1] с. 44-57, [7] с. 6-67, [11].

СРС. Бориди перехідних металів. Класифікація боридів за типом боридної підґратки. Типові діаграми стану Me-B. Основні структурні типи.

Література. [1] с. 58-69, [78] с. 8-30, [11].

СРС. Бориди РЗМ. Особливості структури тетраборидів, гексаборидів та додекаборидів. Типи хімічного зв'язку. Фізико-технічні та хімічні властивості боридів, зв'язок з кристалічною структурою.

Література. [1] с. 70-79, [8] с. 132-165, [11].

СРС. Силіциди перехідних металів. Особливості кристалічної та електронної будови. Основні структурні типи. Фізико-хімічні властивості та їх зв'язок з кристалічною будовою.

Література: [1] с. 80-93, [9] с. 10-42, [11].

СРС. Продовження. Силіциди перехідних металів. Особливості кристалічної та електронної будови. Основні структурні типи. Фізико-хімічні властивості та їх зв'язок з кристалічною будовою.

Література: [1] с. 80-93, [9] с. 10-42, [11].

СРС. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Кристалічна та електронна будова нітридів бору, алюмінію та кремнію; карбідів бору та кремнію. Фізико-хімічні властивості.

Література. [1] с. 95-110, [12] с. 5-12, с. 22-24, с. 50-51, с. 85-87, с. 117-118, с. 146-150.

СРС. Продовження. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Кристалічна та електронна будова нітридів бору, алюмінію та кремнію; карбідів бору та кремнію. Фізико-хімічні властивості.

Література. [1] с. 95-110, [12] с. 5-12, с. 22-24, с. 50-51, с. 85-87, с. 117-118, с. 146-150.

5.2. Практичні заняття

Для проведення практичних занять для очного навчання використовуються наочні моделі кристалічних ґраток базових структурних типів таких як α -Fe, γ -Fe, Zn(Mg), алмаз, графіт, ZnS-сфалерит, ZnS-вюрцит, Cu_2O , CaF_2 , NaCl, CsCl, CaTiO_2 , MgAl_2O_4 , які зустрічаються серед структур тугоплавких сполуки. Для візуалізації зазначених структурних типів під час проведення дистанційних занять використовується програмне забезпечення CrysX-3d-Viewer, яке є у вільному доступі у мережі Інтернет. Для виконання цих практичних робіт потрібні знання основ кристалохімії набуті студентами під час вивчення дисципліни "Кристалографія, кристалохімія та мінералогія" і у скороченому вигляді наведені у теоретичних відомостях до кожної практичної роботи у навчальному посібнику "Кристалохімія тугоплавких сполук : практикум".

СРС. Практична робота №1. Опис елементарної комірки кристалічної структури.

СРС. Практична робота №2. Визначення площин ковзкого відображення та гвинтових осей симетрії кристалічних структур.

СРС. Практична робота №3. Визначення просторової групи симетрії кристалічних структур.

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

Заняття 1. Практична робота №4. Визначення рентгенівської густини та ретикулярної щільності кристалічних структур.

СРС. Практична робота №5. Опис кристалічних структур тугоплавких сполук.

Заняття 2. Залік.

6. Самостійна робота студента/аспіранта

Самостійна робота студента (97 годин.) складається з:

- самостійна підготовки теоретичних тем – 83 год;
- підготовки до практичної роботи, яка полягає у написанні протоколу – 2 год;
- підготовки до ДКР – 6 год;
- підготовки до заліку – 6 год.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Правила відвідування занять.

Відвідування лекційних занять є бажаним, хоча і не обов'язковим. Відвідування лекційних занять дозволить студентам не тільки опановувати знання безпосередньо на лекції, але і задати викладачу питання, що виникають під час викладання матеріалу лекції.

Відвідування практичних занять є обов'язковим.

Правила поведінки на заняттях.

На усіх заняттях, лекційних і практичних, вітається відключення звукових сигналів телефонів.

Під час проведення очно практичного заняття в спеціалізованій аудиторії №209-9 корпусу студенти допомагають викладачу зняти необхідні для проведення заняття наочні моделі з полиць. На практичних заняттях не забороняється користування конспектами лекцій, підручниками, електронними гаджетами для пошуку інформації, що відповідає темі практичного заняття.

Перевірка правильності виконання завдань і підсумок кількості виконаних моделей проводиться викладачем безпосередньо на занятті.

За умови проведення практичного заняття у дистанційному режимі оформлені протокол практичної роботи із виконанням завдання завантажуються студентами до GoogleClassRoom "Кристалохімія тугоплавких сполук" для перевірки.

Перескладання заліку проводиться під час додаткової сесії за положенням НТУУ "КПІ ім. Ігоря Сікорського" відповідно до графіку перескладань оприлюдненому на сайті ІМЗ ім. Є. О. Патона.

Усі учасники освітнього процесу: викладачі і здобувачі в процесі вивчення дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

8.1. Види контролю:

- Поточний контроль: практична робота, ДКР
- Календарний контроль: не проводиться.
- Семестровий контроль: залік

Кожний вид робіт оцінюється за 100-бальною шкалою. Коефіцієнти вагомості наведено у формулі

$$O_{\text{семестр}} = 0,2 \sum O_{\text{ПР}} + 0,8 O_{\text{ДКР}}$$

8.2. Критерії нарахування балів.

Домашня контрольна робота.

Приклад ДКР та максимальні бали оцінювання за виконання кожного пункту завдання:

ЗАВДАННЯ №1

для домашньої контрольної роботи
з дисципліни «Кристалохімія тугоплавких сполук»
для студентів заочної форми навчання

1. Використовуючи дані таблиці 5.1 навчального посібника «Кристалохімія тугоплавких сполук. Практикум» (<https://ela.kpi.ua/handle/123456789/36843>) для тугоплавкої сполуки TiC зобразити елементарну комірку структури та її проєкцію на площину (001) – 10 балів.
2. Визначити тип комірки Браве – 5 балів.
3. Визначити координаційні числа та координаційні многогранники для даної структури (практична робота № 1) – 20 балів.
4. Визначити число структурних та формульних одиниць (практична робота № 1) – 20 балів.
5. Обчислити рентгенівську щільність (практична робота № 4) – 15 балів.
6. Розрахувати та порівняти значення ретикулярної щільності для площин (100), (110), (111) (практична робота № 4) – 20 балів.
7. За отриманими результатами зробити висновок щодо належності даної структури до щільнопакованих – 10 балів.

Максимально ДКР оцінюється у 100 балів із ваговим коефіцієнтом 0,8.

За відсутності зазначених пунктів завдання оцінка зменшується на відповідну кількість балів; за кожну помилку знімається 2 бали.

Практичні роботи.

До практичної роботи студент повинен підготувати протокол, який складається із:
номера;

назви;

мети;

теоретичних відомостей, до яких включають основні визначання та умовні позначення;
порядок виконання.

За наявності протоколу практична робота оцінюється за кількість самостійно виконаних завдань на практичному занятті, максимальна оцінка складає 100 балів.

Штрафні бали призначаються за:

- відсутність протоколу – 10 балів;
- протокол, що не відповідає вимогам – 5 балів;
- несамостійна робота на практичному занятті – 5 балів.

Ваговий коефіцієнт оцінювання результатів виконання практичних робіт складає 0,2.

Залік.

Умовою допуску до заліку є виконання практичної роботи і домашньої контрольної роботи.
Мінімальним позитивним є рейтинг, що складає не менше 60 балів, відповідно:

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

Практична робота – 12 балів;

ДКР – 48 балів.

Студенти, що набрали упродовж семестру не менше 60 балів мають можливість отримати оцінку, згідно таблиці відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою.

Для підвищення рейтингової оцінки студент може написати залікову контрольну роботу, але у цьому випадку попередній рейтинг студента скасовується і він отримує оцінку з урахуванням результатів залікової контрольної роботи, згідно таблиці відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

Кожне завдання залікової контрольної роботи містить два теоретичних запитання і одне практичне завдання. Приклад завдання для залікової контрольної наведено у Додатку А. Перелік питань, що виносяться на залікову контрольну роботу наведений у Додатку Б. Залікова контрольна робота проводиться письмово. На підготовку відповідей на запитання завдання залікової контрольної роботи виділяється 1 академічна година часу.

Сумарна максимальна оцінка складає 100 балів, відповідно:

- Максимальна оцінка за правильну відповідь на кожне теоретичне питання складає 30 балів.
- Максимальна оцінка за правильно розв'язане практичне завдання – 40 балів.

Під час розв'язування задачі студент може користуватися кристалічними ґратками речовин та сполук.

Оцінка за відповідь знижується по кожному з питань – за принципові помилки у відповіді на 20-15 балів, за неповну відповідь на 15-10 балів, за неправильне використання термінів на 5 балів.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

- перелік питань, які виносяться на залікову контрольну роботу наведено у додатку Б;
- студенти можуть отримати 10 балів за сертифікати проходження дистанційних чи онлайн курсів за тематикою дисципліни.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентом, к. т. н., доцентом, Бірюкович Ліною Олегівною

Ухвалено кафедрою ВТМ та ПМ (протокол № 16 від 09.04.21 р.)

Погоджено Методичною комісією ІМЗ ім. Є. О. Патона (протокол № 9/21 від 20 травня 2021 р.)

1. Пояснити, які електронні конфігурації у конфігураційній моделі речовини вважаються валентноутворюючими і чому.
2. Охарактеризувати властивості карбідів і нітридів перехідних металів IV-VI груп та пояснити, що визначає високу твердість цих сполук.
3. Визначити та зобразити на площині проєкції (001) елементи симетрії елементарної ґратки TiC.

Додаток Б

Перелік питань, що виносяться на залікову контрольну

1. Історичний та сучасний погляд на речовини, що відносять до тугоплавких.
2. Етапи розвитку уяви про речовину та матеріали з цієї речовини.
3. Причини виникнення різноманітних моделей конденсованого стану речовини. Наведіть приклади таких моделей.
4. Конфігураційна модель речовини. Основні положення.
5. Які електронні конфігурації у конфігураційній моделі речовини вважаються валентноутворюючими? Поясніть чому.
6. "Фаза впровадження". Які сполуки відносять до "фаз впровадження"? Правило Хегга.
7. Поясніть різницю між поняттями "фаза впровадження" та "твердий розчин впровадження". Які сполуки утворюють перехідні метали з легкими неметалами?
8. Тугоплавкі сполуки. Визначення та класифікація.
9. Які речовини утворюють тугоплавкі сполуки та які види зв'язку виникають в них?
10. Чому і яким чином відбувається перебудова первинної кристалічної ґратки метала під час утворення тугоплавких сполук?
11. Які сполуки утворюють перехідні метали IV-VI груп з вуглецем? Який структурний тип кристалічних ґраток монокарбідів перехідних металів IV- VI?
12. Які координаційні поліедри утворюються в монокарбідах перехідних металів IV-VI груп? Які з них є структурнозмінними, а які структурно сталими?
13. У порожнинах якої форми розташовуються атоми неметалу в фазах впровадження? Які вимоги до розміру цих порожнин?
14. Який структурний тип кристалічної ґратки утворюється, якщо атоми неметалу заповнюють усі октаедричні пустоти гранецентрованої кубічної ґратки?
15. Що таке області гомогенності? За рахунок чого зберігається кристалічна структура фази впровадження в області гомогенності?
16. Класифікація кристалічних структур карбідів перехідних металів IV-VI груп за розташуванням атомів вуглецю та металу.
17. Які сполуки утворюють перехідні метали IV-VI груп з азотом? Який структурний тип кристалічних ґраток мононітридів та субнітридів перехідних металів IV-VI?
18. У порожнинах якої форми розташовуються атоми азоту в нітридах перехідних металів IV-VI груп? Які вимоги до розміру цих порожнин.
19. Що спільного і чим відрізняються карбіди та нітриди перехідних металів IV-VI груп?
20. Властивості карбідів і нітридів перехідних металів IV-VI груп. Що визначає високу твердість цих сполук?
21. Властивості карбідів і нітридів перехідних металів IV-VI груп. Що визначає високу температуру плавлення цих сполук?
22. Властивості карбідів і нітридів перехідних металів IV-VI груп. Що обумовлює специфічні електричні властивості цих сполук?
23. Особливості електронної будови боридів.
24. Які структурні елементи утворюють атоми бору в сполуках? Структурний тип AlB_2 .
25. Бориди з каркасом з атомів бору. Структурний тип CaB_6 .
26. Бориди з каркасом з атомів бору. Структурний тип UB_4 .
27. Бориди з каркасом з атомів бору. Структурний тип UB_{12} .
28. Властивості боридів перехідних металів. Що впливає на різницю у властивостях боридів і карбідів, нітридів?
29. Особливості будови силіцидів перехідних металів.
30. Класифікація силіцидів. Іонно-ковалентні силіциди.

Бірюкович Л. О. Кристалохімія тугоплавких сполук

- 31. Класифікація силіцидів. Металоподібні силіциди.*
- 32. Класифікація силіцидів. Ковалентні силіциди.*
- 33. Структурні елементи атомів кремнію в сполуках.*
- 34. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Нітрид бору.*
- 35. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Нітрид алюмінію.*
- 36. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Карбід бору.*
- 37. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Нітрид бору.*
- 38. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Нітрид кремнію.*
- 39. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Карбід кремнію.*
- 40. Неметалеві тугоплавкі сполуки. Борид кремнію.*