

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання індивідуального завдання (курсової роботи)

з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови»

для студентів денної та заочної форм навчання

за спеціальністю G8 «Матеріалознавство»

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 1 від 19.02.2026 р.

Харків
НТУ «ХП»
2026

Методичні вказівки до виконання індивідуального завдання (курсової роботи) з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» для студентів денної та заочної форм навчання за спеціальністю G8 «Матеріалознавство» / Колектив авторів кафедри «Матеріалознавство» за загальною редакцією В. В. Білозерова. – Харків : НТУ «ХПІ», 2026. – 33 с.

Укладачі: В. В. Білозеров
В. В. Субботіна
О. В. Субботін
Г. А. Федоренко

Рецензент: В. В. Дмитрик

Кафедра «Матеріалознавство»

ВСТУП

Навчальна дисципліна «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» належить до циклу навчальних дисциплін професійної підготовки бакалаврів освітньої програми «Прикладне матеріалознавство та новітні технології» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю G8 «Матеріалознавство».

В системі підготовки фахівців у вищих навчальних закладах актуальним є індивідуально-орієнтований підхід в організації навчання студентів, що визначено нормативно-правовими актами Міністерства освіти і науки. За цих умов індивідуальне завдання (курсова робота), як одна із форм індивідуального завдання, є складовою програми підготовки з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови». Метою виконання індивідуального завдання (курсової роботи) є підготовка студентами аналітичних та узагальнюючих матеріалів. При підготовці індивідуального завдання (курсової роботи) студенти повинні отримати навички опрацювання літературних джерел, складання плану індивідуального завдання (курсової роботи) та розкриття теми з використанням нормативного та практичного матеріалу, особистого досвіду тощо. Дана форма письмової роботи базується на реферуванні окремих питань за обраною тематикою з літературних джерел, а також можливому виконанні деяких розрахунків, якщо це необхідно для розв'язання певних завдань. Вона призначена для поточного або підсумкового закріплення навчального матеріалу та контролювання знань і навичок, набутих студентами в процесі навчання. Виклад матеріалу в розрахунковому завданні повинно мати чітку логічну послідовність згідно з обраною темою, власне аналізу та узагальнення інформації, отриманої з досліджених літературних джерел, творчий підхід до теми.

Індивідуальне завдання (курсова робота) широко використовується в навчальному процесі як спосіб оцінювання не тільки знань студента, а ще і його вміння опрацьовувати та аналізувати джерела інформації.

Методичні вказівки до виконання індивідуального завдання (курсової роботи) з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови»

призначені для ознайомлення студентів з основними вимогами до робіт такого типу, правилами оформлення та основними критеріями оцінювання.

Виконання студентом індивідуального завдання (курсової роботи) стимулює творчі здібності та дозволяє повністю розкрити його потенціал до самостійної роботи. Під час написання індивідуального завдання (курсової роботи) відбувається узагальнення та структурування знань за його тематикою, тому вибір тематики індивідуального завдання (курсової роботи) слід проводити з урахуванням подальшої роботи студента в даному напрямку.

1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ

Згідно з освітньою програмою «Прикладне матеріалознавство та новітні технології» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю G8 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (курсова робота) з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» є обов'язковою формою самостійної позааудиторної роботи студентів денної та заочної форм навчання.

Метою індивідуального завдання (курсової роботи) є поглиблення, закріплення та розширення теоретичних і практичних знань, щодо будови та властивостей матеріалів, що здобуті студентами при вивченні навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови», а також поглиблене розуміння основних понять і законів кристалографії, таких як симетрія, кристалічні ґратки, просторова група тощо..

Вимоги до студентів при виконанні індивідуального завдання (курсової роботи) такі:

- знання про кристалічні ґратки, їх типи та симетрію для вивчення особливостей будови матеріалів;
- ідентифікація та аналіз точкових, лінійних, площинних і об'ємних дефектів у кристалічній структурі;
- визначення впливу дефектів на механічні, електричні, теплові та інші властивості матеріалів.

Індивідуальне завдання (курсова робота) є заключним етапом засвоєння навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови».

Методики аналізу типів симетрії, їх впливу на фізичні властивості матеріалів, аналіз кристалічної будови на атомному рівні, дослідження дефектів, базуються на теоретичних відомостях та навичках, набутих студентами під час вивчення навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови». Цим забезпечується зв'язок індивідуального завдання (курсової роботи) з іншими навчальними дисциплінами за навчальним планом кафедри.

Виконання індивідуального завдання (курсової роботи), в свою чергу, формує у студентів навички, необхідні для подальшого вирішення широкого кола інженерних питань.

Мета методичних вказівок – навчити самостійно користуватись технічною, у тому числі довідковою, літературою розвинути навички до самостійної роботи та наукового дослідження. Методичні вказівки призначені для студентів спеціальності G8 «Матеріалознавство» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти

денної та заочної форм навчання закладів вищої освіти.

Кожен студент обирає варіант індивідуального завдання для виконання курсової роботи. Необхідні довідникові дані для виконання завдання наведено у таблиці «Кристалічні структури елементів».

2. ТИПОВЕ ІНДИВІДУАЛЬНЕ ЗАВДАННЯ (КУРСОВА РОБОТА)

Тема: «Кристалічна структура металів та сплавів системи _____»

1. Характеристика кристалічної структури _____:

- а) структурний тип;
- б) кристалічна ґратка (схема, a , b , c ; α , β , γ);
- в) базис;
- г) координаційне число;
- д) співвідношення між атомним радіусом і періодом ґратки;
- е) щільність упакування.

2. Симетрія кристалічної структури:

- а) визначити повний набір елементів симетрії;
- б) накреслити стереографічну проекцію;
- в) вказати клас симетрії і просторову групу.

3. Міжвузля кристалічної структури:

- а) октаедричні порожнечі (координати, число, розмір);
- б) тетраедричні порожнечі (координати, число, розмір).

4. Фазові рівноваги системи _____:

- а) привести діаграму стану системи;
- б) додати характеристику фаз;
- в) розрахувати залежність періоду ґратки твердого розчину за правилом

Вегарда (графік);

г) привести графік залежності періоду ґратки від складу за літературними даними.

5. Формули для кристалографічних розрахунків:

- а) період ідентичності;
- б) кут між напрямками;
- в) кут між площинами ;
- г) міжплощинна відстань.

6. Стереографічна проекція.

Побудувати стереографічну проекцію з віссю $[001]$ для напрямків $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

3. ВАРІАНТИ ПИТАНЬ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ) ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

1. Кристалічна ґратка та як вона визначає властивості матеріалу.
2. Описати характеристику та приклади металів, що мають об'ємно-центровану кубічну (ОЦК), площиноцентровану кубічну (ПЦК) та гексагональну компактну (ГК) структуру.
3. Вплив температури, швидкості охолодження, тиску та складу сплаву на формування кристалічної структури.
4. Класифікація дефектів кристалічних ґраток за розміром.
5. Характеристика точкових дефектів (вакансії, міжвузлові атоми, дефекти Френкеля і Шотки. Домішкові атоми заміщення і втілення).
6. Утворення комплексів вакансій і міжвузлових атомів із домішковими атомами.
7. Геометрична і атомна модель крайової дислокації.
8. Ковзання крайової дислокації.
9. Переповзання крайової дислокації.
10. Геометрична і атомна модель гвинтової дислокації.
11. Переміщення гвинтової дислокації.
12. Поперечне ковзання гвинтової дислокації.
13. Криволінійні дислокації змішаної орієнтації.
14. Кількісні характеристики дислокацій: контур і вектор Бюргерса. Запис вектора Бюргерса. Потужність вектора.
15. Густина дислокацій. Залежність міцності від густини дислокацій.
16. Методи виявлення дислокацій.
17. Утворення дислокацій при пластичній деформації. Джерело Франка-Ріда.
18. Міграція міжвузлових та домішкових атомів.
19. Взаємодія дислокацій із вакансіями і міжвузловими атомами.
20. Взаємодія дислокацій із домішковими атомами. Атмосфери Котрелла.
21. Міграція вакансій.
22. Концентрація вакансій та енергія їх утворення.
23. Поведінка вакансій при гартуванні та відпалі.
24. Перетинання крайових дислокацій при їх переміщенні.
25. Перетинання гвинтових дислокацій.
26. Малокутові границі субзерен, енергія малокутової границі.

27. Великокутові границі, їх структура.
28. Дефекти пакування, енергія дефекта пакування.
29. Двійникові кристалічні структури.
30. Поліморфні перетворення елементів та приклади для металів. Кристалографічна орієнтація при поліморфних перетвореннях.
31. Складні ґратки структур (ГЦП, типу алмазу, графіту).
32. Елементи симетрії нескінчених кристалічних структур.
33. Кристалографічні проекції. Сферична проекція, сферичні координати. Стереографічна проекція, її особливості.
34. Пояснити, як тип кристалічної ґратки і дефекти в ній впливають на такі властивості, як міцність, пластичність та твердість.
35. Пояснити, як методи рентгеноструктурного аналізу, електронної мікроскопії та інші методи використовуються для вивчення кристалічної структури.

4. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ)

ВСТУП

Молибден – елемент шостої групи п'ятого періоду періодичної системи хімічних елементів, атомний номер 42. Позначається символом Mo.

Молибден – світло-сірий метал з кубічною об'ємноцентрованою ґраткою, парамагнетик, шкала Мооса визначає його твердість 4,5 балами. Володіє вкрай низьким коефіцієнтом теплового розширення. Молибден є тугоплавким металом з температурою плавлення $2\ 620\ ^\circ\text{C}$ і температурою кипіння $4\ 639\ ^\circ\text{C}$. Щільність – $10,22\ \text{г/см}^3$.

Молибден використовується для легування сталей як компонент жароміцних і корозійностійких сплавів. Молибден - один з небагатьох легуючих елементів, здатних одночасно підвищити міцність, в'язкі властивості сталі і корозійну стійкість. Молибденовий дріт (стрічка) служить для виготовлення високотемпературних печей, введів електричного струму в лампах розжарювання. Сполуки молибдену - сульфід, оксиди, молибдати – є каталізаторами хімічних реакцій, пігментами барвників, компонентами глазури. Гексафторид молибдену застосовується при нанесенні металевого Mo на різні матеріали, MoS_2 використовується як тверде високотемпературне мастило.

Ніобій – елемент п'ятої групи п'ятого періоду періодичної системи хімічних елементів, атомний номер – 41. Позначається символом Nb.

Ніобій – блискучий метал сріблясто-сірого кольору з кубічною об'ємноцентрованою кристалічною ґраткою. Для ніобію відомі ізотопи з масовими числами від 81 до 113.

Температура плавлення – $2\ 741\ \text{K}$, температура кипіння – $5\ 015\ \text{K}$, щільність – $8,57\ \text{г/см}^3$

Застосування і виробництво ніобію швидко зростають, що обумовлено поєднанням таких його властивостей, як тугоплавкість, малий перетин захоплення теплових нейтронів, здатність утворювати жароміцні, надпровідні та ін. сплави, корозійна стійкість, гетерні властивості, низька робота виходу електронів, хороша оброблюваність тиском на холоді та хороше зварювання. Основні області застосування ніобію: ракетобудування, авіаційна і космічна техніка, радіотехніка, електроніка, хімічна апаратобудування, атомна енергетика.

2. РОЗРАХУНКОВО-ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

1. Характеристика кристалічної структури Мо–Nb.

а. Структурний тип Мо и Nb

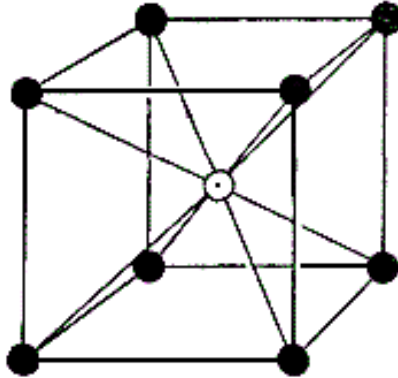


Рисунок 2.1 – Об'ємноцентрована кубічна гратка

б. Кристалічна гратка (схема, a , b , c ; α , β , γ)

Період кристалічної гратки – це довжина ребра елементарної комірки кристалічної гратки. Тобто це найменша відстань, при зсуві на яке гратка точно відтворює свій початковий вигляд, тобто в кожному її вузлі виявляються такі ж атоми, що і до зсуву.

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Для Мо: $a = b = c = 3,147 \text{ \AA} (3,147 \cdot 10^{-10} \text{ м})$

Для Nb: $a = b = c = 3,301 \text{ \AA} (3,301 \cdot 10^{-10} \text{ м})$

в. Базис

Базис – це кількість атомів, яка припадає на елементарну комірку.

$$N = 2$$

г. Координаційне число

Координаційне число – це число найближчих рівновіддалених атомів від даного.

$$K = 8$$

д. Співвідношення між атомним радіусом і періодом ґратки

Період кристалічної ґратки – це довжина ребра елементарної комірки кристалічної ґратки. Тобто це найменша відстань, при зсуві на яке ґратка точно відтворює свій початковий вигляд

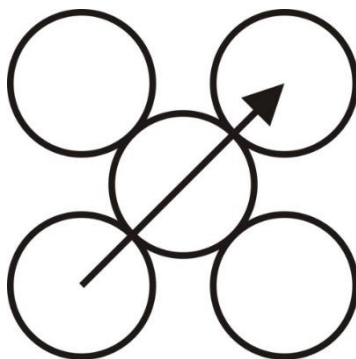


Рисунок 2.2 – Напрямок $\langle 111 \rangle$ з упакуванням атомів

е. Щільність упакування (коефіцієнт компактності)

Показуємо, яка частина простору зайнята атомами:

$$4R = a\sqrt{3} \quad V_{\text{гр}} = a^3 \quad \theta = 0,68$$

Симетрія кристалічної структури

Симетрія кристала – це його здатність поєднуватися з самим собою при деяких просторових перетвореннях. Якщо ґратка збігається сама з собою при повороті деякої осі на кут $2\pi/n$, то ця вісь називається віссю симетрії n -го порядку (найбільш поширені осі симетрії 1-го, 2-го, 4-го і 6-го порядку).

Елемент симетрії – геометричний образ просторових перетворень, що

забезпечують збіг кристала з самим собою.

Площина симетрії (позначається σ) - площина, яка ділить фігуру або систему точок на дві або більше дзеркальні частини. У кубі 9 площин симетрії: 3 осі 4-го порядку, 4 осі 3-го порядку і 6 осей симетрії 2-го порядку.

Центр симетрії - точка всередині кристала, в якій будь-яка пряма, що проходить від її центру, зустрічає такі ж точки на обох кінцях на однаковій відстані.

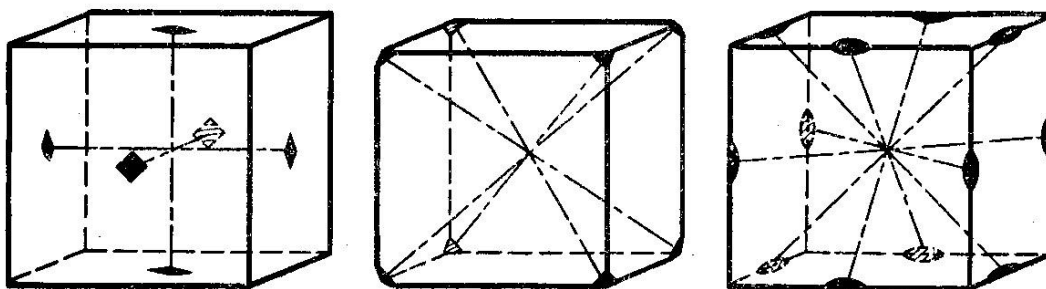


Рисунок 2.3 – Осі симетрії куба

Сингонія – це об'єднання кристалів з однаковою симетрією елементарних осередків, їх структур і системою координат.

За симетрії і числа одиничних напрямків кристали діляться на три категорії: вищу (кубічна сингонія), середню (гексагональна, тетрагональна і тригональна сингонії) і нижчу (ромбічна, моноклінна і триклінна сингонії).

У кубічній сингонії присутні більше однієї осі симетрії вище другого порядку, тобто $L3$ або $L4$. Кристали кубічної сингонії обов'язково повинні мати чотири осі третього порядку $4L3$.

Мо і Nb відносяться до вищої категорії кристалів. Крім осей 2-го порядку в цих кристалах обов'язково є чотири осі симетрії 3-го порядку, і можуть бути також три простих або інверсійних осі симетрії 4-го порядку. Такі кристали є ізотропними.

Міжвузля кристалічної структури

Міжвузля в ідеальному кристалі - це вільний простір між зайнятими атомами вузлами кристалічної ґратки. Міжвузля характеризуються розміром, за який приймають радіус кульки, який вписується в цю пору (в ОЦК-ґратці міжвузля займає 32 %).

ОЦК-ґратка має два види пустот, що утворюють тверді розчини проник-

нення: тетраедричних і октаедричних.

Октаедричні порожнечі знаходяться на середині всіх граней і на середині всіх ребер. Тетраедричні порожнечі знаходяться на гранях комірки, по чотири на кожній грані. Розмір октаедричних пустот в ОЦК-комірці менше, ніж тетраедричних.

Усього в ОЦК-гратці 6 октаедричних та 12 тетраедричних порожнеч.

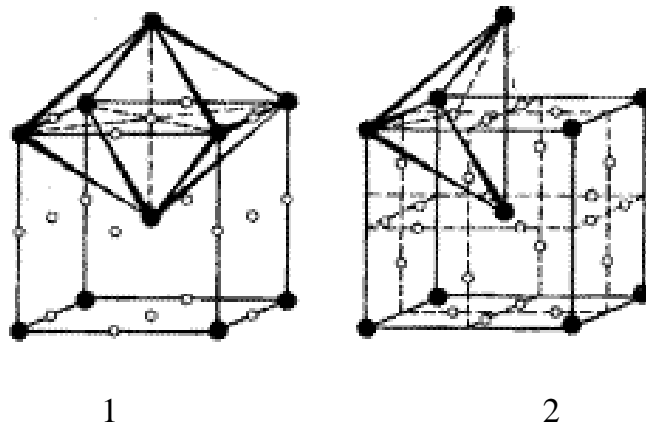


Рисунок 2.4 – Розташування порожнеч у кубічній гратці:

1 – одна з шести можливих октаедричних порожнеч в ОЦК-гратці ($r = 0,154R$);

2 – одна з дванадцяти можливих тетраедричних порожнеч в ОЦК-гратці
($r = 0,291R$)

Фазові рівноваги системи Mo-Nb

Система характеризується безпервною розчинністю компонентів в рідкому і твердому станах. Ліквідус і солідус монотонно підвищуються від ніобію до молібдену. Твердий розчин на основі ніобію в залежності від вмісту в ньому молібдену має наступні параметри ґратки:

C_{Mo} , ат. д	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
α , нм	0,3306	0,329	0,3268	0,3245	0,3232	0,3216	0,3203	0,3190	0,3173	0,3160	0,3146

Закон Вегарда - апроксимоване емпіричне правило, яке свідчить, що існує лінійна залежність при постійній температурі між властивостями кристалічної ґратки сплаву і концентрацією окремих його елементів

Таким чином, параметри кристалічної ґратки (α) твердого розчину (сплаву)

матеріалів з однаковою структурою ґратки, можуть бути знайдені шляхом лінійної інтерполяції між параметрами ґратки вихідних з'єднань.

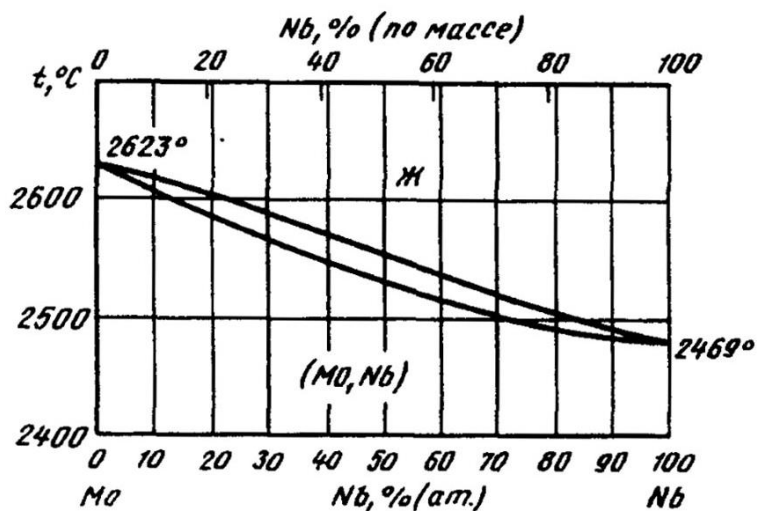


Рисунок 2.4 – Діаграма стану системи Мо–Nb

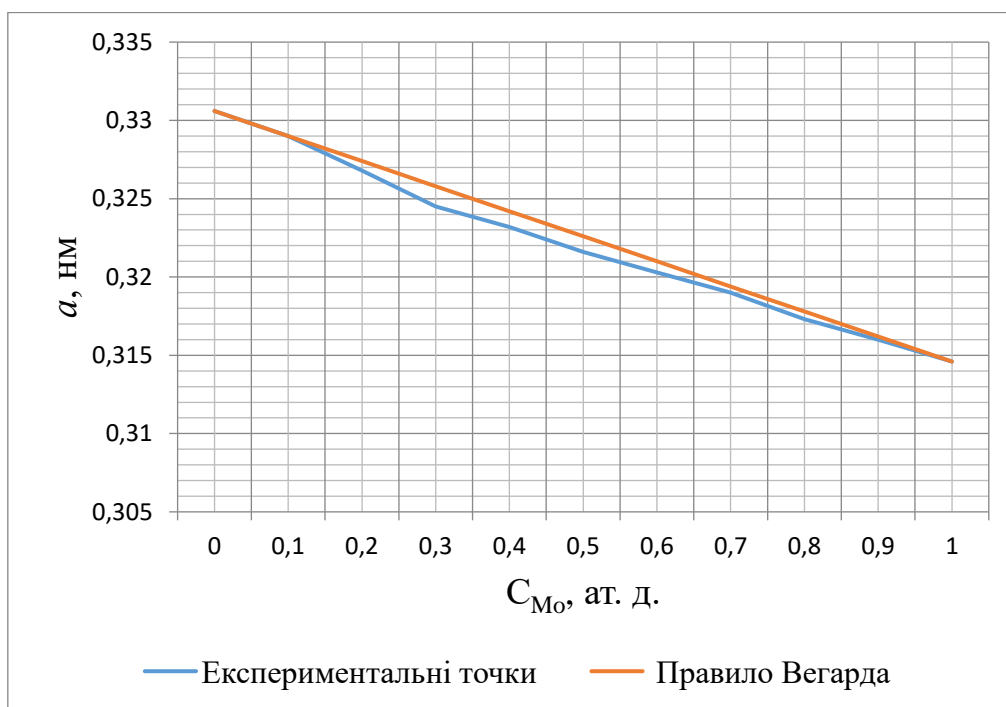


Рисунок 2.5 – Графік залежності періоду ґратки твердого розчину від складу

Формули для кристалографічних розрахунків

а) Період ідентичності - це найкоротший відстань між сусідніми атомами уздовж заданого напрямку.

$$I_{uvw}^2 = (\bar{R} * \bar{R})$$

$$\bar{R}_{uvw} = u\bar{a} + v\bar{b} + w\bar{c}$$

$$I_{uvw}^2 = u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2 + 2uvab \cos \gamma + 2uwbc \cos \beta + 2vwac \cos \alpha$$

Для кубічної ґратки:

$$I_{uvw}^2 = u^2a^2 + v^2a^2 + w^2a^2$$

$$I_{uvw} = a\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

б) Кут між двома напрямками $[U_1V_1W_1] [U_2V_2W_2]$.

$$\bar{R}_1 = u_1\bar{a} + v_1\bar{b} + w_1\bar{c}$$

$$\bar{R}_2 = u_2\bar{a} + v_2\bar{b} + w_2\bar{c}$$

$$(\bar{a} * \bar{b}) = |\bar{a}| * |\bar{b}| * \cos \varphi$$

$$(\bar{R}_1 * \bar{R}_2) = |\bar{R}_1| * |\bar{R}_2| * \cos \varphi$$

$$\cos \varphi = \frac{(\bar{R}_1 * \bar{R}_2)}{|\bar{R}_1| * |\bar{R}_2|}$$

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 a^2 + u_1 v_2 ab \cos \gamma + u_1 w_1 ac \cos \beta + v_1 u_2 ab \cos \gamma + v_1 v_2 b^2}{\sqrt{u_1^2 \bar{a} + v_1^2 \bar{b} + w_1^2 \bar{c}} * \sqrt{u_2^2 \bar{a} + v_2^2 \bar{b} + w_2^2 \bar{c}}} + \frac{v_1 w_2 bc \cos \alpha + w_1 u_2 ac \cos \beta + w_1 v_2 ab \cos \alpha + w_1 w_2 c^2}{\sqrt{u_1^2 \bar{a} + v_1^2 \bar{b} + w_1^2 \bar{c}} * \sqrt{u_2^2 \bar{a} + v_2^2 \bar{b} + w_2^2 \bar{c}}}$$

Для кубічної ґратки:

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1 + v_1 + w_1} * \sqrt{u_2 + v_2 + w_2}}$$

в) Кут між площинками

$$(h_1 k_1 l_1) (h_2 k_2 l_2)$$

$$\bar{r}_1^* = h_1 \bar{a} + k_1 \bar{b} + l_1 \bar{c}$$

$$\bar{r}_2^* = h_2 \bar{a} + k_2 \bar{b} + l_2 \bar{c}$$

$$\cos \varphi = \frac{(\bar{r}_1^* * \bar{r}_2^*)}{|\bar{r}_1^*| * |\bar{r}_2^*|}$$

$$|\bar{r}_1^*| = \sqrt{h_1^2 \bar{a}^2 + k_1^2 \bar{b}^2 + l_1^2 \bar{c}^2} =$$

$$= \sqrt{h_1^2 \bar{a}^2 + k_1^2 \bar{b}^2 + l_1^2 \bar{c}^2 + 2h_1 k_1 \bar{a} \bar{b} \cos \gamma + 2h_1 l_1 \bar{a} \bar{c} \cos \beta + 2k_1 l_1 \bar{b} \bar{c} \cos \alpha}$$

$$|\bar{r}_2^*| = \sqrt{h_2^2 \bar{a}^2 + k_2^2 \bar{b}^2 + l_2^2 \bar{c}^2} =$$

$$= \sqrt{h_2^2 \bar{a}^2 + k_2^2 \bar{b}^2 + l_2^2 \bar{c}^2 + 2h_2 k_2 \bar{a} \bar{b} \cos \gamma + 2h_2 l_2 \bar{a} \bar{c} \cos \beta + 2k_2 l_2 \bar{b} \bar{c} \cos \alpha}$$

$$\begin{aligned} (\bar{r}_2^* * \bar{r}_1^*) &= h_1 h_2 \bar{a}^2 + h_1 k_2 \bar{a} \bar{b} \cos \gamma + h_1 l_2 \bar{a} \bar{c} \cos \beta + k_1 h_2 \bar{a} \bar{c} \cos \gamma \\ &+ k_1 k_2 \bar{b}^2 + k_1 l_1 \bar{b} \bar{c} \cos \beta + k_1 l_2 \bar{b} \bar{c} \cos \alpha + h_2 l_1 \bar{a} \bar{c} \cos \beta + k_2 l_1 \bar{b} \bar{c} \cos \alpha \\ &+ l_1 l_2 \bar{c}^2 \end{aligned}$$

Для кубічної ґратки:

$$V = a^3; |\bar{a}^*| = \frac{a^2}{V} = \frac{1}{a} = a^{-1} = |\bar{b}^*| = |\bar{c}^*|$$

$$|\bar{r}_1^*| = \sqrt{h_1^2 a^{-2} + k_1^2 a^{-2} + l_1^2 a^{-2}} = \frac{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}}{a}$$

$$|\bar{r}_2^*| = \sqrt{h_2^2 a^{-2} + k_2^2 a^{-2} + l_2^2 a^{-2}} = \frac{\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}{a}$$

$$\begin{aligned} (\bar{r}_2^* * \bar{r}_1^*) &= h_1 h_2 \bar{a}^{*2} + k_1 k_2 \bar{a}^{*2} + l_1 l_2 \bar{a}^{*2} = h_1 h_2 a^{-2} + k_1 k_2 a^{-2} + l_1 l_2 a^{-2} \\ &= \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2} \end{aligned}$$

$$\cos \psi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}}{\frac{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}}{a} * \frac{\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}{a}} = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} * \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Г) Відстань між площинками:

$$|\bar{r}_{hkl}^*| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$\frac{1}{d^2} = (\bar{r}^* * \bar{r}^*) = (h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos \gamma + 2hla^* c^* \cos \beta + 2klc^* b^* \cos \alpha)$$

Для кубічної ґратки:

$$\cos \gamma^* = 0 \text{ т. к. } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \text{ и } a = b = c$$

$$\frac{1}{d^2} = (\bar{r}^* * \bar{r}^*) = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)}{a^2}$$

Стереографічні проєкції

Для побудови стереографічних проєкцій необхідно обчислити кути, які

складають ці напрямки один з одним. Кути між зазначеними напрямками визначаємо за формулою:

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} * \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}$$

Індекси реперних точок	001				010				100			
Індекси напрямку	110	101	011	111	110	101	011	111	110	101	011	111
φ'	90	45	45	-55	45	90	45	-55	45	45	90	-55

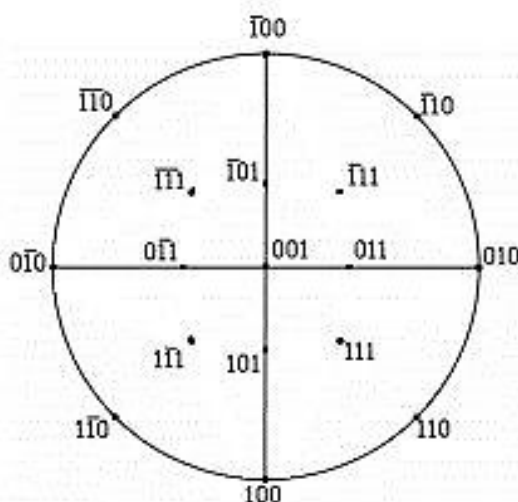


Рисунок 4.7 - Стереографічна проекція сукупностей площин {100} {110} {111}

ВИСНОВОК

У цій роботі представлена інформація про основні характеристики молібдену та ніобію, їх структурний тип, кристалічна гратка, їх координаційне число, щільність упакування. Також наведені формули для кубічної гратки, графік фазового рівноваги системи та стереографічні проекції.

СПИСОК ДЖЕРЕЛ ІНФОРМАЦІЇ

1. Менчук В. В. Кристалохімія [Електронний ресурс] : метод. посіб. для практичних занять з курсу для студентів ф-ту хімії та фармації спеціальності 102 Хімія / В. В. Менчук, Л. А. Раскола. – Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2022. – 49 с. – Електрон. версія друк вид. – Режим доступу : <http://dspace.onu.edu.ua:8080/bitstream/123456789/33697/1/8F.pdf>
2. <https://ru.wikipedia.org/wiki/Молибден>
3. <https://ru.wikipedia.org/wiki/Ниобий>
4. <https://studopedia.org/2-24010.html>
5. <https://markmet.ru/diagrammy-splavov/diagramma-sostoyaniya-sistemy-molibden-niobii-mo-nb>
6. https://ru.qaz.wiki/wiki/Vegard%27s_law

**5. ВАРІАНТИ
ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (КУРСОВИХ РОБІТ)**

Варіант	Система	Варіант	Система
1	Nb-V	11	Ni-Pd
2	Mo-V	12	Cr-V
3	Cu-Pd	13	Cu-Rh
4	Nb-Ta	14	Cr-W
5	Mo-W	15	Cr-Mo
6	Ni-Au	16	Mo-Nb
7	Cu-Au	17	Ni-Pt
8	Ag-Au	18	Fe-V
9	Nb-W	19	Cu-Ni
10	Cu-Pt	20	Mo-W

6. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ)

Відповідно до навчального плану спеціальності G8 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (курсова робота) з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» виконується самостійно.

У процесі виконання індивідуального завдання (курсової роботи) студенти закріплюють здобуті теоретичні знання з матеріалознавства, опановують навички роботи з науково-технічною та довідковою літературою.

Індивідуальне завдання (курсова робота) вимагає від студентів використання теоретичних положень навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови» для практичного аналізу фізичних і механічних властивостей матеріалів на основі їх кристалічної структури. Студенти повинні застосувати знання про типи кристалічних ґраток, дефекти кристалічної ґратки та їх вплив на властивості матеріалів для дослідження і вибору оптимальних матеріалів для конкретних інженерних завдань.

Структура індивідуального завдання (курсової роботи) спрямована на творчий пошук та індивідуальний підхід сприяє розширенню ерудиції майбутнього інженера.

Кожен студент виконує свій варіант індивідуального завдання (курсової роботи), який відрізняється від інших. Робота виконується під керівництвом викладача, який у встановленому порядку видає студенту індивідуальне завдання (курсова робота) для виконання, графік його виконання, надає студенту методичну допомогу, необхідну студенту для розв'язання окремих питань, рекомендує необхідну літературу, проводить систематичні консультації за розкладом і контролює хід виконання роботи.

Індивідуальне завдання (курсова робота) оформлюється відповідно до вимог, викладених нижче. Його захист відбувається в установленій термін.

Дослівне копіювання матеріалів інших робіт, підручників, конспектів, методичних вказівок, інших джерел не допускається. Однак допускається використання таких матеріалів за умови обов'язкового посилання на них відповідно до встановлених правил. Загальні положення, висновки викладаються в тексті індивідуального завдання (курсової роботи) самостійно.

Побудування індивідуального завдання (курсової роботи) має бути максимально наближеним до класичної наукової роботи. Вимоги до структури і оформлення якої регламентуються СТЗВО-ХПІ-3.01-2025. Система стандартів з організації навчального процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу.

Загальні вимоги до виконання.

У встановлений термін, до захисту індивідуального завдання (курсової роботи) студент зобов'язаний представити викладачу для перевірки його текстову частину у переплетеному вигляді, яка повинна послідовно містити такі структурні елементи:

- титульний аркуш (див. Додаток 1);
- основну частину;
- список джерел інформації.

Аркуш з переліком питань завдання розташовується після титульного аркушу роботи та не входить в загальну кількість аркушів.

Список джерел інформації являє собою список літератури та електронних ресурсів, звідки був запозичений фактичний матеріал, необхідний для виконання індивідуального завдання (курсової роботи). Цей список складають у порядку появи посилань у тексті роботи. Посилання на літературу в тексті роботи розміщують у квадратних дужках після відповідної цитати, наприклад [7]. В даному випадку «7» – це номер у списку літератури тієї публікації, на яку посилається автор. У списку джерел інформації, посилання на кожне джерело записують з абзацу і нумерують арабськими числами. Оформлення списку джерел інформації виконується згідно з СТЗВО-ХПІ-3.01-2025.

Текстову частину індивідуального завдання (курсової роботи) оформляють відповідно до вимог СТЗВО-ХПІ-3.01-2025, державною мовою, за допомогою засобів комп'ютерної техніки. Текст роботи друкують з одного боку на аркушах білого паперу формату А4 (210×297 мм), розташування сторінок – книжне, залишаючи береги таких розмірів: лівий – 3 см, правий – 1,5 см, верхній і нижній – 2 см. При наборі тексту висота букв повинна бути не меншою 2,5 мм. Рекомендується використовувати шрифт Times New Roman (кегель 14) з міжрядковим інтервалом 1,5 і вирівнювання за шириною сторінки. Перший рядок кожного абзацу необхідно починати з відступом на 1 см. Відстань між абзацами така сама, як і між рядками у абзаці – 1,5 інтервали. Шрифт друку повинен бути чітким, чорного кольору, а щільність тексту роботи однаковою. Заголовок першого розділу завдання необхідно друкувати великими літерами жирним шрифтом з вирівнюванням по центру «ОСНОВНА ЧАСТИНА» друкується. Кожне нове питання індивідуального завдання (курсової роботи) необхідно починати з нового аркушу. Заголовок – «СПИСОК ДЖЕРЕЛ ІНФОРМАЦІЇ» не нумерується. Нумерацію подають арабськими цифрами без знаку §, № і т. п., з крапкою після цифри. Таблиці і рисунки слід розміщувати в тексті безпосередньо після їх першого згадування. Всі сторінки роботи, включаючи список використаних джерел,

підлягають нумерації на загальних засадах. Першою сторінкою роботи є титульний аркуш, який включають до загальної нумерації сторінок роботи. На титульному аркуші (сторінка 1) та на аркуші із завданням до індивідуального завдання (курсової роботи) (не входить в загальну кількість сторінок) номер сторінок не ставлять. Нумерація починається із сторінки основної частини де розкривається перше питання, та здійснюється у правому верхньому куті сторінки без крапки. Рисунки, таблиці та формули нумерують послідовно арабськими цифрами. Порядкові номери позначають арабськими цифрами у круглих дужках на сторінці праворуч на рівні відповідної формули. Наприклад: «(2.1)» – перша формула другого питання. Кожний рисунок (схема, діаграма, графік) повинний мати порядковий номер та назву, які необхідно розміщувати під ним без крапки. Наприклад: «Рисунок 3.1 – Діаграма фазового складу двокомпонентного сплаву». У тексті де викладено матеріал, який пов'язаний з рисунком на який необхідно вказати розміщують посилання у круглих дужках «(рис. 3.1)», або «див. рис. 3.1». Кожна таблиця повинна мати порядковий номер та назву, які необхідно розміщувати над таблицею посередині рядка. Наприклад: «Таблиця 1.1 – Критичні точки сплаву». При перенесенні частини таблиці на наступну сторінку, слово «Таблиця» та її назва вказуються один раз над першою частиною таблиці, а над іншими частинами пишуть: «Продовження табл.», «Закінчення табл.» із зазначенням її номера.

ДОДАТКИ

Додаток 1

Зразок оформлення титульного аркуша

Міністерство освіти і науки України

**Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»**

Кафедра «Матеріалознавство»

КУРСОВА РОБОТА

з навчальної дисципліни

«Кристалографія і дефекти кристалічної будови»

Виконав(а)

ст. гр. МІТ-

Перевірив

Дата виконання роботи

Особистий підпис студента

Харків – 202_

Додаток 2. Основні формули кристалографії

Міжплощинна відстань d_{hkl} :

– кубічна сингонія

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2};$$

– гексагональна сингонія

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Кут між площинами $(h_1k_1l_1)$ та $(h_2k_2l_2)$:

– кубічна сингонія

$$\cos \varphi = \frac{h_1k_2 + k_1l_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

– гексагональна сингонія

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1h_2 + \frac{1}{2}(h_1h_2 + h_2k_1) + \frac{3}{4}\frac{a^2}{c^2} + l_1l_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1k_1 + \frac{3}{4}\frac{a^2}{c^2}l_1^2\right)\left(h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2 + \frac{3}{4}\frac{a^2}{c^2}l_2^2\right)}}$$

Формули для розрахунку кутів між напрямками $[uvw]$ аналогічні вище зазначеним формулам, тільки замість індексів площин (hkl) необхідно записати індекси напрямків $[uvw]$.

Додаток 3

Кристалічні структури елементів

Елемент	Сим-вол	Модифікація	Тип ґратки	Періоди комірки, нм	
				а	с
1	2	3	4	5	6
Срібло	Ag	–	ГЦК	0,40853	–
Алюміній	Al	–	ГЦК	0,40488	–
Миш'як	As	–	Ромбоedr.	0,37598	1,05475
Золото	Au	–	ГЦК	0,40789	–
Барій	Ba	–	ОЦК	0,501	–
Берилій	Be	α (< 1254 °C)	ГЦП	0,22858	0,35843
		β (> 1254 °C)	ОЦК		
Вісмут	Bi	–	Ромбоedr.	0,45460	1,1862
Вуглець	C	Графіт	Гексагон.	0,2464	0,6711
		Алмаз	Кубічна	0,35669	
Кадмій	Cd	–	ГЦП	0,29787	0,56166
Кобальт	Co	α (< 400 °C)	ГЦП	0,25071	0,40695
		β (> 400 °C)	ГЦК	0,3554	
Хром	Cr	–	ОЦК	0,2884	–
Мідь	Cu	–	ГЦК	0,36148	–
Залізо	Fe	α (< 911 °C)	ОЦК	0,28665	
		γ (911-1 392 °C)	ГЦК	0,3656	–
		δ (> 1 392 °C)	ОЦК	0,2930	
Германій	Ge	–	Кубічна	0,5658	
Гафній	Hf	α (< 1740 °C)	ГЦП	0,3198	0,5061
		β (> 1740 °C)	ОЦК	0,3500	
Індій	In	–	ГЦТ	0,32512	0,49467
Іридій	Ir	–	ГЦК	0,38390	–
Калій	K	–	ОЦК	0,53298	–
Літій	Li	> –195 °C	ОЦК	0,35100	–
		< –195 °C	ГЦП	0,3086	0,6823

Продовження додатку 3

1	2	3	4	5	6
Магній	Mg	—	ГЦП	0,32089	—
Марганець	Mn	α (< 727 °C)	Кубічна	0,89139	—
		β (727–1 095 °C)	Кубічна	0,6313	—
		γ (1095–1133 °C)	ГЦК	0,3862	—
		δ (> 1133 °C)	ОЦК	0,3080	—
Молібден	Mo	—	ОЦК	0,31470	—
Натрій	Na	—	ОЦК	0,4291	—
Ніобій	Nb	—	ОЦК	0,33002	—
Нікель	Ni	—	ГЦК	0,35232	—
Осмій	Os	—	ГЦПП	0,27353	0,43191
Свинець	Pb	—	ГЦК	0,49507	—
Паладій	Pd	—	ГЦК	0,38874	—
Платина	Pt	—	ГЦК	0,39242	—
Реній	Re	—	ГЦП	0,27609	0,44576
Родій	Rh	—	ГЦК	0,38034	—
Рутеній	Ru	—	ГЦП	0,2700	0,4275
Сурма	Sb	—	Ромбоedr.	0,43084	1,1274
Скандій	Sc	—	ГЦП	0,3308	0,5267
Кремній	Si	—	Кубічна	0,54286	—
Олово	Sn	α (< 13 °C)	Кубічна	0,6491	—
		β (> 13 °C)	Тетрагон.	0,58315	0,31814
Тантал	Ta	—	ОЦК	0,33025	—
Титан	Ti	α (< 882.5 °C)	ГЦП	0,29508	0,46855
		β (>882.5 °C)	ОЦК	0,3606	—
Уран	и	α (< 662 °C)	Ромбічна	0,28537	$b = 0,58695$ $c = 0,49548$
		β (> 662 -775 °C)	Тетрагон.	0,1075	0,5656
		γ (>775 °C)	ОЦК	—	—
Ванадій	V	—	ОЦК	0,30271	—

Закінчення додатку 3

1	2	3	4	5	6
Вольфрам	w	–	ОЦК	0,31652	–
Ітрій	Y	α (< 1490 °C)	ГЦП	0,36509	0,57388
		β (> 1490 °C)	ОЦК		
Цинк	Zn	–	ГЦП	0,26646	0,49461
Цирконій	Zr	α (< 862 °C)	ГЦП	0,3232	0,5147
		β (> 862 °C)	ОЦК	0,3620	
Церій	Ce	α (< 800 °C)	ОЦК	0,5143	
		β (> 800 °C)	ГЦП	0,3650	0,5960

НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Пилипенко І. В., Спасьонова Л. М. Кристалохімія : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» освітньої програми «Хімічні технології неорганічних в'язучих речовин, кераміки, скла та полімерних і композиційних матеріалів» / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,33 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 100 с. URL: <https://ela.kpi.ua/bitstreams/43cc355a-0e83-4fe0-96b2-975eb0b3c0cc/download>
2. Колінько С. О., Бутенко Т. І., Ващенко В. А. Конспект лекцій з дисципліни «Кристалографія» для здобувачів освітнього ступеня бакалавра спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної форми навчання / М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол. ун-т. Черкаси : ЧДТУ, 2020. 99 с. URL: <https://er.chdtu.edu.ua/bitstream/ChSTU/4011/1/97.pdf>
3. Мамчур С. І., Носова Т. В., Федосов О. В. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія : Конспект лекцій для здобувачів освітнього ступеня бакалавр зі спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної форми навчання. Дніпро : 2024. 96 с. URL: https://files.fti.dp.ua/preprint/krystalohrafiya-krystalokhimiya-ta-mineralohiya?perpage=12&order=DESC&orderby=date&pos=10&source_list=collection&ref=%2Fpreprint%2F%3Fview_mode%3Drecords%26perpage%3D12%26page_d%3D1%26order%3DDESC%26orderby%3Ddate%26fetch_only%3Dthumbnail%26fetch_only_meta%3D1832%252C1876%252C1861%252C2461%252C2459
4. Бірюкович Л. О., Соловійова Т. О. Кристалохімія тугоплавких сполук. Лаб. практикум : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за освітньою програмою «Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів» спеціальності «Матеріалознавство» / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,01 Кбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 92 с. URL: <https://ela.kpi.ua/bitstreams/19318b35-3a8a-4f42-a790-e9c52b599d1b/download>
5. Кушнерьов О. І. Практикум з дисципліни «Кристалографія». Дніпро : ліра, 2022. 40 с. URL: http://repository.dnu.dp.ua:1100/?page=inner_material&id=15087
6. Менчук В. В., Раскола Л. А. Кристалохімія : метод. посіб. для практичних занять з курсу для студентів ф-ту хімії та фармації спеціальності 102 Хімія.

Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2022. 49 с. URL: <http://dspace.onu.edu.ua:8080/bitstream/123456789/33697/1/8F.pdf>

7. Кристалохімія. Лаб. практикум : навч.-метод. посіб. / К. С. Ютілова, Г. М. Розанцев, О. М. Швед, А. В. Кравчук. Вінниця : ДонНУ імені Василя Стуса, 2023. 56 с. URL: <https://r2.donnu.edu.ua/bitstreams/5e133810-3e9c-4f1a-842b-85af989bc3f6/download>

8. Marcos C. Crystallography. Introduction to the study of minerals. Springer Cham, 2022. 523 p. URL: <https://www.geokniga.org/books/31176>

9. Crystallography in materials science : from structure-property relationships to engineering /Schorr S., Weidenthaler C. (ed.). Walter de Gruyter GmbH, 2021. 369 p.

10. Кодекс етики академічних взаємовідносин та доброчесності Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут» СУЯ ХПІ-ВЗЯОД-МР/10.1:2023. URL: <https://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/wp-content/uploads/sites/43/2024/04/Kodeks-etyky-akademichnyh-vzayemovidnosyn-ta-dobrochesnosti-Natsionalnogo-tehnichnogo-universytetu-Harkivskyj-politehnicnyj-institut-.pdf>

11. СТЗВО-ХПІ-3.01-2025. Система стандартів з організації навчально-го процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу. Загальні вимоги до виконання. – На заміну СТЗВО-ХПІ-3.01-2021 ; [чинний з 2025-03-01]. Харків : НТУ «ХПІ», 2025. 43 с. URL: <https://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/metodotdel/wp-content/uploads/sites/28/2025/06/STZVO-HPI-3.01-2025-2.pdf>

ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ

1. <https://studfiles.net/>

ЗМІСТ

ВСТУП	
1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ	5
2. ТИПОВЕ ІНДИВІДУАЛЬНЕ ЗАВДАННЯ (КУРСОВА РОБОТА)	7
3. ВАРІАНТИ ПИТАНЬ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ) ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ	8
4. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ)	10
5. ВАРІАНТИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (КУРСОВИХ РОБІТ)	21
6. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (КУРСОВОЇ РОБОТИ)	22
ДОДАТОК 1	25
ДОДАТОК 2	26
ДОДАТОК 3	27
НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ	30
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	30
ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ	31

Навчальне видання

Методичні вказівки

до виконання індивідуального завдання (курсової роботи)
з навчальної дисципліни «Кристалографія і дефекти кристалічної будови»
для студентів денної та заочної форм навчання
за спеціальністю G8 «Матеріалознавство»

Укладачі:

БІЛОЗЕРОВ Валерій Володимирович
СУББОТІНА Валерія Валеріївна
СУББОТІН Олександр Володимирович
ФЕДОРЕНКО Ганна Анатоліївна

Відповідальна за випуск проф. Субботіна В. В.
Роботу до видання рекомендувала проф. Пономаренко О. І.

В авторській редакції

План 2026 р., поз. 267

Гарнітура Times New Roman. Ум. друк. арк.

Видавничий центр НТУ «ХП».

Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 5478 від 21.08.2017 р.

61002, Харків, вул. Кирпичова, 2.

Електронне видання