

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання)

з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану»

для студентів денної та заочної форм навчання

за спеціальністю 132 «Матеріалознавство»

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 3 від 24.10.2024 р.

Харків
НТУ «ХП»
2024

Методичні вказівки до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану» для студентів денної та заочної форм навчання за спеціальністю 132 «Матеріалознавство» / Уклад. В. В. Білозеров, О. О. Волков, Т. І. Дробенюк, Г. О. Князева, С. А. Князєв, Т. О. Протасенко, В. В. Субботіна, О. В. Субботін, О. С. Терлецький, Г. А. Федоренко. – Харків : НТУ «ХП», 2024. – 34 с.

Укладачі: В. В. Білозеров
О. О. Волков
Т. І. Дробенюк
Г. О. Князева
С. А. Князєв
Т. О. Протасенко
В. В. Субботіна
О. В. Субботін
О. С. Терлецький
Г. А. Федоренко

Рецензент: В. В. Дмитрик

Кафедра «Матеріалознавство»

ВСТУП

Навчальна дисципліна «Теорія конденсованого стану» належить до циклу навчальних дисциплін професійної підготовки бакалаврів освітньої програми «Прикладне матеріалознавство, новітні технології та комп'ютерний дизайн матеріалів» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 132 «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 (розрахункове завдання), як одна із форм індивідуального завдання, є складовою програми підготовки з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану». Метою виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) є підготовка студентами аналітичних та узагальнюючих матеріалів. При підготовці індивідуального завдання (розрахункового завдання) студенти повинні отримати навички опрацювання літературних джерел, складання плану індивідуального завдання (розрахункового завдання) 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 індивідуальному завданні (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 (розрахункове завдання) 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 (розрахункового завдання) з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану» призначені для ознайомлення студентів з основними вимогами до робіт такого типу, правилами оформлення та основними критеріями оцінювання.

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

1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ

Згідно з освітньою програмою «Прикладне матеріалознавство, новітні технології та комп'ютерний дизайн матеріалів» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 132 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (розрахункове завдання) з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану» є обов'язковою формою самостійної позааудиторної роботи студентів денної та заочної форм навчання.

Метою індивідуального завдання (розрахункового завдання) є поглиблення, закріплення та розширення теоретичних і практичних знань, щодо будови та властивостей матеріалів, що здобуті студентами при вивченні навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану», а також придбання практичного досвіду з використання цих знань для розрахування за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів та доцільності призначення тих чи інших видів термічного оброблення.

Вимоги до студентів при виконанні індивідуального завдання (розрахункового завдання) такі: розрахування за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів. На цій основі встановлюється основний тип міжатомного зв'язку елементів, його порівняльна сила, прогнозується закономірність зміни температури плавлення по їх періоду з урахуванням впливу неосновних міжатомних зв'язків. Два елементи періодичної таблиці завдання надаються викладачем, варіанти не співпадають.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) є заключним етапом засвоєння навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану».

Методики розрахування за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів базуються на теоретичних відомостях та навичках, набутих студентами під час вивчення навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану». Цим забезпечується зв'язок індивідуального завдання (розрахункового завдання) з іншими навчальними дисциплінами за навчальним планом кафедри, що пов'язано з вивченням процесів утворення структур двокомпонентних сплавів.

Виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання), 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 132 «Матеріалознавство» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти денної та заочної форм навчання закладів вищої освіти.

2. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)

РОЗРАХУНКИ ЧАСТИН ЗАВДАННЯ ДЛЯ ЕЛЕМЕНТІВ: I, Nb

2.1. Розписати в повній і короткій формі електронну структуру заданих елементів та її прокоментувати.

$_{53}\text{I}$: повна – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^5$; коротка – $[\text{Kr}] 4d^{10}5s^25p^5$.

$_{41}\text{Nb}$: повна – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^4 5s^1$; коротка – $[\text{Kr}] 4d^45s^1$

а) Який підрівень заповнюється? У йода заповнюється $5p$ -підрівень, а у ніобію – $4d$.

б) Яка електронна підорбіталь із валентних розташована зовні, яка нижче? Застосувати розрахунки програми FDA, кнопки « $r \cdot R(r)$ » та «Orbitals». Наведемо добуток хвильової функції $\psi(r)$ на радіус окружності $r - r \cdot \psi(r)$, що більш наочно та за якістю відповідає щільності ймовірності на поверхні сфери – $4\pi r^2 \psi(r)^2$. – рис. 2.1 та 2.2.

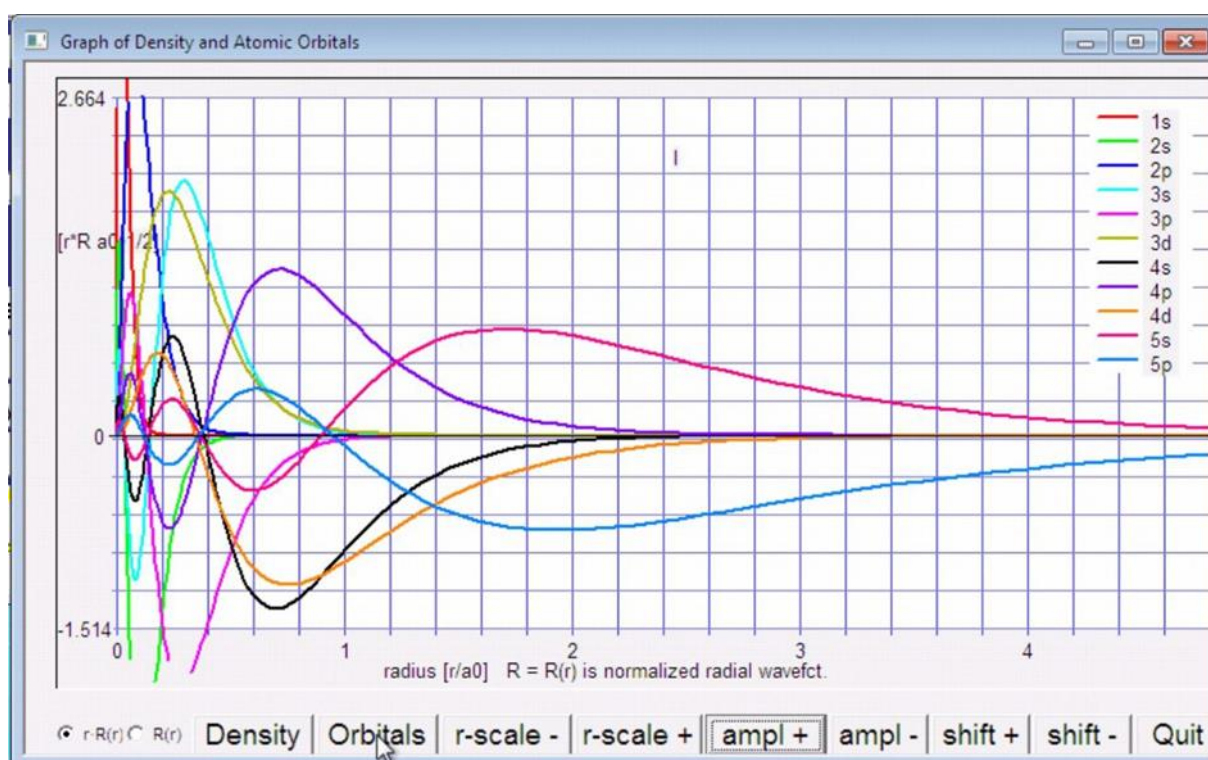


Рисунок 2.1 – Радіальна залежність $r\psi(r)$ для I

Як видно з рис. 2.1, у Йоду з номером 53 заповнюється зовнішній $5p$ -підрі-
вень, що позначений на діаграмі синім кольором.

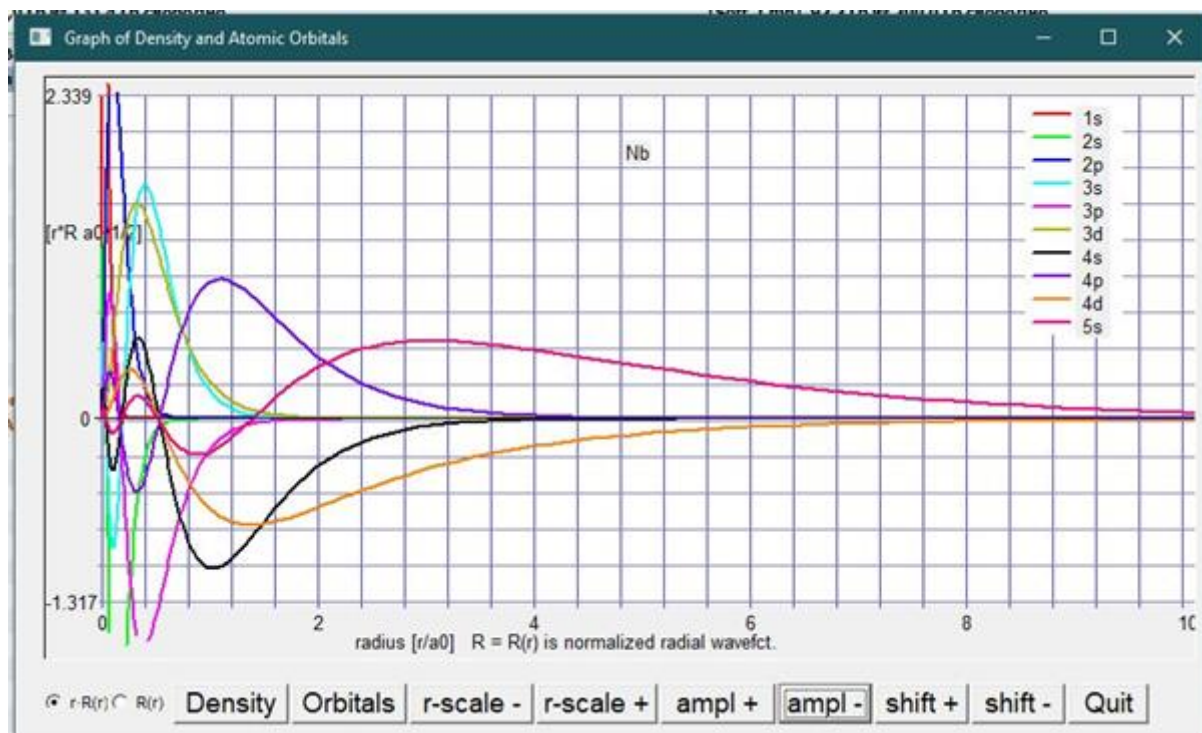


Рисунок 2.2 – Радіальна залежність $r\psi(r)$ для Nb

Як видно з рис. 2.2, зовні розташована $5s$ -підорбіталь. При цьому $5s$ -орбі-
таль заповнюється першою, а потім після неї аж до повного заповнення, буду-
ється $4d$ -орбіталь, що зумовлене прагненням атомів та електронів зайняти макси-
мально енергетично вигідну позицію. Нижче розташована $4d$ підорбіталь.

**2.2. За допомогою програми FDA для валентних підрівней розрахувати
повну енергію (E), її кінетичну (E_k) та потенційну (E_{pot}) складові.**

У програмі FDA дані наводяться в енергетичних одиницях Хартрі [E_h]. Пе-
реведемо їх значення в [eV] (з урахуванням $1 E_h \approx 27,2$ eV).

Знайдемо відсутнє значення середньої повної енергії валентних електронів
 E_{cp} за її значеннями для енергетичних підрівней, потенціальної E_{pot} та кінетичної
 E_k складових повної енергії. Для цього скористуємось лістингами розрахунків
енергетики підрівней у програмі FDA для елемента I – рис. 2.3.

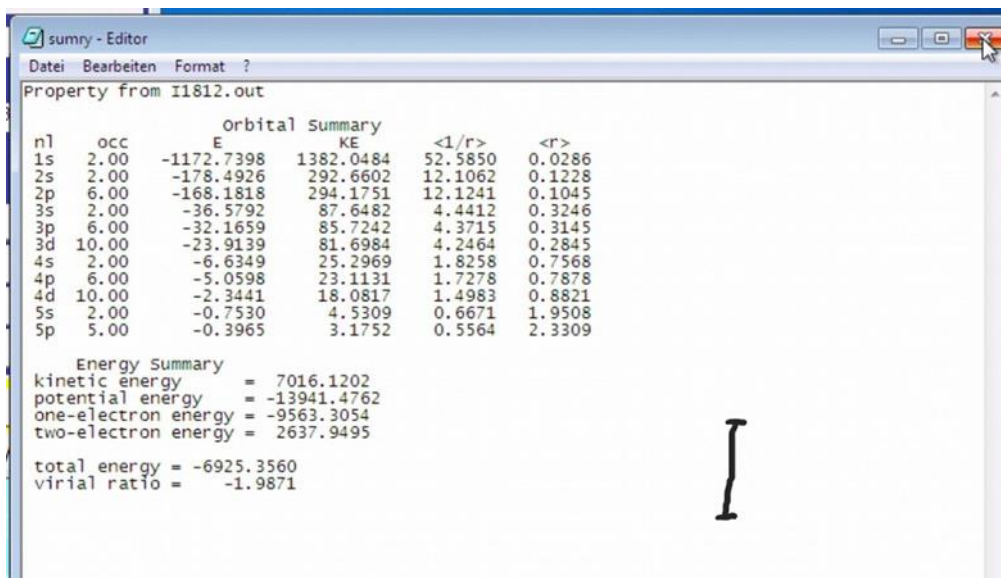


Рисунок 2.3 – Інтерфейс та лістинг розрахунків для I

Розрахуємо для I.

$$I : 5s: E = -0,753 \cdot 27,2 = -20,48 \text{ eV}; E_k = 4,531 \cdot 27,2 = 123,2 \text{ eV.}$$

$$5p: E = -0,396 \cdot 27,2 = -10,78 \text{ eV}; E_k = 3,1752 \cdot 27,2 = 86,36 \text{ eV.}$$

$$\text{Отримуємо: } E_{cp\ sp} = -15,63 \text{ eV.}; E_{k\ cp} = 104,8 \text{ eV.}$$

$$E_{pot} = E - E_k = -120,4 \text{ eV.}$$

Енергетика підрівней у програмі FDA для елемента Nb – рис. 2.4.

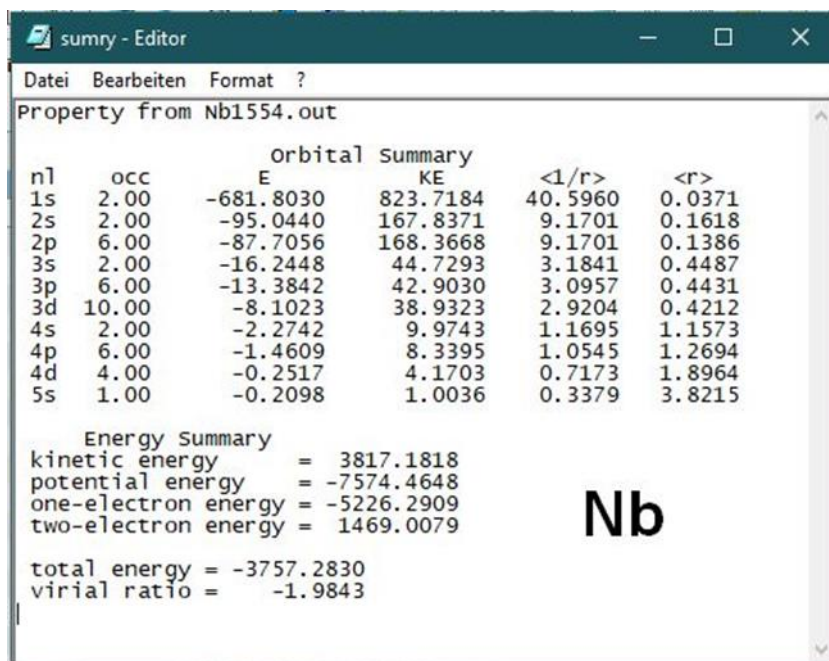


Рисунок 2.4 – Інтерфейс та лістинг розрахунків для Nb

Розрахуємо для Nb.

Nb : 5s: $E = -5,707$ eB; $E_k = 27,298$ eB

4d: $E = -6,846$ eB; $E_k = 113,4$ eB.

$E_{cp\ sd} = -6,276$ eB; $E_{k\ cp} = 70,36$ eB,

Отримуємо: $E_{pot} = E - E_k = -76,64$ eB.

Як свідчать отриманні данні, E и E_{pot} для елементів I та Nb відрізняються і свідчать про посилення зв'язку валентних електронів з ядром по періоду із зростанням номера елемента. Особливо це характерне для d -підорбіталі у валентному шарі перехідних металів. З цієї причини середні енергії валентних електронів для йоду розраховувались без урахування енергетики $4d$ - підорбіталі.

Наведемо отримані дані середніх енергій E та E_{pot} та для зіставлення – інших елементів 5 періоду (I позначено 17 номером групи, Nb – 5-м номером).

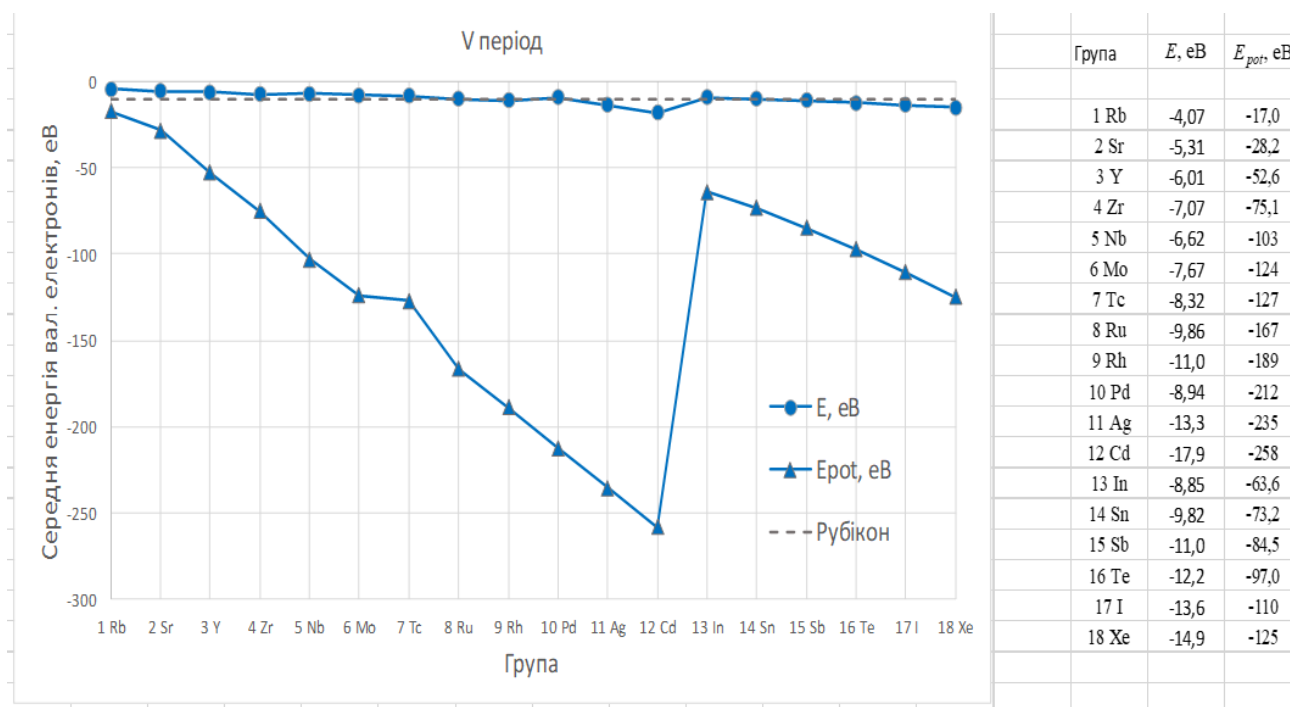


Рисунок 2.4 – Повна середня енергія валентних електронів E та її потенційна складова E_{pot} для елементів V періоду

2.3. Обґрунтувати основний тип міжатомного зв'язку заданих елементів у конденсованому стані та зв'язок, що контролює $T_{пл}$.

Ніобій – блискучий, білий, м'який і пластичний перехідний метал, який набуває синюватого відтінку під час тривалого перебування на повітрі при кімнат-

ній температурі. Метал починає окислюватися на повітрі при високій температурі, і, якщо працювати з ним гарячим, це потрібно робити в захисній атмосфері, щоб мінімізувати утворення оксиду.

Середня енергія валентних електронів ніобію більше за «рубікон» у -10 еВ, що означає, що ніобій формує у конденсованому стані в якості основного металевий зв'язок.

$$E_{sd}(\text{Nb}) = -6,276 \text{ eV} \gtrsim -10 \text{ eV}.$$

Тобто, у ніобію діє металевий зв'язок

Проста речовина йод (загальноживана назва – йод; від грец. ἰώδης – «фіолковий (фіолетовий)»), також від лат. «*Iodum*») за нормальних умов – це кристали (формула – I_2) чорно-сірого кольору з фіолетовим металевим блиском, що виявляють неметалеві властивості та видають характерний запах. Легко утворює фіолетові пари, що мають різкий запах. Елементарний йод високотоксичний. При нагріванні при атмосферному тиску йод сублимує, перетворюючись на пари фіолетового кольору; при охолодженні при атмосферному тиску пари йоду кристалізуються, минаючи рідкий стан. Цим користуються практично для очищення йоду від нелетючих домішок.

Середня енергія валентних електронів йоду менше за «рубікон» у -10 еВ, що означає, що йод формує у конденсованому стані в якості основного ковалентний зв'язок.

$$E_{sp}(\text{I}) = -15,63 \text{ eV} \lesssim -10 \text{ eV}.$$

2.4. Прокоментувати по 2 сусідні (ліворуч, праворуч) та ваші елементи періоду по закономірностям зміни температури T_{nl} та факторах, що це обумовлюють.

Сусідами щодо ніобію (Nb) є такі ж перехідні метали ітрій (Y), цирконій (Zr) (ліворуч) та молібден (Mo) і технецій (Tc) (праворуч). Ключовим для розуміння закономірностей зміни їх фізичних властивостей на прикладі температури плавлення (t_{nl}) є графік енергетики валентних s - та d -підрівней у ізольованому атомі – рис. 2.5.

Як бачимо, середня енергія підрівней E_{sd} перевищує характерне граничне значення переходу від основного металевого до ковалентного зв'язку – 10 еВ та зменшується в ланцюжку $\text{Y} \rightarrow \text{Tc}$. Цьому відповідає посилення сили металевого

зв'язку хмар вільних (ідеалізовано) s - та d -електронів у такому ланцюжку, підвищення температури t_{nl} . При цьому, як свідчить графік на рис. 2.5, значення E_d для технеція наближаються до «рубікону» -10 еВ на фоні поступового все більшого групування $4d$ -орбіталі в своєму «рідному» четвертому шарі, а не п'ятому – рис. 2.2.

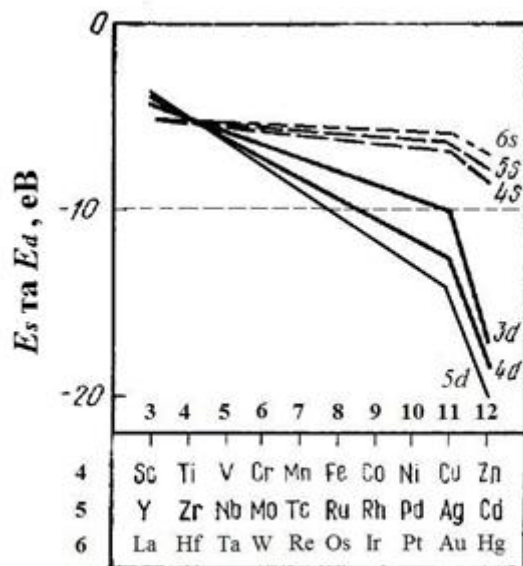


Рисунок 2.5 – Енергії валентних E_s - та E_d -підрівней перехідних металів

З цієї причини, від шостої групи і далі d -орбіталі (підрівень) все менше приймає участь у формуванні металевого зв'язку в перехідних металах. З формальної точки зору, після молібдену, в нашому випадку, середня енергія E_{sd} на формування металевого зв'язку починає зростати, що його послабує, температура t_{nl} після молібдену повинна спадати.

Це і спостерігається на рис. 3.9 (третій розділ).

Щодо йоду, то в ланцюжку елементів $Sb \rightarrow Xe$ маємо монотонне зниження сили основного ковалентного зв'язку (рис. 3.6), температури t_{nl} аж до Ван-дер-Ваальсовому зв'язку з мінімальним значенням t_{nl} у ксенона.

3. ДОДАТКОВІ МЕТОДИЧНІ МАТЕРІАЛИ ТА МІРКУВАННЯ ЗАЛЕЖНО ВІД ВАРІАНТУ

3.1. Розписати в повній і короткій формі електронну структуру заданих елементів та прокоментувати її.

Cr: повна – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$; коротка – $Ar 4s^1 3d^5$.

Se: повна – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^4$; коротка – $[Ar] 4s^2 3d^{10} 4p^4$.

а) Який підрівень заповнюється? У елемента Cr – $3d$. У хрома $3d$ -підрівень повинен мати 4 електрони, але із-за зв'язування цим підрівнем одного $4s$ -електрона має $3d^5$. У Se заповнюється $4p$ енергетичний підрівень.

б) Яка електронна підорбіталь розташована зовні? Використати розрахунки програми FDA, кнопки « $rR(r)$ » та «Orbitals». Наведемо добуток хвильової функції $\psi(r)$ на радіус кола $r - r\psi(r)$, яка більш наочно та за якістю відповідає щільності ймовірності на поверхні сфери – $4\pi r^2 \cdot \psi(r)^2$ – рис. 3.1 та 3.2.

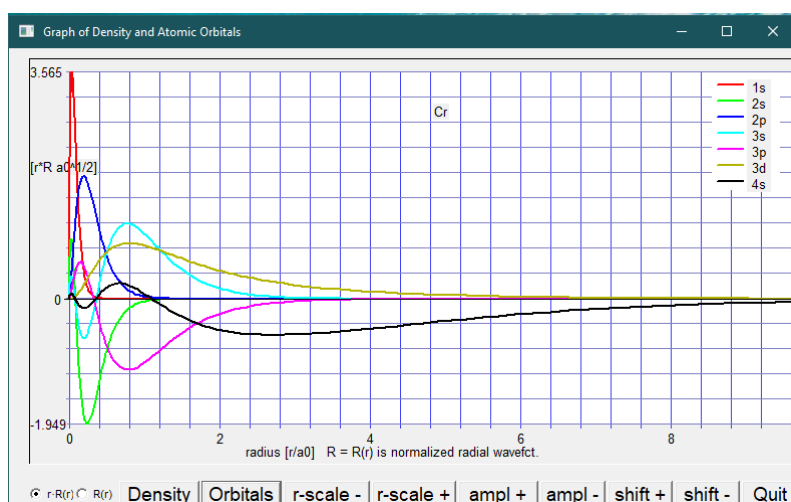


Рисунок 3.1 – Радіальна залежність $r^2 \cdot \psi(r)$ для Cr

Як видно з рис. 3.1, у Cr зовні розташована $4s$ підорбіталь (чорний колір), яка заповнена, причому положення максимуму її щільності визначає характерний радіус четвертого валентного шару. В свою чергу, значна частина щільності $3d$ -підорбіталі (гірничний колір), що заповнюється, знаходиться у третьому, попередньому електронному шарі (періоді). При цьому, якщо проаналізувати аналогічні графіки перехідних металів по періоду, з підвищенням номеру групи перехідних металів щільність d -підорбіталей все більше концентрується у відповідному попередньому шарі (періоді).

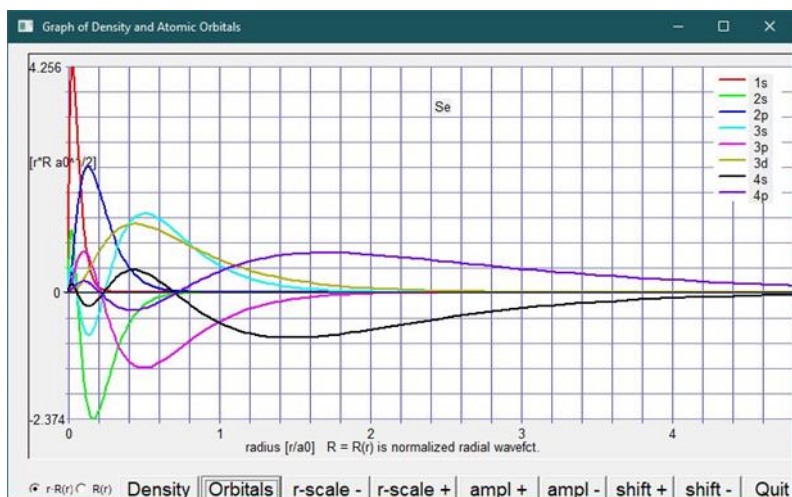


Рисунок 3.2 – Радіальна залежність $r^2 \cdot \psi(r)$ для Se

Як видно з рис. 3.2, у Se зовні розташована $4p$ -підорбіталь (бузковий колір), яка заповнюється, а основна щільність $4s$ -підорбіталі (чорний колір), що вже заповнена, знаходиться у тому ж четвертому шарі, але трохи нижче. Формально валентна, $3d$ -підорбіталь за своєю щільністю майже повністю розташована у своєму «рідному» попередньому 3 шарі (періоді). Тому у хімічних реакціях та у формуванні фізичних властивостей практично не приймає участь.

3.2. За допомогою програми FDA для валентних підрівней розрахувати повну енергію (E), її кінетичну (E_k) та потенційну (E_{pot}) складові.

На рис. 3.3 та 3.4 наведено інтерфейси та лістинги результатів розрахунків програми.

У програмі FDA дані наводяться в енергетичних одиницях Хартрі [E_h]. Знайдемо відсутнє значення E_{pot} , середні значення повної енергії E_{mn} відповідних валентних підрівней. В кінці розрахунків переведемо їх значення в [eV] (з урахуванням $1 E_h \approx 27,2$ eV).

Cr $3d$: повна $E = -0,273 E_h$; кінетична $E_k = 5,68 E_h$.

Отримуємо: потенційна $E_{pot} = E - E_k = -0,273 - 5,68 = -5,95 E_h$.

$4s$: повна $E = -0,223 E_h$; кінетична $E_k = 0,822 E_h$.

Отримуємо: потенційна $E_{pot} = E - E_k = -0,223 - 0,822 = -1,05 E_h$.

Середні $3d4s$ значення повної: $E_{mn} = E_{sd} = (1/2) \cdot (-0,273 - 0,223) \cdot 27,2 = -6,75$ eV.

Se $3d$: повна $E = -2,52 E_h$; кінетична $E_k = 20,6 E_h$.

Отримуємо: потенційна $E_{pot} = E - E_k = -2,52 - 20,6 = -23,1 E_h$.

4s: повна $E = -0,785 E_h$; кінетична $E_k = 3,93 E_h$.

Отримуємо: потенційна $E_{pot} = E - E_k = -0,785 - 3,93 = -4,72 E_h$.

4p: повна $E = -0,379 E_h$; кінетична $E_k = 2,63 E_h$.

Отримуємо: потенційна $E_{pot} = E - E_k = -0,379 - 2,63 = -3,01 E_h$.

The screenshot shows the FDA software interface for Chromium (Cr). The job name is 'Cr' and the electron configuration is '4p 0 0 0 4s 1 0 3d 5 0 3p 3 3 3s 1 1 2p 3 3 2s 1 1 1s 1 1'. The output file 'sumry.txt' contains the following data:

Property from Cr855.out					
orbital Summary					
n\l	occ	E	KE	<1/r>	<r>
1s	2.00	-218.1557	278.9838	23.6246	0.0639
2s	2.00	-25.1361	50.7113	5.0462	0.2923
2p	6.00	-21.6122	50.2115	5.0032	0.2565
3s	2.00	-2.9180	10.7635	1.5769	0.8927
3p	6.00	-1.8997	9.4663	1.4568	0.9417
3d	5.00	-0.2732	5.6828	1.0801	1.2815
4s	1.00	-0.2230	0.8223	0.3730	3.5152

Energy Summary	
kinetic energy	= 1068.2207
potential energy	= -2111.9929
one-electron energy	= -1452.4645
two-electron energy	= 408.6923
total energy	= -1043.7721
virial ratio	= -1.9771

a

б

Рисунок 3.3 – Інтерфейс (а) та лістинг (б) розрахунків для Cr

The screenshot shows the FDA software interface for Selenium (Se). The job name is 'Se' and the electron configuration is '4p 3 1 4s 1 1 3d 5 5 3p 3 3 3s 1 1 2p 3 3 2s 1 1 1s 1 1'. The output file 'sumry.txt' contains the following data:

Property from Se1133.out					
orbital Summary					
n\l	occ	E	KE	<1/r>	<r>
1s	2.00	-457.7342	564.5018	33.6063	0.0448
2s	2.00	-59.0438	111.2390	7.4674	0.1984
2p	6.00	-53.3510	111.2907	7.4538	0.1710
3s	2.00	-8.1791	26.6465	2.4667	0.5755
3p	6.00	-6.1570	24.8785	2.3595	0.5814
3d	10.00	-2.5201	20.6277	2.1098	0.6010
4s	2.00	-0.7849	3.9282	0.7615	1.7395
4p	4.00	-0.3787	2.6346	0.6156	2.1503

Energy Summary	
kinetic energy	= 2446.4619
potential energy	= -4848.5999
one-electron energy	= -3369.0285
two-electron energy	= 966.8904
total energy	= -2402.1380
virial ratio	= -1.9819

a

б

Рисунок 3.4 – Інтерфейс (а) та лістинг (б) розрахунків для Se

Як свідчить розрахунок для Se, його енергетичний 3*d*-підрівень в порівнянні із 4*s*- та 4*p*-підрівнями як за повною, так і за потенційною енергіями у кілька разів сильніше зв'язаний з ядром, що корелює з даними п. 1 по розташуванню орбіталей. Тому властивості визначаються 4*s*4*p*-підрівнями, їх середньою повною енергією.

Тоді для Se середні 4*s*4*p* значення повної енергії дорівнюють:

$$E_{mn} = E_{sp} = (1/2) \cdot (-0,785 - 0,379) \cdot 27,2 = -15,8 \text{ eV.}$$

Коментар. Як свідчать розрахунки, у Cr значення повної енергії 3*d*- та 4*s*-підрівнів порівнянні, їх середнє E_{sd} алгебраїчно перевищує «порогове» значення (– 10 eV), а енергетичний 3*d*-підрівень за значеннями E та E_{pot} сильніше зв'язаний з ядром.

У Se 3*d*-підрівень після своєї побудови за значеннями E та E_{pot} у кілька разів сильніше зв'язаний з ядром у порівнянні із 4*s*- та 4*p*-підрівнями. Тому міжатомний зв'язок та властивості визначають 4*s*- та 4*p*-підрівні з середнім значенням повної енергії E_{sp} , яка менше «рубікону» (– 10 eV). Зокрема, 4*s*-підрівень сильніше зв'язаний з ядром, чим 4*p*, що відповідає п. 1.

Примітка для тих, хто працює з «*s*» і «*p*» підрівнями у II та III періодах. Як E_{pot} , так и E відрізняються не більш чим у 1,5–2 рази. Своїми словами необхідно «розкрити» тему в одному абзаці з конкретними відносинами, який підрівень сильніше пов'язаний з ядром, а який слабше.

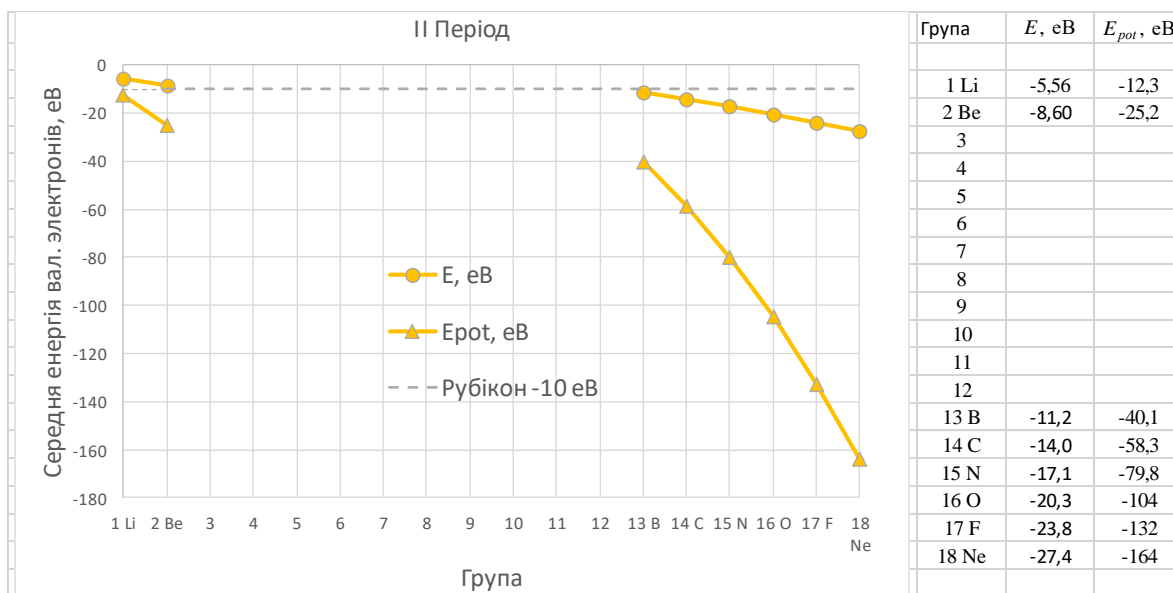
В цілому, як бачимо, зв'язок валентних електронів з ядром при підвищенні номеру елемента посилюється. Наведемо отримані дані їх середніх енергій E та складової E_{pot} по періоду, що розглядався, на рис. 3.5.

3.3. Обґрунтувати основний тип міжатомного зв'язку заданих елементів у конденсованому стані та зв'язок, який контролює $T_{пл}$.

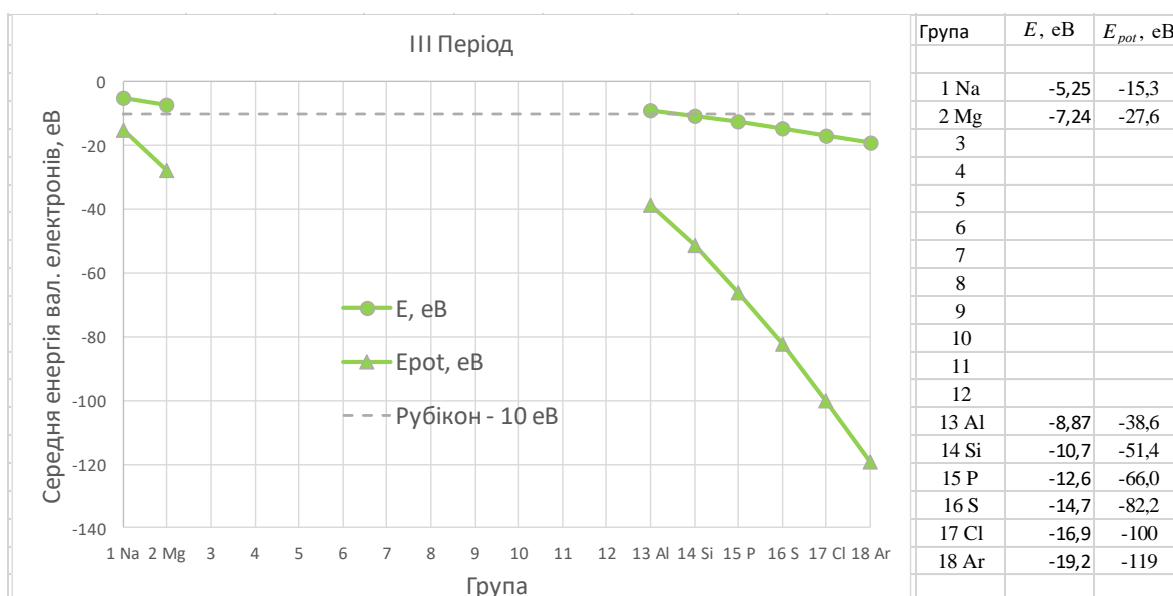
При обґрунтуванні треба застосувати розраховані вами середні повні енергії E електронів валентного рівня, для перехідних металів урахувати E_d та необхідні для ваших елементів міркування із наступних положень.

1) *Кристаліграфічні дані за фізичним сенсом.* З кристалічними структурами та їх параметрами елементів таблиці можна ознайомитись на сайті <https://www.webelements.com>. На цьому ж ресурсі, а також на сайті <https://www.ptable.com> детально та згруповано наведено фізичні властивості. На ресурсі University of Liverpool зручно скористатися їх сайтом [3D-моделей](#) для

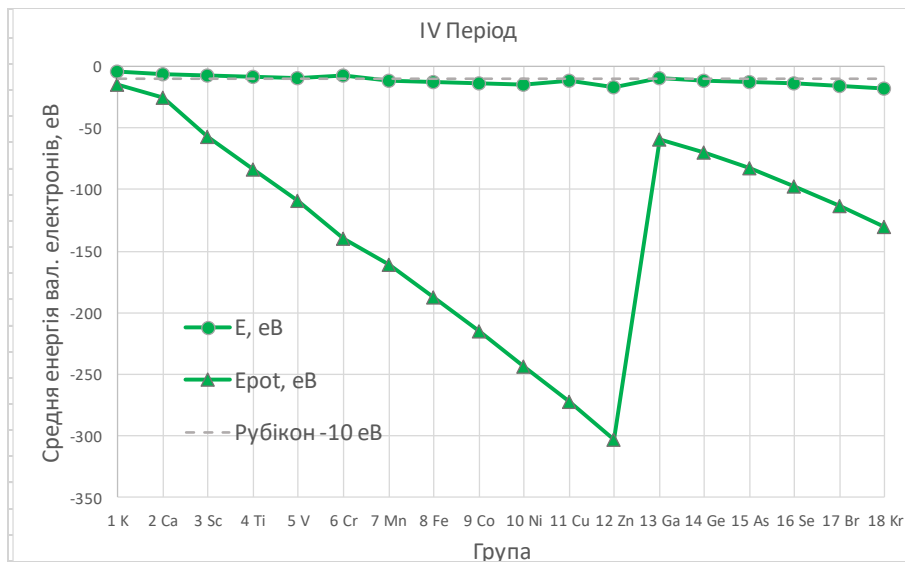
орбіталей (із меню «Structure and bonding») та кристалічних ґраток (із меню «Inorganic»), а також [деяких сполук елементів](#). Нарешті, також ґратки елементів можна проаналізувати на ресурсі <http://molview.org>. Для цього треба набрати англійською назву елемента у пошуку, обрати його із списку, що загрузить файл структури із Crystallography Open Database.



a

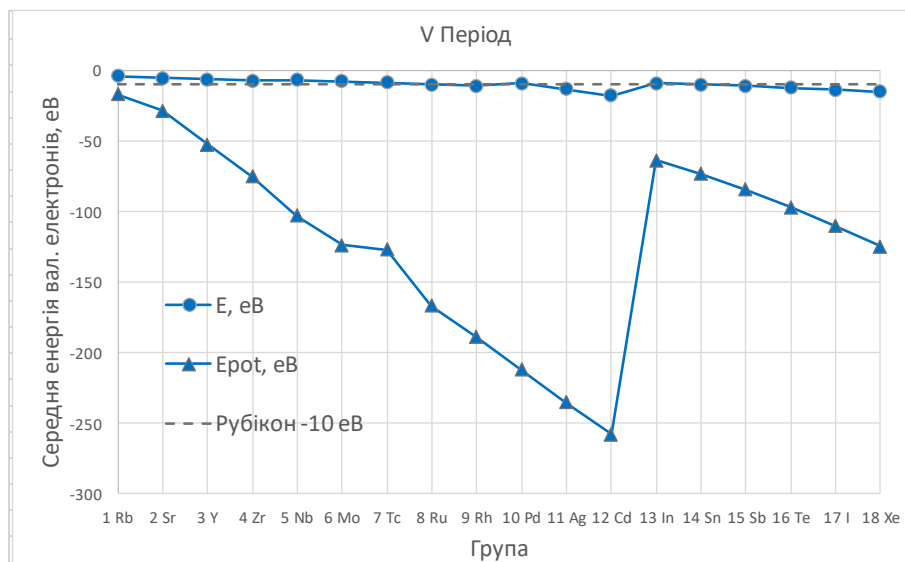


б



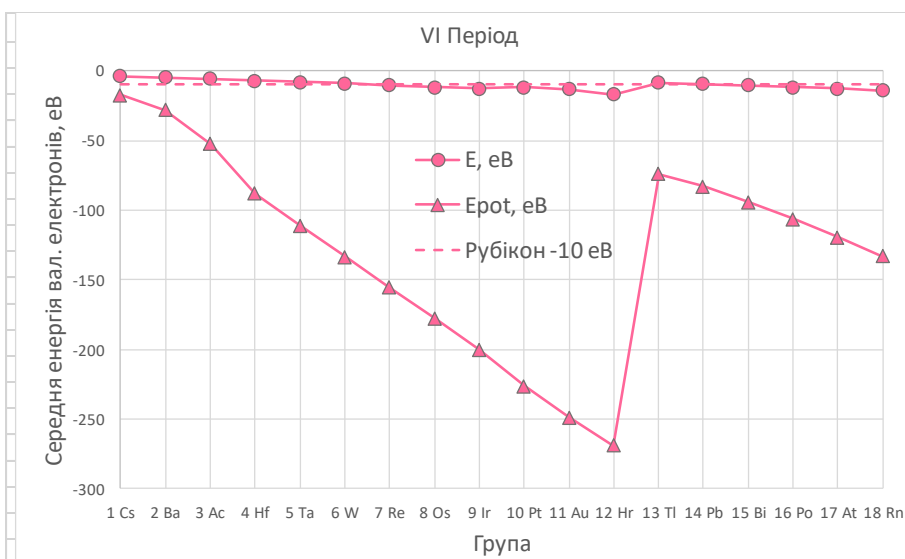
Група	E, eВ	E _{pot} , eВ
1 K	-4,31	-15,0
2 Ca	-5,73	-25,6
3 Sc	-6,88	-57,1
4 Ti	-8,11	-84,0
5 V	-9,34	-110
6 Cr	-7,20	-140
7 Mn	-11,7	-161
8 Fe	-12,9	-188
9 Co	-14,0	-215
10 Ni	-15,1	-243
11 Cu	-11,1	-273
12 Zn	-17,2	-303
13 Ga	-9,77	-58,9
14 Ge	-11,0	-69,9
15 As	-12,4	-82,9
16 Se	-14,0	-97
17 Br	-15,6	-113
18 Kr	-17,4	-130

6



Група	E, eВ	E _{pot} , eВ
1 Rb	-4,07	-17,0
2 Sr	-5,31	-28,2
3 Y	-6,01	-52,6
4 Zr	-7,07	-75,1
5 Nb	-6,62	-103
6 Mo	-7,67	-124
7 Tc	-8,32	-127
8 Ru	-9,86	-167
9 Rh	-11,0	-189
10 Pd	-8,94	-212
11 Ag	-13,3	-235
12 Cd	-17,9	-258
13 In	-8,85	-63,6
14 Sn	-9,82	-73,2
15 Sb	-11,0	-84,5
16 Te	-12,2	-97,0
17 I	-13,6	-110
18 Xe	-14,9	-125

2



Група	E, eВ	E _{pot} , eВ
1 Cs	-3,68	-17,4
2 Ba	-4,75	-28,4
3 Ac	-5,75	-52,7
4 Hf	-6,94	-88,0
5 Ta	-8,02	-111
6 W	-9,18	-133
7 Re	-10,4	-156
8 Os	-11,7	-178
9 Ir	-12,9	-200
10 Pt	-12,0	-226
11 Au	-13,1	-249
12 Hg	-16,9	-269
13 Tl	-8,71	-74,0
14 Pb	-9,54	-83,1
15 Bi	-10,5	-94,2
16 Po	-11,6	-106
17 At	-12,8	-120
18 Rn	-14,0	-133

d

Рисунок 3.5 – Середні енергії E та E_{pot} валентних електронів II–VI періодів (a–d)

2) **Металевий зв'язок.** Для всіх елементів періодичної таблиці, за винятком 18 групи та перехідних металів, виконується наступне правило, закономірність. Якщо середня енергія E_s -, E_{sp} -валентних електронів перевищує значення $E \approx -10$ еВ (а для E_s це виконується завжди), то в конденсованому стані (рідина, кристал) формується в якості основного – металевий (Met) тип зв'язку. При цьому, чим сильніше валентні електрони зв'язані з ядром, тобто – чим менше значення E_s або E_{sp} , тим сильніший металевий зв'язок, тим більше температура плавлення ($T_{пл}$) металу (Me). Зазначимо, що вищенаведеному відповідає зростання позитивної різниці $\Delta E_{met} = 0 - E_s$, (або $0 - E_{sp}$), що безпосередньо і характеризує силу Met зв'язку. Відповідний графік енергій E для s- та p- підрівней валентних електронів в ізолюваних атомах у групах 1, 2, 12–18 наведено на рис. 3.6 (роз'яснення по ковалентному зв'язку буде надано нижче у пп 4).

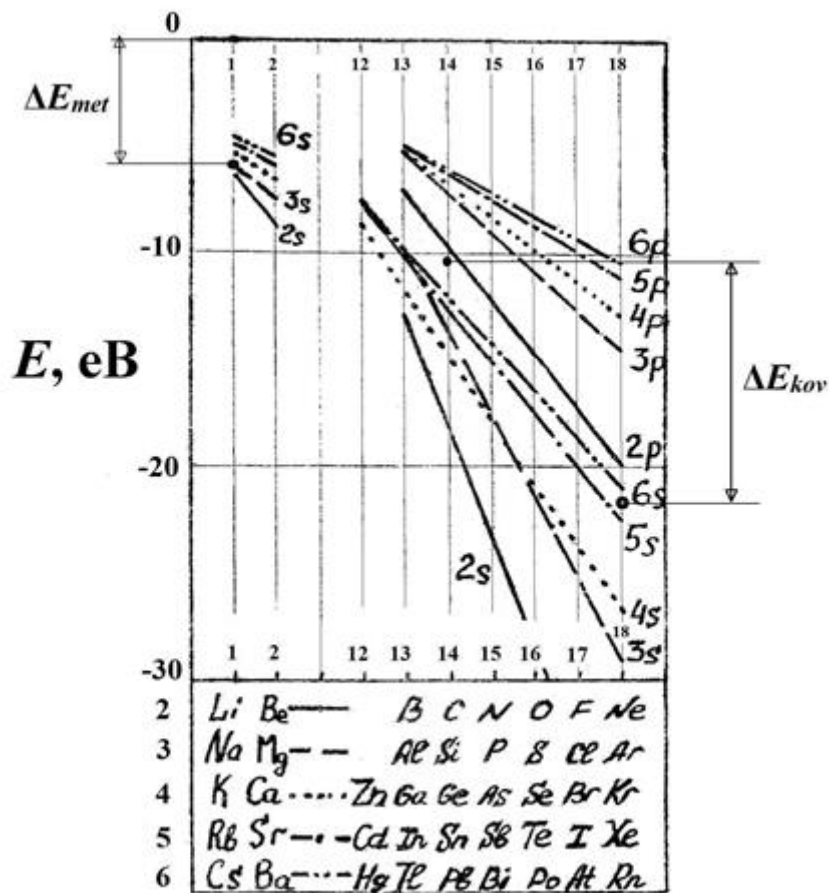


Рисунок 3.6 – Оцінювання сили металевого (Na, ΔE_{met}) та ковалентного зв'язків (Si, ΔE_{kov})

Вищенаведене зрозуміло, бо при формуванні ідеалізованого металевого зв'язку і делокалізації валентних електронів долається та зникає потенційна

складова енергії по їх переміщенню відносно іонного остову ґратки, набуває виграш (зниження) по кінетичній складовій енергії. А цьому і відповідає, як мінімальне, – значення повної енергії «0». Зміни температури T_{nl} таких металів наведено на рис. 3.9. При відсутності чинників, які збурюють електронний газ, умова рівномірності та максимального числа найближчих сусідів обумовлює у нормальних металах ОЦК-, ГЦК-, та ГПУ-ґратки.

3) **Перехідні Ме.** У разі перехідних металів усе аналогічно, але стосовно середньої енергії $E_{sd} \gtrsim -10$ еВ, тому що *Met*-зв'язок «формують» *s*- та *d*-підрівні, підорбітали. Чим більше $\Delta E_{met} = 0 - E_{sd}$, тим сильніший металевий зв'язок, тим вище температура $T_{пл}$. Порівняно з *s*- та *p*-електронами найважливіше те, що *d*-електрони за своєю потенційною складовою E_{pot} набагато сильніше (у кілька разів) зв'язані з ядром – рис. 3.5. Тому, при побудові *d*-підрівня (групи № 3–6) його зв'язок з ядром посилюється, значення енергії E_d наближаються до $E_d \approx -10$ еВ, знижується також і середня енергія E_{sd} – рис. 3.7. Відповідно, температура $T_{пл}$ із-за збільшення ΔE_{met} спочатку зростає.

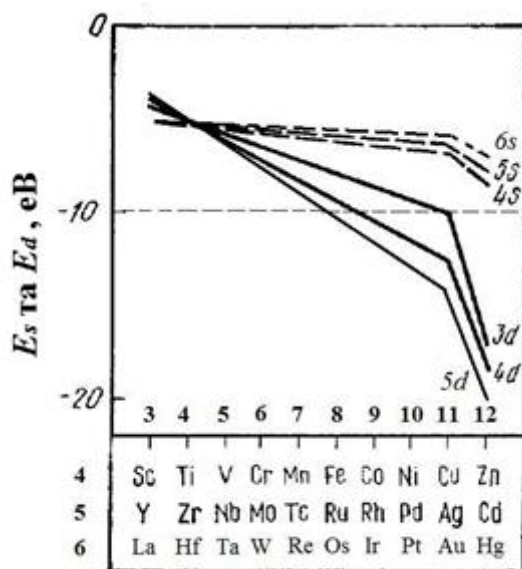


Рисунок 3.7 – Енергії валентних E_s - та E_d -підрівней перехідних металів

Але при перетинанні *d*-електронами енергетичного «рубікону» ≈ -10 еВ та подальшому зниженню значень $E_d \lesssim -10$ еВ (групи 7–12), вони надалі все менш беруть участь у делокалізації, розширенні, тобто – у формуванні *Met*-зв'язку. З формальної точки зору, цьому відповідає підвищення середньої енергії E_{sd} електронних хвиль, що беруть участь у *Met*-зв'язку, майже до рівня E_s у 12 групі, та зменшення ΔE_{met} . А це не що інше, як зменшення сили *Met*-зв'язку і, відповідно,

температури T_{nl} .

Приходимо до висновку, що у перехідних Me із-за зниження E_{sd} по періоду та наближення її значень «рубікону» (≈ -10 еВ), температура T_{nl} спочатку зростає, досягає максимуму (6 група), а далі знижується. При цьому максимум T_{nl} (6 гр.), як виходить із ΔE_{met} на рис. 3.7, повинен зростати за періодів 4, 5, 6 – рис.3.9. Зрозуміло, що ураховувати d-підорбіталь після 11 групи не має сенсу.

4) Ковалентний (Ков) зв'язок. Принципово протилежне відбувається в іншому випадку, коли у *s*- та *p*-підрівня середня $E_{sp} \lesssim -10$ еВ (зрозуміло – за винятком 18 групи), тобто нижче «рубікону» – 10 еВ. При цій умові відбувається енергетичний виграш по потенційній складовій E_{pot} повної енергії E_{sp} за рахунок локалізації, зв'язуванні кількох валентних електронів від сусідніх атомів з формуванням ковалентних пар і добудови валентного шару кожного атома. В цьому і полягає фізична суть Ков зв'язку, в рамках якого виграш по потенційній складовій перевищує програш по кінетичній, бо вона зростає із-за локалізації. Максимальному зниженню E_{pot} та найсильнішому зв'язку валентних електронів з ядром відповідає формальна добудова валентного шару у 18 групі. Тому кількість ковалентних пар становить за правилом (18–N) або (8–N), де N – номер групи відповідно формату таблиці. Енергетичний виграш, сила Ков зв'язку та значення T_{nl} пропорційні $\Delta E_{kov} = E_{sp, N} - E_{sp, 18}$. Тобто, дорівнює різниці середніх енергій валентних електронів у елементі та у групі №18 його періоду – рис. 3.6.

Безпосередньо цю закономірність можна перевірити по елементам C, Si, та Ge у 14 групі, що мають решітку алмазу з 4 Ков парами. Значення ΔE_{kov} , сила Ков зв'язку у цієї низці елементів повільно знижуються – рис. 3.6, що добре підтверджується і повільним зниженням T_{nl} (рис. 3.9).

Здавалося б, що аналогічне зниження T_{nl} через поступове ослаблення Ков зв'язку (ΔE_{kov}) повинно спостерігатися і в низці елементів другого періоду B, C, N, O, F. Але, значення T_{nl} спочатку у 1,5 рази зростає від бора до 3640 °С у вуглецю, а потім різко падає до криогенних ≈ -220 °С у ґратках із молекул-гантелей з Ков зв'язком N₂, O₂, F₂. Це, а також інші закономірності зміни T_{nl} у групах 15–17 для 2–5 періодів роз'яснюється послідовним (на відміну від паралельного для C, Si, Ge) сполученням у ґратці основного ковалентного та неосновних і слабкіших зв'язків.

5) Ков зв'язок у групах 15–17 для 2–5 періодів. Що до елементів таблиці взагалі, то умові $E_{sp} \lesssim -10$ еВ відповідає їх менша частина в порівнянні з металами, а для формування ковалентного зв'язку їм потрібно від 1 (17 група) до 5 (елемент В) Ков-пар. Але побудувати решітку з рівноправними та однаковими міжатомними відстанями в об'ємі можливо тільки для 4, 6, 8, та 12 ковалентних

пар. Розглянемо з цього наслідки. Решітка для Ков зв'язку з 1-ю парою (17 група) реалізується укладкою молекул-гантелей, всередині яких – одна Ков-пара (рис. 3.8 в). Але через велику щільність та малий переріз поперек Ков-пари у 2 періоді, молекули-гантелі також спостерігаються і у N₂, O₂ з 3-ма та 2-ма такими парами (15, 16 групи).

Тоді отримуємо низку елементів N₂, O₂, F₂, Cl₂, в яких гантелі з сильним основним Ков зв'язком послідовно пов'язані слабким В-д-В зв'язком між гантелями, тому ця слабка ланка і контролює $T_{пл}$.

Періоди 3–6. Для 2-х Ков-пар (16 група) решітка являє собою укладку у просторі ланцюжків шарами або кільцями, в яких кожний атом має двох найближчих сусідів з Ков зв'язком – рис. 3.8 б. Для 3-х пар (15 група) – укладкою атомів у двошарові пакети, в яких кожний атом має трьох найближчих сусідів з Ков зв'язком – рис. 3.8 а. Між собою гантелі або шари послідовно пов'язані неосновними, більш слабкими зв'язками (паралельно Ван-дер-Ваальсовий (В-д-В) та металевий), а кристалічні решітки низькосиметричні внаслідок такої складної укладки – рис. 3.8 [<http://molview.org>].

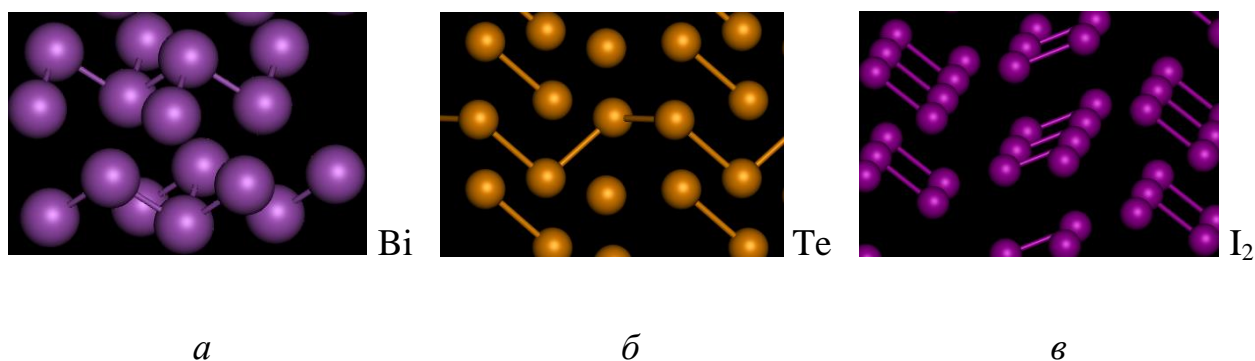


Рисунок 3.8 – 3D-моделі ґраток з 3 (а), 2 (б) та 1 (в) Ков парою

б) Неосновний металевий зв'язок. Він з'являється у частки елементів (В, Si, Ge, «чорний» Р, As, Sb, Bi, Se, Te, Po, At) при формуванні Ков зв'язку внаслідок переходу незначної частки електронів у зону провідності (делокалізації). Загальне правило – чим більше складова E_{pot} у повної енергії валентних електронів ізолюваного атома, чим сильніше вони зв'язані з ядром, тим менше їх залишкова щільність ймовірності ψ^2 у міжостовному просторі решітки при перерізі Ков пари поперек. При цьому сама ковалентна пара у перерізі поперек більш локалізована. Приходимо до висновку, що остаточні значення ψ^2 будуть *знижатися при зменшенні номеру періоду та зростанні номера групи по періоду*. Відповідно,

при цьому буде зменшуватися і сила неосновного металевого зв'язку на фоні основного та сильного ковалентного зв'язку. Це яскраво проявляється у поліморфних модифікаціях «чорний» фосфор, «сірий» селен, напівметалах As, Sb, Bi, Te, Po, At.

З вказаної закономірності отримуємо, що в групах 15–16 *другого періоду* 3 та 2 Ков пари укладаються в одному напрямку без взаємного збурення в молекули-гантелі N₂, O₂, як зазначалося вище. Так як остаточні значення ψ^2 між ними низькі, в якості неосновного зв'язку між молекулами остається тільки слабкий Ван-дер-Ваальсовий з низькими T_{nl} . Тоді отримуємо аналогічну низку елементів N₂, O₂, F₂, Cl₂, в яких В-д-В зв'язок між гантелями контролює T_{nl} . Це добре ілюструє, наприклад, азот. Його кипіння відбувається при криогенних – 196 °С і при 20 °С це – газ N₂, але майже до $t \approx 3000$ °С молекула N₂ не дисоціює, не розриває Ков зв'язок.

Тому у інших розглянутих у п. 5) елементах 3–6 періодів та групах 15–17 неосновний і слабкіший металевий зв'язок буде з'являтися та діяти послідовно з ковалентним із-за збільшення остаточних значень ψ^2 у порівнянні з 2 періодом. Наприклад – у низці елементів As, Se (3 період).

7) Вплив неосновного зв'язку на температуру $T_{пл}$. Загальне правило – при послідовному поєднанні сильної та слабкої ланки в якомусь контурі кристалічної ґратки, її стійкість до термічних збурень, а відповідно – і температура плавлення $T_{пл}$ визначається слабкою ланкою. І навпаки – при паралельному поєднанні сильного та слабкого зв'язків температура $T_{пл}$ контролюється сильною ланкою. Отримуємо, що у розглянутих у п. 4) елементів В, С, Si, Ge температура $T_{пл}$ визначається основним Ков зв'язком. У п. 5) для періодів 3–6, групи 16–17, – неосновним Met, а для N₂, O₂, F₂, Cl₂, розглянутих в п. 5) та 6) – неосновним Ван-дер-Ваальсовим.

Зазначимо, що у елемента бор (В) основний Ков зв'язок з 5-ю парами в цілому сильніший, чим у карбону (вуглецю (С)). Але однакові міжатомні відстані для 5 пар у ґратці неможливі. Тому 1 Ков пара серед п'яти не має оптимальної відстані, тому – ослаблена і в послідовному поєднанні сильної та слабкої ланки обумовлює понижену температуру $T_{пл}$ порівняно з карбоном (вуглецем).

8) Ковалентний зв'язок у 6 періоді. У 15–17 групах сила Ков та Met зв'язків доволі порівнянні. Тому Ві, Ро та At залежно від наукової школи відносять до постперехідних металів або полуметалів. Зокрема, Ро із-за простої кубічної ґратки та зниження електропровідності при зростанні T часто відносять до металів. Але наявність ковалентної компоненти у міжатомному зв'язку наочно ілюструє рис. 3.8 а для Ві.

Приходимо до висновку, що помітна щільність електронних хвиль у міжстовному просторі і обумовлює майже незмінність температури $T_{пл}$ у 15–17 групах шостого періоду.

9) Група 18. В 18 групі діє єдиний та слабкий В-д-В зв'язок, бо всі дозволені валентні енергетичні підрівні періоду добудовані, заповнені, зв'язок цих електронів з ядром у періоді найсильніший та немає енергетичних причин по їх модифікуванню на створення інших зв'язків. Так як заряд ядра та кількість електронів зростають з підвищенням номеру елемента, підвищується і дипольний момент у 18 групі із зростанням номеру періоду. Як наслідок, це слабе В-д-В притягіння на своєму рівні посилюється, значення $T_{пл}$ по групі вниз зростають, але при цьому не перевищують -70 °С. В цілому, безумовно, в 18 групі маємо мінімальне значення $T_{пл}$ у відповідних періодах.

3.4. Прокоментувати по 2 сусідні (ліворуч, праворуч) та ваші елементи періоду по закономірностям зміни температури $T_{пл}$ та факторах, що це обумовлюють.

Для коментарів застосувати потрібні міркування із попереднього підрозділу 3.3 та закономірності, наведені на рис. 3.9.

**4. ВАРІАНТИ
ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (РОЗРАХУНКОВИХ ЗАВДАНЬ)
ЗА ПАРАМИ РІЗНИХ ЕЛЕМЕНТІВ**

Варіант 1

Mg, Si

Варіант 2

Na, P

Варіант 3

K, Ga

Варіант 4

Ca, Ge

Варіант 5

Be, S

Варіант 6

Ti, O

Варіант 7

Cr, C

Варіант 8

Zr, I

Варіант 9

Ta, As

Варіант 10

W, Se

Варіант 11

Ag, Br

Варіант 12

Hf, Cl

Варіант 13

Au, Sb

Варіант 14

Sr, Bi

Варіант 15

Nb, Ge

5. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)

Відповідно до навчального плану спеціальності 132 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (розрахункове завдання) з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану» виконується самостійно.

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

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) вимагає від студентів використання теоретичних положень навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану» для розрахування за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів.

Структура індивідуального завдання (розрахункового завдання) спрямована на творчий пошук та індивідуальний підхід у розрахуванні за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів, сприяє розширенню ерудиції майбутнього інженера.

Кожен студент виконує свій варіант індивідуального завдання (розрахункового завдання), який відрізняється від інших. Робота виконується під керівництвом викладача, який у встановленому порядку видає студенту індивідуальне завдання (розрахункове завдання) 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 (розрахункове завдання) оформлюється відповідно до вимог, викладених нижче. Його захист відбувається в установлений 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, розрахування за допомогою програмного забезпечення, що додається, енергетики та радіального розподілу валентних електронів зазначених двох елементів, висновки викладаються в тексті індивідуального завдання (розрахункового завдання) самостійно.

Побудування індивідуального завдання (розрахункового завдання) має бути максимально наближеним до класичної наукової роботи. Вимоги до структури і оформлення якої регламентуються СТЗВО-ХПІ-3.01-2021. Система стандартів з організації навчального процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу. Загальні вимоги до виконання.

У встановлений термін, до захисту індивідуального завдання (розрахункового завдання) студент зобов'язаний представити викладачу для перевірення 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 (розрахункового завдання). 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-3.01-2021.

Текстову частину індивідуального завдання (розрахункового завдання) оформляють відповідно до вимог СТЗВО-ХПІ-3.01-2021, 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 (розрахункового завдання) 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 (розрахункового завдання) (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»

РОЗРАХУНКОВЕ ЗАВДАННЯ

**з навчальної дисципліни
«Теорія конденсованого стану»**

Виконав(а)

ст. гр. МІТ-

Перевірив

Дата виконання роботи

Особистий підпис студента

Харків – 202_

НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна література

1. Girvin S., Yang K. Modern condensed matter physics. Cambridge University Press, 2019. 714 p. URL: https://web.phy.ntnu.edu.tw/~hongyi/notes/Books/Girvin,%20Yang_Modern%20Condensed%20Matter%20Physics_2019_SSP.pdf
2. Бродин О. М. Теоретична фізика. Квантова механіка : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 2.6 Мбайт). Ки-їв : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. 233 с. URL: <https://ela.kpi.ua/server/api/core/bitstreams/fe113466-eefc-41e3-beb2-0d4edda8d9df/content>
3. Стріха М. В. Фізика конденсованого середовища : навч. посіб. Київ : КНУ, 2022. 333 с. URL: <http://phys-el.univ.kiev.ua/resources/CondMat.pdf>
4. Колінько С. О., Бутенко Т. І., Ващенко В. А. Конспект лекцій з дисципліни «Фізика конденсованого стану матеріалів» для здобувачів освітнього ступеня бакалавра спеціальності 132 «Матеріалознавство» денної форми навчання ; М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол. ун-т. Черкаси : ЧДТУ, 2021. 175 с. URL: <https://er.chdtu.edu.ua/bitstream/ChSTU/4059/1/A0..pdf>
5. Гусак А. М., Запорожець Т. В., Сторожук Н. В. Фізика матеріалів – базові моделі. Навч. посіб. для магістрантів спеціальності «фізика та астрономія». Черкаси : видавець ФОП Гордієнко Є. І., 2021. 157 с. URL: <http://eprints.cdu.edu.ua/4279/1/%2Bgoos.pdf>
6. Теорія кристалізації та формування виливків : консп. лекц. / Є. В. Синегін, С. В. Журавльова, Л. С. Молчанов, С. В. Суховецький. Дніпро : НМетАУ, 2021. 47 с. URL: https://nmetau.edu.ua/file/kl_teoriya_kristalizatsiyi_ta_formuvannya_vilivkiv.pdf
7. 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-con->

[tent/uploads/sites/43/2024/04/Kodeks-etyky-akademichnyh-vzayemvidnosyn-ta-dobrochesnosti-Natsionalnogo-tehnichnogo-universytetu-Harkivskiy-politehnichnyj-institut-.pdf](http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/metodotdel/wp-content/uploads/sites/28/2021/12/STZVO-HPI-3.01-2021-SSONP.-Tekstovi-dokumenty-u-sferi-navchalnogo-protsesu.-Zagalni-vimogi-do-vikonannya.pdf)

8. СТЗВО-ХПІ-3.01-2021. Система стандартів з організації навчально-го процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу. Загальні вимоги до виконання / Є. Сокол, Р. Мигущенко, С. Радогуз, В. Пильов, С. Хазієва, Г. Крупа. – На заміну СТЗВО-ХПІ-3.01-2018 ; [чинний з 2022-01-01]. Харків : НТУ «ХПІ», 2021. 52 с. URL: <http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/metodotdel/wp-content/uploads/sites/28/2021/12/STZVO-HPI-3.01-2021-SSONP.-Tekstovi-dokumenty-u-sferi-navchalnogo-protsesu.-Zagalni-vimogi-do-vikonannya.pdf>

Додаткова література

1. Shackelford J. F. Introduction to materials science for engineers. Pearson, 2023. 690 p.

2. McKenzie R. H. Condensed matter physics: a very short introduction. Oxford University Press, 2023. 176 p.

3. Basu S. Condensed matter physics: a modern perspective. Bristol : IOP Publishing, 2022. 380 p. URL: <https://dokumen.pub/condensed-matter-physics-a-modern-perspective-9780750330312-9780750330299-9780750330329-9780750330305.html>

4. Linden S., Meschede D. Condensed matter physics. Bonn : Universität Bonn, 2022. 199 p. URL: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwjkg6X5vrCPAxWGPRAIHT0-CD8QFnoECCAQAQ&url=https%3A%2F%2Fwww.pi.uni-bonn.de%2Flin-den%2Fen%2Fmedia%2Fcondensed-matter-physics.pdf%2F%40%40download%2Ffile%2FCondensed%2520Matter%2520Physics.pdf&usg=AOv-Vaw1RbkrvN4KbCBmWN42OU_WV&opi=89978449

ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ

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

ЗМІСТ

ВСТУП	3
1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ	5
2. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)	7
3. ДОДАТКОВІ МЕТОДИЧНІ МАТЕРІАЛИ ТА МІРКУВАННЯ ЗАЛЕЖНО ВІД ВАРІАНТУ	12
4. ВАРІАНТИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (РОЗРАХУНКОВИХ ЗАВДАНЬ) ЗА ПАРАМИ РІЗНИХ ЕЛЕМЕНТІВ	26
5. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)	27
ДОДАТОК 1	30
НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ	31
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	31
ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ	32

Навчальне видання

Методичні вказівки

до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання)
з навчальної дисципліни «Теорія конденсованого стану»
для студентів денної та заочної форм навчання
за спеціальністю 132 «Матеріалознавство»

Укладачі:

БІЛОЗЕРОВ Валерій Володимирович
ВОЛКОВ Олег Олексійович
ДРОБЕНЮК Тамара Іванівна
КНЯЗЄВА Ганна Олександрівна
КНЯЗЄВ Сергій Анатолійович
ПРОТАСЕНКО Тетяна Олександрівна
СУББОТІНА Валерія Валеріївна
СУББОТІН Олександр Володимирович
ТЕРЛЕЦЬКИЙ Олександр Семенович
ФЕДОРЕНКО Ганна Анатоліївна

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

В авторській редакції

План 2024 р., поз. 991

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