Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра фізики кристалів

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Декан фізичного факультету

Руслан ВОВК

“____” _____2024 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецкурс «**Вступ до теорії дифузії**»
(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти перший (бакалавр)

галузь знань 10 – природничі науки
(шифр і назва)

спеціальність 104 – фізика та астрономія
(шифр і назва)

освітня програма фізика
(шифр і назва)

спеціалізація
(шифр і назва)

вид дисципліни за вибором
(обов’язкова / за вибором)

факультет фізичний

2024/2025 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

30 серпня 2024 року, протокол № 9

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Богданов В. В., канд. фіз.- мат. наук, доцент кафедри фізики кристалів.

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 9 від 22 серпня 2024 року

Завідувач кафедри

_____ _____
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником проектної групи) _____
назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми
(керівник проектної групи)

Лазоренко О.В.

_____
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 1 від 28 серпня 2024 року

Голова методичної комісії

_____ _____
(підпис) (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Вступ до теорії дифузії**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки

_____перший (бакалавр)_____

(назва рівня вищої освіти)

напряму підготовки _____6.040203 – фізика _____

спеціалізації

_____

## 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є

ознайомити студентів із сучасним станом теорії дифузії та експериментальних методів дослідження дифузійніх процесів

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є
освоїти атомну та феноменологічну теорію дифузії, а також дифузійну кінетику

1.3. Кількість кредитів – 4

1.4. Загальна кількість годин – 120

| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни | |
|---|---|
| За вибором | |
| Денна форма навчання | Заочна (дистанційна) форма навчання |
| Рік підготовки | |
| 4-й | -й |
| Семестр | |
| 8-й | -й |
| Лекції | |
| 24 год. | год. |
| Практичні, семінарські заняття | |
| 24 год. | год. |
| Лабораторні заняття | |
| год. | год. |
| Самостійна робота | |
| 72 | год. |
| 1 курсова робота | |
| 2 контрольні роботи | |

1.6. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:
знати: механізми і кінетику дифузії у кристалах та сучасні методи її експериментального дослідження;
вміти: аналізувати процеси, що супроводжують дифузію в кристалічних тілах.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

**Розділ 1**. Мікроскопічна теорія дифузії в кристалах

1. Дифузія і віпадкові блукання. Коефіциент дифузії

2. Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Арреніуса

3. Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії

4. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв'язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом

5. Експериментальне визначення характеристик вакансій

6. Внесок комплексів вакансій у дифузію

7. Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі

8. Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів

9. Дифузія й електропровідність іонних кристалів

10. Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів

11. Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів.

12. Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах

**Розділ 2**. Кінетика дифузії в кристалах

13. Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік

14. Різні типи коефіцієнтів дифузії

15. Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік. Його рішення

16. Застосування загального розв'язку рівняння дифузії для конкретних умов експерименту: дифузія з нескінченно тонкого шару в необмежене тіло (дифузія з миттєвого джерела), дифузія крізь площину контакту двох напівнескінченних твердих тіл (дифузія із постійного джерела)

17. Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю N(x,t)

18. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефициента взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.

## 3. Структура навчальної дисципліни

| Назви роздлів і тем | Кількість годин | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Денна форма | | | | | |
| | Усього | у тому числі | | | | |
| | | л | п | л. | ін. | с.р. |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| **Розділ 1.** Мікроскопічна теорія дифузії в кристалах | | | | | | |
| 1. Дифузія і віпадкові блукання. Коефициент дифузії | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 2. Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 3. Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 4. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв'язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 5. Експериментальне визначення характеристик вакансій | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 6. Внесок комплексів вакансій у дифузію | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 7. Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 8. Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів | 7 | 1 | 1 | | | 4 |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 9. Дифузія й електропровідність іонних кристалів | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 10. Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 11. Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів. | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| 12. Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах | 7 | 1 | 1 | | | 4 |
| Разом за розділом 1 | 24 | 12 | 12 | | | |
| | | | | | | |
| **Розділ 2.** Кінетика дифузії в кристалах | | | | | | |
| 13. Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| 14. Різні типи коефіцієнтів дифузії | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| 15. Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік. Його рішення | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| 16. Застосування загального розв'язку рівняння дифузії для конкретних умов експерименту: дифузія з нескінченно тонкого шару в необмежене тіло (дифузія з миттєвого джерела), дифузія крізь площину контакту двох напівнескінченних твердих тіл (дифузія із постійного джерела) | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| 17. Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю N(x,t) | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| 18. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефициента взаємної дифузії методом Больцмана-Матано. | 7 | 2 | 1 | | | 4 |
| Разом за розділом 2 | 42 | 12 | 6 | | | 24 |
| **Усього годин** | 120 | 24 | 24 | | | 72 |

## 4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

| № з/п | Назва теми | Кількість годин |
|---|---|---|
| 1 | Дифузія і віпадкові блукання. Коефициент дифузії | 2 |
| 2 | Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса | 2 |
| 3 | Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії | 2 |
| 4 | Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. | 2 |
| 5 | Експериментальне визначення характеристик вакансій | 2 |
| 6 | Внесок комплексів вакансій у дифузію | 2 |
| 7 | Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. | 2 |
| 8 | Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів | 2 |
| 9 | Дифузія й електропровідність іонних кристалів | 2 |
| 10 | Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів | 2 |
| 11 | Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів | 2 |
| 12 | Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах | 2 |
| 13 | Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік | 2 |
| 14 | Різні типи коефіцієнтів дифузії | 2 |
| 15 | Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік | 2 |
| 16 | Застосування загального розв'язку рівняння дифузії для конкретних умов експерименту: дифузія з нескінченно тонкого шару в необмежене тіло (дифузія з миттєвого джерела), дифузія крізь площину контакту двох напівнескінченних твердих тіл (дифузія із постійного джерела) | 2 |

| | | |
|---|---|---|
| 17 | Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю N(x,t) | 2 |
| 18 | Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефициента взаємної дифузії методом Больцмана-Матано | 2 |
| | Разом | 24 |

## 5. Завдання для самостійної роботи

| № | З використанням літературних джерел із списка рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми: | Кількість годин |
|---|---|---|
| | Дифузія і віпадкові блукання. Коефициент дифузії | 4 |
| | Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса | 4 |
| | Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії | 4 |
| | Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. | 4 |
| | Експериментальне визначення характеристик вакансій | 4 |
| | Внесок комплексів вакансій у дифузію | 4 |
| | Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. | 4 |
| | Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів | 4 |
| | Дифузія й електропровідність іонних кристалів | 4 |
| | Зв’язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів | 4 |
| | Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів | 4 |
| | Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах | 4 |
| | Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік | 4 |
| | Різні типи коефіцієнтів дифузії | 4 |
| | Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік | 4 |
| | Застосування загального розв’язку рівняння дифузії для конкретних умов експерименту: дифузія з нескінченно тонкого шару в необмежене тіло (дифузія з миттєвого джерела), дифузія крізь площину контакту двох напівнескінченних твердих тіл (дифузія із постійного джерела) | 4 |
| | Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю N(x,t) | 4 |
| | Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефициента взаємної дифузії методом Больцмана-Матано | 4 |
| | Разом | 72 |

## 6. Індивідуальні завдання

Курсова робота: «Розрахунок концентраційної залежності коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано».

## 7. Методи контролю

контр. роб., екзамен.

Питання до контролю:

1. Дифузія і віпадкові блукання. Коефициент дифузії
2. Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Арреніуса
3. Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії
4. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв’язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом
5. Експериментальне визначення характеристик вакансій
6. Внесок комплексів вакансій у дифузію

7. Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі
8. Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів
9. Дифузія й електропровідність іонних кристалів
10. Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів
11. Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів.
12. Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах
13. Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік
14. Різні типи коефіцієнтів дифузії
15. Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік. Його рішення
16. Застосування загального розв'язку рівняння дифузії для конкретних умов експерименту: дифузія з нескінченно тонкого шару в необмежене тіло (дифузія з миттєвого джерела), дифузія крізь площину контакту двох напівнескінченних твердих тіл (дифузія із постійного джерела)
17. Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю N(x,t)
18. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефициента взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.

**Екзаменаційний білет № 1**

1. Яким чином виражається коефіцієнт дифузії через характеристики випадкових блукань?
2. Використовуючи закон діючих мас, розрахуйте рівноважну концентрацію вакансій по Шотткі в металах.

**Екзаменаційний білет № 2**

1. Розв'язок рівняння, що описує нестаціонарний дифузний потік з постійного джерела дифузії і спосіб експериментального вивчення кінетики дифузії в такій постановці.
2. Оцінити середній час блукань надлишкових вакансій в металі, якщо коефіцієнт їхньої дифузії $D_v \approx 10^{-14}$ м$^2$с$^{-1}$. Вважати, що єдиними стоками вакансій є дислокації, густина яких дорівнює $\rho \approx 10^{12}$ м$^{-2}$

**Екзаменаційний білет № 3**

1. Як і чому пов'язані коефіцієнти дифузії атомів і вакансій?
2. Чому експеримент з вивчення впливу концентрації Cd в кристалі NaCl на дифузію в ньому ізотопу Cl * дозволяє оцінити відносний внесок в дифузію і електропровідність саме комплексів «аніон-катионная бівакансія», а не комплексів «домішковий іон - вакансія»?

**Екзаменаційний білет № 4**

1. Ефект кореляції дифузійних стрибків.
2. Використовуючи кореляційні співвідношення, оцініть середню частоту дифузійних стрибків атомів в металі при предплавільной температурі, якщо частота теплових коливань атомів $\nu_0 \sim 10^{13}$с$^{-1}$.

**Екзаменаційний білет № 5**

1. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії.

2. Сотня фішок розміщена вздовж лінії. Кожна фішка з інтервалом $\Delta t = 2c$ зміщується перпендикулярно лінії на 2 мм випадковим чином в одному з двох напрямків (вгору або вниз). На якій відстані виявиться ансамбль фішок через 2 години? Розрахувати середню частоту перескоків і коефіцієнт дифузії. Відповідь дати в $м^2с^{-1}$.

**Екзаменаційний білет № 6**

1. Зв'язок між коефіцієнтом дифузії і провідністю іонних кристалів.
2. Коефіцієнт дифузії вуглецю в α-Fe $D = 8\cdot10^{-6} exp\left(-\frac{1eV}{kT}\right) м^2с^{-1}$. Обчислити ентропію міграції $S_м$, якщо частота теплових коливань атомів в залізі $\nu_0 = 5\cdot10^{13}\ с^{-1}$, довжина дифузійного стрибка вуглецю в гратці α-Fe дорівнює $2{,}5\cdot10^{-10}$ м.

**Екзаменаційний білет № 7**

1. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.
2. На поверхню кристала наносять тонкий шар радіоактивного ізотопу і відпалюють при температурі 800 °C протягом 2-х годин. На яку глибину проникне ізотоп в кристал, якщо його коефіцієнт дифузії в кристалі $D = 5\cdot10^{-5} exp(-1{,}8\ eV/kT)\ м^2с^{-1}$?

**Екзаменаційний білет № 8**

1. Як залежить провідність іонних кристалів від температури?
2. Використовуючи дифузійні кореляції, отримати рівняння Арреніуса і оцінити максимальне значення коефіцієнта дифузії поблизу температури плавлення для Cu.

**Екзаменаційний білет № 9**

1. Експериментальне визначення характеристик вакансій.
2. Водень поміщений в резервуар з товщиною стінок λ = 1мм. Резервуар знаходиться у вакуумі. Тиск водню в резервуарі p1 = 105Па. Розрахувати потік водню крізь стінку резервуара, якщо відомо, що розчинність водню в металі пропорційна $\sqrt{p}$ і становить $10^{-5}$ ат% при $p = 10^3$ Па, коефіцієнт дифузії водню в металі, $D = 10^{-9}\ м^2с^{-1}$, атомний об′єм металу $\omega \approx 10^{-29}\ м^3$.

**Екзаменаційний білет № 10**

1. Отримання рівняння Ейнштейна-Смолуховського в мікроскопічному і континуальному описах дифузії.
2. Коефіцієнт дифузії вуглецю в нікелі при кімнатній температурі $D = 10^{-24}\ м^2с^{-1}$. Обчислити ентропію активації дифузії, якщо ентальпія активації дифузії вуглецю в нікелі 1,2eV, частота теплових коливань атомів в гратці нікелю $\nu_0 = 5\cdot10^{13}\ с^{-1}$, довжина дифузійного стрибка вуглецю в гратці нікелю дорівнює $2{,}5\cdot10^{-10}$ м.

**Екзаменаційний білет № 11**

1. Точкові дефекти в іонних кристалах.
2. Довести, що функція $N(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] d\xi$ є рішенням другого рівняння Фіка, якщо $N(x, 0) = f(\xi)$ – вихідний розподіл концентрації атомів, що дифундують в міру

коефіцієнта дифузії D, який не залежить від концентрації. Отримати рішення для випадку дифузії з нескінченно тонкого джерела, а також з постійного джерела.

**Екзаменаційний білет № 12**

1. Різні типи коефіцієнтів дифузії.
2. Розрахувати середню відстань від вихідної точки, на яку зміститься велика група атомів, що зробила n стрибків довжиною *a* за час їхньої хаотичної теплової міграції в кристалі з кубічної симетрією.

## 8. Схема нарахування балів

| Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні | | | | | Екзамен | Сума |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Поточне тестування за темами | Контрольна робота | Поточне тестування за темами | Контрольна робота | Курсова робота | | |
| Т1-Т10 | | Т11-Т18 | | | | |
| 10 | 10 | 10 | 10 | 20 | 40 | 100 |

Т1, Т2 ... – теми розділів.

Поточне тестування з кожної теми складається з одного тестового завдання. Відповідь оцінюється в 1 бал.

Контрольна робота складається з 2-ох питань, відповідь на кожне оцінюється в 5 балів.

Екзаменаційний білет містить два пункти: 1 теоретичне питання і 1 задачу. Відповідь на кожен пункт оцінюється в 20 балів.

**Шкала оцінювання**

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка за національною шкалою | |
|---|---|---|
| | для екзамену | для заліку |
| 90 – 100 | відмінно | зараховано |
| 70-89 | добре | |
| 50-69 | задовільно | |
| 1-49 | незадовільно | не зараховано |

## 9. Рекомендована література

### Основна література


1. Manning J. Kinetics of atoms diffusion in crystals.– М.: Мир, 1971.
2. Дамаск А., Динс Дж. Точкові дефекти в металах.– М.: Мир, 1966.
3. Лідьярд А. Іонна провідність кристалів.– М.: ИЛ, 1962.
4. Bokstein B.S. Diffusion in metals.– М., 1978.
5. Гегузин Я. О. Дифузійна зона.– М.: Наука, 1979.
6. Бокштейн Б. С., Копецький Ч. В., Швіндлерман Л. С. Термодинаміка і кінетика меж зерен в металах.– М., 1986.
7. Гегузін Я. О., Кагановський Ю. С. Дифузійні процеси на поверхні кристала.– М.: Енергоатомвидавництво, 1984.
8. Kaur I., Gust B. Diffusion along grain and phase boundaries.–М., 1991.

9. Богданов В. В. Дифузія в кристалах. – ХНУ, 2006.

**Допоміжна література**

1. Термично активовані процеси в кристалах. Сбірник статей /Пер. з англ. під ред. А.Н. Орлова. – М.: Мир, 1973.
2. Парицька Л. Н. Дифузія і дифузійні процеси в кристалах: Тексти лекцій.– Част. 1.– Харків: ХДУ, 1991.
3. Adda Y., Philibert J. La diffusion dans les solides.– 1,2. Saclay, France, 1966.
4. Philibert J. Atom movements. Diffusion and mass transport in solids.– Les Editions de Physiqe, 1991.