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 «**Дифузія в реальних кристалах»**
(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____другий (магістр)_____
/

галузь знань _____10 – природничі науки_____
(шифр і назва)

спеціальність _____104 – фізика та астрономія_____
(шифр і назва)

освітня програма _____освітньо-професійна – 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 “**Дифузія в реальних кристалах**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки

_____**магістра**_____

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

спеціальності _____**104 – фізика та астрономія** _____

спеціалізації_____

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є:
ознайомити студентів із теорією дифузії в кристалах у зв’язку із наявністю дефектів кристалічної будови.
1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є:
в рамках фізики реальних кристалів вивчити процеси, що відбуваються в дифузійній зоні кристалічних систем та супроводжуючі їх ефекти кінетичного походження.

1.3. Кількість кредитів – 3

1.4. Загальна кількість годин – 90

Характеристика навчальної дисципліни	
за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-й
Семестр	
2-й	-й
Лекції	
24 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
	год.
Лабораторні заняття	
год.	год.
Самостійна робота	
66 год.	год.
Індивідуальні завдання	
2 контрольні роботи	

1.6. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:
знати: особливості дифузійних процесів у реальних кристалах та сучасні методи експериментального дослідження зв’язку дифузійних коефіцієнтів із сруктурним станом дифузійної зони;
вміти: аналізувати процеси, що супроводжують дифузію в реальних кристалічних тілах у зв’язку з наявністю в них мікродефектів таких як внутрішні та зовнішні поверхні, дислокації, інофазні включення та інше.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Процеси в дифузійній зоні.

1. Взаємна дифузія. Ефект Кіркендала. Аналіз Даркена.

2. Термодинамічний підхід до опису дифузії. Загальна феноменологічна теорія дифузії. Її застосування до описания конкретных явлений переноса.

3. Феноменологічні рівняння взаємної дифузії з урахуванням вакансій.

4. Одержання значень коефіцієнтів дифузії у конкретному вигляді.

5. Ефект Маннінга кореляції дифузійних стрибків атомів у вакансійному потоці.

6. Розподіл вакансій у дифузійній зоні. Конкуренція ефектів Кіркендала і Френкеля.

7. Розподіл напружень у дифузійній зоні. Вплив напружень на дифузію й супутні ефекти.

8. Дифузійні процеси у багатофазних системах. Зв'язок між фазовою діаграмою і розподілом концентрації в дифузійній зоні.

9. Дифузійні процеси у багатофазних системах: системи з обмеженою розчиністю у твердій фазі, системи з проміжними фазами.

10. Кінетика росту фаз у дифузійній зоні. Дифузійний режим. Межова кінетика

Розділ 2. Дифузія і дефекти кристалів.

11. Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж.

12. Дифузия вздовж поодинокої стаціонарної межі. Аналіз Фішера.

13. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.

14. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії. Параметри зерномежової дифузії при вакансийному механізмі. Умови застсовності аналізу Фішера.

15. Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж.

16. Дифузія рухомими межами. Міграція меж, спричинена межовою дифузією.

17. Структура вільної поверхні кристала. Поверхнева дифузія.

18. Експериментальне визначення параметрів поверхневої та об'ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні кристала.

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. Процеси в дифузійній зоні						
1. Взаємна дифузія. Ефект Кіркендала. Аналіз Даркена	5	1				4
2. Термодинамічний підхід до опису дифузії. Загальна феноменологічна теорія дифузії	5	2				3
3. Феноменологічні рівняння взаємної дифузії з урахуванням вакансій	5	1				4
4. Отримання значень коефіцієнтів дифузії в явному вигляді	5	1				4
5. Ефект Маннинга направленого потоку вакансій	5	2				3
6. Розподіл вакансій в дифузійної зоні. Конкуренція ефектів Кіркендалла і Френкеля	5	1				4
7. Розподіл напружень в дифузійної зоні. Їх вплив на дифузію і супутні їй ефекти	5	2				3
8. Зв'язок між фазової діаграмою і розподілом концентрації в дифузійної зоні при взаємній дифузії	5	2				3
9. Діфузійні процеси у багатофазних системах: системи з обмеженою розчіністю у твердій фазі, системи з проміжними фазами	5	2				3

10. Кінетика росту фаз у дифузійній зоні. Дифузійний режим. Межова кінетика	5	2				3
Разом за розділом 1	50	16				34
Розділ 2. Дифузія і дефекти кристалів						
11. Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж	5	1				4
12. Дифузия вздовж поодинокої стаціонарної межі. Аналіз Фішера	5	1				4
13. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії	5	1				4
14. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії. Параметри зерномежової дифузії при вакансийному механізмі. Умови застсовності аналізу Фішера.	5	1				4
15. Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж	5	1				4
16. Дифузія рухомими межами. Міграція меж, спричинена межовою дифузією	5	1				4
17. Структура вільної поверхні кристала. Поверхнева дифузія	5	1				4
18. Експериментальне визначення параметрів поверхневої та об’ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні кристала	5	1				4
Разом за розділом 2	40	8				32
Усього годин	90	24				66

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списка рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин
1	Взаємна дифузія. Ефект Кіркендала. Аналіз Даркена	4
2	Термодинамічний підхід до опису дифузії. Загальна феноменологічна теорія дифузії	3
3	Феноменологічні рівняння взаємної дифузії з урахуванням вакансій	4
4	Отримання значень коефіцієнтів дифузії в явному вигляді	4
5	Ефект Маннинга направленого потоку вакансій	3
6	6. Розподіл вакансій в дифузійної зоні. Конкуренція ефектів Кіркендалла і Френкеля	4
7	Розподіл напружень в дифузійної зоні. Їх вплив на дифузію і супутні їй ефекти	3
8	Зв'язок між фазової діаграмою і розподілом концентрації в дифузійної зоні при взаємній дифузії	3
9	Діфузійні процеси у багатофазних системах: системи з обмеженою розчіністю у твердій фазі, системи з проміжними фазами	3
10	Кінетика росту фаз у дифузійній зоні. Дифузійний режим. Межова кінетика	3
11	Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж	4
12	12. Дифузия вздовж поодинокої стаціонарної межі. Аналіз Фішера	4
13	Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії	4
14	Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії. Параметри зерномежової дифузії при вакансийному механізмі. Умови застсовності аналізу Фішера.	4
15	Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж	4

16	Дифузія рухомими межами. Міграція меж, спричинена межовою дифузією	4
17	Структура вільної поверхні кристала. Поверхнева дифузія	4
18	Експериментальне визначення параметрів поверхневої та об’ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні кристала	4
	Разом	66

6. Теми курсових робіт:

7. Методи контролю:

контр. роб., залік.

Питання до контролю:

1. Взаємна дифузія. Ефект Кіркендала. Аналіз Даркена.
2. Термодинамічний підхід до опису дифузії. Загальна феноменологічна теорія дифузії. Її застосування до описания конкретных явлений переноса.
3. Феноменологічні рівняння взаємної дифузії з урахуванням вакансій.
4. Отримання значень коефіцієнтів дифузії в явному вигляді.
5. Ефект Маннинга направленого потоку вакансій.
6. Розподіл вакансій в дифузійної зоні. Конкуренція ефектів Кіркендалла і Френкеля.
7. Розподіл напружень в дифузійної зоні. Їх вплив на дифузію і супутні їй ефекти.
8. Зв'язок між фазової діаграмою і розподілом концентрації в дифузійної зоні при взаємній дифузії.
9. Діфузійні процеси у багатофазних системах: системи з обмеженою розчіністю у твердій фазі, системи з проміжними фазами.
10. Кінетика росту фаз у дифузійній зоні. Дифузійний режим. Межова кінетика.
11. Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж.
12. Дифузія уздовж поодинокої стаціонарної межі. аналіз Фішера.
13. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежевої дифузії.
14. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежевої дифузії. Параметри зерномежевої дифузії при вакансійному механізмі. Умови застосовності аналізу Фішера.
15. Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж.
16. Дифузія рухомими межами. Дифузійно-індукована міграція меж зерен.
17. Структура вільної поверхні кристала. Дифузія уздовж поверхні. Визначення параметрів поверхневої дифузії методом перенесення маси.
18. Експериментальне визначення параметрів поверхневої і об'ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні.

Заліковий білет № 1

1. Взаємна дифузія. Ефект Кіркендала. Аналіз Даркена.
2. Знайти кінетичний закон зростання шару оксиду МеО на поверхні металу в припущенні, що оксид зростає в результаті дифузії металевих іонів через шар оксиду на зовнішню поверхню, де відбувається окислення.

Заліковий білет № 2

1. Термодинамічний підхід до опису дифузії. Загальна феноменологічна теорія дифузії. Її застосування до опису конкретних явищ переносу.

2. Отримайте вираз для товщини шару інтерметаліду, що формується при взаємній дифузії двох металів, за якої відбувається зміна кінетичного закону зростання сполуки.

Заліковий білет № 3

1. Феноменологічні рівняння взаємної дифузії з урахуванням вакансій.
2. Водень поміщений в резервуар з товщиною стінок $\lambda = 1$ мм. Резервуар знаходиться у вакуумі. Тиск водню в резервуарі $p_1 = 10^5$ Па. 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^{2}с$^{-1}$, атомний об′єм металу $\omega \approx 10^{-29}$ м^3.

Заліковий білет № 4

1. Отримання значень коефіцієнтів дифузії в явному вигляді.
2. У дифузійний контакт приведено речовини А і В. Після відпалу виявилося, що крива розподілу $C_B(x)$ симетрична щодо точки $C_B(x_0)$, де x_0 – координата площині вихідного контакту. Що можна сказати про концентраційну залежність коефіцієнта дифузії D_B? Якою функцією описується $C_B(x)$?

Заліковий білет № 5

1. Ефект Маннинга направленого потоку вакансій.
2. У дифузійній зоні системи А-В зростає шар сполуки, товщина якого λ лінійно залежить від часу відпалу. Через 10 годин відпалу концентрації В на різних берегах шару виявилися рівними $C_1 = 0{,}65$: $C_2 = 0{,}66$, а його товщина $\lambda = 20$ мкм. Оцінити кінетичний коефіцієнт зростання сполуки, якщо взаємна дифузія А–В відбувається униполярно.

Заліковий білет № 6

1. Розподіл вакансій в дифузійної зоні. Конкуренція ефектів Кіркендалла і Френкеля.
2. Після 10-годинного відпалу при 200 °С бікрістала Zn з мідною плівкою, що напилена на його торець, перпендикулярний площині міжзеренної межі, виміряли розподіл концентрації Cu методом зняття шарів, паралельних площині джерела дифузії. З використанням рішення Фішера обчислили коефіцієнт зерномежевої $D_b \approx 10^{-11}$ м^{2}с$^{-1}$ і об′ємної $D \approx 10^{-16}$ м^{2}с$^{-1}$ дифузії. Чи правомірно було використовувати рішення Фішера в даному випадку?

Заліковий білет № 7

1. Розподіл напружень у дифузійній зоні. Вплив напружень на дифузію й супутні ефекти.
2. Було проведено дифузний відпал зразків двох типів: 1-й складався з латуні (Cu + 30ат.% Zn) і відпалювався у вакуумі, 2-й являв собою зразок бутербродного типу, складений з міді та латуні. У процесі відпалу при $T = 900$ °С відбувалася сублімація цинку з 1-го зразка в вакуум і взаємна дифузія цинку і міді в 2-му зразку. Після 10-ти годинного відпалу були виміряні розподілення концентрації цинку в дифузійних зонах двох зразків. Яким способом слід обробити результати експерименту, щоб отримати значення коефіцієнтів дифузії, що характеризують кінетику дифузійних процесів в кожному зі зразків?

Заліковий білет № 8

1. Зв'язок між фазової діаграмою і розподілом концентрації в дифузійної зоні при взаємній дифузії.

2. З термодинаміки незворотних процесів випливає, що в ізотермічних умовах дифузний потік визначається співвідношенням $j = -L\nabla\mu$, де L – кінетичний коефіцієнт, $\nabla\mu$ – градієнт хімічного потенціалу дифундуючих частинок. Виразити кінетичний коефіцієнт через коефіцієнт дифузії D і рухливість B.

Заліковий білет № 9

1. Дифузійні процеси у багатофазних системах: системи з обмеженою розчиністю у твердій фазі, системи з проміжними фазами.
2. Оцінити коефіцієнт дифузії вакансій в золоті при 40 °C, скориставшись емпіричним правилом $H = 18kT_m$ і вважаючи, що енергія утворення вакансій $H_v = 0{,}87$ eV, предекспонентний множник $D_0 = 2\cdot10^{-5}$ м^{2}с$^{-1}$, температура плавлення золота $T_m = 1336$ K.

Заліковий білет № 10

1. Кінетика росту сполук у дифузійний зоні. Різні режими росту. Узгодження дифузійних і межових потоків.
2. З термодинаміки незворотних процесів випливає, що в ізотермічних умовах дифузний потік визначається співвідношенням $j = -L\nabla\mu$, де L – кінетичний коеффіцієнт, $\nabla\mu$ – градієнт хімічного потенціалу дифундуючих частинок. Виразити кінетичний коефіцієнт через коефіцієнт дифузії D і рухливість B.

Заліковий білет № 11

1. Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж.
2. В якому режимі за класифікацією Харрісона відбувається дифузія домішки в бікрісталл, якщо кут при вершині ізоконцентраціонного контуру поблизу межі зерен дорівнює 160°?

Заліковий білет № 12

1. Дифузия вздовж поодинокої стаціонарної межі. Аналіз Фішера.
2. Отримайте вираз для товщини шару інтерметаліду, що формується за взаємної дифузії двох металів, при якої відбувається зміна кінетичного закону зростання сполуки.

Заліковий білет № 13

1. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.
2. Водень поміщений в резервуар з товщиною стінок $\lambda = 1$мм. 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^{2}с$^{-1}$, атомний об′єм металу $\omega \approx 10^{-29}$ м^3.

Заліковий білет № 14

1. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежевої дифузії. Параметри зерномежевої дифузії при вакансійному механізмі. Умови застосовності аналізу Фішера.
2. У дифузійний контакт приведено речовини A і B. Після відпалу виявилося, що крива розподілу $C_B(x)$ симетрична щодо точки $C_B(x_0)$, де x_0 – координата площині вихідного контакту. Що можна сказати про концентраційну залежність коефіцієнта дифузії D_B? Якою функцією описується $C_B(x)$?

Заліковий білет № 15

1. Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж.

2. У дифузійній зоні системи А-В зростає шар сполуки, товщина якого λ лінійно залежить від часу відпалу. Через 10 годин відпалу концентрації В на різних берегах шару виявилися рівними $C_1 = 0{,}65$: $C_2 = 0{,}66$, а його товщина $\lambda = 20$ мкм. Оцінити кінетичний коефіцієнт зростання сполуки, якщо взаємна дифузія А–В відбувається униполярно.

Заліковий білет № 16

1. Дифузія рухомими межами. Дифузійно-індукована міграція меж зерен.
2. Після 10-годинного відпалу при 200 °С бікрісталла Zn з мідною плівкою, що напилена на його торець, перпендикулярний площині межзеренної межі, виміряли розподіл концентрації Cu методом зняття шарів, паралельних площині джерела дифузії. З використанням рішення Фішера обчислили коефіцієнт зерномежевої $D_b \approx 10^{-11}$ м^{2}с$^{-1}$ і об′ємної $D \approx 10^{-16}$ м^{2}с$^{-1}$ дифузії. Чи правомірно було використовувати рішення Фішера в даному випадку?

Заліковий білет № 17

1. Структура вільної поверхні кристала. Дифузія уздовж поверхні. Визначення параметрів поверхневої дифузії методом перенесення маси.
2. Було проведено дифузний відпал зразків двох типів: 1-й складався з латуні (Cu + 30ат.% Zn) і відпалювався у вакуумі, 2-й являв собою зразок бутербродного типу, складений з міді та латуні. У процесі відпалу при $T = 900$ °С відбувалася сублімація цинку з 1-го зразка в вакуум і взаємна дифузія цинку і міді в 2-му зразку. Після 10-ти годинного відпалу були виміряні розподілення концентрації цинку в дифузійних зонах двох зразків. Яким способом слід обробити результати експерименту, щоб отримати значення коефіцієнтів дифузії, що характеризують кінетику дифузійних процесів в кожному зі зразків?

Заліковий білет № 18

1. Експериментальне визначення параметрів поверхневої і об'ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні.
2. З термодинаміки незворотних процесів випливає, що в ізотермічних умовах дифузний потік визначається співвідношенням $j = -L\nabla\mu$, де L – кінетичний коеффіцієнт, $\nabla\mu$ – градієнт хімічного потенціалу дифундуючих частинок. Виразити кінетичний коефіцієнт через коефіцієнт дифузії D і рухливість B.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль		Залік	Сума
Контрольна робота за темами Т1-Т10	Контрольна робота за темами Т11-Т18		
30	30	40	100

Т1, Т2 ... – теми розділів

Контрольна робота з кожної теми складається з двох питань. Відповідь на кожне питання оцінюється в 1,5 бала.

Залік проводиться у письмовій формі. Заліковий 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	

70-89	добре	зараховано
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована 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.