

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра фізики кристалів

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Декан  
фізичного факультету

Руслан БОБК  
“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецкурс «Дифузія дефектами кристала»  
(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-наукова – фізика \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
вид дисципліни \_\_\_\_\_ за вибором \_\_\_\_\_  
(обов’язкова / за вибором)  
факультет \_\_\_\_\_ фізичний \_\_\_\_\_

2023/2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

30 серпня 2023 року, протокол № 6

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

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 6 від 28 серпня 2023 року

Завідувач кафедри Гриньов Б. В.

\_\_\_\_\_  
(підпис)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником проектної групи) \_\_\_\_\_

назва освітньої програми

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

Бойко Ю.І.

\_\_\_\_\_  
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 7 від 29 серпня 2023 року

Голова методичної комісії

Макаровський М.О.

\_\_\_\_\_  
(підпис)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Дифузія дефектами кристала**” складена відповідно до освітньо-наукової 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 – 6

1.4. Загальна кількість годин – 180

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

1.6. Згідно з вимогами освітньо-наукової програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: особливості дифузійних процесів у реальних кристалах та сучасні методи експериментального дослідження зв'язку дифузійних коефіцієнтів із структурним станом дифузійної зони;

вміти: аналізувати процеси, що супроводжують дифузію в реальних кристалічних тілах у зв'язку з наявністю в них мікрodefektів таких як внутрішні та зовнішні поверхні, дислокації, інофазні включення та інше.

### 2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Дифузія уздовж меж зерен у кристалах.

1.1. Розвиток уявлень про структуру меж зерен.

- 1.2. Дифузійні властивості меж.
- Розділ 2. Теорія дифузії уздовж одиначної стаціонарної межі.
- 1.1. Метод Фішера розділення дифузійних потоків.
- 2.2. Дифузія уздовж міжфазової межі.
- Розділ 3. Визначення параметрів дифузії межами зерен.
- 3.1. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.
- 3.2. Умови застосовності розв'язку Фішера.
- 3.3. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії.
- 3.4. Про механізм дифузії межами.
- Розділ 4. Дифузія в полікристалах.
- 4.1. Різні режими кінетики дифузії у полікристалах.
- 4.2. Дифузія рухомими межами.
- 4.3. Міграція меж, спричинена межевою дифузією.
- Розділ 5. Дифузія уздовж дислокацій.
- 5.1. Математичний опис дифузії дислокаціями.
- 5.2. Різні кінетичні режими дифузії в монокристалах.
- Розділ 6. Дифузія уздовж вільної поверхні кристала.
- 6.1. Структура поверхні.
- 6.2. Поверхнева дифузія.
- 6.3. Визначення параметрів дифузії поверхнею.
- 6.4. Експериментальне визначення дифузійних параметрів методом перенесення маси.

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	л.	ін.	с.р.	
1	2	3	4	5	6	7
<b>Розділ 1. Дифузія уздовж меж зерен у кристалах.</b>						
1. Розвиток уявлень про структуру меж зерен.	11	2		3		4,5
2. Дифузійні властивості меж.	11	2		3		4,5
Разом за розділом 1	22	4		6		9
<b>Розділ 2. Теорія дифузії уздовж одиначної стаціонарної межі.</b>						
3. Метод Фішера розділення дифузійних потоків.	11	2		3		3
4. Дифузія уздовж міжфазової межі.	4	1		3		3
Разом за розділом 2	15	3		6		6
<b>Розділ 3. Визначення параметрів дифузії межами зерен.</b>						
5. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.	11	1		3		4,5
6. Умови застосовності розв'язку Фішера.	11	1		3		4,5
7. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії.	11	1		3		4,5
8. Про механізм дифузії межами.	11	1		2		4,5
Разом за розділом 3	44	4		11		24

<b>Розділ 4. Дифузія в полікристалах.</b>					
9. Різні режими кінетики дифузії у полікристалах.	10	2	3	4	
10. Дифузія рухомими межами.	11	2	3	5	
11. Міграція меж, спричинена межевою дифузією.	12	2	3	5	
Разом за розділом 4	33	6	9	14	
<b>Розділ 5. Дифузія уздовж дислокацій.</b>					
12. Математичний опис дифузії дислокаціями.	11	1	3	4,5	
13. Різні кінетичні режими дифузії в монокристалах.	11	1	3	4,5	
Разом за розділом 5	22	2	6	9	
<b>Розділ 6. Дифузія уздовж вільної поверхні кристала.</b>					
14. Структура поверхні.	11	2	3	4,5	
15. Поверхнева дифузія.	11	1	3	4,5	
16. Визначення параметрів дифузії поверхнею.	11	2	3	4,5	
17. Експериментальне визначення дифузійних параметрів методом перенесення маси.	11	1	3	4,5	
Разом за розділом 6	44	6	12	18	
<b>Усього годин</b>					
	180	25	50	105	

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

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розвиток уявлень про структуру меж зерен.	3
2	Дифузійні властивості меж.	3
3	Метод Фішера розділення дифузійних потоків.	3
4	Дифузія уздовж міжфазової межі.	3
5	Експериментальні методи визначення параметрів зерномежевої дифузії.	3
6	Умови застосовності розв'язку Фішера.	3
7	Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежевої дифузії.	3
8	Про механізм дифузії межами.	2
9	Різні режими кінетики дифузії у полікристалах.	3
10	Дифузія рухомими межами.	3
11	Міграція меж, спричинена межевою дифузією.	3
12	Математичний опис дифузії дислокаціями.	3
13	Різні кінетичні режими дифузії в монокристалах.	3
14	Структура поверхні.	3
15	Поверхнева дифузія.	3
16	Визначення параметрів дифузії поверхнею.	3
17	Експериментальне визначення дифузійних параметрів методом перенесення маси.	3
	Разом	50

#### 5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списку рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин
1	Розвиток уявлень про структуру меж зерен.	4,5

2	Дифузійні властивості меж.	4,5
3	Метод Фішера розділення дифузійних потоків.	3
4	Дифузія уздовж міжфазової межі.	3
5	Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.	4,5
6	Умови застосовності розв'язку Фішера.	4,5
7	Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії.	4,5
8	Про механізм дифузії межами.	4,5
9	Різні режими кінетики дифузії у полікристалах.	4
10	Дифузія рухомими межами.	4
11	Міграція меж, спричинена межевою дифузією.	5
12	Математичний опис дифузії дислокаціями.	4,5
13	Різні кінетичні режими дифузії в монокристалах.	4,5
14	Структура поверхні.	4,5
15	Поверхнева дифузія.	4,5
16	Визначення параметрів дифузії поверхнею.	4,5
17	Експериментальне визначення дифузійних параметрів методом перенесення маси.	4,5
	Разом	105

## 6. Тема курсової роботи

Дифузійно-індукована міграція меж зерен.

### 7. Методи контролю:

контр. роб., екзамен.

### Питання до контролю:

1. Сучасні уявлення про структуру меж зерен. Дифузія уздовж меж.
2. Дифузія уздовж поодинокі стаціонарної межі. аналіз Фішера.
3. Експериментальні методи визначення параметрів зерномежової дифузії.
4. Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежової дифузії. Параметри зерномежової дифузії при вакансійному механізмі. Умови застосовності аналізу Фішера.
5. Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж.
6. Дифузія рухомими межами. Дифузійно-індукована міграція меж зерен.
7. Структура вільної поверхні кристала. Дифузія уздовж поверхні. Визначення параметрів поверхневої дифузії методом перенесення маси.
8. Експериментальне визначення параметрів поверхневої і об'ємної дифузії методом перенесення маси вздовж вільної поверхні.

### Екзаменаційний білет № 1

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 ізоконцентраційного контуру поблизу межі зерен дорівнює  $80^\circ$ ?

### Екзаменаційний білет № 2

1. Дифузія вздовж поодинокі стаціонарної межі. Аналіз Фішера.

- Отримайте вираз для товщини шару інтерметаліду, що формується за взаємної дифузії двох металів, при якій відбувається зміна кінетичного закону зростання сполуки.

#### Екзаменаційний білет № 3

- Експериментальні методи визначення параметрів зерномежевої дифузії.
- Водень поміщений в резервуар з товщиною стінок  $\lambda = 1$  мм. Резервуар знаходиться у вакуумі. Тиск водню в резервуарі  $p_1 = 105$  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<sup>2</sup>с<sup>-1</sup>, атомний об'єм металу  $\omega \approx 10^{-29}$  м<sup>3</sup>.

#### Екзаменаційний білет № 4

- Орієнтаційна залежність коефіцієнта зерномежевої дифузії. Параметри зерномежевої дифузії при вакансійному механізмі. Умови застосовності аналізу Фішера.
- У дифузійний контакт приведено речовини А і В. Після відпалу виявилось, 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  $C_B(x)$ ?

#### Екзаменаційний білет № 5

- Дифузія в полікристалах. Класифікація дифузійних режимів для стаціонарних і рухомих меж.
- У дифузійній зоні системи А-В зростає шар сполуки, товщина якого  $\lambda$  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 уніполярно.

#### Екзаменаційний білет № 6

- Дифузія рухомими межами. Дифузійно-індукована міграція меж зерен.
- Після 10-годинного відпалу при 200 °С бікрісталла Zn з мідною плівкою, що напилена на його торець, перпендикулярній 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<sup>2</sup>с<sup>-1</sup> і об'ємної  $D \approx 10^{-16}$  м<sup>2</sup>с<sup>-1</sup> дифузії. Чи правомірно було використовувати рішення Фішера в даному випадку?

#### Екзаменаційний білет № 7

- Структура вільної поверхні кристала. Дифузія уздовж поверхні. Визначення параметрів поверхневої дифузії методом перенесення маси.
- Було проведено дифузійний 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?

#### Екзаменаційний білет № 8

- 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 коефіцієнт,  $\nabla\mu$  – градієнт хімічного потенціалу дифундуючих частинок. Виразити кінетичний коефіцієнт через коефіцієнт дифузії  $D$  і рухливість  $B$ .

### 8. Схема нарахування балів

Поточний контроль		Екзамен	Сума
Контрольна робота за темами Т1-Т10	Контрольна робота за темами Т11-Т17		
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.

Екзамен проводиться у письмовій формі. 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.– Elsevier, 1971.
2. A. C. Damask, G. J. Dienes, Point Defects in Metals, Gordon and Breach, New York, 1963.
3. A. B. Lidiard, Ionic Conductivity. Encyclopedia of Physics, Springer - Verlag , Berlin , 1957.
4. Bokstein B.S. Diffusion in metals, Springer Science, 1978.
5. Гегузин Я. О. Дифузійна зона.– Київ, Наукова думка, 1979.
6. Kaur I., Gust B. Diffusion along grain and phase boundaries.– Elsevier, 1991.
7. Богданов В. В. Дифузія в кристалах. – ХНУ, 2006.
7. P. G. Shewmon, Diffusion in Solids, J. Williams Book Company, 1983.
8. H. Mehrer, Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes Springer Science & Business Media, 2007.

### Допоміжна література



1. Парицька Л. Н. Дифузія і дифузійні процеси в кристалах: Тексти лекцій.– Част. 1.– Харків: ХДУ, 1991.
2. Adda Y., Philibert J. La diffusion dans les solides.– 1,2. Saclay, France, 1966.
3. Philibert J. Atom movements. Diffusion and mass transport in solids.– Les Editions de Physique, 1991.