

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи ХНУ імені В.Н.Каразіна

“ _____ ” _____ 2020 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецкурс «**Порівняльний опис термічно-активованої та квантово-тунельної
дифузії в 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-наукова – фізика** _____
(шифр і назва)
спеціалізація _____
(шифр і назва)
вид дисципліни _____ **за вибором** _____
(обов'язкова / за вибором)
факультет _____ **фізичний** _____

2020/2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

28 серпня 2020 року, протокол № 5

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

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 7 від 18 червня 2020 року

Завідувач кафедри Гриньов Б. В.

(підпис)

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 10 від 25 червня 2020 року

Голова методичної комісії

(підпис)

(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Порівняльний опис термічно-активованої та квантово-тунельної дифузії в кристалах**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки

_____другий (магістр)_____

(назва рівня вищої освіти)

напряму підготовки _____ **104 – фізика та астрономія** _____
спеціалізації _____

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є

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

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є

освоїти атомну та феноменологічну теорію дифузії, а також дифузійну кінетику

1.3. Кількість кредитів – 6

1.4. Загальна кількість годин – 180

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	-й
Семестр	
1-й	-й
Лекції	
36 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
26 год.	год.
Лабораторні заняття	
72 год.	год.
Самостійна робота	
72 год.	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 випадкові блукання. Коефіцієнт 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 нестационарний 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 напівнескінчених 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 коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.

Розділ 3. Квантова дифузія.

19. Дифузія квазічастинок у твердих розчинах He3-He4.
20. Коефіцієнт дифузії квазічастинок.
21. Зіткнення квазічастинок в ґратковому просторі.
22. Канонічне перетворення гамільтониана (I.I)
23. Коефіцієнт квантової дифузії домішок He3 в твердому He4.
24. Квазічастинки у квантових кристалах.
25. Пов'язані стани квазічастинок у квантових кристалах.
26. Бозе-конденсація зв'язаних станів квазічастинок у квантових кристалах.
27. "Надрухливість" зв'язаних станів квазічастинок у квантовому кристалі.
28. Упорядкування водню в металі.
29. Квазічастинки у двовимірних квантових кристалах.
30. Монослої ізотопів гелію на графітовій підкладці.
31. Розсіювання квазічастинок у двовимірному ґратковому просторі.
32. Особливості поведінки коефіцієнта дифузії вакансіонів.
33. Зв'язані стани квазічастинок у двовимірних квантових кристалах.
34. Термодинаміка двовимірного квантового кристала.

35. Дифузія, індукована вакансіями у двовимірних квантових кристалах.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього го	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 випадкові блукання. Коефіцієнт дифузії	6	2		2		2
2. Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса	6	2		2		2
3. Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії	6	2		2		2
4. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв'язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом	6	2		2		2
5. Експериментальне визначення характеристик вакансій	6	2		2		2
6. Внесок комплексів вакансій у дифузію	6	2		2		2
7. Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі	6	2		2		2
8. Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів	6	2		2		2
9. Дифузія й електропровідність іонних кристалів	6	2		2		2
10. Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів	6	2		2		2
11. Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів.	6	2		2		2
12. Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах	6	2		2		2
Разом за розділом 1	72	24		24		24
Розділ 2. Кінетика дифузії в кристалах						
13. Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік	6	2		2		2
14. Різні типи коефіцієнтів дифузії	6	2		2		2
15. Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік. Його рішення	6	2		2		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)	6	2		2		2
17. Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю $N(x,t)$	6	2		2		2
18. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.	6	2		2		2
Разом за розділом 2	36	12		12		12
Розділ 3. Квантова дифузія.						

19. Дифузія квазічастинок у твердих розчинах He3-He4.	6		3	3
20. Коефіцієнт дифузії квазічастинок.	6		3	3
21. Зіткнення квазічастинок в ґратковому просторі.	6		3	3
23. Коефіцієнт квантової дифузії домішок He3 в твердому He4.	6		3	3
24. Квазічастинки у квантових кристалах.	6		3	3
25. Зв'язані стани квазічастинок у квантових кристалах.	6		3	3
26. Бозе-конденсація зв'язаних станів квазічастинок у квантових кристалах.	6		3	3
27. "Надрухливість" зв'язаних станів квазічастинок у квантовому кристалі.	6		3	3
28. Упорядкування водню в металі.	6		3	3
29. Квазічастинки у двовимірних квантових кристалах.	6		3	3
31. Розсіювання квазічастинок у двовимірному ґратковому просторі.	6		3	3
32. Особливості поведінки коефіцієнта дифузії вакансіонів.	6		3	3
Разом за розділом 3	72		36	36
Контрольна робота				2
Курсова робота				1
Усього годин	180	36	72	72

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Вивчення процесу збираючої рекристалізації у полікристалах заліза	14
2	Спікання порошкових пресовок	14
3	Дифузійний розпад тонких металевих плівок на твердій підкладці	14
4	Вивчення процесу взаємної дифузії в системі Cu-Ni	15
5	Релаксація напруг, що виникають у дифузійній зоні, під час формування інтерметаліду в системі Cd-Ni	15
	Разом	72

5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списку рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин
1	Дифузія і випадкові блукання. Коефіцієнт дифузії	2
2	Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Арреніуса	2
3	Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії	2
4	Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв'язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом	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. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі	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. Його рішення	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 коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.	2
19	. Дифузія квазічастинок у твердих розчинах He3-He4.	3
20	. Коефіцієнт дифузії квазічастинок.	3
21	Зіткнення квазічастинок в ґратковому просторі.	3
22	Коефіцієнт квантової дифузії домішок He3 в твердому He4.	3
23	Квазічастинки у квантових кристалах.	3
24	Зв'язані стани квазічастинок у квантових кристалах.	3
25	Бозе-конденсація зв'язаних станів квазічастинок у квантових кристалах.	3
26	"Надрухливість" зв'язаних станів квазічастинок у квантовому кристалі.	3
27	Упорядкування водню в металі.	3
28	Квазічастинки у двовимірних квантових кристалах.	3
29	Розсіювання квазічастинок у двовимірному ґратковому просторі.	3
30	Особливості поведінки коефіцієнта дифузії вакансіонів.	3
	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 випадкові блукання. Коефіцієнт 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 нестационарний 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 коефіцієнта 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 Шоттки в металах.

Екзаменаційний білет № 2

1. Розв'язок рівняння, що описує нестационарний дифузійний 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 $D_v \approx 10^{-14} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$. Вважати, що єдиними стоками вакансій є дислокації, густина яких дорівнює $\rho \approx 10^{12} \text{ м}^{-2}$

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-катионна 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 предплавильной температурі, якщо частота теплових коливань атомів $\nu_0 \sim 10^{13} \text{с}^{-1}$.

Екзаменаційний білет № 5

1. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії.
2. Сотня фішок розміщена вздовж лінії. Кожна фішка з інтервалом $\Delta t = 2 \text{с}$ 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 $\text{м}^2 \text{с}^{-1}$.

Екзаменаційний білет № 6

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

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 $D = 5 \cdot 10^{-5} \exp(-1,8 \text{eV}/kT) \text{м}^2 \text{с}^{-1}$?

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 $\lambda = 1 \text{мм}$. Резервуар знаходиться у вакуумі. Тиск водню в резервуарі $p_1 = 105 \text{Па}$. Розрахувати потік водню крізь стінку резервуара, якщо відомо, що розчинність водню в металі пропорційна \sqrt{p} і становить $10^{-5} \text{ат}\%$ при $p = 10^3 \text{Па}$, коефіцієнт дифузії водню в металі, $D = 10^{-9} \text{м}^2 \text{с}^{-1}$, атомний об'єм металу $\omega \approx 10^{-29} \text{м}^3$.

Екзаменаційний білет № 10

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

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	Разом		
T1-T10		T11-T18				
20	10	20	10	60	40	100

T1, T2 ... – теми розділів.

Поточне тестування з кожної теми складається з двох тестових завдань. Відповідь на кожне завдання 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. Шьюмон П. Диффузия в твердых телах.– М.: Металлургия, 1966.
2. Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах.– М.: Мир, 1971.
3. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах.– М.: Мир, 1966.
4. Лидьярд А. Ионная проводимость кристаллов.– М.: ИЛ, 1962.
5. Болтакс Б. И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках.– Л., Наука, 1972.
6. Боровский И. Б., Гуров К. П., Марчукова И. Д., Угасте Ю. Э. Процессы взаимной диффузии в сплавах.– М.: Наука, 1973.

7. Бокштейн Б. С., Бокштейн С. З., Жуховицкий А. А. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах.– М.: Металлургия, 1974.
8. Бокштейн Б. С. Диффузия в металлах.– М.: Металлургия, 1978.
9. Гегузин Я. Е. Диффузионная зона.– М.: Наука, 1979.
10. Бокштейн Б. С., Копецкий Ч. В., Швиндлерман Л. С. Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах.– М.: Металлургия, 1986.
11. Гегузин Я. Е., Кагановский Ю. С. Диффузионные процессы на поверхности кристалла.– М.: Энергоатомиздат, 1984.
12. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зерен и фаз.–М., 1991.
13. Богданов В. В. Диффузия в кристаллах. – ХНУ, 2006.
14. 1. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. Квантовая теория дефектов в кристаллах. - ЖЭТФ, 1969, т.56, с.2057-2068.
15. 2. Андреев А.Ф. Диффузия в квантовых кристаллах. УФН, 1976, т.118, с.251-271.
16. 4. Григорьев В.Н., Есельсон Б.Н., Михеев В.А. Квантовая диффузия примесей He3 в твердом He4. Письма в ЖЭТФ, 1973, т.17,с.25-28.

Допоміжна література

1. Термически активированные процессы в кристаллах. Сборник статей /Пер. с англ. под ред. А.Н. Орлова. – М.: Мир, 1973.
2. Парицкая Л. Н. Диффузия и диффузионные процессы в кристаллах: Тексты лекций.– Часть 1.– Харьков: ХГУ, 1991.
3. Малкович Р. Ш. Математика диффузии в полупроводниках.– СПб.: Наука, 1999.
4. Adda Y., Philibert J. La diffusion dans les solides.– 1,2. Saclay, France, 1966.
5. Philibert J. Atom movements. Diffusion and mass transport in solids.– Les Editions de Physique, 1991.