

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан фізичного факультету

Руслан ВОВК



“ ” 2025 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецкурс «Вступ до теорії дифузії»

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____ перший (бакалаврський) _____
галузь знань _____ 10 – Природничі науки, математика та статистика _____
(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 _____

2025/2026 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

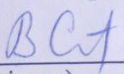
29 серпня 2025 року, протокол № 10

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

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол №9 від 22 серпня 2025 року

В.о. завідувача кафедри:



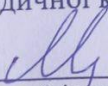
(підпис)

Владислав СЕМІНЬКО
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол №5 від 28 серпня 2025 року

Голова методичної комісії



(підпис)

Микола МАКАРОВСЬКИЙ
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Вступ до теорії дифузії**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки _____ перший (бакалавр) _____
напряму _____ Е5 – фізика та астрономія _____

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 – 4

1.4. Загальна кількість годин – 48

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	
год.	год.
1 курсова робота	
2 контрольні роботи	

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

Компетентності, що мають бути сформовані:

- **Інтегральна:** Здатність розв’язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується складністю та невизначеністю умов. (ІК)
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК 2)
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій. (ЗК 3)
- Здатність приймати обґрунтовані рішення. (ЗК 5)
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт. (ЗК 8)
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов’язків. (ЗК 9)
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово. (ЗК 12)

- Здатність спілкуватися іноземною мовою. (ЗК 13)
- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії. (ФК 1)
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту. (ФК 7)
- Здатність виконувати теоретичні та експериментальні дослідження автономно та у складі наукової групи. (ФК 8)
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації. (ФК 9)
- Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей. (ФК 10)
- Усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних та астрономічних досліджень. (ФК 12)
- Орієнтація на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук. (ФК 13)
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК 14)

1.7. Перелік результатів навчання, що формує дана дисципліна

Програмні результати навчання

- Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії. (ПРН 1)
- Знати і розуміти фізичні основи астрономічних явищ: аналізувати, тлумачити, пояснювати і класифікувати будову та еволюцію астрономічних об'єктів Всесвіту (планет, зір, планетних систем, галактик тощо), а також основні фізичні процеси, які відбуваються в них. (ПРН 2)
- Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій. (ПРН 3)
- Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії. (ПРН 5)
- Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії. (ПРН 6)
- Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації. (ПРН 7)
- Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань. (ПРН 8)
- Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки. (ПРН 11)
- Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень. (ПРН 13)
- Знати і розуміти роль і місце фізики, астрономії та інших природничих наук у загальній системі знань про природу та суспільство, у розвитку техніки й технологій та у формуванні сучасного наукового світогляду. (ПРН 17)
- Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства. (ПРН 22)
- Розуміти історію та закономірності розвитку фізики та астрономії. (ПРН 23)

- Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій. (ПРН 24)
- Мати навички самостійного прийняття рішень стосовно своїх освітньої траєкторії та професійного розвитку. (ПРН 25)

1.8. Вивченню спецкурсу «Вступ до теорії дифузії» передують курс загальної фізики, курс класичної термодинаміки та статистичної фізики.

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 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.

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	3	1	2			

2. Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса	3	2	1			
3. Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії	3	1	2			
4. Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії. Взаємозв'язок характеристик вакансій з параметрами дифузії за вакансійним механізмом	3	2	1			
5. Експериментальне визначення характеристик вакансій	3	2	1			
6. Внесок комплексів вакансій у дифузію	3	1	2			
7. Точкові дефекти в іонних кристалах. Дефекти по Шотткі, по Френкелю. Критерії ймовірності утворення дефектів Френкеля і Шотткі	3	1	2			
8. Використання закону діючих мас для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів	3	2	1			
9. Дифузія й електропровідність іонних кристалів	2	1	1			
10. Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів	2	1	1			
11. Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів.	3	2	1			
12. Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах	3	2	1			
Разом за розділом 1	34	17	17			
Розділ 2. Кінетика дифузії в кристалах						
13. Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік	2	2	1			
14. Різні типи коефіцієнтів дифузії	2	2	1			
15. Рівняння дифузії, що описує нестационарний дифузійний потік. Його рішення	2	2	1			
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)	3	2	1			
17. Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю $N(x,t)$	2	2	1			
18. Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано.	3	2	1			
Разом за розділом 2	14	7	7			
Усього годин	48	24	24			

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дифузія і випадкові блукання. Коефіцієнт дифузії	2
2	Елементарний акт дифузії та його характеристики. Рівняння Ареніуса	1
3	Кореляційні співвідношення і оцінка параметрів дифузії	2
4	Механізми дифузії. Роль вакансій в дифузії.	1
5	Експериментальне визначення характеристик вакансій	1
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	1
9	Дифузія й електропровідність іонних кристалів	1
10	Зв'язок між іонною провідністю і коефіцієнтом дифузії іонів	1
11	Внесок комплексів точкових дефектів у дифузію і провідність іонних кристалів	1
12	Роль точкових дефектів у дифузії в напівпровідникових кристалах	1
13	Рівняння, що описує стаціонарний дифузійний потік	1
14	Різні типи коефіцієнтів дифузії	1
15	Рівняння дифузії, що описує нестаціонарний дифузійний потік	1
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)	1
17	Визначення коефіцієнта дифузії з постійного джерела за експериментально обмірюваною залежністю $N(x,t)$	1
18	Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії. Обчислення значення коефіцієнта взаємної дифузії методом Больцмана-Матано	1
	Разом	24

5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списку рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин

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 $D_v \gg 10^{-14} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$. Вважати, що єдиними стоками вакансій є дислокації, густина яких дорівнює $\rho \gg 10^{12} \text{ м}^{-2}$

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 ґратці $\alpha\text{-Fe}$ 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 °С протягом 2-х годин. На яку глибину проникне ізотоп в кристал, якщо його коефіцієнт дифузії в кристалі $D = 5 \times 10^{-5} \exp(-1,8 \text{ eV}/kT) \text{ м}^2\text{с}^{-1}$?

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 $l = 1 \text{ мм}$. 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 $w \gg 10^{-29} \text{ м}^3$.

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 ґратці нікелю $\nu_0 = 5 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, довжина дифузійного стрибка вуглецю в ґратці нікелю дорівнює $2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

Екзаменаційний білет № 11

1. Точкові дефекти в іонних кристалах.

2. Довести, що функція $N(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] d\xi$ є рішенням другого

рівняння Фіка, якщо $N(x, 0) = f(x)$ – 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 симетрії.

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

T1, T2 ... – 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. Богданов В. В. Дифузія в кристалах. – ХНУ, 2006.
2. Mehrer, H. Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials, diffusion-controlled processes. – Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007.
3. Ghomashchi, R. An Introduction to Fundamentals of Diffusion in Solid State Materials. – CRC Press, 2024.
4. Shewmon P. Diffusion in Solids. – Springer Cham, 2016.
5. Manning J. Diffusion Kinetics for Atoms in Crystals. – Van Nostrand, 1968.

Допоміжна література

1. Парицька Л. Н. Дифузія і дифузійні процеси в кристалах: Тексти лекцій.– Част. 1.– Харків: ХДУ, 1991.
2. Murch, G. E. Diffusion in crystalline solids. – Academic Press, 2012.
3. Alope P., and Divinski, S. (eds.) Handbook of Solid State Diffusion: Volume 1: Diffusion Fundamentals and Techniques. Vol. 1. – Elsevier, 2017.