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 «**Механізми і кінетика росту кристалів**»
(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти перший (бакалавр)
/

галузь знань 0402 – 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, Мацокін Д.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 “**Механізми і кінетика росту кристаллів**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки

_____перший (бакалавр)_____

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

напряму підготовки _____6.040203 – фізика _____

спеціалізації

_____

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є
подати сучасний стан теорії кристалізації та методів аналізу процесів кристалізації, ознайомити студентів із молекулярно-кінетичним підходом до опису процесу кристалізації, морфологією кристалів та основними принципами і методами їх вирощування.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є
освоїти молекулярно-кінетичну теорію росту кристалів та основні методи вирощування кристалів із різних агрегатних станів речовини.

1.3. Кількість кредитів – 9

1.4. Загальна кількість годин –270

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
4-й	-й
Семестр	
7-й	-й
Лекції	
64 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
96 год.	год.
Самостійна робота, у тому числі	
110	
Індивідуальні завдання	
2 контрольні роботи	

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

знати: механізми росту кристалів, залежність швидкости процесу кристалізації від стану і складу середовища кристалізації, умов тепловідведення тощо; основані на теоретичних уявленнях про кристалогенезис методи штучного вирощування кристалів;

вміти: використовувати знання про механізми росту кристалів, залежність швидкости процесу кристалізації від стану і складу середовища кристалізації для аналізу процесів, що супроводжують ріст реальних кристалів.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Атомна структура поверхні кристала

1. Поверхнева енергія
2. Анізотропія поверхневої енергії
3. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель
4. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини
5. Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості

Розділ 2. Механізми та кінетика росту кристалів

6. Нормальний ріст. Кінетика росту кристала з розплаву
7. Кінетика нормального росту кристала з розчину
8. Процес пошарового росту кристалів
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала
10. Механізми та кінетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів
11. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті

Розділ 3. Взаємодія зростаючого кристала з домішками

12. Вплив домішок на швидкість росту кристала
13. Нерівновагий захват атомарної домішки
14. Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища

Розділ 4. Морфологія кристалів

15. Рівноважна форма кристала
16. Форма росту кристала
17. Морфологія поверхні зростаючого кристала
18. Вплив умов росту на морфологію кристала
19. Втрата стабільності форм росту
20. Форми розчинення кристала

Розділ 5. Комп’ютерне моделювання процесу кристалізації

21. Методи молекулярної динаміки
22. Стохастичні методи
23. Моделі клітинних автоматів

Розділ 6. Про методи вирощування кристалів

24. Кристалізація з парової фази
25. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів
26. Кристалізація з розчину
27. Кристалізація з розплаву

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. Атомна структура поверхні кристала						
1. Поверхнева енергія	10	4		3		3
2. Анізотропія поверхневої енергії	10	4		3		3
3. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель	10	4		3		3
4. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини	10	4		3		3
5. Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості						
Разом за розділом 1	**40**	**16**		**12**		**12**
Розділ 2. Механізми та кінетика росту кристалів						
6. Нормальний ріст. Кінетика росту кристала з розплаву	10	4		3		3
7. Кінетика нормального росту кристала з розчину	10	4		3		3
8. Процес пошарового росту кристалів	10	4		3		3
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала	10	4		3		3
10. Механізми та кінетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів	10	4		3		3
11. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті	10	4		3		3
Разом за розділом 2	**60**	**24**		**18**		**18**
Розділ 3. Взаємодія зростаючого кристала з домішками						
12. Вплив домішок на швидкість росту кристала	10	4		3		3
13. Нерівновагий захват атомарної домішки	10	4		3		3
14. Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища	10	4		3		3
Разом за розділом 3	**30**	**12**		**9**		**9**
Розділ 4. Морфологія кристалів						
15. Рівноважна форма кристала	10	4		3		3
16. Форма росту кристала	10	4		3		3
17. Морфологія поверхні зростаючого кристала	10	4		3		3
18. Вплив умов росту на морфологію кристала	10	4		3		3
19. Втрата стабільності форм росту	10	4		3		3
20. Форми розчинення кристала	10	4		3		3
Разом за розділом 4	**60**	**24**		**18**		**18**
Розділ 5. Комп’ютерне моделювання процесу кристалізації						
21. Методи молекулярної динаміки	10	4		3		3
22. Стохастичні методи	10	4		3		3
23. Моделі клітинних автоматів	10	4		3		3
Разом за розділом 5	**30**	**12**		**9**		**9**
Розділ 6. Про методи вирощування кристалів						
24. Кристалізація з парової фази	10	4		3		3
25. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів	10	4		3		3
26. Кристалізація з розчину	10	4		3		3
27. Кристалізація з розплаву	10	4		3		3
Контрольна робота						

Разом за розділом 6	**40**	**16**		**12**		**12**
Усього годин	**270**	**64**		**96**		**110**

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дослідження форм росту кристалів	9
2	Дослідження епітаксіального росту кристалів	9
3	Шарувато-спіральний ріст кристалів	9
4	Отримання епітаксіальних плівок шляхом напилювання у вакуумі	9
5	Періодична кристалізація у тонкому шарі переохолодженого розплаву	9
6	Вирощування монокристалів методом Бриджмена	9
7	Вирощування монокристалів методом Стокбаргера	9
8	Очищення органічних речовин методом зонного плавлення	9
9	Вирощування монокристалів методом Киропулоса	9
10	Вирощування кристалу із розчину	9
	Разом	96

5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списка рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин
	1. Поверхнева енергія	3
	2. Анізотропія поверхневої енергії	3
	3. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель	3
	4. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини	3
	6. Нормальний ріст. Кінетика росту кристала з розплаву	3
	7. Кінетика нормального росту кристала з розчину	3
	8. Процес пошарового росту кристалів	3
	9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала	3
	10. Механізми та кінетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів	3
	11. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті	3
	12. Вплив домішок на швидкість росту кристала	3
	13. Нерівновагий захват атомарної домішки	3
	14. Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища	3
	15. Рівноважна форма кристала	3
	16. Форма росту кристала	3
	17. Морфологія поверхні зростаючого кристала	3
	18. Вплив умов росту на морфологію кристала	3
	19. Втрата стабільності форм росту	3
	20. Форми розчинення кристала	3
	21. Методи молекулярної динаміки	3
	22. Стохастичні методи	3
	23. Моделі клітинних автоматів	3
	24. Кристалізація з парової фази	3
	25. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів	3

	26. Кристалізація з розчину	3
	27. Кристалізація з розплаву	3
	Разом	110

7. Методи контролю

екзамен.

Питання до контролю:

1. Поверхнева енергія. Її анізотропія
2. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель
3. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини
4. Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості
5. Нормальний ріст кристалів. Кінетика росту кристала з розплаву
6. Кінетика нормального росту кристала з розчину
7. Процес пошарового росту кристалів
8. Концентрація адатомів, довжина дифузійного шляху адатома, Ллнійна густина зламів на сходині
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала
10. Розподіл хімічного потенціалу атомів на поверхні поблизу ізольованої елементарної сходини
11. Кінетика переміщення елементарної сходини
12. Кінетика переміщення ешелону елементарних сходин
13. Залежність швидкості переміщення сходини від її висоти
14. Джерела сходин на поверхні досконалого кристала
15. Механізм шарувато-спірального росту
16. Шарувато-спіральний ріст кристалів з розчину і розплаву
17. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті
18. Вплив домішок на швидкість росту кристала
19. Нерівновагий захват атомарної домішки
20. Утворення напружень, дислокацій, захват маточного середовища
21. Рівноважна форма кристала
22. Метод Гіббса–Кюрі–Вульфа визначення рівноважної форми
23. Метод Странського–Каішева середніх робіт відриву
24. Форма росту кристала
25. Морфологія поверхні зростаючого кристала
26. Вплив умов росту на морфологію кристала
27. Втрата стабільності форм росту
28. Комп’ютерне моделювання процесу плавлення ідеального кристала методом молекулярної динаміки

29 Комп’ютерне моделювання процесу гомогенної кристалізації

30. Стохастичні методи моделювання: математична модель росту кристала з домішкою, реалізація різних механізмів росту грані кристала, розподіл домішки у кристалі, що росте
31. Моделі клітинних автоматів: спонтанна кристалізація однокомпонентного розплаву
32. Моделі клітинних автоматів: кКристалізація бінарного сплаву з обмеженою розчинністю у твердій фазі
33. Комп’ютерне моделювання гідродинамічних процесів
34. Методи вирощування кристалів з парової фази
35. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів
36. Методи вирощування кристалів з розчину
37. Методи вирощування кристалів з розплаву

Екзаменаційний білет № 1

1. Поверхнева енергія. Її анізотропія.
2. Яким механізмом буде здійснюватися зростання кристала з парової фази, якщо тиск пари дорівнює 2,5 Па, а тиск насиченої пари дорівнює 2,48 Па? Якою при цьому буде залежність швидкості росту кристала від пересичення?

Екзаменаційний білет № 2

1. TLK-модель структури поверхні кристалу. Фазовий перехід гладкої поверхні на шорсткувату. Критерій шорсткості поверхні. (20 балів)
2. У рівновазі з розплавом міді знаходиться кристал при температурі 1300 К. Використовуючи теорему Вульфа, знайдіть відстань від центру зростання до поверхні кристала. Температура плавлення міді 1356 К, параметр гратки $2{,}5\cdot10^{-10}$ м.

Екзаменаційний білет № 3

1. За яких умов відбувається нормальний ріст кристалів? Як залежить швидкість нормального росту кристалу від рушійної сили кристалізації?
2. На поверхні пошарово зростаючого з пари кристала зародився двовимірний агрегат критичного розміру. Вільна енергія замкнутої сходинки атомної висоти, що утворилася, изотропна. Отримайте вираз для радіуса кривизни такої сходинки.

Екзаменаційний білет № 4

1. Чим визначається швидкість переміщення ізольованої елементарної сходинки при пошаровому зростанні кристала? Як змінюється ця швидкість під час руху сходинок в ешелоні?
2. ГЦК кристал росте з гидротермального розчину при температурі 200°С. Теплота кристалізації 0,3 еВ. За яким законом буде змінюватися швидкість росту кристала зі збільшенням пересичення розчину?

Екзаменаційний білет № 5

1. Чим визначається кінетика пошарового росту досконалих кристалів за великих пересичень?
2. В об'ємі розплаву росте кристал сферичної форми в дифузійному режимі. Отримати вираз для розподілу температури навколо кристала T (r), вважаючи його квазістаціонарним.

Екзаменаційний білет № 6

1. Як залежить хімічний потенціал атомів на віцінальній поверхні кристала від відстані до ізольованої елементарної сходинки? Чому він дорівнює на відстані від сходинки, більшої довжини вільного пробігу адатома?
2. Поверхня пошарово зростаючого з парової фази кристала представлена ешелоном сходин висотою $h = 36a$, що рухаються з середньою швидкістю V. a – параметр гратки кристала. Середня відстань між сходинами $\lambda=10^2a$. Температура кристала 10^3 К, теплота випаровування 1 eV. У скільки разів швидкість руху сходін менше швидкості руху елементарних сходін в тих же умовах?

Екзаменаційний білет № 7

1. Пошаровий і нормальний ріст кристалів. Кінетика нормального росту кристалу з розчину.
2. В процесі росту кристалу з парової фази атом потрапляє з парової до адсорбованої фази. В якій області віцінальної поверхні кристала він має опинитися, щоб мати реальну можливість повернутися до парової фази?

Екзаменаційний білет № 8

1. В рамках моделі TLK поясніть, у яких позиціях на віцінальній поверхні кристала атоми знаходяться у кристалічній фазі. Як виражається теплота випаровування кристала через енергію міжатомного зв'язку?
2. Віцінальним грань (018) кристала, що має просту кубічну ґратку з параметром $a = 5 \cdot 10^{-10}$ м і масою атома $2 \cdot 10^{-25}$ кг, росте з пари, відносне пересичення якої 10^{-2}. Температура кристала 200 °С, теплота випаровування 1,5 еВ, тиск насиченої пари 10^2 Па. Обчислити швидкість руху елементарних сходин, що становлять структуру віціналі, приймаючи, що пошаровий ріст відбувається в дифузійному режимі.

Екзаменаційний білет № 9

1. Якими є функції розподілення хімічного потенціалу та концентрації адатомів поблизу ізольованої елементарної сходинки?
2. Кристал з простою кубічною граткою зародився і росте з розчину при кімнатній температурі. Після 10 хвилин росту його огранка представлена трьома типами граней: {001}, {011} і {111}. Відносне пересичення розчину 0,03, рівноважна концентрація розчину 0,3, коефіцієнт дифузії атомів речовини, що кристалізується, в розчині $2 \cdot 10^{-9}$ м^{2}с$^{-1}$, ширина дворика кристалізації 2 мкм, питома поверхнева енергія граней {001} 2,5 Дж·м$^{-2}$, теплота кристалізації 0,25 еВ, параметр кристалічної гратки $3 \cdot 10^{-10}$ м. Якою буде огранка кристала після 1 години росту?

Екзаменаційний білет № 10

1. Чому зростання кристалів з розплаву, як правило, здійснюється нормальним механізмом?
2. Якою є концентрація домішки в кристалі, що знаходиться в рівновазі з розплавом, що містить 0,6% домішки, якщо температура розплаву 700 °С, енергія зв'язку домішкових атомів з матричними на 0,1еВ більше в кристалічній фазі, ніж в рідкій? Різницю атомних об'ємів в кристалі і рідини можна знехтувати.

Екзаменаційний білет № 11

1. Форми росту і рівноважні форми кристалів. Правило Вульфа і метод Странского-Каішева визначення рівноважної форми кристала.
2. Отримайте вираз для температурної залежності концентрації розчину, що знаходиться в рівновазі з кристалом.

Екзаменаційний білет № 12

1. Кінетика пошарового росту кристалу за наявності на його гранях постійно діючих джерел шарів.
2. Кристал сферичної форми росте з розчину. Яким буде його розмір за 2 години росту в дифузійному режимі, якщо коефіцієнт дифузії атомів в розчині $\approx 10^{-9}$ м^{2}с$^{-1}$, пересичення розчину 0,2?

Екзаменаційний білет № 13

1. Механізм пошарового росту досконалих кристалів. Кінетика росту при невеликих пересиченнях середовища кристалізації.
2. Ріст з розчину геометрично шорсткої грані (110) монокристала NaCl характеризується кінетичним коефіцієнтом кристалізації $\beta = 10^{-4}$ м/с. Чим буде визначатися кінетика росту грані, якщо поставка речовини до зростаючої грані здійснюється в міру коефіцієнта дифузії $D = 5 \cdot 10^{-9}$ м^2/с через дворик кристалізації товщиною $\delta = 5$ мкм?

Екзаменаційний білет № 14

1. Якою є морфологія реальних кристалів? Чим може бути обумовлена втрата стійкості гранних форм росту? До чого вона може призвести?
2. Кристал з параметром гратки $5 \cdot 10^{-10}$ м росте з розчину при кімнатній температурі шарувато-спіральним механізмом. Як залежить від пересичення розчину швидкість росту кристала, якщо енергія десорбції адатомів зі зростаючою поверхнею дорівнює 0,6 еВ, а відстань між витками спіралей в горбиках росту дорівнює 10 мкм?

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні					Екзамен	Сума
Поточне тестування за темами	Контроль на робота	Поточне тестування за темами	Контроль на робота	Разом		
Т1-Т14		Т15-Т27				
14	16	14	16	60	40	100

Т1, Т2 ... – теми розділів.

Поточне тестування з кожної теми складається з одного тестового завдання, відповідь на яке оцінюється в 1 бал.

Контрольна робота складається з 2-ох питань, відповідь на кожне оцінюється у 8 балів.

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

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцін	
	для чотирирівневої шкали	для дворівневої шкали
90 –	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовіль	не зараховано

9. Рекомендована література

Основна література

1. Kelly A., Growth G. Crystallography and defects in crystals.– М.: Мир, 1974.
2. Палатник Л. С., Папіров І. І. Орієнтовна кристалізація.– М.: Металлургия, 1964.
3. Палатник Л. С., Папіров І. І. Епітаксійні плівки.– М.: Наука, 1971.
4. Lodis R., Parker R. Crystal growth.– М.: Мир, 1974.
5. Сучасна кристалографія (у чотирьох томах). Т. 3, Створення кристалів.– М.: Наука, 1980.
6. Богданов В. В. Основи теорії росту кристалів. – Вид. ХНУ ім. В.Н.Каразіна. – 2010.

7. Ch Kittel. Introduction in solid state physic, M., Наука. -1978.
8. А.М. Косевич. Фізична механіка реальних кристалів. Киев, Наукова думка. - 1981.

Допоміжна література

1. Чернов О. О., УФН, **23**, №2, 1961.
2. Chrystian J. Theory of transformations in metals and alloys. 1 Thermodynamics and general kinetic theory.– М.: Мир, 1978.
3. Handbook of Crystal Growth. Edited by D.T.J Hurle. Nortn-Holland, 1993–1995: – Vol. 1: Fundamentals (Parts A and B); – Vol. 2: Bulk Crystal Growth (Parts A and B); – Vol. 3: Thin Films and Epitaxy (Parts A and B).