

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 «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 _____

2020/2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

21 червня 2020 року, протокол № 6

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

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 7 від 20 червня 2020 року

Завідувач кафедри Гриньов Б. В.

(підпис)

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 6 від 20 червня 2020 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	
32 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
96 год.	год.
Самостійна робота, у тому числі	
142 год.	год.
Індивідуальні завдання	
контрольна робота	

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

знати: механізми росту кристалів, залежність швидкості 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 швидкості 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 сходу від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходу
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 сходів 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 розділів 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	9	1				5
2. Анізотропія поверхневої енергії	9	1				5
3. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель	9	1				5
4. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини	9	1				5
5. Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості	9	1				4
Разом за розділом 1	45	5	1	6		24
Розділ 2. Механізми та кінетика росту кристалів						
146. Нормальний ріст. Кінетика росту кристала з розплаву	3	1				4
8. Процес пошарового росту кристалів ³	3	1				4
7. Кінетика нормального росту кристала з розчину						
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала	4	1				4
1310. Механізми та кінетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів	3	1				4
Разом за розділом 23	45	6	1	6		23
11. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті						
Розділ 3. Взаємодія зростаючого кристала з домішками						
12. Вплив домішок на швидкість росту кристала	4	1				8
813. Нерівновагий захват атомарної домішки						
14. Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища ⁴²	4	2				8
Разом за розділом 3	45	5	1	6		24
Розділ 4. Морфологія кристалів						
15. Рівноважна форма кристала	3	1				4
416. Форма росту кристала						
17. Морфологія поверхні зростаючого кристала ³¹	3	1				4
18. Вплив умов росту на морфологію кристала	3	1				4
19. Втрата стабільності форм росту	3	1				4
20. Форми розчинення кристала	3	1				3
Разом за розділом 4	45	6	1	6		23
Розділ 5. Комп'ютерне моделювання процесу кристалізації						
21. Методи молекулярної динаміки	4	2				8
822. Стохастичні методи						
23. Моделі клітинних автоматів ⁴²	4	1				8
Разом за розділом 5	45	5	1	6		24
Розділ 6. Про методи вирощування кристалів						
24. Кристалізація з парової фази	4	1				6
625. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів						

26. Кристалізація з розчину ⁴²	4	1			6
27. Кристалізація з розплаву	3	1			6
Контрольна робота					
Разом за розділом 6	45	5	1	6	24
Усього годин	270	32	9	6	142

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дослідження форм росту кристалів	7
2	Дослідження епітаксiального росту кристалів	7
3	Шарувато-спiральний рiст кристалів	7
4	Отримання епітаксiальних плiвок шляхом напилювання у вакуумі	8
5	Періодична кристалізація у тонкому шарі переохолодженого розплаву	6
6	Вирощування монокристалів методом Бриджмена	15
7	Вирощування монокристалів методом Стокбаргера	16
8	Очищення органічних речовин методом зонного плавлення	7
9	Вирощування монокристалів методом Киропулоса	7
10	Вирощування кристалу із розчину	16
	Разом	96

5. Завдання для самостійної роботи

№	З використанням літературних джерел із списку рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин
1	Поверхнева енергія	6
2	Анізотропія поверхневої енергії	6
3	Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель	6
4	Залежність вільної енергії сходуни від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходуни	6
5	Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості	6
6	Нормальний рiст. Кiнетика росту кристала з розплаву	6
7	Кiнетика нормального росту кристала з розчину	6
8	Процес пошарового росту кристалів	5
9	Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала	5
10	Механізми та кiнетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів	5
11	Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті	5
12	Вплив домішок на швидкість росту кристала	5
13	Нерівновагий захват атомарної домішки	5
14	Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища	5
15	Рівноважна форма кристала	5
16	Форма росту кристала	5
17	Морфологія поверхні зростаючого кристала	5
18	Вплив умов росту на морфологію кристала	5

19	Втрата стабільності форм росту	5
20	Форми розчинення кристала	5
21	Методи молекулярної динаміки	5
22	Стохастичні методи	5
23	Моделі клітинних автоматів	5
24	Кристалізація з парової фази	5
25	Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних кристалів	5
26	Кристалізація з розчину	5
27	Кристалізація з розплаву	5
	Разом	142

6. Тема курсової роботи:

7. Методи контролю

екзамен.

Питання до контролю:

1. Поверхнева енергія. Її анізотропія
2. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель
3. Залежність вільної енергії сходуни від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходуни
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 схдині
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходинок уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала
10. Розподіл хімічного потенціалу атомів на поверхні поблизу ізольованої елементарної сходуни
11. Кінетика переміщення елементарної сходуни
12. Кінетика переміщення ешелону елементарних сходинок
13. Залежність швидкості переміщення сходуни від її висоти
14. Джерела сходинок 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: кристалізація 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. (20 балів)
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? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 2

1. TLK-модель структури поверхні кристалу. Фазовий перехід гладкої поверхні на шорсткувану. 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 ґратки $2,5 \cdot 10^{-10}$ м. (30 балів)

Екзаменаційний білет № 3

1. За яких умов відбувається нормальний ріст кристалів? Як залежить швидкість нормального росту кристалу від рушійної сили кристалізації? (20 балів)
2. На поверхні пошарово зростаючого з пари кристала зародився двовимірний агрегат критичного розміру. Вільна енергія замкнутої сходинки атомної висоти, що утворилася, ізотропна. Отримайте вираз для радіуса кривизни такої сходинки. (30 балів)

Екзаменаційний білет № 4

1. Чим визначається швидкість переміщення ізольованої елементарної сходинки при пошаровому зростанні кристала? Як змінюється ця швидкість під час руху сходинки в ешелоні? (20 балів)
2. ГЦК кристал росте з гидротермального розчину при температурі 200°C. Теплота кристалізації 0,3 еВ. За яким законом буде змінюватися швидкість росту кристала зі збільшенням пересичення розчину? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 5

1. Чим визначається кінетика пошарового росту досконалих кристалів за великих пересичень? (20 балів)
2. В об'ємі розплаву росте кристал сферичної форми в дифузійному режимі. Отримати вираз для розподілу температури навколо кристала $T(r)$, вважаючи його квазістаціонарним. (30 балів)

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? (20 балів)
2. Поверхня пошарово зростаючого з парової фази кристала представлена ешелонем сходин висотою $h = 36a$, що рухаються з середньою швидкістю V . a – параметр ґратки кристала. Се-

редня відстань між сходами $\lambda=10^2a$. Температура кристала 10^3 K , теплота випаровування 1 eV . У скільки разів швидкість руху сходін менше швидкості руху елементарних сходін в тих же умовах? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 7

1. Пошаровий і нормальний ріст кристалів. Кінетика нормального росту кристалу з розчину. (20 балів)
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? (30 балів)

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? (20 балів)
2. Віцінальним грань $\{018\}$ кристала, що має просту кубічну ґратку з параметром $a=5\cdot 10^{-10}\text{ м}$ і масою атома $2\cdot 10^{-25}\text{ кг}$, росте з пари, відносно пересичення якої 10^{-2} . Температура кристала $200\text{ }^\circ\text{C}$, теплота випаровування $1,5\text{ eV}$, тиск насиченої пари 10^2 Па . Обчислити швидкість руху елементарних сходін, що становлять структуру віціналі, приймаючи, що пошаровий ріст відбувається в дифузійному режимі. (30 балів)

Екзаменаційний білет № 9

1. Якими є функції розподілення хімічного потенціалу та концентрації адатомів поблизу ізольованої елементарної сходинки? (20 балів)
2. Кристал з простою кубічною ґраткою зародився і росте з розчину при кімнатній температурі. Після 10 хвилин росту його огранка представлена трьома типами граней: $\{001\}$, $\{011\}$ і $\{111\}$. Відносно пересичення розчину 0,03, рівноважна концентрація розчину 0,3, коефіцієнт дифузії атомів речовини, що кристалізується, в розчині $2\cdot 10^{-9}\text{ м}^2\text{ с}^{-1}$, ширина дворика кристалізації 2 мкм, питома поверхнева енергія граней $\{001\}$ $2,5\text{ Дж}\cdot\text{м}^{-2}$, теплота кристалізації $0,25\text{ eV}$, параметр кристалічної ґратки $3\cdot 10^{-10}\text{ м}$. Якою буде огранка кристала після 1 години росту? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 10

1. Чому зростання кристалів з розплаву, як правило, здійснюється нормальним механізмом? (20 балів)
2. Якою є концентрація домішки в кристалі, що знаходиться в рівновазі з розплавом, що містить 0,6% домішки, якщо температура розплаву $700\text{ }^\circ\text{C}$, енергія зв'язку домішкових атомів з матричними на $0,1\text{ eV}$ більше в кристалічній фазі, ніж в рідкій? Різницю атомних об'ємів в кристалі і рідині можна знехтувати. (30 балів)

Екзаменаційний білет № 11

1. Форми росту і рівноважні форми кристалів. Правило Вульфа і метод Странського-Каішева визначення рівноважної форми кристала. (20 балів)
2. Отримайте вираз для температурної залежності концентрації розчину, що знаходиться в рівновазі з кристалом. (30 балів)

Екзаменаційний білет № 12

1. Кінетика пошарового росту кристалу за наявності на його гранях постійно діючих джерел шарів. (20 балів)

2. Кристал сферичної форми росте з розчину. Яким буде його розмір за 2 години росту в дифузійному режимі, якщо коефіцієнт дифузії атомів в розчині $\approx 10^{-9} \text{ м}^2\text{с}^{-1}$, пересичення розчину 0,2? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 13

1. Механізм поширювального росту досконалих кристалів. Кінетика росту при невеликих пересиченнях середовища кристалізації. (20 балів)
2. Ріст з розчину геометрично шорсткої грані (110) монокристала NaCl характеризується кінетичним коефіцієнтом кристалізації $\beta = 10^{-4} \text{ м/с}$. Чим буде визначатися кінетика росту грані, якщо поставка речовини до зростаючої грані здійснюється в міру коефіцієнта дифузії $D = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ через дворик кристалізації товщиною $\delta = 5 \text{ мкм}$? (30 балів)

Екзаменаційний білет № 14

1. Якою є морфологія реальних кристалів? Чим може бути обумовлена втрата стійкості граничних форм росту? До чого вона може призвести? (20 балів)
2. Кристал з параметром ґратки $5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ 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 eV, а відстань між витками спіралей в горбиках росту дорівнює 10 мкм? (30 балів)

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні				Екзамен	Сума
Поточне тестування за темами	Поточне тестування за темами	Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Разом		
T1-T14	T15-T27				
14	13	23	50	50	100

T1, T2 ... – 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 перше оцінюється в 10 балів, на друге – 13 балів.

Екзаменаційний білет містить два пункти: 1 теоретичне питання і 1 задачу. Відповідь на 1-й пункт оцінюється в 20 балів, на 2-й – 30 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	

9. Рекомендована література

Основна література

1. Элементарные процессы роста кристаллов (под ред. А. А. Чернова).– М.: ИЛ, 1959.
2. Хонигман Б. Рост и форма кристаллов.– М.: ИЛ, 1961.
3. Вайнгард У. Введение в физику кристаллизации металлов.– М.: Мир, 1967.
4. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах.– М.: Мир, 1974.
5. Палатник Л. С., Папилов И. И. Ориентированная кристаллизация.– М.: Металлургия, 1964.
6. Палатник Л. С., Папилов И. И. Эпитаксиальные пленки.– М.: Наука, 1971.
7. Козлова О. Г. Рост и морфология кристаллов.– М.: Изд. МГУ, 1973.
8. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов.– М.: Мир, 1974.
9. Современная кристаллография (в четырех томах). Т. 3, Образование кристаллов.– М.: Наука, 1980.
10. Богданов В. В. Основи теорії росту кристалів. – Вид. ХНУ ім. В.Н.Каразіна. – 2010.

Допоміжна література

1. Варма А. Рост кристаллов и дислокации.– М.: ИЛ, 1958.
2. Теория и практика выращивания кристаллов. Пер. с англ.– М.: Металлургия, 1968.
3. Чернов А. А., УФН, **23**, №2, 1961.
4. Лейтвейн Ф., Зоммер-Кулачевски Ш. Кристаллография.– М.: Высшая школа, 1968.
5. Стрикленд-Констебл Р. Ф. Кинетика и механизм кристаллизации.– Ленинград: Недра, 1971.
6. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах.– М.: Наука, 1975. Пфанн В. Дж. Зонная плавка.– М.: Мир, 1970.
7. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Часть 1 Термодинамика и общая кинетическая теория.– М.: Мир, 1978.
8. Сангвал К. Травление кристаллов: Теория, эксперимент, применение: Пер. с англ.– М.: Мир, 1990.– 492 с.
9. Handbook of Crystal Growth. Edited by D.T.J Hurlle. 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).