

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан фізичного факультету
Руслан БОВК

“ ” 2025 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецкурс «Механізми і кінетика росту кристалів»

(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:

В.С.Т.
(підпис)

Владислав СЕМІНЬКО
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол №5 від 28 серпня 2025 року

Голова методичної комісії

М.
(підпис)

Микола МАКАРОВСЬКИЙ
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Механізми і кінетика росту кристалів**” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки

_____перший (бакалавр)_____

напряму підготовки _____Е5 – фізика та астрономія_____

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 – 160

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	
год.	
Індивідуальні завдання	
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 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 відшуковувати 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 «Механізми і кінетика росту кристалів» передують курс загальної фізики, курс класичної термодинаміки та статистичної фізики.

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 сходи від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходи
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				
1		л	п	л.	ін.	с.р.
2	3	4	5	6	7	
Розділ 1. Атомна структура поверхні кристала						
1. Поверхнева енергія	6	3		3		
2. Анізотропія поверхневої енергії	6	3		3		
3. Структурні елементи поверхні кристала. TLK-модель	6	2		4		
4. Залежність вільної енергії сходини від щільності зламів на ній. Термічна шорсткість сходини	6	2		4		
5. Термічна шорсткість поверхні. Критерій шорсткості	6	2		4		
Разом за розділом 1	30	12		18		
Розділ 2. Механізми та кінетика росту кристалів						
6. Нормальний ріст. Кінетика росту кристала з розплаву	6	2		4		
7. Кінетика нормального росту кристала з розчину	6	2		4		
8. Процес пошарового росту кристалів	6	2		4		
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала	6	2		4		
10. Механізми та кінетика пошарового росту досконалих і недосконалих кристалів	6	3		3		
11. Вивчення елементарних актів пошарового росту кристалів в експерименті	6	3		3		
Разом за розділом 2	36	14		22		
Розділ 3. Взаємодія зростаючого кристала з домішками						
12. Вплив домішок на швидкість росту кристала	6	3		3		
13. Нерівновагий захват атомарної домішки	6	2		4		
14. Утворення напруг, дислокацій, захват маточного середовища	6	3		3		
Разом за розділом 3	18	8		10		
Розділ 4. Морфологія кристалів						
15. Рівноважна форма кристала	6	3		3		
16. Форма росту кристала	6	3		3		
17. Морфологія поверхні зростаючого кристала	6	3		3		
18. Вплив умов росту на морфологію кристала	6	3		3		
19. Втрата стабільності форм росту	5	2		3		
20. Форми розчинення кристала	5	2		3		
Разом за розділом 4	34	16		18		
Розділ 5. Комп'ютерне моделювання процесу кристалізації						
21. Методи молекулярної динаміки	6	3		3		
22. Стохастичні методи	6	2		4		
23. Моделі клітинних автоматів	6	3		3		
Разом за розділом 5	18	8		10		
Розділ 6. Про методи вирощування кристалів						
24. Кристалізація з парової фази	6	2		4		
25. Кристалізація з пари крізь шар рідкої фази. Ріст ниткоподібних	6	2		4		

кристалів					
26. Кристалізація з розчину	6	3	3		
27. Кристалізація з розплаву	6	3	3		
Контрольна робота					
Разом за розділом 6	24	10	14		
Усього годин	160	64	96		

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дослідження форм росту кристалів	9
2	Дослідження епітаксialного росту кристалів	9
3	Шарувато-спіральный ріст кристалів	9
4	Отримання епітаксialних 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 списку рекомендованої літератури проробка питань, поставлених викладачем на лекції з теми:	Кількість годин

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 схдині
9. Швидкість руху елементарних прямолінійних сходин уздовж поверхні пошарово зростаючого кристала
10. Розподіл хімічного потенціалу атомів на поверхні поблизу ізолюваної 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-спіральный 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–Кюри–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.
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 ґратки $2,5 \times 10^{-10}$ 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 сходинок атомної висоти, що утворилася, ізотропна. Отримайте вираз для радіуса кривизни такої сходинок.

Екзаменаційний білет № 4

1. Чим визначається швидкість переміщення ізольованої елементарної сходинок при пошаровому зростанні кристала? Як змінюється ця швидкість під час руху сходинок в ешелоні?

- ГЦК кристал росте з гідротермального розчину при температурі 200°C . Теплота кристалізації $0,3\text{ еВ}$. За яким законом буде змінюватися швидкість росту кристала зі збільшенням пересичення розчину?

Екзаменаційний білет № 5

- Чим визначається кінетика пошарового росту досконалих кристалів за великих пересичень?
- 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

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

Екзаменаційний білет № 7

- Пошаровий і нормальний ріст кристалів. Кінетика нормального росту кристалу з розчину.
- 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

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

Екзаменаційний білет № 9

- Якими є функції розподілення хімічного потенціалу та концентрації адатомів поблизу ізолюваної елементарної сходинки?
- 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 $2\times 10^{-9}\text{ м}^2\text{ с}^{-1}$, ширина дворика кристалізації 2 мкм , питома поверхнева енергія граней $\{001\}$ $2,5\text{ Дж}\times\text{м}^{-2}$, теплота кристалізації $0,25\text{ еВ}$, параметр кристалічної ґратки $3\times 10^{-10}\text{ м}$. Якою буде огранка кристала після 1 години росту?

Екзаменаційний білет № 10

- Чому зростання кристалів з розплаву, як правило, здійснюється нормальним механізмом?
- Якою є концентрація домішки в кристалі, що знаходиться в рівновазі з розплавом, що містить $0,6\%$ домішки, якщо температура розплаву 700°C , енергія зв'язку домішкових

атомів з матричними на 0,1eV більше в кристалічній фазі, ніж в рідкій? Різницю атомних об'ємів в кристалі і рідині 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 $\gg 10^{-9} \text{ м}^2\text{с}^{-1}$, 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 $b=10^{-4} \text{ м/с}$. Чим буде визначатися кінетика росту грані, якщо поставка речовини до зростаючої грані здійснюється в міру коефіцієнта дифузії $D=5 \times 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ через дворік кристалізації товщиною $d=5 \text{ мкм}$?

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 ґратки $5 \times 10^{-10} \text{ м}$ 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?

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні					Екзамен	Сума
Поточне тестування за темами	Контроль на роботу	Поточне тестування за темами	Контроль на роботу	Разом		
T1-T14		T15-T27				
14	16	14	16	60	40	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 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	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали	для дворівневої шкали
90-100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовіль	не зараховано

9. Рекомендована література

Основна література

1. Богданов В. В. Основи теорії росту кристалів. – Вид. ХНУ ім. В.Н.Каразіна. – 2010.
2. Bhat, H. L. Introduction to crystal growth: principles and practice. – CRC Press, 2014.
3. Nishinaga, T., ed. Handbook of crystal growth: fundamentals. – Elsevier, 2014.
4. Müller, G., Métois, J. J., & Rudolph, P. (Eds.). (2004). Crystal Growth-From fundamentals to technology. Elsevier, 2004.
5. Сідлецький О.Ц., Гриньов Б.В. Сцинтиляційні кристали на основі твердих розчинів заміщення – Харків: “ІСМА”, 2019.

Допоміжна література

1. Handbook of Crystal Growth. Edited by D.T.J Hurlé. North-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).
2. Pamplin, Brian R. (ed.). Crystal growth: International series on the Science of the solid state. – Elsevier, 2013.
3. Journal of Crystal Growth, Elsevier, 1967-2025 (<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-crystal-growth/issues?page=1>).