

В.С. СУЗДАЛЬ, д-р техн. наук, ст. науч. сотр., Институт
сцинтилляционных материалов НАН Украины, Харьков

СПИРАЛЬНАЯ S - МАТРИЦА И РОСТ КРИСТАЛЛОВ

Рассматривается механизм роста кристалла винтовой спиралью, исходя из предпосылки о наличии в кристаллическом зародыше неисчезающей дислокационной ступеньки. Предложена матричная модель однозаходной дислокационной спирали типа Архимедовой на грани роста кристалла, в виде спиральной S-матрицы. Введено понятие спирали q - рода и показана практическая значимость S-матрицы, для выращивания кристаллов больших размеров по спирали с большим q .

Ключевые слова: кристалл, рост, механизм, спираль, модель, S-матрица.

Введение. Под механизмами роста кристаллов понимают способы присоединения частиц к кристаллу. Различают два основных механизма: 1) механизм нормального роста; 2) механизм послыойного роста.

Нормальный рост грани происходит на не сингулярных поверхностях, при этом частицы присоединяются к поверхности практически повсеместно. Данный механизм обычно проявляется на стадии регенерации граней или в случае равновесного состояния шероховатой поверхности грани растущего кристалла.

Послойный рост представляет собой образование гладких граней путем последовательного отложения слоев вещества, при этом ростовые ступени распространяются от центров роста.

Особую роль в процессе роста кристалла играют несовершенства его структуры, называемые дислокациями (смещениями). Кристаллов без дислокаций не существует. В соответствии с теорией дислокаций в процессе роста кристалла, особенно при массовой кристаллизации, его решетка искажается. Температурные градиенты у поверхности кристалла, возникающие вследствие не изотермичности кристаллизации, адсорбции примесей и других причин, приводят к появлению дислокаций, дефектов поверхности грани, которая оказывается не идеально плоской, а имеющей неровный рельеф (рис.1). При кристаллизации из растворов, из газов, при образовании твердой фазы в результате химической реакции, рельеф поверхности кристалла может иметь точечные нарушения. Однако, он часто приобретает форму плоских или винтовых, спиральных уступов (ступенек), имеющих молекулярные или намного, большие размеры

Механизм послыойного роста путем последовательного отложения слоев от центров роста, в качестве которых могут выступать выходы на поверхность грани дислокаций или двумерные зародыши, представлен в [1].

© В.С. Суздаль, 2015

Английский кристаллограф Франк в 1948 году высказал догадку, что при послойном росте, кристалл растет не параллельными рядами, а винтовой спиралью [2].

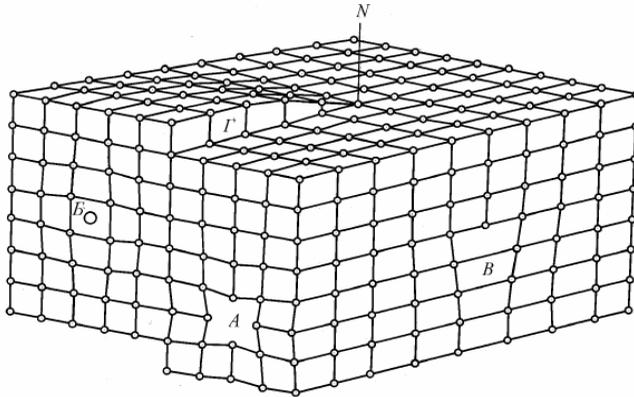


Рис.1 – Структурные дефекты в кристаллах: точечные дефекты – вакансия (А), внедрение атома в межузлие (Б), линейные дефекты – краевая дислокация (В), винтовая дислокация (Г)

Эта теория исходит из предпосылки о наличии в кристаллическом зародыше не исчезающей *дислокационной ступеньки*, которая перемещается за счет присоединения атомов параллельно самой себе.

Нарастание грани на дислокационной ступеньке происходит по спирали путем навивания одного слоя на другой. Дислокации, следовательно, являются непрерывно действующим источником возникновения слоев и снимают необходимость появления на поверхности растущей грани двухмерных зародышей. Постоянное наличие открытой ступеньки винтовой дислокации создает благоприятные условия для роста кристалла. Ведь, не нужно начинать строить ни новый ряд, ни новую плоскость. Атомы, пристраивающиеся к ступенькам, наращивают ее, и за счет этого она начинает перемещаться по поверхности грани. Но это движение не будет перемещением ступеньки параллельно самой себе, так как ее конец неподвижен. Так как атомы укладываются с постоянной скоростью вдоль всей длины ступеньки, то она по мере роста начнет изгибаться и примет форму спирали. Постоянное наращивание ступеньки новыми слоями атомов приведет к тому, что на грани кристалла образуется спиральная башенка. На схеме (рис. 2) показана последовательность этапов спирального роста *a*, *b*, *v* и *z* кристалла. Центральная часть ее как бы ввинчивается в пространство, опережая в своем движении нижние ступеньки лестницы, которые со временем будут застроены полностью и исчезнут, превратившись в завершенный атомный слой. На рис. 2а на грани кристалла изображен вектор винтовой дислокации длиной *b*. Если, имеется

много, близко расположенных дислокаций, то ступеньки роста кристалла имеют высоту из многих атомных слоев и их можно видеть даже в обычный микроскоп. Винтовые дислокации ведут к образованию на поверхности кристалла спиралей роста, высотой от одного до нескольких тысяч атомов. Фотографии, полученные с помощью электронного микроскопа, подтвердили реальность спирального механизма роста кристаллов (рис. 3).

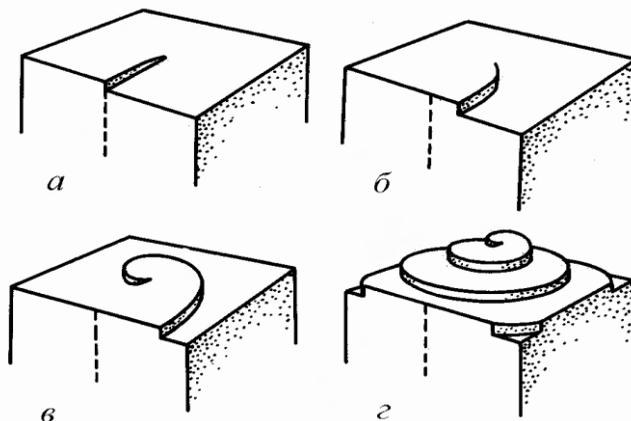


Рис. 2 – Схема спирального роста кристалла: а – появление винтовой дислокации; б – начало изгиба; в – закручивание в спираль; г – образование спиральной башенки.

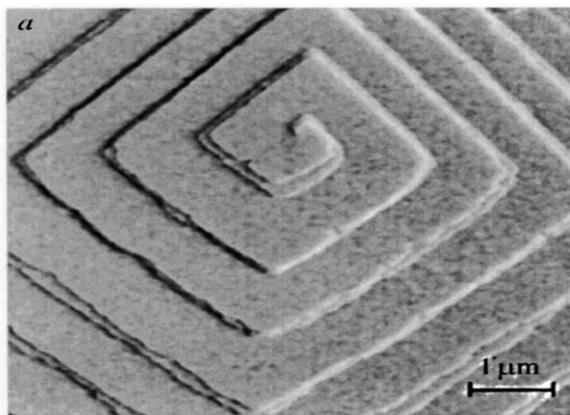


Рис.3 – Дислокационная спираль на грани кристалла бифталата калия [4]

Спирали, порожденные дислокациями, наблюдаются на кристаллах с различными типами связей, строением решетки и симметрией. Спиральный

рост экспериментально обнаружен при изучении роста многих кристаллов, например, алмаза, Mg, Cd, Ag и др. [3, 4, 5].

Спиральный рост на сегодняшний день, является одним из наиболее распространенных и наблюдаемых механизмов роста, и уже нет сомнений в том, что именно так растут кристаллы из паров и слабо пересыщенных растворов.

Матричная модель кристаллизации. Матричную модель изотропной однозаходной дислокационной спирали на грани роста кристалла представим в виде спиральной S-матрицы.

Определение. Спиральная S-матрица, это двухуровневая не особая матрица четного порядка n , состоящая из чисел $\{\pm a\}$ (рис. 4).

Например, S-матрица восьмого порядка

$$S_8 = \begin{bmatrix} -a & a & a & a & a & -a & -a & -a \\ a & -a & -a & -a & -a & a & -a & -a \\ -a & -a & -a & -a & -a & -a & a & -a \\ -a & a \\ -a & -a & -a & a & -a & -a & -a & a \\ -a & -a & a & -a & -a & -a & a & -a \\ -a & -a & -a & a & -a & a & -a & -a \\ -a & -a & -a & -a & a & -a & -a & -a \end{bmatrix}$$

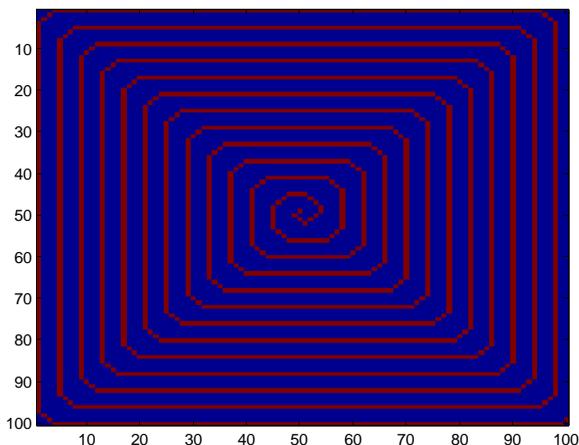


Рис. 4 – Спиральная S-матрица

Пусть r_c – размер двумерного зародыша и длина вектора b , определяется некоторым количеством зародышей. Выберем на S -матрице систему координат XU так, чтобы вектор b (начальная ступенька роста) совпадал по направлению, например, с осью Y , т.е. предполагаем, что в процессе роста кристалла дислокационная спираль закручивается от оси Y (рис. 5). Начало координат XU – точка выхода винтовой дислокации. Длина начальной ступеньки b спирального роста, ориентированной по оси Y , будет кратна простым числам q , т.е. $b = qr_c$. Если, $q = 1$, то назовем ее спиралью первого рода. Если, начальная винтовая дислокация, в выбранной системе координат, имеет $q=2$, то это спираль второго рода. Если $q=3$, то это спираль третьего рода и т.д.

Свойства S-матрицы.

S -матрица не ортогональна по столбцам. Она обладает свойствами Архимедовой спирали, а, именно, расстояние между витками спирали (шаг спирали $\lambda = 4b = q4r_c$), величина постоянная.

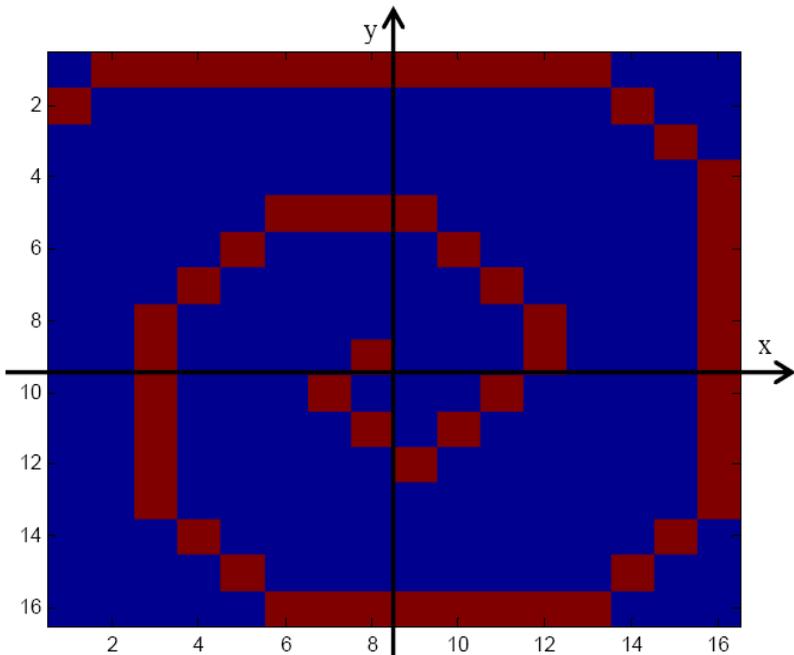


Рис. 5 – S -матрица со спиралью первого рода

Пусть $a = 0,125$, тогда число оборотов спирали для матрицы S_n определяется квадратичной фробениусовой нормой m этой матрицы. Для спирали

первого рода радиус спирали на первом круге равен $r_1^1 = r_c + 4r_c = 5r_c$, на втором круге – $r_2^1 = 9r_c$, на третьем – $r_3^1 = 13r_c$. В общем случае, на m круге $r_m^q = q(4m+1)r_c$. После 1000 оборотов радиус спирали первого рода $r_{1000}^1 = 4001r_c$ при шаге спирали $4r_c$, радиус спирали пятого рода $r_{1000}^5 = 20005r_c$ при шаге спирали $20r_c$, т.е. шаг спирали в обоих случаях составит, менее 0.1 процента от радиуса. В результате, кристалл, практически, прекращает свой рост по осям X, Y и, продолжает расти по высоте (рис. 2 з). Следовательно, выращивание кристаллов больших размеров возможен по спирали с $q \gg 1$ ($q=4,6$) или за счет появления на грани роста нескольких спиралей, возможно – с разными q (рис. 6). Математическое описание системы таких взаимодействующих спиралей достаточно сложно и зависит от взаимного расположения, энергии, вектора Бюргерса винтовых дислокаций [6].



Рис. 6 – Спирали роста на гранях кристалла

Выводы. С целью изучения механизмов роста кристалла предложена матричная модель дислокационной спирали на гранях роста в виде спиральной S-матрицы. Перспективы дальнейшей работы над матричными моделями связаны с расширением семейства S-матриц. Практическая значимость S-матрицы определяется тем, что поверхностные явления на макро- и микро-

уровнях роста кристалла представляют сегодня значительный интерес с точки зрения развития нанотехнологий и других отраслей науки.

Список литературы: 1. *Портнов В. Н.* Возникновение и рост кристаллов / *В. Н. Портнов, Е. В. Чупрунов* // М. : Физматлит. – 2006. – 328 с. 2. *Frank F. C.* The influence of dislocation on crystal growth / *F. C. Frank* // *Disc. Faraday Soc.* – 1949. – No 5. – P. 48-54. 3. *Чернов А. А.* Слоисто-спиральный рост кристаллов / *А. А. Чернов* // *Успехи физических наук.* – 1961. – Т. 73, вып. 2. – С. 1277-1331. 4. *Рашкович Л. Н.* Формирование дислокационной спирали на грани (010) кристалла бифталата калия / *Л. Н. Рашкович, Е. В. Петрова, О. А. Шустин, Т. Г. Черневич* // *Физика твердого тела.* – 2003. – Т. 45, вып.2. – С. 377-383. 5. *Гуськов С. С.* Механизм роста грани кристалла с зонарной микроструктурой / *С. С. Гуськов, М. А. Фаддеев, Е. В. Чупрунов* // *Вестник Нижегородского ун-та им. Н. И. Лобачевского. Серия : Физика твердого тела.* – 2008. – № 6. – С. 39-45. 6. *Burton W. K.* The Growth of Crystals and the Equilibrium Structure of their Surfaces / *W. K. Burton, N. Cabrera, F. C. Frank* // *Phil. Trans. Roy. Soc. London. Ser. : A.* – 1951. – Vol. 243. – P. 299-360.

Bibliography: 1. *Portnov V. N.* Voznikovenije i rost kristallov // *V. N. Portnov, E. V. Chuprunov.* М : Fizmatlit, – 2006. – 328 p. 2. *Frank F. C.* The influence of dislocation on crystal growth / *F. C. Frank* // *Disc. Faraday Soc.* – 1949. – No 5. – P. 48-54. 3. *Chernov A. A.* Sloisto-spiralnyi rost kristallov / *A. A. Chernov* // *Uspekhi fizicheskikh nauk.* – Vol. 73. – P. 1277-1331. 4. *Rashkovich L. N.* Formirovanije dislokatsionnoy spirali na grani (010) kristalla biftalata kalija / *L. N. Rashkovich, E. V. Petrova, O. A. Shustin, T. G. Chervovich* // *Fizika tverdogo tela.* – 2003. – Vol. 45, Is. 2. – P. 377-383. 5. *Guskov S. S.* Mekhanizm rosta grani kristalla s zonaroy mikrostrukturoy / *S. S. Guskov, M. A., Faddejev, E. V. Chuprunov* // *Vestnik Nizhegorodskogo Un-ta. Ser. : Uspekhi fizicheskikh nauk.* – 2008. – No 6. – P. 39-45. 6. *Burton W. K.* The Growth of Crystals and the Equilibrium Structure of their Surfaces / *W. K. Burton, N. Cabrera, F. C. Frank* // *Phil. Trans. Roy. Soc. London. Ser. : A.* – 1951. – Vol. 243. – P. 299-360.

Поступила (received) 30.01.2015