

	Силабус навчальної дисципліни Наукові основи технологій вирощування монокристалів
Напрямок підготовки	Доктор філософії
Галузь знань	13 Механічна інженерія
Спеціальність	132 Матеріалознавство
Освітньо-наукова програма	«Монокристалічні, керамічні та наноструктурні матеріали»
Статус дисципліни	Вибіркова
Семестр	3-4
Кількість кредитів ЄКТС	12
Форма підсумкового контролю	Залік + екзамен
Викладач	Вовк Олег Михайлович, кандидат хімічних наук, старший дослідник старший наук. співроб. Інституту монокристалів Національної академії наук України CV: https://isc.kharkov.ua/viddil-optychnyh-ta-lazernyh-krystaliv/ e-mail: oleh.vovk@isc.kharkov.ua ORCID ID: https://orcid.org/0000-0002-0715-0613 Scopus ID: 36864124800 Google Scholar: https://scholar.google.com/citations?user=R30GV0YAAAAJ&hl=uk тел.роб.: +38 057 341-04-01
Анотація навчальної дисципліни	Ознайомлення з основами теорії росту монокристалів, структурними особливостями та властивостями кристалів, фізико-хімічними та технологічними основами методів вирощування монокристалів, після ростовими методами управління властивостями кристалів, впливу умов кристалізації на фізичні та хімічні властивості кристалів, основними галузями застосування кристалів. А також одержання практичних навичок роботи з вирощування певних типів монокристалів.
Загальний обсяг	360 годин: лекції – 80 годин; практичні заняття – 40 годин; самостійна робота – 240 годин

Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Фізико-хімічні основи кристалізації.

Розділ 1. Вступ до курсу

Тема 1. Вступ до курсу «Наукові основи технологій вирощування монокристалів». Визначення поняття монокристалу. Історичний нарис розвитку методів вирощування монокристалів. Еволюція теорій росту кристалів. Загальні принципи одержання монокристалів. Загальний огляд методів одержання монокристалів.

Розділ 2. Будова кристалів. Основи кристалографії

Тема 2. Кристали та кристалічні структури. Природа кристалічного стану. Побудова кристалів із щільно упакованих гексагональних шарів атомів. Елементарні комірки структур гранецентрована кубічна (ГЦК) та гексагональна щільноупакована (ГЦУ). Помилки укладання та двійники. Зображення кристалів у вигляді координатних багатогранників.

Тема 3. Кристалічні ґратки та симетрія. Двовимірні ґратки. Підходи до вивчення кристалічних структур. Ґратки Браве та кристалічні системи. Симетрія кристала: точкові групи, просторові групи, симетрійні властивості та квазіперіодичні кристали. Симетрія та габітус кристалів. Центри та інверсійні осі симетрії

Тема 4. Опис площин та напрямків решітки в кристалах: індекси Міллера та символи осей зон. Зони, осі зон і закон зон, правило додавання. Зворотна решітка. Стереографічна проекція. Побудова стереографічної проекції кристалів. Застосування стереографічної проекції. Відображення симетрії точкової групи, співвідношення орієнтації.

Тема 5. Дифракція рентгенівських променів. Інтенсивності дифрагованих рентгенівських променів: рівняння структурного фактора та його застосування. Рівняння Шеррера: взаємні точки та вузли решітки. Рентгенівські методи: метод Лауе, осциляційний, ротаційний та прецесійний методи. Дифракція рентгенівських променів (і нейтронів) на впорядкованих кристалах. Рентгенівська дифракція полікристалічних матеріалів. Точні вимірювання параметрів решітки. Ідентифікація невідомих фаз.

Тема 6. Дифракція електронів. Конструкція сфери Евальда для дифракції електронів. Аналіз електронограм. Застосування дифракції електронів.

Розділ 3. Будова розплавів

Тема 7. Розплави. В'язкість розплавів. Порівняння кристалічних і розплавових структур. Радіальна функція розподілу і локальні атомні густини. Будова розплавів. Координація атомів у розплавах. Зв'язки в рідинах. Вплив температури на радіальну функцію розподілу. Теорії плавлення і рідкого стану.

Розділ 4. Основи термодинаміки

Тема 8. Основи термодинаміки. Рівняння Гіббса -Дюгема. Ентальпія: теплообмін і робота при перетвореннях тверде тіло в рідину. Співіснування твердих тіл і розплавів. Критична точка твердого розплаву. Термічне переохолодження та метастабільність. Зміни вільної енергії під час замерзання та плавлення.

Тема 9. Термодинамічна рівновага. Геометричне зображення фазової рівноваги. Р-Т фазова діаграма. Фазові процеси. Поліморфізм і метастабільні стани. Подвійні системи. Типи Р-Т-Х фазових діаграм подвійних систем. Метастабільні стани у фазовому просторі Р-Т-Х. Експериментальні методи дослідження фазової рівноваги Р-Т-Х.

Розділ 5. Теоретичні аспекти росту кристалів

Тема 10. Термічні концепції при кристалізації. Близька до рівноваги кристалізація. Енергетичний баланс в системі, що затвердіває. Енергетичні баланси на межі розділу кристал-розплав. Енергетичний баланс інтерфейсу – задача Стефана. Закон теплопровідності Фур'є. Закон охолодження Ньютона: коефіцієнти теплопередачі.

Тема 11. Затвердіння чистих речовин. Квазістатична теорія. Аналіз рухомих меж.

Тема 12. Баланс маси розчинених речовин: макросегрегація. Локальна та глобальна міжфазна рівновага. Відторгнення розчиненої речовини на межі розділу тверде тіло–рідина. Теорія макросегрегації Гуллівера–Шейля. Макросегрегація з твердотільною дифузєю. Модель Броді–Флемінгса для розподілу розчинених речовин. Криві сегрегації бінарних сплавів.

Тема 13. Затвердіння на плоскому фронті. Приграничні шари розчиненої речовини. Перехідна макросегрегація. Контроль складу. Конвекція в затвердіваючих розплавах. Ефективні коефіцієнти розподілу.

Тема 14. Інтерфейси кристал-розплав. Капілярність. Планарні та вигнуті інтерфейси. Ефект Гіббса-Томсона. Конституційне переохолодження. Міжфазна нестійкість в монокристалах і в полікристалах. Стабільні інтерфейси. Нестабільні інтерфейси. Масовий ріст кристалів: обмеження форм для стабільності.

Тема 15. Лінійна морфологічна стійкість. Плоско-фронтальне затвердіння в стаціонарному стані. Критерії стабільності. Загальний аналіз стабільності. Нелінійні моделі стійкості. Обмеження лінійної стабільності. Абсолютна стійкість у нелінійному режимі.

Тема 16. Нуклеаційний каталіз. Флуктуація-Дисипація. Гетерогенна рівновага. Гомогенне зародження. Гетерогенне зародження.

Тема 17. Ріст дендритів. Теорія дендритного росту. Дендритні приграничні шари. Дендритна капілярність. Гіпотеза граничної стабільності.

Тема 18. Структура інтерфейсу та кінетика росту. Фасетні інтерфейси і безгранні інтерфейси. Кінетичні теорії дворівневої моделі інтерфейсу.

Тема 19. Багатофазне затвердіння. Евтектика. Теорія евтектики Ханта–Джексона. Евтектичні мікроструктури. Розрахунок евтектичних мікроструктур. Направлене затвердіння поліфазних сплавів.

Тема 20. Швидке затвердіння. Нерівноважні фазові діаграми. Гіперохолодження. Термодинамічні межі. Захоплення розчинених речовин.

Розділ 6. Характеризація кристалів

Тема 21. Дефекти кристалів. Нульвимірні дефекти. Одновимірні дефекти. Двовимірні дефекти (площинні дефекти): межі зерен, стекування, протифазні границі, двійники, границі доменів. Поверхня кристалів. Тривимірні дефекти: включення, вторинні фази, пори.

Тема 22. Якість кристалів. Критерії якості кристалів. Якість кристалів і їх застосування.

Тема 23. Обрані методи характеризації кристалів. Травлення кристалів. Рентгенівська топографія. Скануюча електронна мікроскопія. Трансмісійна електронна мікроскопія.

Розділ 7. Наукові основи технологій вирощування кристалів

Тема 24. Огляд і класифікація основних методів вирощування кристалів. Контейнерні та безконтейнерні методи. Статичні та динамічні методи.

Тема 25. Методи очистки сировини. Методи сепарації порошків. Масова кристалізація і перекристалізація. Фізико-хімічні методи оцінки якості сировини.

Тема 26. Метод Вернейля. Структурні дефекти, характерні для метода

Тема 27. Метод Чохральського. Інверсія фронту кристалізації. Кристалізація в магнітному полі. Вирощування під флюсом.

Тема 28. Методи Обреїмова-Шубнікова, Стокбаргера, Бріджмена.

Тема 29. Метод Пфанна (зонне вирощування). ГСК. Метод Штебера, НЕМ-метод. Метод вирощування із гарнісажу.

Тема 30. Ріст кристалів у плаваючій зоні.

Тема 31. Метод Кіропулоса. Інверсія фронту кристалізації. Підживлення розплаву.

Тема 32. Метод Степанова. Капілярні та некапілярні методи вирощування профільованих кристалів. Структура профільованих кристалів. MPD-метод.

Тема 33. Вирощування кристалів з високотемпературних розчинів (вирощування з флюсу).

Тема 34. Вирощування кристалів з низькотемпературних розчинів (водних розчинів).

Тема 35. Гідротермічний і амонійнотермічний метод вирощування кристалів.

Тема 36. Вирощування масивних кристалів із газової фази.

Тема 37. Методи епітаксialного росту. Рідкофазна епітаксія (LPE). Парофазова епітаксія (VPE).

Тема 38. Порівняльна оцінка можливостей методів вирощування кристалів. Критерії вибору методу для вирощування заданого кристалу. Тенденції розвитку методів вирощування кристалів.

Розділ 8. Покращення властивостей кристалів

Тема 39. Методи відпалу кристалів. Вплив середовища відпалу на властивості кристалів. Відпал для зняття напруги. Вплив відпалу на щільність структурних дефектів в кристалах. Поводження домішок при відпалі.

Розділ 9. Моделювання процесів росту кристалів

Тема 40. Конвекція та контроль потоків у розплаві при рості кристалів. Тепло і масо перенос в системах Бріджмена-Стокбаргера та Степанова.

Структура навчальної дисципліни

Розділи і теми	Кількість годин			
	усього	у тому числі		
		лекції	практика	самостійна робота
1	2	3	4	5
Розділ 1				
Тема 1.		2		4
<i>Разом за розділом 1</i>	<i>6</i>	<i>2</i>		<i>4</i>
Розділ 2				
Тема 2.		2		4
Тема 3		4		6
Тема 4.		2		6
Тема 5.		2		6
Тема 6.		2		4
<i>Разом за розділом 2</i>	<i>38</i>	<i>12</i>		<i>26</i>
Розділ 3				
Тема 7.		2		6
<i>Разом за розділом 3</i>	<i>8</i>	<i>2</i>		<i>6</i>
1	2	3	4	5
Розділ 4				
Тема 8.		2		4

Тема 9		2		6
<i>Разом за розділом 4</i>	<i>14</i>	<i>4</i>		<i>10</i>
Розділ 5				
Тема 10.		2		4
Тема 11.		2		4
Тема 12.		2		6
1	2	3	4	5
Тема 13.		2		5
Тема 14.		2		5
Тема 15.		2		5
Тема 16.		2		5
Тема 17.		2		4
Тема 18.		2		6
Тема 19.		2		6
Тема 20.		2		4
<i>Разом за розділом 5</i>	<i>74</i>	<i>20</i>		<i>54</i>
<i>Залік</i>	<i>10</i>			<i>10</i>
Розділ 6				
Тема 21		2		6
Тема 22.		2		3
Тема 23.		2		6
<i>Разом за розділом 6</i>	<i>21</i>	<i>6</i>		<i>15</i>
Розділ 7				
Тема 24.		2		4
Тема 25.		2		6
Тема 26.		2		2
Тема 27.		2	10	6
Тема 28.		2	10	6
Тема 29.		3	10	4

	Тема 30.		2		4
	Тема 31.		2		6
	Тема 32.		3	10	6
	Тема 33.		2		8
	Тема 34.		2		6
	Тема 35.		2		6
	Тема 36.		2		4
	Тема 37.		1		3
	Тема 38.		1		4
	<i>Разом за розділом 7</i>	<i>145</i>	<i>30</i>	<i>40</i>	<i>75</i>
Розділ 8					
	Тема 39.		2		3
	<i>Разом за розділом 8</i>	<i>5</i>	<i>2</i>		<i>3</i>
Розділ 9					
	Тема 40.		2		7
	<i>Разом за розділом 9</i>	<i>9</i>	<i>2</i>		<i>7</i>
	<i>Екзамен</i>	<i>30</i>			<i>30</i>
	Усього годин	360	80	40	240
Теми практичних занять					
№ з/п	Назва теми				Кількість годин
1	Вирощування кристалу методом горизонтальної спрямованої кристалізації (ГСК)				10
2	Вирощування кристалу методом Степанова				10
3	Вирощування кристалу методом Чохральського				10
4	Вирощування кристалу методом Бріджмена -Стокбаргера				10
	Разом				40
Методи контролю					
Поточний контроль: Перевірка розуміння аспірантами теоретичного та практичного програмного матеріалу в цілому, здатність творчо використовувати накопиченні знання та вміння. Підсумковий контроль (залік + екзамен).					

Схема нарахування балів

Поточний контроль, практичні заняття, самостійна робота								Екзамен	Сума
Розділи 1-2	Розділ 3	Розділ 4	Розділ 5	Розділ 6	Розділ 7	Розділи 8-9	Разом		
T1-T6	T7	T8-T9	T10-T20	T21-T23	T24- T38	T39- T40			
4	4	4	8	4	32	4	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

Критерії оцінювання

Шляхом усного **опитування** викладач перевіряє розуміння аспірантами теоретичного програмного матеріалу в цілому (оцінюється до 4 балів).

Під час **практичного** заняття перевіряється здатність творчо використовувати накопиченні знання та вміння (оцінюється до 4 балів).

Залік проводиться після 3-го семестру по матеріалу за темами з 1 по 20. Аспіранту, який набув за результатами поточного контролю в семестрі 28 рейтингових балів, залік зараховується автоматично. Якщо аспірант має менше 28 балів, набуті ним бали за поточний контроль знецінюються, і він/вона складає залік за матеріалом тем 1-20 (питання 1-24).

Аспіранти складають екзамен після закінчення навчання за обсягом усього навчального матеріалу.

Екзамен та залік оцінюються за наступною системою балів:

40 балів	аспірант продемонстрував глибоке знання змісту питання; відповідь побудована лаконічно, чітко, логічно та послідовно; відповідь демонструє високий рівень засвоєння навчального матеріалу
30-39 балів	аспірант продемонстрував знання змісту питання; відповідь побудована лаконічно та послідовно, проте допущені певні неточності та похибки у логіці викладу матеріалу;
20-29 балів	аспірант продемонстрував певне знання змісту питання, відповідь є недостатньо послідовною, та логічною;
10-19 балів	аспірант продемонстрував уявлення з залікового питання, відповідь є фрагментарною, відповідь не послідовна, не логічна, не зовсім відповідає змісту питання
1-20 балів	відповідь часткова; відповідь не послідовна, не логічна, не зовсім відповідає змісту питання.
0 балів	відповідь відсутня, або не відповідає змісту питання

Питання до заліку/екзамену

1. Кристали та кристалічні структури. Природа кристалічного стану.
2. Кристалічні ґратки та симетрія. Симетрія та габітус кристалів.
3. Опис площин та напрямків решітки в кристалах.
4. Стереографічна проекція. Побудова стереографічної проекції кристалів
5. Дифракція рентгенівських променів. Інтенсивності дифрагованих рентгенівських променів. Рентгенівські методи.
6. Дифракція електронів та її застосування.
7. Розплави. В'язкість розплавів. Порівняння кристалічних і розплавових структур. Координація атомів у розплавах.
8. Рівняння Гіббса -Дюгема. Ентальпія: теплообмін і робота при перетвореннях тверде тіло в рідину.
9. Співіснування твердих тіл і розплавів. Критична точка твердого розплаву. Термічне переохолодження та метастабільність.
10. Термодинамічна рівновага. Геометричне зображення фазової рівноваги. Р-Т фазова діаграма.
11. Типи Р-Т-Х фазових діаграм подвійних систем. Метастабільні стани у фазовому просторі Р-Т-Х. Експериментальні методи дослідження фазової рівноваги Р-Т-х.
12. Термічні концепції при кристалізації.
13. Затвердіння чистих речовин.
14. Затвердіння розчинів. Відторгнення розчиненої речовини на межі розділу тверде тіло—рідина.
15. Затвердіння на плоскому фронті. Приграничні шари розчиненої речовини.
16. Інтерфейси кристал-розплав. Планарні та вигнуті інтерфейси.
17. Лінійна морфологічна стійкість. Критерії стабільності.
18. Нелінійні моделі стійкості. Абсолютна стійкість у нелінійному режимі.
19. Нуклеаційний каталіз. Гетерогенна рівновага. Гетерогенне зародження.
20. Флуктуація-Дисипація. Гомогенне зародження.
21. Ріст дендритів. Теорія дендритного росту.
22. Структура інтерфейсу та кінетика росту. Фасетні інтерфейси і безгранні інтерфейси.
23. Багатофазне затвердіння. Евтектика. Теорія евтектики Ханта–Джексона.
24. Швидке затвердіння. Нерівноважні фазові діаграми.
25. Дефекти кристалів.
26. Якість кристалів. Критерії якості кристалів.
27. Методи характеристики кристалів.
28. Класифікація основних методів вирощування кристалів
29. Методи очистки сировини. Фізико-хімічні методи оцінки якості сировини.
30. Метод Вернейля.
31. Метод Чохральського.
32. Методи Обреїмова-Шубнікова, Стокбаргера, Бріджмена.
33. Метод Пфанна (зонне вирощування).
34. Метод ГСК.

35. Метод Штебера, НЕМ-метод.
36. Метод вирощування із гарнісажу.
37. Ріст кристалів у плаваючій зоні.
38. Метод Кіропулоса.
39. Метод Степанова.
40. MPD-метод
41. Вирощування кристалів з високотемпературних розчинів
42. Гідротермічний і амонійнотермічний метод вирощування кристалів.
43. Вирощування масивних кристалів з газової фази.
44. Методи епітаксialного росту
45. Методи відпалу кристалів.
46. Конвекція та контроль потоків у розплаві при рості кристалів.

Рекомендована література

Основна література

1. Богданов В.В. Основи теорії росту кристалів: навчальний посібник / Харків: ХНУ ім. Каразіна, 2010. – 313 с.
2. Добровинская Е.Р. Энциклопедия сапфира / Х.:Институт монокристаллов,2004.–508 с.
3. Кристаллические материалы для оптики и электроники /Под ред.В.М.Пузикова, Х.: Ин-т монокристаллов,2012.– 544 с.
4. Пузиков В.М. Монокристаллы KDP\DKDP для мощных лазеров / Х.: Ин-т монокристаллов,2004.– 336 с.
5. Чугай О.Н. Модификация физических свойств кристаллов А2 В6 самоупорядочением дефектой структуры / Х.: ИСМА.,2008.– 276 с.
6. Benz, Klaus-Werner, i Wolfgang Neumann. 2014. «Introduction to Crystal Growth and Characterization».
7. Dhanaraj, Govindhan, Kullaiah Byrappa, Vishwanath Prasad, i Michael Dudley, ред. 2010. *Springer Handbook of Crystal Growth*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-74761-1>.
8. Feigelson, Robert S. 2015. «Crystal Growth through the Ages». В *Handbook of Crystal Growth*, 1–83. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-56369-9.00001-0>.
9. Glicksman, Martin Eden. 2011. *Principles of Solidification*. New York, NY: Springer New York. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7344-3>.
10. Greenberg, Jacob H. 2002. *Thermodynamic Basis of Crystal Growth*. Вип. 44. Springer Series in Materials Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-04876-4>.
11. Hammond, Christopher. 2009. *The Basics of Crystallography and Diffraction*. 3rd ed. International Union of Crystallography Texts on Crystallography 12. Oxford: Oxford University Press.

Допоміжна література

12. E.Dobrovinskaya, L.Lytvynov, V.Pischik. Sapphire. Material, Manufacturing, Applications. Publisher "Springer".2009,481 p.
13. Single Crystals of Electronic Materials, Edited by Roberto Fornary, WOODHEAD publisher ELSEVIER, Sept 2018, 583 p.
14. Физика сцинтилляторов. Материалы, методы, аппаратура – Харьков: "ИСМА", 2015. 270с.
15. Н.З.Галунов, О.А.Тарасенко. Формирование треков ионизирующих излучений в органических конденсированных средах. Харьков. ИСМА. 2011.180с.