

повышение содержания кластеров из 7, 13, 19 и т. д. атомов, характерных для некристаллографич. пентагональной упаковки (рис. 4). Поверхностные атомы в этих кластерах образуют завершённую координац. сферу. Поэтому работа их образования минимальна, а их число максимально по сравнению с зародышами, содержащими на 1 атом больше или меньше.

Образование зародыша на хорошо смачиваемой поверхности кристалла требует преодоления меньшего

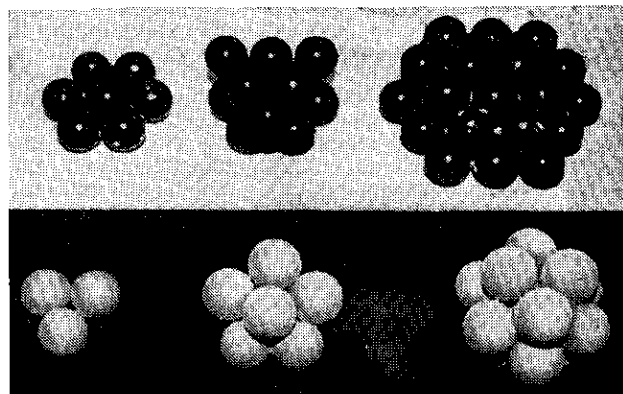


Рис. 4. Кристаллографическая плотнейшая (вверху) и пентагональная (внизу) упаковки.

барьера, и потому такое гетерогенное зарождение происходит при меньших переохлаждениях (см. *Эпитаксия*).

Понижение темп-ры не только уменьшает работу образования зародыша, но и экспоненциально повышает вязкость расплава, т. е. снижает частоту присоединения новых частиц к зародышу (рис. 5, а). В результате  $I(\Delta T)$  сначала достигает максимума, а затем становится столь малой (рис. 5, б), что при низких темп-рах расплав затвердевает, оставаясь аморфным. В расплавах со сравнительно малой вязкостью это возможно лишь при очень быстром ( $\sim 10^6$  К/с) охлаждении. Так получают

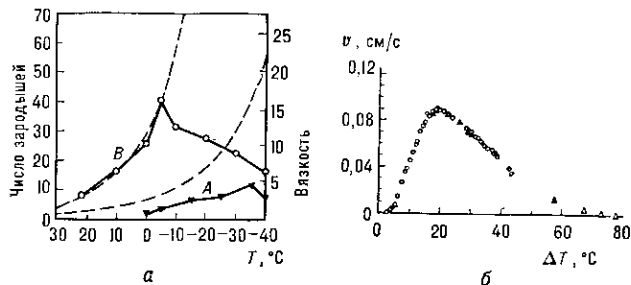


Рис. 5. Температурные зависимости скорости зарождения и роста кристалла: а) сплошные кривые — температурная зависимость числа зародышей цитриновой кислоты в переохлаждённом водном растворе (темп-ры насыщения: А—62 °С, В—85 °С); пунктир — увеличение вязкости (в паузах) растворов с понижением  $T$ ; б) скорость роста  $v$  кристаллов бензофенона из расплава как функции  $\Delta T$ .

аморфные сплавы металлов (см. *Аморфные металлы*). В жидком гелии образование зародышей возможно не переходом системы через барьер, а туннельным просачиванием сквозь него. При выращивании крупных совершенных кристаллов на «затравках» избегают появления спонтанных зародышей, используя слабо пересыщенные растворы или перегретые расплавы. Наоборот, в металлургии стремятся получить максимальное число центров  $K$ ., создавая глубокие переохлаждения (см. ниже).

Рост кристалла может быть послойным и нормальным в зависимости от того, является ли его поверхность в

атомном масштабе гладкой или шероховатой. Атомные плоскости, образующие гладкую грань, почти полностью укомплектованы и содержат сравнительно небольшое число вакансий и атомов, адсорбированных в местах, соответствующих узлам кристаллич. решётки следующего слоя. Края незавершённых атомных плоскостей образуют ступени (рис. 6, а). В результате тепловых флуктуаций ступень содержит некое число трёхмерных входящих углов — изломов. Присоединение новой частицы к излому не изменяет энергии поверхности и поэтому является элементарным актом роста кристалла. С увеличением отношения тепловой энергии  $kT$  к поверхностной энергии  $\epsilon$  (в расчёте на 1 атомное место на поверхности) плотность изломов увеличивается. Соответственно увеличивается конфигурац. энтропия и падает свободная линейная энергия ступени. При определ. отношениях  $kT/\epsilon$  (близких к 1, но несколько различных для разных граней) линейная энергия ступени обращается в 0, и ступень «размазывается» по грани, к-рая превращается в шероховатую, т. е. равномерно и плотно покрытую изломами поверхность (рис. 6, б). Связь поверхностной энергии с теплотой  $K$  позволяет заключить, что для веществ и темп-р, для к-рых изменение энтропии при  $K$  таково, что  $\Delta S/k > 4$ , все плотноупакованные грани — гладкие. Эта ситуация характерна для равновесия кристалл — пар, а также (для нек-рых веществ) для границы кристалл — расплав. Переход от шероховатости к огранению возможен при изменении концентрации в двухкомпонентных системах

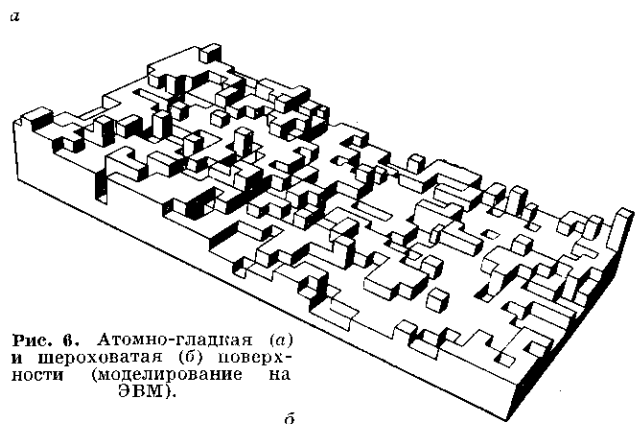
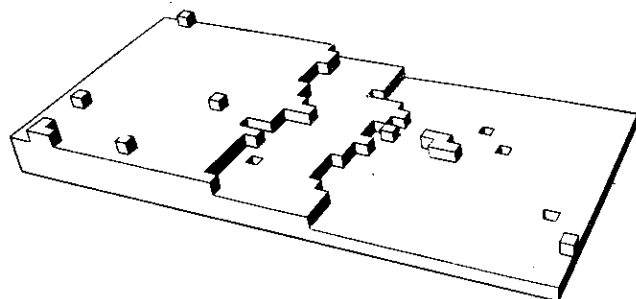


Рис. 6. Атомно-гладкая (а) и шероховатая (б) поверхности (моделирование на ЭВМ).

( $K$ . из растворов). Если  $\Delta S/k < 2$  (типично для плавления металлов), то поверхности любой ориентации шероховаты. При  $2 \leq \Delta S/k \leq 4$  отдельные гладкие грани сосуществуют с шероховатыми поверхностями (напр., кристаллы Ge и Si в расплавах, гранаты в расплавах и высокотемпературных растворах). Зависимость свободной энергии и скорости  $K$ . от ориентации поверхности имеет острые (сингулярные) минимумы для гладких (сингулярных) граней и округлённые (несингулярные) для шероховатых поверхностей.

Присоединение нового атома в любом положении на поверхности кроме излома меняет её энергию. Заполне-