

**Количественные исследования эволюции регенерирующего  
монокристаллического шара**

**Научный руководитель – Томас Виктор Габриэлевич**

***Ковалев Валентин Николаевич***

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: kovvn99.msu16@gmail.com*

Первые исследования регенерации кристаллов начались более двух веков назад. В то же время, только совсем недавно была предложена кинематическая модель, описывающая механизмы этого процесса [1]. Согласно модели (рис.1), генетическим предшественником субиндивидов на регенерирующей поверхности являются исходные шероховатости, которые в математическом представлении аппроксимируются дугами окружностей радиуса  $R_i$ , равномерно и случайно распределенного на  $[R_{\min}, R_{\max}]$ . Далее эти дуги покрываются гранями всех возможных простых форм, которые строятся как касательные к этим дугам, вследствие чего каждый субиндивид приобретает индивидуальный набор микрограней. Различия в скоростях роста микрограней и форме выступов способствуют реализации геометрического отбора как в пределах субиндивида, так и между последними.

Целью настоящей работы являлась проверка кинематической модели на количественное соответствие реальным ростовым процессам на примере регенерирующего шара алюмокалиевых квасцов (АКК)  $KAl(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$ . Исследования сферической поверхности шара АКК в ходе реальных экспериментов сводились к определению протяженностей плоских участков граней простых форм (рис.2). Как было показано ранее [1], степень разрастания плоских участков, как и вероятность их появления, чувствительна к шероховатости поверхности, описываемой величиной  $Sm/Rz$  (параметры шероховатости:  $Sm$  - средний шаг между неровностями, и  $Rz$  - максимальная вертикальная амплитуда). Для определения количественного соответствия проводилось численное моделирование, входными параметрами для которого брались: шероховатость исходной поверхности, задаваемая параметрами  $R_{\min}$  и  $R_{\max}$  ( $R_{\min} = Rz$ ,  $R_{\max} = Sm^2/4R_{\min}$ ),  $(hkl)$  зенитных макрограней ( $0 \leq |h|=|k|$ ,  $|l| \leq 10$ ) и их экспериментально определенные скорости роста.

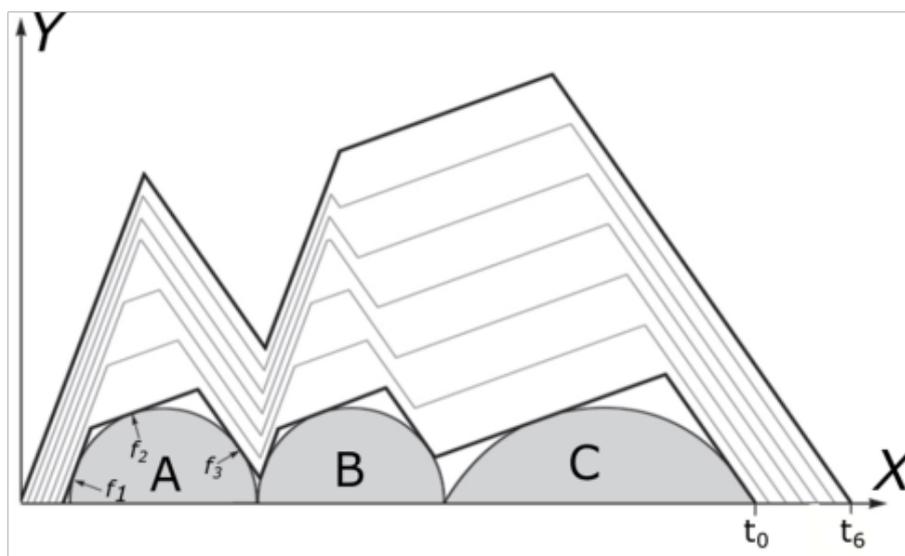
Полученные экспериментальные данные качественно согласуются с предсказанным моделью поведением различных плоских участков во времени. Относительно количественных данных, то изменение протяженности плоских участков ( $L$ ) граней простых форм в течение времени ( $t$ ) описывается степенной зависимостью вида  $L = kt^{a \approx 0.5}$ . Причем в тех случаях, когда  $Sm/Rz = 17.8$  и  $23.6$ , наблюдается почти полное соответствие модели и эксперимента. Расхождение модели и эксперимента демонстрируется в случае сверхгрубой поверхности ( $Sm/Rz = 3.6$ ), когда на поверхности, помимо округлых выступов, присутствуют и округлые впадины.

Продемонстрировано количественное соответствие модели и реального процесса регенерации шара, определено количественное воздействие шероховатости поверхности на протекание регенерации. Причиной наблюдаемых в ряде случаев расхождений является различие в морфологии элементов поверхности, приготовленной вручную и задаваемой моделью.

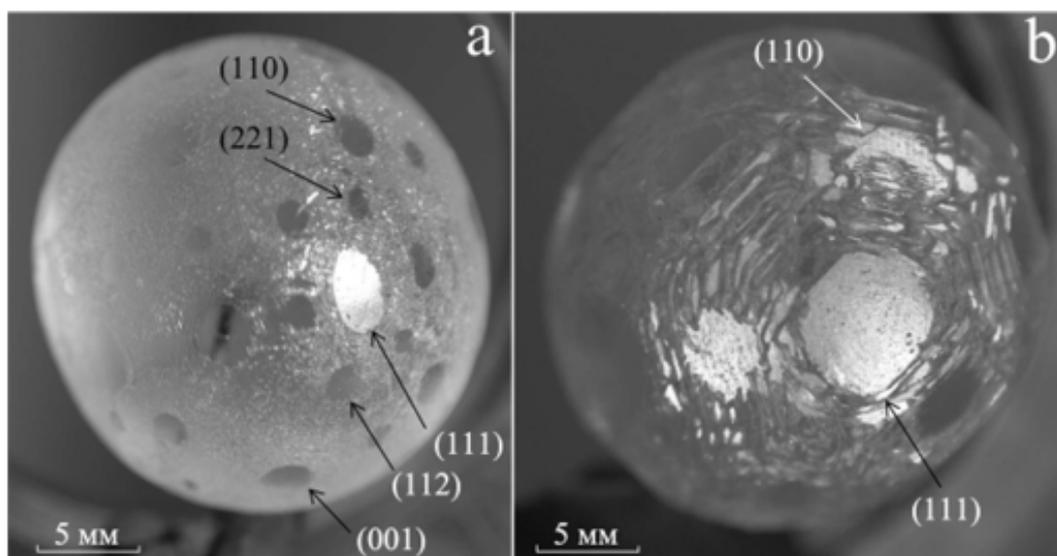
**Источники и литература**

- 1) Томас В.Г., Гаврюшкин П.Н., Фурсенко Д.А. // Кристаллография. 2015. Т. 60., № 3. С. 511.

### Иллюстрации



**Рис. 1.** Основные положения кинематической модели. Неровности на регенерирующей поверхности аппроксимируются дугами А, В и С (последняя отличается кривизной). Ломаные линии – изохроны роста, образованные микрогранями  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $f_3$ . На начальном этапе выступы покрываются максимально возможными индивидуальными наборами микрограней. Дальнейшая эволюция поверхности обусловлена реализацией двух типов геометрического отбора: 1 - отбор между гранями в пределах каждого субиндивида, который заключается в поглощении быстрорастущих граней относительно медленно растущими согласно критерию Бёргстрема (например, в пределах субиндивида А); 2 - отбор между субиндивидами, приводящий к поглощению соседей (на примере взаимоотношения субиндивидов В и С). Движущей силой такого отбора является различия в геометрии шероховатостей, исходно присутствующих на поверхности [1].



**Рис. 2.** Изменение формы монокристаллического шара алюмокалиевых квасцов в ходе его регенерации. В течение процесса происходит исчезновение плоских участков, отвечающих  $\{112\}$  и  $\{221\}$  (присутствуют на рис. а и отсутствуют на рис. б) и начинается поглощение (110) макроскопически шероховатой поверхностью. В то же время плоский участок, отвечающий  $\{111\}$ , непрерывно разрастается на поверхности, а плоские участки  $\{001\}$  незначительно изменяют протяженность или же сохраняют постоянную величину. Экспозиции в водном растворе (пересыщение  $\sim 0.5\%$ , температура  $42^\circ\text{C}$ ): а – 1.5, б – 7 ч [1].