

Зарождение и рост ГПУ фазы в гомогенных (Ar) и гетерогенных (Ar–Kr) кластерах по данным электронографии

А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, А.П. Конотоп, В.Н. Самоваров

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: konotop@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 8 августа 2014 г., после переработки 19 сентября 2014 г., опубликована онлайн 22 октября 2014 г.

Проведено электронографическое исследование зарождения и роста ГПУ фазы в гомогенных (Ar) и гетерогенных (Ar–Kr) кластерах, сформированных в адиабатически расширяющейся сверхзвуковой струе инертных газов. Средний размер исследованных кластеров варьировался от $2 \cdot 10^3$ до $1 \cdot 10^5$ атомов/кластер. Установлен пороговый размер кластеров, соответствующий появлению в них, наряду с ГЦК, ГПУ структуры. Обнаружено, что относительное содержание ГПУ фазы в монокристаллических кластерах растет с увеличением их размеров. При этом в гетерогенных кластерах относительный объем ГПУ фазы превышает объем в гомогенных кластерах такого же размера. Установлена корреляция между относительным объемом ГПУ фазы в кластерах и числом содержащихся в ГЦК матрице «дефектных» плоскостей, являющихся зародышами ГПУ фазы. Выявлено, что в очень больших ($\delta \geq 150 \text{ \AA}$) поликристаллических агрегациях доля ГПУ фазы достигает максимального значения и не изменяется при дальнейшем увеличении кластеров. Предложен механизм зарождения и роста ГПУ фазы в кластерах инертных газов.

Проведено електронографічне дослідження зародження та зростання ГЩП фази в гомогенних (Ar) та гетерогенних (Ar–Kr) кластерах, що сформувалися в надзвуковому струмені інертних газів, який адиабатично розширюється. Середній розмір кластерів, що досліджувалися, варіювався від $2 \cdot 10^3$ до $1 \cdot 10^5$ атомів/кластер. Встановлено пороговий розмір кластерів, який відповідає появі в них, разом з ГЦК, ГЩП структури. Виявлено, що відносний зміст ГЩП фази в монокристалічних кластерах зростає зі збільшенням їх розмірів. При цьому в гетерогенних кластерах відносний об'єм ГЩП фази перевищує об'єм в гомогенних кластерах такого ж розміру. Встановлено кореляцію між відносним об'ємом ГЩП фази в кластерах та числом «дефектних» площин, що містяться в ГЦК матриці, які є зародками ГЩП фази. Виявлено, що в дуже великих полікристалічних агрегациях ($\delta \geq 150 \text{ \AA}$) доля ГЩП фази досягає максимального значення та не змінюється при подальшому збільшенні розмірів кластерів. Запропоновано механізм зародження та зростання ГЩП фази в кластерах інертних газів.

PACS: 61.05.J– Дифракция и рассеяние электронов;
61.46.Bc Структура кластеров;
64.70.Nd Структурные переходы в наноразмерных материалах.

Ключевые слова: кластер, аргон, криптон, ГЦК–ГПУ переход, дефекты упаковки.

Проблема конкуренции и сосуществования ГЦК и ГПУ фаз (англ. fcc и hcp соответственно), а также механизмы ГЦК–ГПУ переходов в отвердевших инертных газах исследуются уже десятки лет. В то время как теоретические расчеты потенциальной энергии кристалла в рамках парного потенциала Леннарда-Джонса показыва-

ют преимущество в 0,01% гексагональной плотной упаковки, все инертные газы, за исключением гелия, в нормальных условиях имеют гранцентрированную кубическую решетку. Однако, как показали недавние эксперименты, устойчивая ГПУ структура в массивных образцах может реализоваться при сверхвысоких давле-

ниях. Так, в случае криптона появление ГПУ фазы и ее сосуществование с ГЦК фазой наблюдалось при давлениях $\geq 3,2$ ГПа [1], тогда как в аргоне ГПУ структура обнаруживалась при давлениях $\geq 49,6$ ГПа [2].

Еще один способ получения ГПУ структуры, но уже в тонких конденсированных пленках, имел место при осаждении инертных газов на охлажденную до 2–10 К подложку. Последующий отжиг таких пленок при сравнительно низких температурах ($T \approx \frac{1}{3}T_m$, T_m — температура плавления) сопровождался интенсивной рекристаллизацией конденсата, приводившей к появлению смешанной ГЦК–ГПУ [3] или чистой (в случае Ne) ГПУ структуры [4].

Теоретические и экспериментальные исследования, посвященные «ГЦК–ГПУ дилемме», проводились также на свободных кластерах инертных газов, структурные и физико-химические свойства которых в значительной мере определяются возросшим вкладом поверхностных атомов в суммарную свободную энергию системы. Так, например, в работе [5] в крупных свободных кластерах Ag электронографическим методом наряду с ГЦК были зафиксированы рефлекс ГПУ структуры, а в работе [6] в указанных кластерах впервые рассматривалась зависящая от размера последовательность перехода ГЦК→ГЦК+ГПУ. Появление ГПУ наряду с ГЦК максимумами наблюдалось и на электронограммах от больших ($\bar{N} \geq 2 \cdot 10^4$ атомов/кластер) гетерогенных кластеров Ag–Kr и Kr–Xe [7]. Заметим, что в [5–7] как однокомпонентные, так и бинарные кластеры получали путем адиабатического истечения в вакуум сверхзвуковой струи газа. В этом случае на начальном этапе формирования кластеров их температура близка к тройной точке и, следовательно, скорость самодиффузии атомов весьма велика, что способствует установлению равновесного состояния кластеров. Реализация ГПУ структуры также имела место в кластерах, образованных в неравновесных условиях, например, при впрыскивании струи газовой смеси Ag–Ne в сверхтекучий гелий с последующей коалесценцией аргоновых кластеров при $T = 40$ К. В результате в гелиевом паре возникали агрегации среднего размера $\bar{N} \approx 65000$ атомов/кластер с преобладанием гексагональной плотной упаковки атомов [8].

Цель настоящей работы — исследование электронографическим методом процесса зарождения и роста ГПУ структуры в чистых (однокомпонентных) Ag и бинарных Ag–Kr кластерах эквимольного состава в интервале средних характеристических линейных размеров $\delta \approx 50\text{--}200$ Å ($\bar{N} \approx 2 \cdot 10^3\text{--}1 \cdot 10^5$ атомов/кластер). Кластеры формировались путем объемной конденсации газа (Ag) или газовой смеси (Ag–Kr) в сверхзвуковой струе, истекавшей в вакуум. В работе предполагалось получить данные относительно размерного порога возникновения ГПУ фазы и дальнейшего роста объема этой фазы как в гомогенных, так и в гетерогенных кла-

стерах. Кроме того, представляло интерес исследовать размерную зависимость количества дефектов упаковки в кластерах, что позволило бы установить взаимосвязь порога возникновения ГПУ фазы и скорости ее роста с числом дефектов упаковки.

Методика эксперимента

Методика получения как гомогенных, так и гетерогенных кластеров инертных газов и исследования их структуры достаточно подробно описана в работах [5,9]. Как известно, варьированием температуры T_0 и (или) давления P_0 газа на входе в сверхзвуковое сопло можно изменять размеры кластеров. В настоящей работе температура T_0 изменялась в интервале 175–125 К, а давление P_0 от 1 до 8 атм. Смешанные кластеры формировались методом истечения в вакуум сверхзвуковой струи газовой смеси Ag–Kr. Концентрация компонентов в гетерогенных кластерах поддерживалась на уровне 50 ± 15 ат.%, что достигалось путем варьирования состава исходной газовой смеси, ее давления и температуры на входе в сопло согласно полученному нами ранее соотношению [10].

Линейный характеристический размер кластеров с ГЦК структурой (или ГЦК доменов в поликристаллических кластерах) δ определялся с помощью соотношения Селякова–Шеррера по уширению дифракционных максимумов с учетом дефектов упаковки (ДУ). Согласно [11]:

$$\frac{1}{\delta} = \frac{1}{\delta_m} - \frac{1}{\delta_{sf}} \text{ и } \frac{\delta}{\delta_{sf}} = \frac{\delta}{\delta_m} - 1 = \mu - 1, \quad (1)$$

где δ_{sf} — вклад в определяемый размер кластера дефектов упаковки, δ и δ_m — истинный и измеренный размеры соответственно, а величина μ равна отношению истинного размера кластера к измеренному. Как известно [11]:

$$\delta_{sf} = \frac{d_{111}}{1,5\alpha + \beta} \frac{1}{j \cos \varphi}, \quad (2)$$

где d_{111} — межплоскостное расстояние между плотноупакованными слоями; α — плотность ДУ деформационного типа, равная n_{sf}/n (n_{sf} — число дефектных плоскостей, n — полное число плоскостей); $j \cos \varphi$ — параметр, характерный для данного семейства плоскостей (в случае (111) он равен 1/4); β — плотность ДУ двойникового типа. Согласно [12], в кластерах инертных газов с $\delta \leq 100$ Å β гораздо меньше α . Кроме того, присутствие двойниковых ДУ не приводит к дополнительному уширению дифракционных максимумов, а лишь вызывает незначительную их асимметрию. Поэтому величиной β в (2) можно пренебречь. В дальнейшем, используя соотношения $n_{sf}/n = \alpha$ и

$n = 3\delta / d_{111}$, а также (2) и (1), получим следующее соотношение:

$$\mu = 1 + n_{sf} / 8. \quad (3)$$

Таким образом, определив значение α и вычислив δ , можно установить величину n_{sf} . В настоящей работе α рассчитывалась по смещению на дифрактограммах ГЦК пика (111) относительно его положения в бездефектном кристалле [12].

Среднее число атомов \bar{N} в кластерах определялось отношением объема кластера к объему, приходящемуся на 1 атом, равному отношению объема элементарной ячейки к количеству содержащихся в ней атомов. Объем кластеров с ГЦК структурой рассчитывался в приближении их сферичности с учетом, что δ — диаметр сформировавшихся сфер. Объем двухфазных кластеров $V = V_{fcc} + V_{hcp}$, следовательно, линейный характеристический размер $\delta = \sqrt[3]{\delta_{fcc}^3 + \delta_{hcp}^3}$. Значение V_{hcp} находилось из отношения интегральной интенсивности ГПУ рефлекса (101) к ГЦК (200), $I_{(101)}/I_{(200)}$, и известной формулы для интенсивности дифрагированных электронов [13], в которой выполнено сокращение на общие для обеих фаз множители:

$$\frac{I_{101}}{I_{200}} = \frac{|\Phi_{101}|^2 \left(\frac{\Omega_{fcc}}{\Omega_{hcp}} \right)^2 \frac{P_{101} d_{101}^2 V_{hcp}}{P_{200} d_{200}^2 V_{fcc}}}{|\Phi_{200}|^2} \approx 1,2 \frac{V_{hcp}}{V_{fcc}}, \quad (4)$$

где Φ_{hkl} — структурные множители для семейства плоскостей (hkl), Ω_{fcc} и Ω_{hcp} — объемы элементарных ячеек ГЦК и ГПУ фаз, P_{hkl} — множители повторяемости, d_{hkl} — межплоскостные расстояния.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены участки дифрактограмм от кластеров Ar–Kr эквимолярного состава, характеристический линейный размер которых составлял 80 и 170 Å ($\bar{N} \approx 6400$ и 60000 атомов/кластер соответственно). Наблюдавшиеся дифракционные картины указывали на формирование в кластерах растворов замещения. Однако если в случае $\delta = 80$ Å структура кластеров соответствовала ГЦК упаковке атомов, то в кластерах с $\delta = 170$ Å имело место сосуществование двух структур — ГЦК и ГПУ. Последнее подтверждалось присутствием на дифрактограммах наряду с ГЦК пиками несовпадающих с ними ГПУ рефлексов (100), (101), (103). Отметим, что различие параметров решеток ГЦК фаз в представленных на рис. 1 кластерах связано с уменьшением концентрации криптона в кластерах при увеличении их размеров. Закономерности формирования состава гетерогенных кластеров, образованных в сверхзвуковых струях газовых смесей, истекающих в вакуум, подробно исследованы в [10].

В дальнейшем, определив для кластеров различного размера отношение интенсивности ГПУ пика (101) к

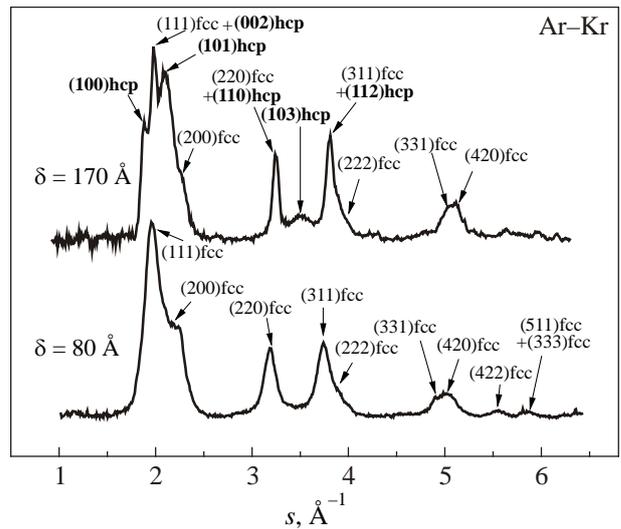


Рис. 1. Дифрактограммы от смешанных кластеров Ar–Kr с $\delta = 80$ Å ($a = 5,56$ Å, Ar(36%)+Kr(64%)) и 170 Å ($a = 5,49$ Å, Ar(57%)+Kr(43%)).

ГЦК — (200) и воспользовавшись уравнением (4), вычислялась величина V_{hcp}/V_{fcc} . Набор значений последней позволил количественно описать ГЦК→ГПУ переход, как функцию размера для гомогенных (Ar) и гетерогенных (Ar–Kr) кластеров. На рис. 2 представлена зависимость отношения V_{hcp}/V_{fcc} для кластеров Ar и Ar–Kr от их величины. Как видно на приведенном графике, в малых кластерах ($\delta \leq 80$ Å) реализовалась только ГЦК структура ($V_{hcp}/V_{fcc} = 0$). Слабые рефлексы ГПУ фазы обнаруживались только в кластерах с $\delta \approx 95$ Å ($\bar{N} \approx 11000$ атомов/кластер). Последующее увеличение размера кластеров сопровождалось быстрым ростом интенсивности ГПУ пиков, а следовательно, и отношения V_{hcp}/V_{fcc} . При этом скорость указанного процесса в бинарных кластерах была заметно выше, чем в однокомпонентных. Дальнейшее увеличение кластеров вызывало существенное замедление ско-

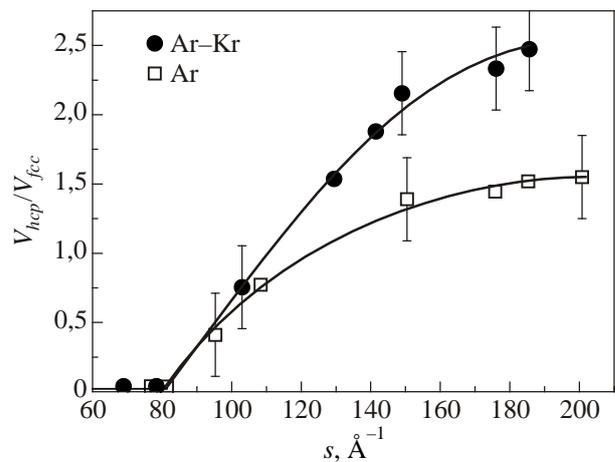


Рис. 2. Отношение объема ГПУ фазы к объему ГЦК фазы V_{hcp}/V_{fcc} в зависимости от размера однокомпонентных кластеров Ar (□) и бинарных кластеров Ar–Kr (●).

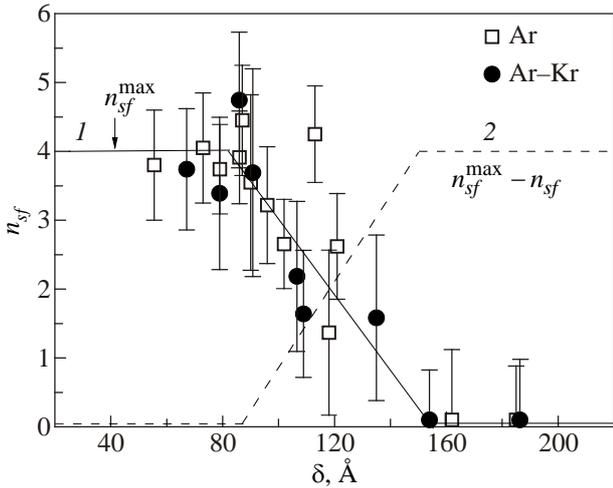


Рис. 3. Число «дефектных» плоскостей n_{sf} в ГЦК матрице кластеров Ar (\square) и Ar-Kr (\bullet) в зависимости от их размеров (1). Штриховой кривой (2) показано число «дефектных» плоскостей, принявших участие в образовании ГПУ фазы, $n_{sf}^{\max} - n_{sf}$.

рости накопления в них гексагональной фазы. Отметим, что в гомогенных кластерах Ar, начиная с $\delta \approx 150 \text{ \AA}$ ($\bar{N} \approx 43000$ атомов/кластер), отношение V_{hcp}/V_{fcc} становилось практически постоянным.

Для исследования механизма формирования ГПУ фазы в кластерах было проведено определение плотности дефектов упаковки деформационного типа α в ГЦК решетке. В малых кластерах ($\delta \approx 60 \text{ \AA}$) величина α составляла 0,07, и непрерывно уменьшалась с увеличением размеров кластеров. В случае $\delta \geq 150 \text{ \AA}$ α практически равна нулю. Зная α , а также размер кластера, легко установить число дефектных плоскостей в нем n_{sf} . Заметим, что области кристаллической решетки вблизи таких плоскостей представляют собой зародыши ГПУ фазы в ГЦК матрице. На рис. 3 (кривая 1) показана зависимость n_{sf} от δ для гомогенных и гетерогенных кластеров. Как видно на рисунке, в обоих случаях изменение n_{sf} с δ описывается одной кривой. При этом наблюдается корреляция зависимостей n_{sf} и V_{hcp}/V_{fcc} от δ . Так, в области малых кластеров ($\delta \leq 90 \text{ \AA}$), для которых отношение V_{hcp}/V_{fcc} постоянно и равно нулю, величина n_{sf} также постоянна. Количество пересекающихся дефектных плоскостей в этом случае максимально, т.е. равно 4, что характерно, как было показано в [12], для малых ГЦК агрегаций. Заметим, что величина n_{sf} равна числу дефектных плоскостей, оставшихся в кластере после формирования в нем ГПУ фазы. Очевидно, что $n_{sf}^{\max} - n_{sf}$ равно числу зародышей, принимавших участие в образовании ГПУ фазы. Количество таких зародышей растет с увеличением размера кластеров (рис. 3, кривая 2). Как видно на рис. 2 и 3, зависимости $n_{sf}^{\max} - n_{sf}$ и V_{hcp}/V_{fcc} имеют идентичный вид.

Увеличение доли ГПУ фазы в больших кластерах можно объяснить следующим образом. Крупные кла-

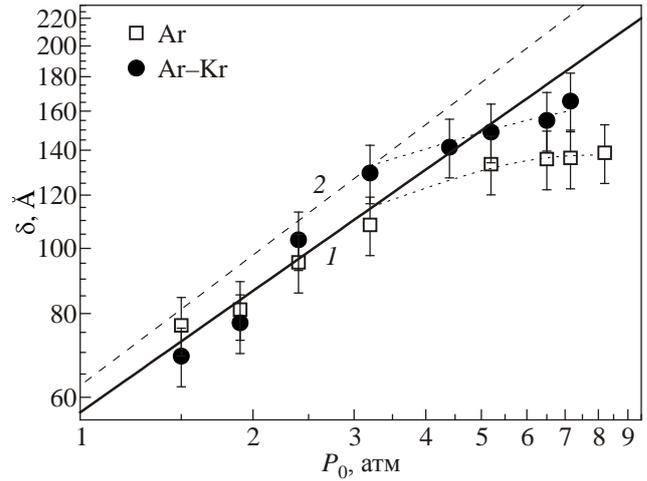


Рис. 4. Зависимость характеристического линейного размера чистых кластеров Ar (\square) и смешанных Ar-Kr (\bullet) эквимольного состава от давления газа (газовой смеси) на входе в сопло P_0 . Теоретическая зависимость $\delta(P_0)$ согласно соотношению Хагены для кластеров Ar (1), расчетная зависимость $\delta(P_0)$ согласно модифицированному соотношению Хагены для кластеров Ar-Kr (2). Пунктирные кривые отображают отклонение экспериментальных данных от расчетных.

стеры, выросшие из крупных жидких капель, в отличие от малых агрегаций охлаждаются медленнее и, следовательно, дольше сохраняют высокую температуру. В результате диффузионные процессы, определяющие зарождение и рост ГПУ фазы в крупных кластерах, протекают гораздо активнее, чем в малых. Более быстрый рост содержания ГПУ фазы в гетерогенных кластерах также, по-видимому, обусловлен большей по сравнению с гомогенными скоростью протекания диффузионных процессов. Дело в том, что в бинарных кластерах, представляющих собой твердый раствор атомов различного размера, возможно возникновение микронапряжений, способствующих увеличению скорости диффузии.

Когда линейный характеристический размер кластеров достигал 150 \AA , количество дефектных плоскостей n_{sf} в них обращалось в нуль, а величина V_{hcp}/V_{fcc} становилась постоянной (см. рис. 2 и 3). Для выяснения причины этой особенности была определена зависимость размера кластеров от давления P_0 при постоянной температуре $T_0 = 140 \text{ K}$. Результаты проведенных измерений представлены на рис. 4. Как видно на рисунке, в случае давлений $P_0 \leq 5 \text{ atm}$ значения δ , полученные из эксперимента, хорошо укладывались на зависимость, соответствующую уравнению Хагены [14]. Заметим, что сплошная кривая проведена согласно Хагене для кластеров Ar с использованием коэффициентов, установленных для нашего сопла [15], а штриховая проведена в соответствии с соотношением Хагены, модифицированным нами для бинарных кластеров Ar-Kr [16]. Как видно на рис. 4, до значения $P_0 = 5 \text{ atm}$ экспериментальные точки в пределах погрешности измерений

достаточно хорошо ложатся на теоретические кривые. Однако при дальнейшем повышении P_0 данные эксперимента отклоняются от расчета в сторону меньших значений δ с выходом их на постоянную величину. Такая особенность зависимости $\delta(P_0)$ ранее наблюдалась в [17] и объяснялась формированием в больших кластерах, образовавшихся из крупных жидких капель, отдельных, контактирующих друг с другом областей когерентного рассеяния. В этом случае метод структурной электронографии определяет не размер всего кластера, а только среднюю величину сформировавшихся в нем доменов. Таким образом, полученные нами экспериментальные данные указывали на поликристалличность больших ($\delta > 150 \text{ \AA}$) кластеров. По мере дальнейшего роста таких агрегаций средняя величина сформировавшихся в них доменов оставалась постоянной и, следовательно, рост кластеров осуществлялся только за счет увеличения количества этих доменов.

Из анализа графиков, представленных на рис. 2 и 3, следует, что в областях когерентного рассеяния (доменах) относительное количество ГПУ и ГЦК фаз постоянно и, кроме того, все присутствовавшие в них дефектные плоскости приняли участие в формировании ГПУ фазы.

Выводы

Впервые проведено электронографическое исследование зарождения и роста ГПУ фазы в гетерогенных и гомогенных кластерах, сформировавшихся при адиабатическом истечении инертных газов или их смесей в вакуум. Наблюдения осуществлялись в широком интервале размеров однокомпонентных Ar и двухкомпонентных кластеров Ar–Kr эквимольного состава. В результате проведенных исследований установлено следующее.

1. Зарождение ГПУ фазы как в гомогенных, так и в гетерогенных кластерах начинается, когда их размер превышает критический $\delta_c \approx 80\text{--}90 \text{ \AA}$.

2. В дальнейшем по мере роста кластеров относительное количество ГПУ фазы в них увеличивается, достигая максимального значения в больших ($\delta \approx 150\text{--}160 \text{ \AA}$) поликристаллических агрегациях. При последующем увеличении кластеров до $\delta \approx 200 \text{ \AA}$ доля ГПУ фазы не изменяется.

3. Содержание ГПУ фазы в гетерогенных кластерах почти в 2 раза превышает ее количество в гомогенных кластерах такого же размера.

4. С увеличением содержания ГПУ фазы число «дефектных» плоскостей, оставшихся в ГЦК матрице, уменьшается. В поликристаллических кластерах число таких плоскостей внутри отдельного домена равно нулю.

5. Предложен механизм зарождения и роста ГПУ фазы в кластерах инертных газов, согласно которому содержащиеся в ГЦК решетке пересекающиеся дефек-

ты упаковки служат зародышами ГПУ структуры. Медленное охлаждение крупных кластеров приводит к более полной реализации диффузионных процессов, что способствует большему содержанию в этих агрегациях ГПУ фазы.

1. D. Errandonea, B. Schwager, and R. Boehler, *High Press. Res.* **22**, 375 (2002).
2. D. Errandonea, R. Boehler, S. Japel, M. Mezouar, and L.R. Benedetti, *Phys. Rev. B* **73**, 092106 (2006).
3. С.И. Коваленко, Н.Н. Багров, *ФТТ* **11**, 2724 (1969).
4. С.И. Коваленко, Э.И. Индан, А.А. Солодовник, И.Н. Крупский, *ФНТ* **1**, 1027 (1975) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **1**, 493 (1975)].
5. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, В.Н. Самоваров, *ФНТ* **30**, 226 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 166 (2004)].
6. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, В.Н. Самоваров, *ФНТ* **34**, 1220 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 966 (2008)].
7. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, А.П. Конотоп, В.Н. Самоваров, *ФНТ* **37**, 670 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 532 (2011)].
8. N.V. Krainyukova, R.E. Boltnev, E.P. Bernard, V.V. Khmelenko, D.M. Lee, and V. Kiryukhin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 245505 (2012).
9. С.И. Коваленко, Д.Д. Солнышкин, Э.Т. Верховцева, В.В. Еременко, *ФНТ* **20**, 961 (1994) [*Low Temp. Phys.* **20**, 758 (1994)].
10. O.P. Konotop, S.I. Kovalenko, O.G. Danylchenko, and V.N. Samovarov, *J. Clust. Sci.* (in press); <http://dx.doi.org/10.1007/s10876-014-0773-6>.
11. В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич, *Теория рассеяния рентгеновских лучей*, Изд-во МГУ, Москва (1972).
12. С.И. Коваленко, Д.Д. Солнышкин, Е.А. Бондаренко, Э.Т. Верховцева, *ФНТ* **23**, 190 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 140 (1997)].
13. Б.К. Вайнштейн, *Структурная электронография*, Изд-во АН СССР, Москва (1956).
14. O.F. Hagen, *Z. Phys. D* **4**, 291 (1987).
15. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, В.Н. Самоваров, *Письма в ЖТФ* **34**, 87 (2008) [*Tech. Phys. Lett.* **34**, 1037 (2008)].
16. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, А.П. Конотоп, В.Н. Самоваров, *Письма в ЖТФ* **38**, 64 (2012) [*Tech. Phys. Lett.* **38**, 332 (2012)].
17. А.Г. Данильченко, С.И. Коваленко, В.Н. Самоваров, *ФНТ* **32**, 1551 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 1182 (2006)].

Nucleation and growth of a hcp phase in homogeneous (Ar) and heterogeneous (Ar–Kr) clusters by the electron diffraction data

O.G. Danylchenko, S.I. Kovalenko, O.P. Konotop, and V.N. Samovarov

The electron diffraction study of nucleation and growth of the hcp phase in homogeneous (Ar) and het-

erogeneous (Ar–Kr) clusters formed in adiabatically expanding supersonic jets is carried out. The average cluster size ranged from $2 \cdot 10^3$ to $1 \cdot 10^5$ atom/cluster. The threshold cluster size corresponding to the appearance of an hcp phase in addition to the fcc structure is determined. It is found that the relative volume of the hcp phase in monocrystalline clusters increases with their size. In heterogeneous clusters, the hcp phase relative volume is greater than that in homogeneous clusters of the same size. We established a correlation between the hcp phase relative volume and the number of «defective» planes contained in the fcc matrix, which were the nuclei of the hcp phase. It is

found that in very large polycrystalline aggregations ($\delta \geq 150 \text{ \AA}$) fraction of the hcp phase reaches its maximum and does not change with further cluster growth. A mechanism of nucleation and growth of the hcp phase in rare gas clusters is proposed.

PACS: 61.05.J– Electron diffraction and scattering;
61.46.Bc Structure of clusters;
64.70.Nd Structural transitions in nanoscale materials.

Keywords: cluster, argon, krypton, fcc-hcp transition, stacking faults.