

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОПОРИСТОСТИ ^{*)}

Змиевская Г.И.

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук,
zmig@mail.ru*

Успешной реализацией вычислительного эксперимента /ВЭ/ в плазме стало создание кинетических кодов для решения задач бесстолкновительной сильно неравновесной плазмы [1]. С этими кодами могут быть согласованы кинетические модели неравновесной стадии фазового перехода /ФП/ (нуклеации) формирования вакансионно-газовой пористости в тонких слоях поверхности «металл-диэлектрик» при имплантации ионов инертных газов, изменяющих механические, электрические, оптические и теплофизические свойства материалов при заполнении пористости различными веществами, в том числе, имеющими большой коэффициент преломления, при этом возникает перспектива для изменений оптических свойств материала. Модели пористых сред могут использоваться для изменения коэффициента теплопроводности в задачах управляемого горения, также при блистеринге в диагностических зеркалах, при плазменной обработке поверхностей с пористо-капиллярной структурой и др. Под ВЭ понимают расчет на компьютере аналога изучаемого физического процесса, ВЭ позволяют изучать явления в тех условиях, где кончаются области применения теории, или может служить основой для новых теорий.

ВЭ нуклеации фазового перехода 1-го рода ФП, известной как задача Фольмера-Беккера-Деринга-Френкеля-Зельдовича [2] модифицирована на нестационарные случаи с решением квазилинейных уравнений типа Фоккера-Планка-Колмогорова/ФПК/, учитывающих дальнедействующий осциллирующий потенциал взаимодействия кластеров зародышей ФП в твердом теле методом стохастической молекулярной динамики /СМД/, основанном на решении стохастических уравнений Ито-Стратоновича /СДУ/[3, 4] численным методом с среднеквадратичной сходимостью второго порядка и алгоритмами с бесконечной областью устойчивости для СДУ с аддитивным шумом, построенных для вероятностных мер, которые зависят от фазовых переменных размеров кластеров зародышей ФП, т.е. пор, и их центров масс в кристаллической решетке. В качестве примера ВЭ модели нуклеации ФП: в слоях образца *Mo/Si* под действием ионов Xe^{++} с энергией 5 кэВ за 10^{-4} с при нормальном падении потока (10^{15} - 10^{17} ион/см²) могут формироваться цепочки пор длиной до 35 нм параллельно потоку в зависимости от его флюенса и температуры поверхности.

Исследовательские программы СМД решения квазилинейных уравнений ФПК [3, 4] могут быть частью «гибридных» кодов, в которых плазменные коды дополнены расчетами ФП.

Благодарность: соавтору и соисполнителю грантов РФФИ (2009-2019) А.Л. Бондаревой за большой вклад в разработку вычислительных средств исследований.

Литература

- [1]. Сигов Ю.С. <<Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды>> // Сост. Змиевская Г.И., Левченко В.Д. М.: ФИЗМАТЛИТ, <<НАУКА >>, 2001. 288 с.
- [2]. Зельдович Я.Б. К теории образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. 1942. Т. 12. № 11–12. С. 525.
- [3]. Змиевская Г.И. Неравновесная кинетика начальной стадии фазового перехода // ФТТ, 2020. Т. 62, №1, С. 40-45,
- [4]. Бондарева А. Л., Змиевская Г.И., Левченко В.Д. Численные методы моделирования образования карбида кремния // XXXVIII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 14 – 18 февраля 2011

^{*)} [DOI – тезисы на английском](#)