кинетика возникновения пористости и изменение свойств материалов в численных моделях

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Миусская пл., д.4, Москва, Россия

Моделирование дефектообразования в слоях покрытия радиационно стойкого карбида кремния обнаружило фундаментальные свойства формирования наноразмерной пористости радиационными потоками, что может быть перспективной разработкой для расчета изменений параметров оптических свойств при заполнении пор веществами с известными характеристиками. Модели пористости возникающей при блистеринге создают среду с неупорядоченной пористостью, подбором параметров слоев в многослойных образцах возможно использовать такие расчеты при проектировании или создании сред со свойствами одномерного фотонного кристалла [1]. Область применения пористых полупроводников (например, карбида кремния) обширна, и требует уточнения свойств при существенном увеличении удельной площади поверхности, изменении теплопроводности и других физических свойств материала. Карбид кремния может рассматриваться также как наноразмерное включение в композиты ракетно-космических материалов, при этом изучается пористость в карбиде кремния при разной радиационной нагрузке и оценивается роль физических процессов на границе зерен. Явление кластеризации (или фазовый переход 1-го рода) моделируется как диффузия в фазовом пространстве размеров кластеров. Изменение размера может происходить также в результате неупругих столкновений зародышей пор при их броуновском движении /БД/ в кристаллической решетке, которое вызвано дальнодействующими потенциалами взаимодействия зародышей друг с другом и градиентами концентраций дефектов в объеме тонкого облучаемого слоя. При рассмотрении процессов движения «островков»-зародышей пор в плазмоподобной среде [2] решетки металла (или по поверхности зерен карбида кремния в металле) такое взаимодействие является косвенным упругим, поскольку определяется свойствами кристаллической решетки, а именно ее акустическими фононами и Фриделевскими осцилляциями плотности электронов твердого тела [3]. Взаимодействие потока ионов с поверхностью формирует распределение зародышей вакансионно-газовых пор, которое не будет равновесным и стационарным, а будет изменяться с характерными временами от нсек до мксек. Вследствие флуктуационной неустойчивости процесса зародышеобразования, связанной с нелинейной зависимостью потенциала Гиббса образования зародыша от его размера и рядом других факторов, можно изменить и скорость образования зародышей новой фазы и ФР зародышей по размерам (которую можно найти, решая системы стохастических дифференциальных уравнений для модели диффузионных Марковских процессов фазового перехода формирующих пористость). Анализируются нелинейные факторы модели, влияющие на эволюцию функции распределения внедренных вакансионно-газовых дефектов в карбиде кремния.

Литература

1. А.Л. Бондарева, Г.И. Змиевская // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2014, № 6, с. 79–85
2. Ю.С. Сигов Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды/Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. ⎯ М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. ⎯ 288 с.
3. А.А. Бeрзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов// ФТТ. 1996. 38 № 5. с. 1349-1356.