НеРавновесные ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ: ЗАКОНОМЕРНОСТИ И ПРИЛОЖЕНИЯ [[1]](#footnote-1)\*)

Змиевская Г.И.

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия zmig@mail.ru

Стохастическая молекулярная динамика неравновесных плазмохимических столкновений [1] и дисперсных сред [2, 3] согласуется с плазменными кодами. Ранее кинетические коды плазмы [4] были реализованы для пылевой плазмы дивертора термоядерного реактора и исследования баллистического режима электронов полупроводников.

Фазовые переходы (ФП) 1-го рода на начальной неравновесной стадии, когда формируются зародыши ФП (капли плазмы разряда жидкой или кристаллической фазы конденсации на поверхности) называют нуклеацией. При воздействии потоков ионов инертных газов на образец формируются неточечные вакансионно-газовые дефекты (ВГД) в кристаллической решетке, происходит ФП. Размеры зародышей ФП и их распределение в объеме образца определяют решением квазилинейных кинетических уравнений в частных производных Фоккера-Планка с нелинейными коэффициентами (Колмогорова-Феллера, Смолуховского) и уравнений стохастического аналога Ито в смысле Стратоновича устойчивыми численными методами семейства Монте-Карло (схема Розенброка).

Нуклеация ФП представлена суперпозицией двух процессов Броуновского движения (БД): диффузии в фазовом пространстве размеров зародышей (или их кластеризации) и диффузии в декартовых координатах объема модели, т.е. моделью броуновской частицы с переменной массой. Флуктуации размера кластеров зародышей ФП, как капель конденсации в плазме разряда, так и ВГД в твердом теле, зависят от модели энергии Гиббса, как суммы вкладов энергий образования зародыша, что позволяет рассчитывать плотность вероятности распределения кластеров по размерам в точках объема. БД кластеров ВГД (в случае имплантации ионов) инициируется косвенным упругим взаимодействием между ВГД и границами образца. Возникновение ВГД возмущает колебания акустических фононов решетки, частоты которых изменяются при рассеянии на дефектах, что учтено при выводе зависимости потенциала взаимодействия от координат ВГД в объеме и модулей упругости среды [5]. Броуновская диффузия в расчетах ФП в металлах и полупроводниках зависит также от фриделевских осцилляций электронной плотности. В процессе расчета траекторий БД потенциалы взаимодействия ВГД учитываются самосогласованным образом при расчете траекторий стохастической молекулярной динамики.

Вычислительные эксперименты пористости нанодисперсной среды могут быть востребованы в моделях сенсоров и лазерных полупроводниковых плазменных антенн, а также при плазменной обработке поверхностей с пористо - капиллярной структурой. Численная оценка скорости изменения размеров пор и распределения локальных упругих напряжений, создаваемых нанопорами, представляет интерес для управления свойствами пористых полупроводников, для создания матриц диэлектриков с включениями наночастиц металла в интересах плазмоники. Варьируя параметры имплантации ионов (длительность и интенсивность потока, площади и направления воздействия, температуры поверхности), можно в широких пределах управлять дисперсностью сред.

Литература

1. Змиевская Г.И.// Физика плазмы, 1997, Т. 23, №4, С. 368-382.
2. Змиевская Г.И., Бондарева А.Л. //Физика плазмы, 2011, Т.37, № 1, С. 93-102.
3. Змиевская Г.И.// ФТТ, 2020. Т. 62, №1, С. 40-45,
4. 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 c.
5. Морозов А.И., Сигов А.С.//УФН, 1994, Т. 164, № 3, С. 243–261.}
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/L/Pt/en/GA-Zmievskaya_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)