Наноструктурный тонкий слой пористости карбида кремния: компьютерное моделирование Броуновского движения дефектов

Змиевская Г.И.

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

К наноструктурированным средам относятся пористые полупроводниковые материалы, размеры пор и кристаллической части образца составляют от единиц до сотен нанометров, а широкий диапазон пористости в материалах создает не только различную дисперсность, но и оптические, люминесцентные и электрические свойства, что предполагает их использование в солнечных батареях, фотодетекторах, светодиодах, фотонных кристаллах, электролюминесцентных дисплеях, термоизоляторах, волноводах, а также разного рода датчиках, газоанализаторах, сенсорах. Свойства пористого карбида кремния, SiC, и методы создания пористости актуальны, в том числе и средствами вычислительного эксперимента [1] – моделирования плазмоподобной кристаллической среды с неточечными радиационными дефектами(порами), формирование и броуновское движение которых определяется упругими свойствами решетки (включая колебания акустических фононов). При температуре 900 K моделировалась имплантация потока ионов Xe++ с энергией ~5 кэВ, время облучения задано дозой ~1016 см–2, перколяционный анализ распределения пор позволил оценить размеры предтрещин ~40 – 60 нм и растягивающие напряжения в решетке порядка 1015 ГПа, определена степень дисперсности среды в зависимости от условий численных экспериментов и спектры фликер-шума. Условия создания структур пористости были рассмотрены в модели броуновского движения дефектов как стохастической системы – генератора Ван-дер-Поля в условиях автогенерации [2]. Поведение 2D модели изучено с помощью кинетического уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова для плотности переходной вероятности (кинетической функции распределения f(x,V,t), где х – координата, V – скорость, t – время) и стохастического аналога модели- стохастических дифференциальных уравнений Ланжевена. Приводится диагностика f(x,V,t), и ее визуализация для различных режимов генератора Ван-дер-Поля при варьировании интенсивности шума. Модель позволяет сравнить состояние фазового пространства стохастических переменных при изменении соотношения физических величин, которыми в модели характеризуется фазовый переход: α, β, γ – коэффициентах обратной связи, линейного и нелинейного трения соответственно.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 18-018-00436.

Литература

1. G.I. Zmievskaya, T.A. Averina, and A.L. Bondareva. Numerical solution of stochastic differential equations in the sense of Stratonovich in an amorphization crystal lattice model. Applied Numerical Mathematics,15–29, 2015.
2. 2 Yu.L. Klimontovich. Statistical Theory of Open Systems. Dodrecht: Kluwer Acad, Publ., 1995.