

УДК 537.533

## **Численная модель образования гелиевых блистеров при воздействии плазменных потоков на поверхность твердого тела**

*А. Л. Бондарева, Г. И. Змиевская*

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва, Россия

*Образование вакансионно-газовых пор или блистеров при взаимодействии поверхностей металлов и диэлектриков с плазмой моделируется как процесс кластеризации примесных дефектов на временах флуктуационной стадии фазового перехода 1-го рода. Распределения кластеров дефектов по размерам и положению в решетке получены численно методом стохастического аналога. Исследована роль отжига.*

Решение таких радиационно-технологических проблем как распыление поверхности, внедрение атомов в решетку, блистеробразование, флекинг, рост вискаров, образование различных химических соединений и т. д. требуют создания эффективных математических моделей. Для управления возникновением и подавлением высокотемпературного блистеробразования в материалах, подвергающихся воздействию плазменных потоков, необходимо изучить причины его возникновения.

Полагаем, что под постоянным воздействием потока частиц в твердом теле происходит фазовый переход 1-го рода, при котором формируются кластеры дефектов, а именно, газовые пузырьки или блистеры.

Формирование кластеров дефектов в кристаллической решетке моделируется суперпозицией последовательно реализуемых двух Винеровских случайных процессов: во-первых, стохастической диффузией в пространстве размеров кластеров, обусловленной флуктуационно-неустойчивым процессом возникновения пузырьков газа, во-вторых, пространственной диффузией кластеров под действием сил, учитывающих взаимодействие кластеров дефектов между собой, а также с электронами и фононами решетки. Учтены также неупругие столкновения кластеров, приводящие к их слиянию, в качестве модели выбрана скачкообразный Марковский процесс (МП).

Модель фазового перехода и метод описания согласуются с кинетическим моделированием бесстолкновительной плазмы [1] и столкновительных плазмохимических процессов в разряде [2].

В работах [3, 4] по образованию зародышей жидкой фазы в пересыщенных парах воды приведена стохастическая модель кластеризации: столкновения частиц пара с поверхностью кластера новой фазы создают флуктуации его размера. Баланс сил, действующих на зародыш, приводит к росту (либо деградации) его размера, и этот процесс является диффузионным Винеровским МП в пространстве размеров кластеров. Я. Б. Зельдович [3] вывел уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова (ФПК) для распределения зародышей по размерам в одномерном случае. В результате качественного анализа задачи Фольмера-Зельдовича был выведен "множитель Зельдовича", хорошо известный в задачах газодинамики конденсирующихся сред. Численное решение нелинейной задачи описания флуктуационной стадии образования зародышей для случая произвольного вида потенциала Гиббса, являющегося функцией распределения зародышей по размерам, было осуществлено методом стохастического аналога [5, 6], разработанного для решения задач космо- и плазмифики [7], а также для флуктуационно-обусловленных явлений в твердых телах [8, 9], когда модель образования кластеров дефектов или пор подобна модели конденсации жидкости из пара, в этом случае рост поры сопровождается испарением частиц (вакансий) внутрь газового пузырька, тогда как при конденсации определяющим процессом агрегации зародышей является прилипание частиц к поверхности.

В случае высокотемпературного блистеринга в слабоанизотропной кристаллической решетке решение кинетических уравнений реализовано методом стохастического аналога, т. е. решены системы нелинейных стохастических дифференциальных уравнений Ито-Стратоновича (СДУ) с функциональными коэффициентами, зависящими от функции распределения блистеров по размерам и координатам (ФР) в приповерхностном слое материала.

Распределение кластеров дефектов по глубине образца, скорость изменения среднего размера дефектов, отклонения от него в процессе развития флуктуационных возмущений в среде и изменения параметра порядка фазового перехода получены интегрированием ФР. Исследованы различные модели блистеринга и роль температуры в локализации кластеров дефектов.

Успех использования уравнений стохастического аналога связан с появлением новых численных методов решения систем СДУ [10].

В основе метода стохастического аналога лежат стохастические свойства кинетических уравнений. Дело в том, что один и тот же случайный процесс  $X(t) = \{t; x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , где  $x_1, x_2, \dots, x_n$  координаты Марковского процесса,  $X_1 \Rightarrow X_2, X_2 \Rightarrow \dots$  характеризуется, с одной стороны, плотностью переходной вероятности (или ФР) МП  $f(t_1; X_1), f(t_2; X_2), \dots$  и уравнениями ФПК (известными в теории вероятности как уравнения Колмогорова), с другой стороны, временную эволюцию самого МП:  $X_1(t_1), X_2(t_2), \dots$  можно опреде-

лить решением СДУ Ито. Результатом их решения являются математическое ожидание и дисперсия флуктуирующей физической величины; по реализации МП можно восстановить в моменты времени  $t_1, t_2, \dots$  ФР, входящие в уравнения ФПК. Эти идеи и новые вычислительные возможности позволили поставить задачу численного исследования распределения дефектов кристаллической решетки по размерам и их расположение в узлах кристаллической решетки, т. е. рассмотреть кластеризацию дефектов (модель, ранее рассмотренную в [11, 12] для кластеризации дефектов при низких температурах аналоговым вычислительным методом) с точки зрения стохастического кинетического моделирования.

Случайный процесс  $\{X(t), t \geq 0\}$  кластеризации дефекта подобен движению броуновской частицы (БЧ), перемещение которой по пространству кристалла определяется взаимодействием кластеров с электронами и фононами решетки и друг с другом, размер БЧ на каждом временном шаге претерпевает флуктуационное возмущение, которое задается балансом сил формирования кластера. Последовательно решаются две задачи: начальное распределение типа "броуновского старта" вакансий по узлам и размерам подвержено диффузии в пространстве размеров, а затем под действием сил взаимодействия кластеры вакансий заполняются частицами газа и перемещаются по пространству. Выход на границу расчетной области и пересечение траекторий рассматриваются особо. Существует возможность слияния кластеров.

Сформулированы уравнения математической физики (УМФ) типа Фоккера-Планка-Колмогорова и Фоккера-Эйнштейна-Крамерса [13, 14] с функционал-коэффициентами, зависящими от кинетических функций распределения, которые определяются решением УМФ. Поскольку упомянутые уравнения второго порядка в частных производных с нелинейными коэффициентами достаточно сложны для решения (известны отдельные весьма упрощенные случаи численного решения), мы применим новый численный метод стохастического аналога, позволяющий заменить решение УМФ параболического типа системой стохастических дифференциальных уравнений Ито, для которых доказаны теоремы существования и единственности решения, существует строгая связь между коэффициентами УМФ и СДУ, а также разработана процедура грамотного вычисления стохастического интеграла для приращения Винеровского процесса (используя форму Стратоновича для СДУ Ито). В отличие от традиционного моделирования фазового перехода с помощью уравнения для эволюции "параметра порядка", в настоящей постановке мы располагаем статистической информацией о состоянии фазового пространства, интегрированием функции распределения которого можно получить параметр порядка, математическое ожидание среднего размера кластера дефектов и другие величины.

Таким образом, неравновесные процессы образования газовых пузырьков в кристаллической решетке описываются численной стохастической моделью, которая позволяет анализировать во времени функцию распределения кластеров дефектов по размерам и их распределение в пространстве кристаллической решетки. Размеры расчетной области и условия на границах выбираются исходя из возможностей используемой вычислительной техники.

Существует ряд возможностей реализации стохастической модели:

модель открытой системы, в которой образование кластеров дефектов в решетке не влияет на свойства окружающей среды; поток частиц, "питающих" образование зародышей, полагается заданным и постоянным;

модель формирования зародышей новой фазы, когда фазовый переход оказывает влияние на тепловой баланс и концентрацию частиц, формирующих зародыш.

Первая модель реализована в данной работе, вторая может быть реализована при расчете кластеризации паров металлов в разряде над поверхностью электродов.

В последующих разделах представлены основные приближения физической постановки; последовательно решаемые кинетические уравнения с конкретизацией коэффициентов, зависящих от математического ожидания определяемой величины; средние размеры кластеров дефектов и математическое ожидание положения кластеров, стохастические уравнения — аналоги для рассматриваемого Марковского процесса, включая скачкообразные процессы слияния; результаты моделирования блистринга.

### Физическая постановка задачи

Данная работа представляет собой численные исследования, описывающие кинетику зарождения блистеров в твердом теле.

Блистер — большой газовый пузырь (размером порядка 1 мкм), образующийся в приповерхностном слое твердого тела под действием бомбардировки поверхности ионами газов.

Блистринг наблюдается при облучении металлов и диэлектриков, кристаллических и аморфных материалов ионами плохо растворимых газов, в особенности гелия.

Блистеры могут образовываться на поверхности солнечных батарей при облучении их солнечным ветром, в приповерхностном слое первой стенки термоядерного реактора; на материалах, помещенных в газовый разряд, в металлических зеркалах для лазерной локации в космосе и других приложениях.

В данной работе в качестве примера рассматривается следующая задача: на поверхность Ni по нормали к поверхности подает поток ионов He с энергией  $E = 10$  кэВ и дозой  $\Delta\Phi \sim 10^{18}$  ион/см<sup>2</sup>, образец находится при температуре  $T = 1000$  К =  $0,58 T_{\text{пл}}$  Ni. Для Ni ограничение по дозам составляет примерно  $10^{16} \leq \Phi \leq 10^{19}$  ион/см<sup>2</sup>.

Мы рассматриваем случай, когда доза облучения соответствует плато на графике зависимости концентрации внедренных атомов от дозы облучения, при этом достигнут предел растворимости газа в материале.

Параметры задачи соответствуют области высокотемпературного блистринга  $0,4 T_{\text{пл}} \leq T \leq 0,6 T_{\text{пл}}$ , где  $T$  — температура поверхности облучаемого материала,  $T_{\text{пл}}$  — температура плавления материала.

Рассматривается флуктуационная (неравновесная) стадия образования блистера. Ее протяженность во времени  $t \sim 10^{-11} + 10^{-8}$  с. Эта стадия характеризуется тем, что уже в самом начале существует пузырек размером, близким к критическому, и на него действуют следующие конкурирующие факторы:

давление на пузырек со стороны материала, которое стремится уничтожить его;

диффузия внедренного He из материала (Ni) в пузырек;

энергия межфазного взаимодействия, иными словами учтен приход и уход частиц в пузырек.

Следует заметить, что испарение частицы внутрь блистера увеличивает объем кластера на 1, т. е. коэффициент диффузии  $D_g$  пропорционален коэффициенту испарения частицы внутрь пузырька.

Рассматривается гетерогенная конденсация на поверхности, которая замедляет процесс роста пузырька за счет блуждания атомов гелия по внутренней поверхности блистера.

Итак, в данной работе мы рассматриваем пузырек с размером, близким к критическому, его рост или деградацию и перемещение в пространстве [15, 16]. Начальное состояние для процесса кластеризации задается равновесным распределением вакансий (старт БЧ), затем для упрощения описания кинетика вакансий не приводится, а речь идет о чисто газовом заполнении поры в кристаллической решетке. Рассматривается случай электронейтральных систем блистеров.

### **Математическая модель процесса кластеризации. Кинетические и стохастические уравнения модели**

Для решения поставленной задачи предложена следующая модель: образование пузырька, его рост и деградация — фазовый переход первого рода, а сам зародыш кластера считаем БЧ сферической формы и переменной массы.

Метод броуновской частицы представляет собой один из методов стохастической динамики. Все уравнения сформулированы для броуновской частицы с переменной массой, роль которой играет кластер, т. е. считается, что с течением времени (и, значит, по мере развития или деградации) центр масс кластера может изменять свое положение в пространстве. Метод броуновских частиц удобен тем, что в ряде случаев среду можно представить в виде стохастической силы, действующей на частицу, и тем самым уменьшить размерность системы и упростить вычисления. Этот метод хорош также тем, что позволяет легко сделать обобщения на случай ансамбля частиц. Отдавая себе отчет в том, что явления в твердом теле необходимо моделировать с учетом квантово-механического приближения, тем не менее, многие практически важные задачи, в том числе и наша, могут быть сведены к модели Броуновского движения (БД), уравнения для которого формулируются как уравнения математической физики в частных производных, а стохастический характер процессов БД находит свое отражение в эволюции вероятностных характеристик, таких как функции распределения частиц, в нашем случае — по размерам и положению в пространстве.

Обобщенное кинетическое уравнение (обратное уравнение Колмогорова)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= L(f); \\ f(t=0) &= f_0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $L(f)$  — оператор, представляющий собой суперпозицию операторов

Фоккер-Планковского типа  $L_g$  и  $L_r$ ;

$f$  — функция распределения фазовых координат сформулирована для описания эволюции БЧ переменной массы, роль которой играет пузырек.

Поскольку полученные кинетические уравнения представляют собой интегродифференциальные уравнения в частных производных, а СДУ описывают тот же МП, что достигается строгим соответствием коэффициентов двух рассматриваемых задач: кинетической и стохастической, использованием теории конечно-мерных распределений, позволяющих связать численную реализацию МП с интерпретацией численных экспериментов на уровне кинетических неравновесных функций распределения.

Таким образом, кинетические уравнения на дискретной сетке времени решаются методом расщепления по физическим процессам и представлением каждой из стадий ее стохастическим аналогом.

На временном шаге  $\Delta t_1$  рассматривается диффузия в пространстве размеров кластеров или задача Фольмера-Зельдовича в отсутствии внешних сил и корреляций (уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова) [17]:

$$\frac{\partial f_r(\bar{g}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[ D_g(\bar{g}, t) \frac{\partial f_r(\bar{g}, t)}{\partial g} \right]}{\partial g} + \frac{1}{kT} \frac{\partial \left[ D_g(\bar{g}, t) f_r(\bar{g}, t) \frac{\partial \{\Delta\Phi(\bar{g}, \bar{r}, t)\}}{\partial g} \right]}{\partial g}, \quad (2)$$

где начальное и граничные условия из [18],  $g$  — число атомов He в пузырьке, т. е. размер пузырька в числе атомов He;

$\bar{g}$  — математическое ожидание размера кластера;

$D_g(\bar{g}, t)$  — коэффициент диффузии в пространстве размеров кластеров;

$f_r(\bar{g}, t)$  — функция распределения пузырьков по размерам, т. е. вероятность обнаружить кластер размером  $g$  в интервале  $g + \Delta g$  в точке  $r$ ;

$\Delta\Phi(\bar{g}, \bar{r}, t)$  — потенциал Гиббса.

В выражении для потенциала Гиббса (рис. 1) мы учитываем не только поверхностное натяжение на границе металл—пузырек и разность химических потенциалов старой и новой фаз, но и упругую реакцию решетки [19, 20], вклад которой в потенциал Гиббса записывается следующим образом

$$\Delta\Phi_{el} = \frac{4}{3} \frac{1 + \sigma}{E} \pi r_g^3 \left[ (p - p_0) - \frac{3p_0^2(1 - 2\sigma)}{1 + \sigma} \right], \quad (3)$$

где  $E$ ,  $\sigma$  — модуль Юнга и коэффициент Пуассона, соответственно; параметр  $p_0$  входит в выражение для тензора однородных напряжений в решетке при возникновении дефекта  $\sigma_{ik} = p_0 \delta_{ik}$ ;  $r_g$  — размер кластера.

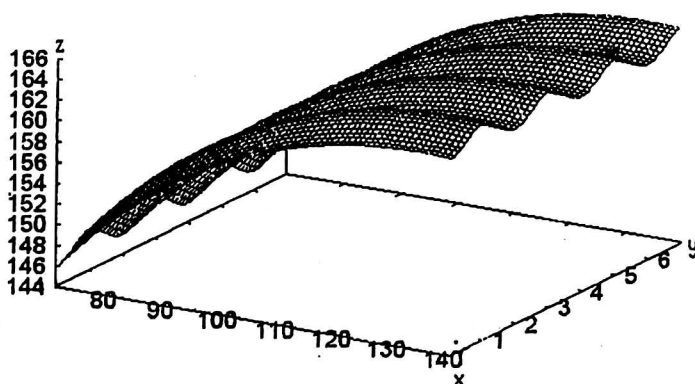


Рис. 1. Модельный потенциал Гиббса ( $a \frac{\text{Дж}}{\text{атом}}$ , по оси  $z$ ), размер пузырька  $g$  отложен по оси  $X$  и измеряется в количестве атомов гелия в нем, положение центра масс зародыша в решетке  $r$  (измеряется в постоянных решетки  $a = 3,5 \text{ \AA}$ , ось  $Y$ )

Коэффициент диффузии в пространстве размеров кластера записывается в виде

$$D_g(g, t) = \frac{D_0 V'^2 c_{0\infty}}{4\pi \left( \frac{2\alpha V' c_{0\infty}}{T(c - c_{0\infty})} \right)^3}, \quad (4)$$

где  $D_0$  — коэффициент диффузии внедренного газа при данной температуре;

$V'$  — молярный объем газа в пузырьке;

$c$  — концентрация внедренного газа;

$c_{0\infty}$  — предел растворимости газа в веществе;

$\alpha$  — коэффициент поверхностного натяжения;

$T$  — температура материала.

Эти величины зависят не только от термодинамических параметров, характеризующих кластеризующуюся фазу (температуры и давления внутри пузырька), но и от математического ожидания случайной величины размера кластера, от функции распределения кластеров по размерам.

Таким образом, правомочно говорить о решении нелинейной задачи.

$D_g(\bar{g}, t)$  и  $\Delta\Phi(\bar{g}, \vec{r}, t)$  — степенные аппроксимационные функции размера кластера. В дальнейшем для простоты изложения величина  $\bar{g}$  упоминается как  $g$ .

$\Delta\Phi(\bar{g}, t, \vec{r}) = -(a - c)g + b g^{\frac{2}{3}} + \Delta\Phi_r(\vec{r})$  — приращение потенциала Гиббса, причем  $cg$  — вклад упругой силы [18], а выражение  $\Delta\Phi(\bar{g}, \vec{r}, t)$  дополнено учетом влияния взаимодействия кластеров, зависящее от  $r$ .

$\Delta\Phi_r(\vec{r}) = k_r \cos(\vec{\phi} \vec{r})$  — периодический потенциал, обобщающий влияние решетки и введенный моделью в [22], такой вид отвечает виду пространственно-зависимых потенциалов из работ [11] и [12]. Заметим также, что в формуле для потенциала Гиббса и диффузии коэффициенты имеют вид

$$b = b_0 \left( 1 - \frac{1}{3} g^{-\frac{1}{3}} \right);$$

$D_g(g, t) = dg^{2/3}$  — коэффициент диффузии в пространстве размеров пузырьков.

Стохастический аналог данного кинетического уравнения определяется из выражения:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{1}{kT} D_g(\bar{g}, t) \frac{\partial \Delta\Phi(\bar{g}, \vec{r}, t)}{\partial g} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_g(\bar{g}, t)}{\partial g} + \sqrt{D_g(\bar{g}, t)} \xi(t), \quad (5)$$

$$0 \leq t \leq T_{\text{finish}}, \quad g_0 \geq 2,$$

где  $\xi(t)$  — случайная функция (в данном случае — это стандартный белый шум единичной интенсивности, поскольку здесь СДУ выписано в форме Стратоновича).

На шаге  $\Delta t_2$  моделируется пространственная диффузия БЧ, т. е. решается задача Эйнштейна-Фоккера (уравнение Крамерса-Смолуховского) в силовых

полях коллективной природы с учетом дальнедействующей части потенциала взаимодействия зародышей через акустические фононы решетки и осцилляции электронной плотности  $U(x, y, z)$  [22]:

$$\frac{\partial f_g(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[ D_r(\vec{r}) \frac{\partial f_g(\vec{r}, t)}{\partial r} \right]}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial \left[ \frac{\vec{F}(\vec{r})}{M_g \gamma} f_g(\vec{r}, t) \right]}{\partial \vec{r}}, \quad (6)$$

где  $M_g$  — масса кластера;  
 $D_r(\vec{r}) = D(x, y, z)$  — коэффициент диффузии в пространстве  $\{R = [x, y, z]\}$ ;  
 $\gamma$  — диссипативный фактор;

$F_x(x, y, z) = -\frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x}$  — потенциал взаимодействия кластеров между собой и с фононами (и электронами) решетки;  
 $U(x, y, z) = U(\vec{r})$

$\vec{F}(\vec{r}) = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{r}}$ ,  $U(\vec{r})$  — суммарный потенциал двухчастичного взаимодействия, взятый по аналогии с [12].

Нелинейный коэффициент диффузии моделируется в соответствии с кинетической теорией в виде:

$$D(x, y, z) = D_0(T)C(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

где  $x, y, z$  — текущие координаты частицы;  
 $C(r)$  — нелинейная функция  $r$ ;  
 $D_0(T)$  — множитель, подбираемый по экспериментальным данным.

Мы решаем три уравнения в пространстве  $[R]$ : для  $x, y, z$ .

Уравнение стохастического аналога кинетического уравнения (6) в отличие от СДУ (5), приведенному выше, здесь записано в интегральном виде:

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t H_x(\tau, x(\tau), y(\tau), z(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t \sigma(\tau, x(\tau), y(\tau), z(\tau)) dW(\tau);$$

$$H_x = -\frac{1}{\gamma M_g} D(x, y, z) \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial D(x, y, z)}{\partial x};$$

$$\sigma_x(x, y, z, t) = \sqrt{D(x, y, z, t)},$$

где  $H_x, \sigma_x$  выведены из уравнения (6) по процедуре из [2, 7];

$dW$  — приращение Винеровского случайного процесса за время  $\Delta t$ ;

$\vec{r}$  — положение центра масс кластера в следующей системе координат: на глубине порядка проекционного пробега He в Ni ( $R_p \sim 70$  нм) выбираем какой-либо узел кристаллической решетки и в него помещаем центр системы координат;  $r$  измеряется в  $a$ -параметрах решетки. Центры масс вакансионных пузырьков распределяются случайным образом по узлам кристаллической решетки в начальный момент времени, рассматривается взаимодействие с девятью соседями каждого кластера. Движение одного пузырька рассматривается как диффузионное до тех пор, пока его смещение от первоначального местоположения в узле решетки не станет больше некоторой величины. Как только это произойдет, центр масс пузырька скачком перемещается в другой ближайший узел решетки. Если при своем движении один зародыш блистера

войдет в сферу столкновения с каким-либо другим зародышем, то происходит их слияние, причем больший поглощает меньший.

Учет скачкообразной составляющей можно описать следующим образом [23]:

$$\frac{\partial f(g, t)}{\partial t} = \int_0^g K(g_1, g - g_1) f(g_1, t) f(g - g_1, t) dg_1 - f(g, t) \int_0^{\infty} K(g, g_1) f(g, t) dg_1. \quad (7)$$

$K(g_1, g_2)$  — константа скорости объединения кластеров с числом атомов  $g_1$  и  $g_2$  в кластер с числом атомов в нем  $g_1 + g_2$ , здесь функция распределения кластеров по размерам нормирована на  $N_{cl}$  — полную плотность кластеров:  $N_{cl} = \int_0^{\infty} f(g, t) dg$ .

Стохастический аналог уравнения (7) и его численная реализация осуществляются по схемам, приведенным в работах [2, 7].

### Численная схема

Напомним общий вид СДУ для диффузионного (Винеровского) случайного процесса:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t H(x(\tau)) d\tau + \int_0^t \sigma(x(\tau)) dw(\tau), \\ 0 \leq t \leq T_{\text{finish}},$$

где  $H(x(\tau))$  — вектор сноса;

$\sigma(x(\tau))$  — диффузионный член.

Для решения систем СДУ применен численный метод Артемьева [10], подразумевающий, что при решении использована форма Стратоновича для решения СДУ. Это позволяет использовать в качестве случайной функции  $\xi(t)$  стандартный белый шум, что существенно упрощает процедуру вычисления стохастического интеграла от Винеровского процесса при реализации численного метода.

Метод Артемьева является методом второго порядка точности с бесконечной областью устойчивости. В этом методе  $g_n$  и  $r_n$  — значения приближенного решения системы СДУ в узлах сетки по времени  $\{t\}$ ,  $h$  — шаг по времени,  $\xi_n$  — последовательность нормально распределенных независимых случайных чисел с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией.

Кроме того, предполагая независимость между собой  $\xi_n$  и  $g_n$  ( $r_n$ ) ( $g_n$  и  $r_n$  зависимы) для каждого  $n$  эти свойства будут выполняться, если положить:

$$\sqrt{h_n \xi_n} = w(t_{n+1}) - w(t_n).$$

При моделировании решения СДУ на ЭВМ значения  $\xi_n$  могут быть вычислены по формуле:

$$\xi_n = \sqrt{-2 \log \alpha_1} \cos(2\pi \alpha_2),$$

где  $\alpha_1, \alpha_2$  — случайные числа, равномерно распределенные в интервале  $[0, 1]$ .

Нами использована следующая схема:

$$g_{n+1,k}^i = g_{n,k}^i + \left[ I - \frac{h}{2} \frac{\partial H_{gn,k}^i}{\partial g} \right]^{-1} \left[ hH_{n,k}^i + \sqrt{h} \sigma_{gn,k}^i \xi_{gn} + \frac{h}{2} \frac{\partial \sigma_{gn,k}^i}{\partial g} \sigma_{gn,k}^i \xi_{gn}^2 \right];$$

$$H_{gn,k}^i = -\frac{1}{kT} D_{gn,k}^i \frac{\partial \Delta \Phi_{n,k}^i}{\partial g} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{gn,k}^i}{\partial g};$$

$$\sigma_{gn,k}^i = \sqrt{D_{gn,k}^i};$$

$$x_{n-1,k+1}^i = x_{n+1,k}^i + \left[ I - \frac{h}{2} \frac{\partial H_{xn+1,k}^i}{\partial x} \right]^{-1} \times \\ \times \left[ hH_{xn+1,k}^i \sqrt{h} \sigma_{xn+1,k}^i \xi_{xk} + \frac{h}{2} \frac{\partial \sigma_{xn+1,k}^i}{\partial x} \sigma_{xn+1,k}^i \xi_{xk}^2 \right];$$

$$H_{xn+1,k}^i = -\frac{1}{\gamma M(g_{n+1}^i)} D_{n+1,k}^i \frac{\partial U_{n+1,k}^i}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{n+1,k}^i}{\partial x};$$

$$\sigma_{n+1,k}^i = \sqrt{D_{n+1,k}^i}.$$

Аналогично рассчитываются  $y_{n+1,k+1}^i$ ,  $x_{n+1,k+1}^i$ .

Здесь  $i$  — номер траектории,  $n + 1$ ;  $\Delta t_1$  — шаг по  $g$ ;  $k$  — шаг  $\Delta t_2$  по  $x, y, z$ ;

$I$  — единичная матрица.

Математическое ожидание и дисперсии величин  $g, r$  рассчитываются по  $i$  траекториям на шаге  $\Delta t_m = \Delta t_1 + \Delta t_2$ .

### Обсуждение результатов вычислительного эксперимента

В работе моделируется флуктуационная стадия кластерообразования на примере системы He — Ni. Длительность этой стадии  $t \sim 10^{-11} \div 10^{-8}$  с, коэффициент обезразмеривания по  $g$   $\tau_g = 8 \cdot 10^{-12}$  с, по  $r$   $\tau_r = 7,2 \cdot 10^{-11}$  с, статистика — 20 000 траекторий для каждой из фазовых координат каждого рассматриваемого кластера дефектов. Усовершенствована модель путем учета скачкообразного слияния кластеров. Кластеры сливаются, если расстояние между центрами масс двух кластеров меньше суммы их радиусов плюс некий прицельный параметр, равный в нашем случае  $\frac{2}{3}a$ , где  $a = 3,5 \text{ \AA}$  параметр решетки. Условие на верхней границе: если  $z = 150$ , то с 85%-ной вероятностью кластер отразится в приповерхностный слой материала, а с 25%-ной уничтожится, при этом число рассматриваемых кластеров уменьшается на 1, и происходит их перенумерация.

Исследовалось влияние дозы облучения и температуры на процесс образования блистера. Так, в зависимости от температуры рост (или деградация) и перемещение в пространстве (всплывание) происходят быстрее (при более

высоких температурах) или медленнее (при низких температурах, но соответствующих высокотемпературному блистрингу) (рис. 2, а, б, в и 3, а, б, в). При более низких температурах высока вероятность образования и дальнейшего существования нескольких больших блистеров. Увеличение температуры в течение численного эксперимента характеризуется большей подвижностью кластеров, ускорением процесса их слияния с ростом температуры, одновременно и большее количество кластеров уходит на поверхность и разрушается (см. рис. 3). Рассматривался также вариант, когда температура образца линейно увеличивалась с течением времени в пределах существования высокотемпературного блистринга, в этом случае наблюдается уменьшение дефектов в образце (рис. 4, а, б, в).

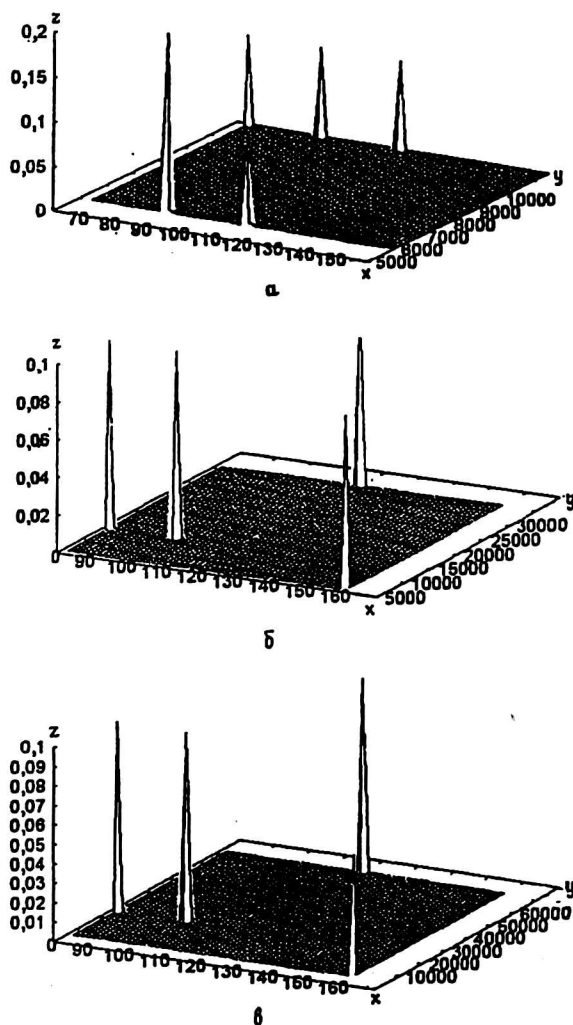
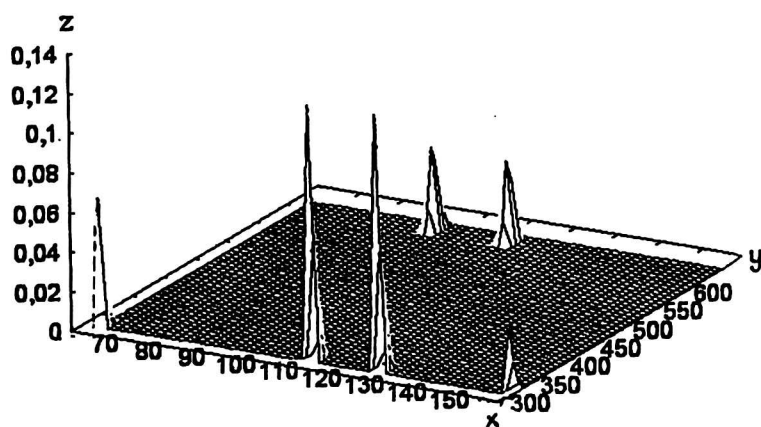
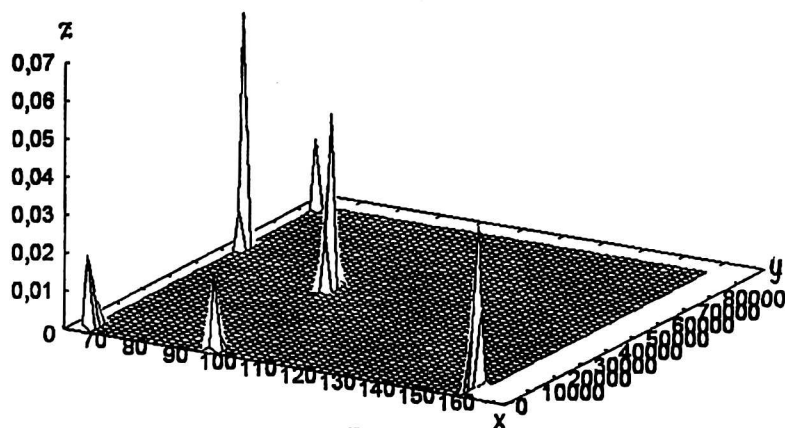


Рис. 2. Двухмерная функция распределения кластеров дефектов гелия в решетке никеля по размерам и положению в кристаллической решетке  $F(g,r,t)$ :

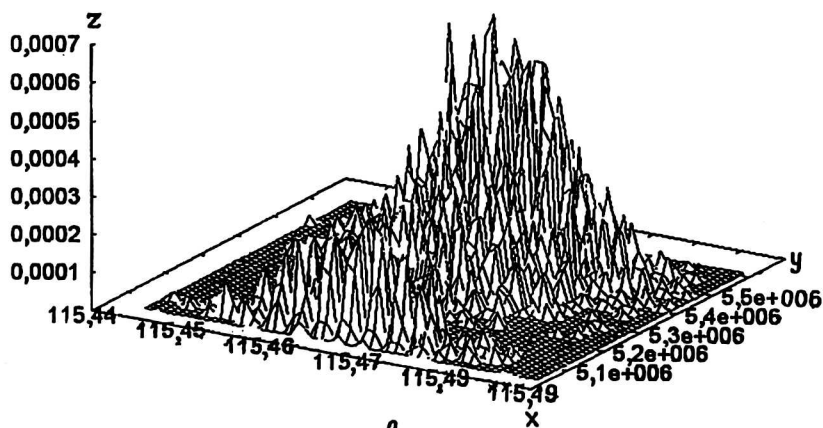
а — в начальный момент времени. По оси  $z$ : значения двумерной функции распределения для системы пузырьков, нормированной на 1, ось  $X$  показывает положение центра масс кластера в описанной системе координат, ось  $Y$  — размер зародыша блистера  $g$ . Температура образца 700 К, критический размер пузырька [9, 15] равен 6493; б — то же, но для момента времени  $t = 0,25 T_{\text{finish}}$ , ( $T_{\text{finish}}$  — время окончания расчета,  $T_{\text{finish}} = 100 \tau$ ); в — то же, для  $T_{\text{finish}}$ .



а



б



в

Рис. 3. Пример расчета кинетической двухмерной функции распределения для системы, первоначально состоящей из 10 кластеров одинакового размера  $g_0 = 320$  ( $g_{кр} = 930$ ). Температура образца 900 К, обозначения осей — аналогичны приведенным на рис. 2, а—в;

а — для момента времени  $t = 0,02 T_{finish}$ ; б — то же, на момент времени  $t = 0,25 T_{finish}$ ;

в — то же, на момент времени  $t = T_{finish}$

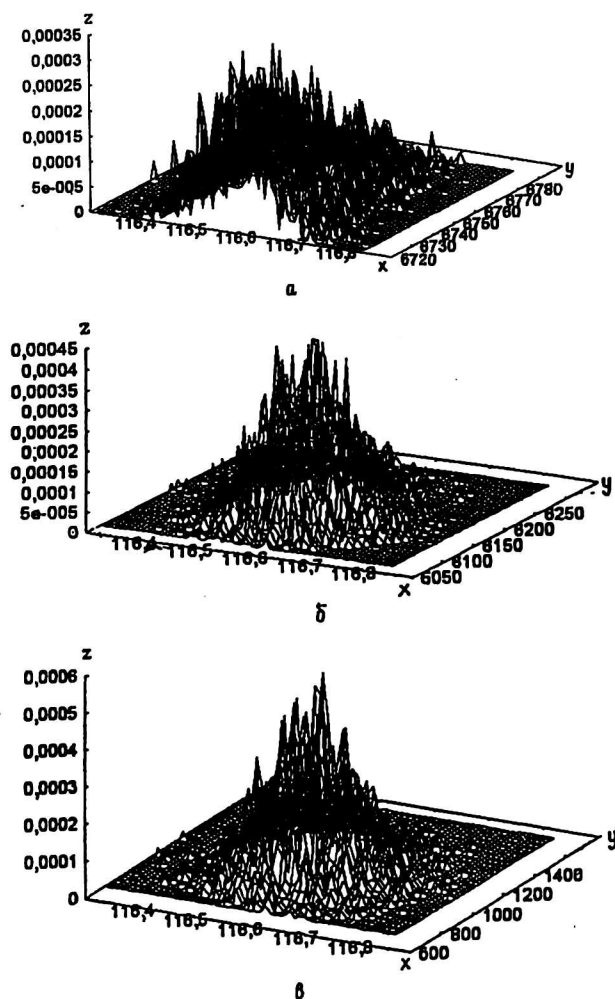


Рис. 4. Результаты расчета в зависимости от температуры (700 — 1000 К):  
 а — для момента времени  $t = 0,02 T_{\text{finish}}$ ; б — то же, для момента времени  
 $t = 0,1 T_{\text{finish}}$ ; в — то же, для момента времени  $t = 0,17 T_{\text{finish}}$

Критический размер кластера  $g_{\text{кр}}$  сильно зависит от температуры, с увеличением которой критический размер кластера уменьшается. Так, для  $T = 1000$  К  $g_{\text{кр}} = 132$ , для  $T = 900$  К  $g_{\text{кр}} = 325$ ; для  $T = 800$  К  $g_{\text{кр}} = 972$ , а для  $T = 700$  К  $g_{\text{кр}} = 6493$ , здесь  $g_{\text{кр}}$  — измеряется в числе атомов гелия в пузырьке. Но одновременно при более низких температурах развитие кластера с размером меньше критического в начале флуктуационной стадии более вероятно, чем при более высоких температурах.

Исследовано влияние нелинейного коэффициента диффузии, что приводит к всплыванию кластеров и скапливанию их в приповерхностном слое образца. Для температуры 800 К на глубине 200—240 максимальная глубина 300 (соответствует средней длине проекционного пробега гелия в никеле при выбранных параметрах).

Исследовались также изменение среднего размера дефектов по глубине образца и ее зависимость от модели блистринга (учет сильных столкновений,

дозы, применяемых численных методов). Полученные зависимости позволяют сделать вывод об нелинейном увеличении среднего размера кластера с приближением к поверхности, т. е. об укрупнении блистеров по мере их “всплывания” (рис. 5 и 6). Учет в потенциале Гиббса пространственно-зависимой части показал, что уменьшение ее влияния приводит к ускорению образования кластеров.

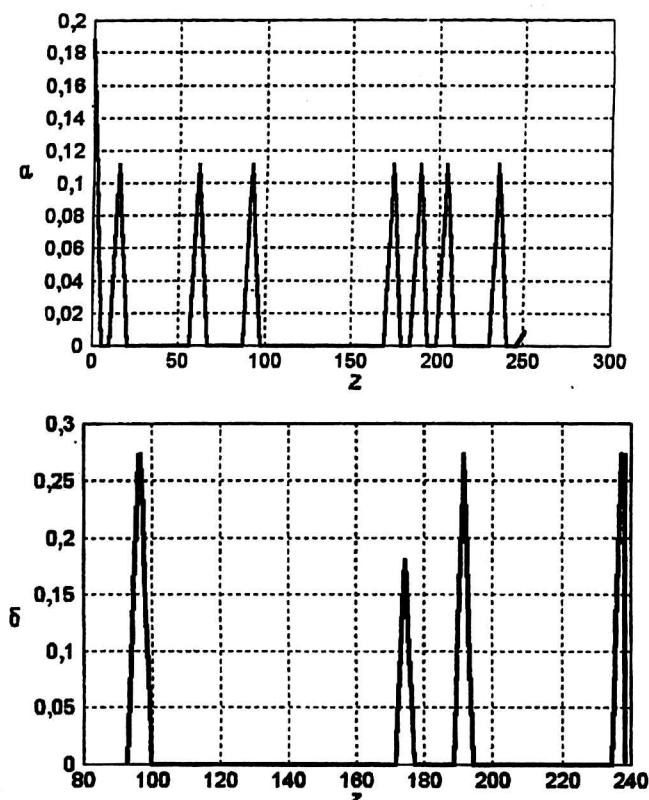


Рис. 5. Зависимость числа кластеров в слое от координаты  $Z$  центра масс кластера (по оси  $Y$  отложено отношение числа кластеров с данным  $Z$  к общему числу кластеров, по оси  $X$  координата  $Z$ . Температура образца 800 K):  
 а — для момента времени  $t = 0,02 T_{\text{finish}}$ ; б — то же, для момента времени  $t = T_{\text{finish}}$

### Выводы

Решена важная задача физики твердого тела — построена численная кинетическая модель флуктуационной стадии фазового перехода, приводящего к образованию газовой-вакансионных пор, изменяющих хрупкость материала.

Исследована флуктуационная неустойчивость, связанная с образованием блистера в приповерхностном слое материала, контактирующего с плазмой (несмотря на то, что начальные условия отвечают области потенциала Гиббса, где зародыш не должен развиваться, наблюдается рост кластера, и наоборот).

В результате проведенного численного эксперимента получены гистограммы распределения блистеров по размерам и их стратификация в приповерхностном слое материала (~100 нм) в зависимости от параметров реального эксперимента.

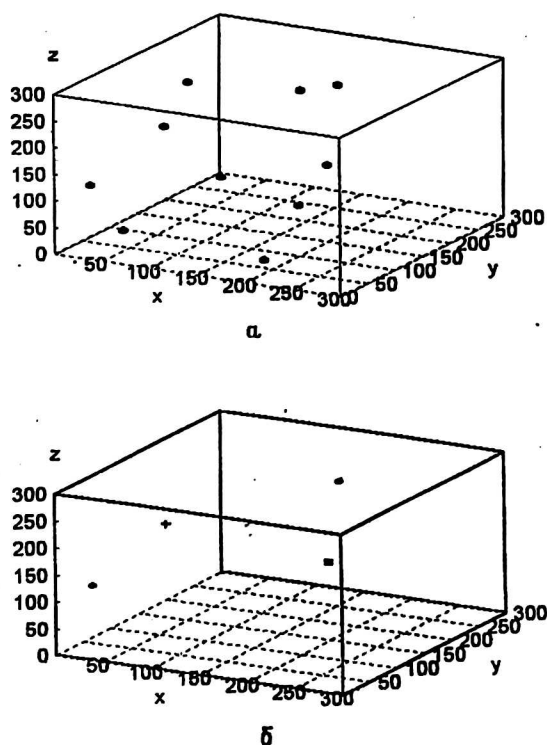


Рис. 6. Местоположение центров масс кластеров в решетке  
(размер кластера равен 950):

*a* — в начальный момент времени; *b* — то же, но при  $t = T_{\text{finish}}$ ;  $\circ$  — кластеры с размером от  $5 \cdot 10^4$  до  $10^5$ ;  $+$  — от  $10^5$  до  $2 \cdot 10^5$ ;  $\square$  — от  $2 \cdot 10^5$  до  $3 \cdot 10^5$

Таким образом, появилась возможность сравнения полученных результатов с измерениями скоплений блистеров, например томографом, дополнительно можно исследовать влияние различных моделей образования блистеров на конечный результат, измеряемый другими методами.

Независимое определение параметра порядка фазового перехода может быть рассчитано согласно кинетической теории как интегральная характеристика от получаемой в нашем эксперименте кинетической функции распределения.

Разработанный авторами численный кинетический код можно модифицировать для следующих задач: кавитация (образования пузырьков пара в жидкости), кристаллизация паров или жидкой капли при рассмотрении конденсации, образование вискерсов на поверхности твердого тела, переход от блистеринга к отшелушиванию и трещиноватости кристалла, рассмотрение квантовых свойств легкого газа, образующего блистер.

## Литература

1. Сигов Ю. С., Левченко В. Д. Когерентные явления при релаксации размытых электронных пучков в открытых плазменных системах//Физика плазмы. 1997. Т. 23. № 4. С. 325—342.
2. Змиевская Г. И. Стохастические аналоги неравновесных столкновительных процессов//Там же. С. 45—60.
3. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы, кавитация//ЖЭТФ. 1942. Т. 12. С. 525—538.

4. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная стадия фазовых переходов. — М.: изд-во Наука, 1985.
5. Змиевская Г. И., Зиньковская Т. В. Численная модель образования кластеров: Докл. АН СССР. 1989. Т. 309. С. 301—305.
6. Змиевская Г. И., Зиньковская Т. В. О численных стохастических аналогах уравнений Фоккера-Планка-Колмогорова; Сигов Ю. С. Дискретное моделирование плазмы. — М., 1990, ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР. С. 149—172; Сб. науч. тр./Под ред. Ю. С. Сигова.
7. Змиевская Г. И. Численные стохастические модели неравновесных процессов//Математ. моделирование. 1996. Т. 8. № 11. С. 3—40.
8. Змиевская Г. И., Зиньковская Т. В. Численная модель кластеризации дефектов на поверхности металла: Матер. XII Межд. конф. "Взаимодействие ионов с поверхностью", 5—8 сентября 1995 г. Звенигород. 1995. Т. 1. С. 89—92.
9. Змиевская Г. И., Бондарева А. Л. Стохастические модели кластеризации дефектов твердого тела//Препринт № 102. — М., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 1997.
10. Аверина Т. А., Артемьев С. С. Новое семейство численных методов решения стохастических дифференциальных уравнений: Докл. АН СССР. 1986. Т. 288. № 4. С. 777—780.
11. Морозов А. И., Овченков П. А., Сигов А. С. Взаимодействие дефектов в кристалле и процессы кластеризации: В кн. Дискретное моделирование плазмы/Под ред. Ю. С. Сигова.// Сб. науч. тр. — М., ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1990.
12. Berzin A. A., Morosov A. I., Sigov A. S. Light-Atom Diffusion and Clustering at Crystal Surfaces//J. Phys.: Condens. Matter. 1997. V. 9. P. 33—41.
13. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. — М.: ТОО "Янус", 1995.
14. Gardiner C. W. Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural Sciences//Springer series in Sinergetics. 1984. V. 13. Springer-Verlag, Berlin/Пер. с англ. Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках. — М.: Мир, 1986. С. 496.
15. Bondareva A. L., Znievskaya G. I. Investigation of blistering in solids using stochastic model in book Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics and Control in Condensed Systems and Other Media: Plenum Publishing Corporation, 1998, editor L. Uvarova. New-York. P. 241—250.
16. Бондарева А. Л., Змиевская Г. И. Образование кластеров на флуктуационной стадии фазового перехода//Препринт № 73. — М., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 1998.
17. Бондарева А. Л., Змиевская Г. И. Численное моделирование уравнений Эйнштейна-Фоккера//Препринт № 101. — М., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 1997.
18. Беграмбеков Л. Б., Горбатов Ю. Б., Тронин В. Н. Исследование блистерообразования на оптических материалах: В кн.: Ионизирующее излучение и лазерные материалы/Под ред. Л. Б. Беграмбекова и Ю. Н. Девятко. — М.: Энергоатомиздат, 1982.
19. Беграмбеков Л. Б. Разрушение поверхности твердых тел при ионном и плазменном облучении. — М.: МИФИ, 1987.
20. Беграмбеков Л. Б., Тронин В. Н. Блистеринг на неоднородных по структуре материалах при ионном облучении в плазме газового разряда: В кн.: Ионизирующие излучения и лазерные материалы. — М.: Энергоатомиздат, 1986. С. 67—73.
21. Артемьев С. С. Численное решение задачи Коши для систем обыкновенных и стохастических дифференциальных уравнений: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, 1991./Вычислительный центр, СО АН СССР.
22. Risken H. The Fokker-Planck Equation Methods of Solution and Applications, Springer Series in Synergetic. Springs-Verlag. Berlin, Heidelberg, New-York. 1989.
23. Смирнов Б. М. Процессы в расширяющемся конденсированном газе//УМФ. Т. 164. С. 665.

---

Авторы благодарят Д. В. Борисова, А. В. Иванова, В. Д. Левченко,  
**Ю. С. Сигова** и Т. В. Левченко за помощь в работе над данной статьей.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант 97-02-17627.

## **Numerical model of helium bubbles formation under influence of plasma flows on solid surface**

*A. L. Bondareva, G. I. Zmievsкая*

Keldysh Institute of Applied Mathematics Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

*Formation of vacancy-gas pores or bubbles is simulated as process of a defects clusterization during fluctuation stage of first-order phase transition, when metal or dielectric surface is irradiated by plasma. Cluster distributions as function versus cluster size and displacement into solids lattice are numerically received by stochastic analog method. Annealing role is examined.*