

На правах рукописи

**РЯБОВ ПАВЕЛ НИКОЛАЕВИЧ**

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ИОННОЙ  
БОМБАРДИРОВКЕ ПОДЛОЖКИ И ПРИ  
ОБРАЗОВАНИИ ПОЛОС АДИАБАТИЧЕСКОГО СДВИГА  
В МАТЕРИАЛАХ**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2011

Работа выполнена в Национальном Исследовательском Ядерном Университете «МИФИ»

Научный руководитель: Заслуженный деятель науки РФ,  
Лауреат Государственной премии СССР,  
доктор физико-математических наук,  
профессор Кудряшов Николай Алексеевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
начальник математического отдела  
профессор Трощев Виталий Ефимович,  
ГНЦ РФ ТРИНИТИ

доктор физико-математических наук,  
доцент Мисюрин Сергей Юрьевич,  
Институт машиноведения  
им. А.А. Благонравова РАН

Ведущая организация: Ярославский Государственный Университет  
им. П.Г. Демидова

Защита состоится «07» декабря 2011 г. в 15 часов 00 минут  
на заседании диссертационного совета Д212.130.09 в Национальном  
Исследовательском Ядерном Университете "МИФИ" по адресу: 115409,  
г. Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел. 324-84-98, 323-92-56

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном  
экземпляре, заверенный печатью организации.

Автореферат разослан «\_\_\_» ноября 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

доктор физико-математических наук, профессор

Леонов А.С.

# Общая характеристика работы

*Объектом исследования* диссертационной работы являются нелинейные математические модели, описывающие процессы самоорганизации диссипативных структур при ионной бомбардировке поверхности подложки и при формировании полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

*Актуальность работы.* Процессы произвольного или вынужденного образования устойчивых пространственно-неоднородных структур, возникающие в результате эволюции неустойчивости в однородных открытых системах, проявляются в природе и во многих физических экспериментах. В настоящее время структуры такого типа принято называть диссипативными. Этот термин введен И. Пригожиным, который отмечал, что для образования таких структур в открытых системах необходимы диссипативные процессы. Классическим примером образования диссипативных структур являются процессы образования ячеек Рэлея-Бенара, реакция Белоусова-Жаботинского, вихри Тейлора и др.

Процессы самоорганизации диссипативных структур характерны для многих неравновесных систем. Они наблюдаются в гидродинамических, биологических и химических системах, а также при распространении фронта пламени, в поведении сыпучих материалов, в плазме, нелинейной оптике и т.д.

В данной диссертации изучаются процессы самоорганизации диссипативных структур, которые наблюдались в экспериментальных работах по исследованию процессов ионной бомбардировки поверхности полупроводниковых подложек и при формировании полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

В 70-х годах прошлого века установлено, что при ионной бомбардировке поверхности подложки происходит процесс самоорганизации упорядоченных структур в виде ячеек, бугорков или ряби в зависимости от значений физических параметров задачи. Эти эксперименты представляют собой значительное технологическое

открытие и ставят ряд вопросов относительно механизмов, отвечающих за формирование данных структур.

Получаемые в результате ионной бомбардировки подложки обладают рядом полезных свойств и используются для защиты оборудования от высоких температур, агрессивных сред и различных типов износа. Данные подложки применяются при изготовлении светоизлучающих устройств на основе кремния (при создании солнечных батарей), в спектроскопии, микроэлектронике, селективном нанокатализе, они необходимы для записи информации со сверхвысокой плотностью.

Явление формирования кластеров наноструктур при ионной бомбардировке поверхности полупроводниковых подложек интенсивно исследуется с использованием экспериментальных методов. В ряде работ длительность облучения образцов составляла от 5 до 16 часов. Таким образом, возникает необходимость разработки математической модели и комплекса расчетных программ, позволяющих объяснить результаты, полученные в экспериментах и сделать прогноз о поведении поверхности подложки.

Еще одним важным и интересным примером самоорганизации структур, рассмотренным в диссертации, являются процессы формирования полос адиабатического сдвига (ПАС) в материалах при деформациях. В последние годы данное явление привлекает к себе большое внимание. Это обусловлено тем, что полосы адиабатического сдвига являются одним из механизмов разрушения материалов при высокоскоростных сдвиговых деформациях. В материалах эти полосы становятся более хрупкими, чем окружающие участки, так что в случае продолжительной деформации происходит разрушение материала вдоль полос. Известно, что область локализации ПАС составляет примерно от 1 до 500 мкм. Данное явление наблюдалось в ряде технологических процессов атомной, военной и космической промышленности и при проведении многих физических экспериментов. Примеры таких процессов встречаются при пробивании материала, обработке материала давлением, при механической

обработке материала, фрикционной сварке материала и прессовании. Возможность возникновения полос адиабатического сдвига отмечалась при работе ядерного реактора, а также при запуске и крушении шаттлов. В последние годы это явление обсуждается при разработке методов создания новых сплавов и материалов. Оказалось, что подобные процессы могут вызывать не только разрушение, но и упрочнение материала. В ряде зарубежных и отечественных публикаций показано, что эффект "залечивания" пор при ударно-волновом нагружении значительно выше по сравнению со статическим сжатием той же амплитуды.

В ряде экспериментальных работ установлено, что при высоких начальных скоростях деформации имеют место процессы самоорганизации полос адиабатического сдвига. Однако, до настоящего времени, по существу, отсутствовали работы по численному моделированию процессов, происходящих при самоорганизации полос адиабатического сдвига в материалах.

**Целью** диссертации является исследование нелинейных математических моделей, описывающих процессы самоорганизации упорядоченных структур при ионной бомбардировке поверхности подложки и при формировании полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

**Методы исследования.** Исследование нелинейных математических моделей в диссертационной работе строилось на основе численных и аналитических методов. При формулировке математических моделей использовались законы сохранения. При построении численных решений применялась теория разностных схем и псевдоспектральные методы. Для построения точных решений дифференциальных уравнений с учетом переменных бегущей волны использовался метод "простейших" уравнений. Символьные вычисления при выполнении работы проводились с использованием пакета прикладных программ MAPLE. Реализация численных алгоритмов проводилась на языке C++ и MATLAB.

***В диссертационной работе решены следующие задачи:***

- Разработана математическая модель для описания процессов самоорганизации кластеров наноструктур на поверхности подложек при ионной бомбардировке;
- Сформулирована математическая модель формирования полос адиабатического сдвига в материалах при сдвиговых деформациях;
- Построены точные решения нелинейных эволюционных уравнений для описания процессов ионной бомбардировки поверхности подложек;
- Разработаны алгоритмы и на их основе реализованы программы, позволяющие проводить численное моделирование процессов формирования структур на поверхности подложек при ионной бомбардировке в одномерном и двумерном случае;
- Изучено влияние физических параметров задачи на формирование наноструктур на поверхности подложек при ионной бомбардировке;
- Разработан численный алгоритм и на его основе реализован комплекс программ, позволяющий исследовать процессы формирования полос адиабатического сдвига в материалах;
- Исследована роль физических параметров математической модели в процессах формирования полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях;
- Изучены процессы самоорганизации полос адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали.

***Научная новизна работы:***

- Предложена математическая модель, описывающая процессы самоорганизации кластеров наноструктур на поверхности подложек при ионной бомбардировке;

- Получены точные решения эволюционных уравнений для описания процессов ионной бомбардировки поверхности подложки в одномерном и двумерном случае;
- Определен диапазон изменения управляющих параметров, в котором наблюдаются упорядоченные структуры при ионной бомбардировке подложки;
- Показано, что при больших временах облучения учет слагаемых высокого порядка приводит к существенному влиянию на процессы формирования наноструктур на поверхности подложки при ионной бомбардировке;
- Установлено существование критического значения начальной скорости деформации, до которой температура плавления в одной полосе адиабатического сдвига достигается быстрее, чем в другой;
- Получены оценки количества сформировавшихся полос адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали в результате сдвиговых деформаций;
- Рассчитаны расстояния между полосами адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали при различных значениях начальной скорости пластической деформации.

*Обоснованность и достоверность* результатов работы подтверждаются совпадением полученных численных результатов с тестовыми точными решениями, экспериментальными данными и результатами других авторов.

*Апробация работы.* Основные результаты и положения диссертации докладывались и обсуждались на следующих научных семинарах и конференциях:

1. Научный семинар кафедры "Прикладная математика" НИЯУ МИФИ "Проблемы современной математики" в 2009 – 2011 годах;

2. Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях", НИЯУ МИФИ, Москва, 27–29 мая 2009 года;
3. Школа–семинар "Нанотехнологии производству — 2009", НИТУ МИСиС, Москва, 21–26 сентября, 2009 год;
4. Международная конференция аспирантов и молодых ученых "Ломоносов — 2010", МГУ, Москва, 12–15 апреля 2010 года;
5. IX Международная школа "Хаотические автоколебания и образование структур", НИ СГУ, Саратов, 4–9 октября 2010 года;
6. Конференция "Математические идеи П. Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания", МИФИ ИАТЭ НИЯУ МИФИ, Обнинск, 14–18 мая, 2011 год;
7. Ежегодная Научная сессия НИЯУ МИФИ, Москва, январь 2009–2011 года.

***Практическая значимость работы*** состоит в следующем:

1. Созданный в рамках диссертационной работы программный комплекс по исследованию процессов формирования структур на поверхности подложек при ионной бомбардировке позволяет формулировать рекомендации по получению данных структур при проведении экспериментов;
2. Разработанный комплекс программ может быть использован при проведении численных экспериментов по исследованию полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях, что позволяет уменьшить издержки на проведение экспериментов по изучению данного процесса;
3. Полученные в рамках диссертационной работы точные решения нелинейных эволюционных уравнений могут использоваться для тестирования комплексов программ по расчету процессов

формирования наноструктур на поверхности подложек при ионной бомбардировке;

4. Результаты диссертационной работы использованы в качестве материалов при выполнении федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы" в рамках государственных контрактов П28, П1222.

***На защиту выносятся:***

- Математическая модель для описания процесса распыления поверхности подложки при ионной бомбардировке;
- Точные решения семейства нелинейных эволюционных уравнений для описания процессов ионной бомбардировки поверхности подложек в одномерном и двумерном случае;
- Комплекс программ, позволяющий проводить математическое моделирование процессов эволюции топографии поверхности подложки при ионной бомбардировке в режиме реального времени;
- Результаты численного моделирования процессов формирования упорядоченных структур на поверхности подложек при ионной бомбардировке;
- Программный комплекс для моделирования процессов образования полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях;
- Результаты вычислительных экспериментов по моделированию процессов формирования полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

***Публикации.*** Основные результаты диссертационной работы отражены в 19 публикациях, в том числе 6 работ опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК.

*Структура и объем диссертации.* Диссертация состоит из введения, пяти разделов, заключения, двух приложений и списка литературы. Диссертация содержит 138 машинописных страниц и 53 рисунка. В список литературы включено 146 наименований.

## Краткое содержание работы.

*Во введении* обсуждается актуальность темы исследования, приводится общая характеристика диссертационной работы, а также ее структура, дается краткий обзор литературы по тематике работы.

*Первый раздел* диссертации посвящен построению нелинейных математических моделей, которые описывают процессы образования кластеров наноструктур на поверхности подложек при ионной бомбардировке и описывают процессы формирования полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

В разделе 1.1 обсуждаются процессы ионной бомбардировки поверхности полупроводниковых подложек. Рассмотрены сценарии взаимодействия падающих на поверхность твердого тела ионов с атомами кристаллической решетки подложки. С учетом того, что энергия падающих ионов  $\epsilon$  лежит в пределах от 1 до 100 кэВ и масса падающего иона больше массы атома подложки, установлено, что преобладающим процессом взаимодействия ионов и атомов подложки является физическое распыление. Если энергия падающих ионов превышает энергию связи частиц кристаллической решетки, то при ударе о поверхность они начинают выбивать атомы с поверхности или вызывать каскад столкновений.

Для описания довольно сложного процесса каскадов столкновений и распыления поверхности подложки в работе предполагается, что ион проникает в вещество и останавливается в некоторой точке  $P$ , высвобождая свою кинетическую энергию согласно распределению

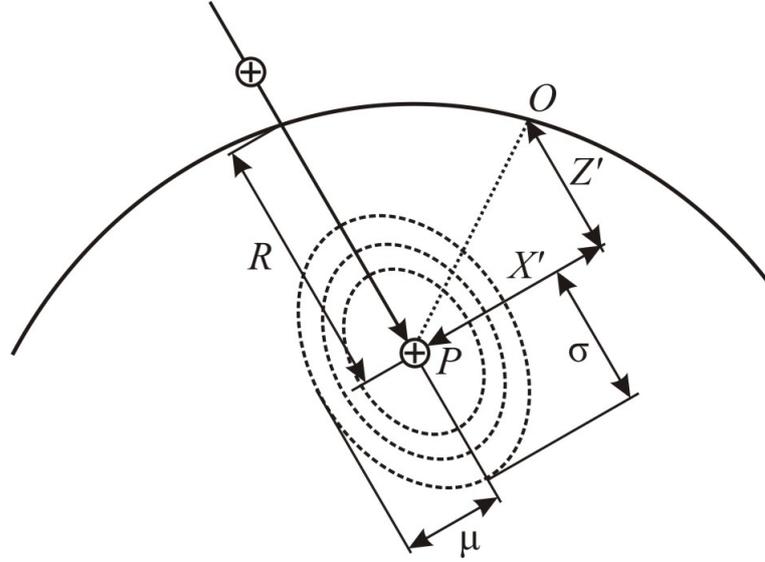


Рис. 1. Схема распределения энергии при проникновении иона вглубь материала

Гаусса с поперечной длиной  $\mu$  и продольной шириной  $\sigma$

$$E(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon}{(2\pi)^{3/2}\mu^2\sigma} \exp\left(-\frac{Z'^2}{2\sigma^2} - \frac{X'^2 + Y'^2}{2\mu^2}\right), \quad (1)$$

где  $\epsilon$  – энергия иона,  $X', Y', Z'$  – расстояния от точки  $P$  до точки  $O$  в направлении траектории иона, см. Рис.1.

Связь между функцией, описывающей профиль поверхности  $h$ , и скоростью эрозии  $V_O$  в поверхностной точке  $O$  дается формулой

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -V_O(1 + h_x^2 + h_y^2)^{1/2} - K\nabla^4 h, \quad (2)$$

где  $K$  – коэффициент температурного сглаживания поверхности подложки,  $V_O$  определяется из соотношения

$$V_O = \Lambda \int_{\mathfrak{R}} \Phi(\mathbf{r})E(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (3)$$

Здесь  $\Lambda$  – постоянная величина, зависящая от сечения рассеяния и поверхностной энергии связи атомов,  $\Phi(\mathbf{r})$  – коррекция потока ионов вследствие вариации локальной кривизны поверхности,  $\mathfrak{R}$  – поверхность, каждый элемент которой дает вклад в общую энергию,

внесенную ионами.

В диссертации показано, что из системы уравнений (1), (2), (3) можно получить следующее дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию профиля поверхности с течением времени

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h}{\partial t} = & -v_0 + \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + \lambda_x \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 + \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \\
& + \xi_x \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) + \xi_y \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \Omega_1 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + \Omega_2 \frac{\partial^3 h}{\partial x \partial y^2} - \\
& - D_{xx} \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} - D_{yy} \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} - D_{xy} \frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} + \zeta_1 \frac{\partial^5 h}{\partial x^5} + \zeta_2 \frac{\partial^5 h}{\partial x \partial y^4} + \zeta_3 \frac{\partial^5 h}{\partial x^3 \partial y^2} - \\
& - r_x \frac{\partial^6 h}{\partial x^6} - r_y \frac{\partial^6 h}{\partial y^6} - r_{xy} \frac{\partial^6 h}{\partial x^4 \partial y^2} - r_{yx} \frac{\partial^6 h}{\partial x^2 \partial y^4} - K \nabla^4 h,
\end{aligned} \tag{4}$$

где коэффициенты  $v_0, \gamma, \nu_x, \nu_y, \xi_x, \xi_y, \Omega_1, \Omega_2, D_{xx}, D_{xy}, D_{yy}, \zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, r_x, r_y, r_{xy}, r_{yx}$  – функции физических параметров задачи, таких как угол падения, плотность потока ионов, их энергия, глубина проникновения и т.д.

В случае нормального падения ионов на поверхность подложки уравнение (4) принимает вид

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h}{\partial t} = & -v_0 + \nu \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) - (D + K) \left( \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} \right) + \\
& + \lambda \left( \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 \right) - r \left( \frac{\partial^6 h}{\partial x^6} + 3 \frac{\partial^6 h}{\partial x^2 \partial y^4} + 3 \frac{\partial^6 h}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\partial^6 h}{\partial y^6} \right),
\end{aligned} \tag{5}$$

где  $v_0, \nu, r, D, \lambda$  зависят от значений физических параметров.

Таким образом, в диссертационной работе показано, что эволюция поверхностной морфологии подложки при ионной бомбардировке с течением времени описывается уравнением (4). Проведено обсуждение физического смысла параметров, входящих в уравнение (4), и их влияния на процессы распыления поверхности. Рассматриваются некоторые частные случаи уравнения (4). Обсуждается процесс распыления быстровращающейся подложки.

В разделе 1.2 рассмотрен процесс сдвиговой деформации

бесконечного слоя несжимаемого упруго-пластического материала высотой  $0 \leq y \leq H$ , см. Рис. 2. Построена математическая модель,

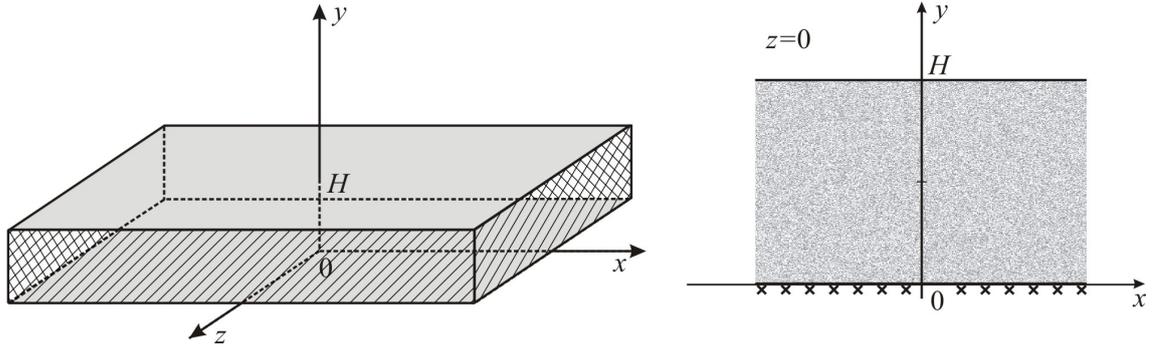


Рис. 2. Геометрия задачи

описывающая процессы формирования полос адиабатического сдвига в материалах при сдвиговых деформациях в виде

$$\begin{aligned}
 v_t - \frac{1}{\rho} \sigma_y &= 0, \\
 \sigma_t - \mu v_y &= -\mu \dot{\varepsilon}^p, \\
 C \rho T_t &= k T_{yy} + \beta \sigma \dot{\varepsilon}^p, \\
 \dot{\varepsilon}^p &= \Sigma^{-1}(T, \sigma, \varepsilon^p), \\
 \varepsilon^p &= \int_0^t \dot{\varepsilon}^p d\tau.
 \end{aligned} \tag{6}$$

где первое уравнение представляет собой закон сохранения импульса, второе уравнение есть следствие закона о деформации, третье – суть закон сохранения энергии, четвертое уравнение – это закон пластической текучести. Здесь  $v(y, t)$  – скорость слоя частиц материала в направлении деформации,  $\sigma(y, t)$  – напряжение,  $T(y, t)$  – температура,  $\varepsilon^p(y, t)$  – пластическая деформация,  $\dot{\varepsilon}^p(y, t)$  – скорость пластической деформации,  $\mu$  – модуль упругого сдвига,  $C$  – теплоемкость,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность материала,  $\beta$  – коэффициент Тейлора-Куни.

*Второй раздел* посвящен построению точных решений нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих процессы формирования упорядоченных структур на поверхности подложек при ионной бомбардировке в одномерном и двумерном случае.

Поскольку в диссертации анализ процессов образования кластеров наноструктур при ионной бомбардировке проводится на основе численных алгоритмов, возникает задача о разработке способов проверки адекватности и эффективности соответствующего алгоритма. Для этого целесообразно воспользоваться точными решениями соответствующих задач.

С этой целью во втором разделе представлено обсуждение методов построения точных решений неинтегрируемых дифференциальных уравнений. Для построения точных решений в данной работе использован метод простейших уравнений как наиболее эффективный.

В частности, построены точные решения в виде уединенных волн и волн переключения для уравнений, описывающих процесс распыления поверхности подложки в одномерном случае. Изучено влияние параметров на профиль и скорость распространения волн. Показана зависимость амплитуды полученных решений от скорости их распространения.

Показано, что уравнение (4) без учета слагаемых пятого и шестого порядка, описывающее процессы формирования диссипативных структур на поверхности подложки при ионной бомбардировке, имеет точные решения в виде комбинаций гиперболических, эллиптических и элементарных функций. Также построены точные решения уравнения (4) при  $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = \xi_x = \xi_y = \Omega_1 = \Omega_2 = \gamma = 0$ .

*Третий раздел* посвящен численному исследованию процесса распыления поверхности подложки при ионной бомбардировке в одномерном случае. Данный процесс описывается уравнениями

$$u_t + u^n u_x + \alpha u_{xx} + \beta u_{xxx} + \delta u_{xxxx} = 0, \quad (7)$$

$$u_t + u u_x + \alpha u_{xx} + \beta u_{xxx} + \delta u_{xxxx} + \theta u_{xxxxx} = 0, \quad (8)$$

где  $\alpha, \beta, \delta, \theta$  – постоянные. Показано, что в одномерном случае распыления поверхности подложки уравнение (4) сводится к (7) и (8) при  $n = 1$  с учетом замены переменных  $u = h_x$ .

Сформулированы краевые задачи, описываемые уравнениями (7),

(8) с учетом периодических граничных условий. На основе конечно-разностных и псевдоспектральных методов разработаны алгоритмы, позволяющие моделировать процессы формирования диссипативных структур на поверхности подложек в одномерном случае. Проведена проверка построенных алгоритмов с использованием полученных в диссертации точных решений. Продемонстрирована эффективность и корректность работы соответствующих алгоритмов.

Исследовано влияние показателя нелинейности  $n$ , входящего в уравнение (7), на процессы формирования диссипативных структур. Показано, что дисперсионное слагаемое приводит к стабилизации профиля поверхности с течением времени. Установлено, что при  $1 \leq n < 1.5$  и  $\sigma \equiv \beta/\sqrt{\alpha\gamma} \geq 0.37$  имеет место процесс формирования структур. Изучена зависимость амплитуды диссипативных структур от величины параметра  $\sigma$ .

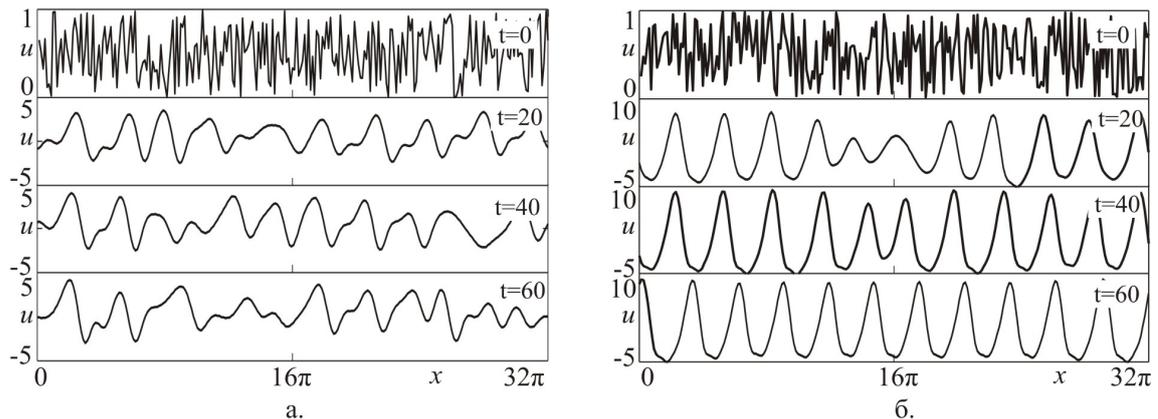


Рис. 3. Хаотические и периодические структуры. а –  $\sigma = 2$ ,  $\mu = 1$ , б –  $\sigma = 6$ ,  $\mu = 1$ .

Исследовано влияние дисперсии пятого порядка на процессы формирования упорядоченных структур, описываемых уравнением (8). Показано, что в зависимости от управляющих параметров  $\sigma \equiv \beta/\sqrt{\alpha\gamma}$  и  $\mu \equiv \theta\sqrt{\alpha/\gamma^3}$  поведение системы носит хаотический или регулярный характер (Рис. 3). Таким образом, установлено существование критического значения параметра  $\sigma^*$  при фиксированном значении параметра  $\mu$ , при котором наблюдаются процессы формирования упорядоченных структур. Установлено, что кривая  $\sigma^*(\mu)$  делит

плоскость  $(\mu, \sigma)$  на две области. Первая область соответствует хаотическому поведению системы, вторая – регулярному (Рис. 4).

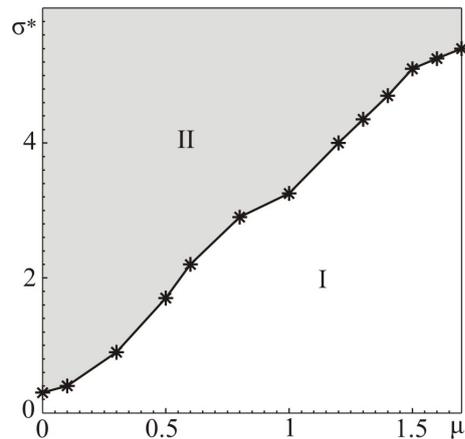


Рис. 4. Зависимость  $\sigma^*(\mu)$  для уравнения (8).

Также изучены волновые процессы, описываемые дифференциальными уравнениями (7), (8) при периодических граничных условиях. Исследована устойчивость полученных в диссертационной работе решений.

Четвертый раздел диссертационной работы посвящен численному моделированию процессов распыления поверхности подложки.

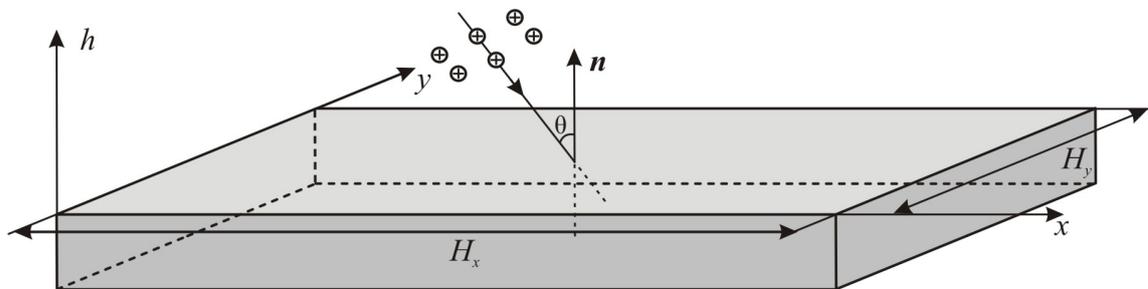


Рис. 5. Распыление плоской подложки при ионной бомбардировке

Рассматривается процесс ионной бомбардировки поверхности плоской подложки, схема которого представлена на Рис. 5. Сформулирована математическая модель, описывающая данный процесс, представляющая собой смешанную краевую задачу для дифференциальных уравнений (4), (5) с учетом периодических граничных условий, для случая наклонного и нормального падения ионов соответственно. Построены дисперсионные соотношения для

модельных уравнений. Обсуждается основная причина неустойчивости, возникающая при ионной бомбардировке поверхности подложек.

С использованием псевдоспектрального метода, разработан численный алгоритм решения задачи о распылении поверхности плоской подложки при ионной бомбардировке. На основе построенного алгоритма реализован комплекс программ, позволяющий проводить математическое моделирование данных процессов. Проведена верификация построенного алгоритма с использованием полученных точных решений. Проведено сравнение построенного алгоритма решения задачи с конечно-разностным методом. Продемонстрирована эффективность псевдоспектрального алгоритма.

При проведении математического моделирования процессов распыления поверхности подложки значения физических параметров задачи варьировались в интервалах  $\epsilon = 1 - 100$  кэВ,  $R = 0.5 - 10$  нм,  $\theta = [0^\circ, 90^\circ)$ . Здесь  $\epsilon$  – энергия ионов,  $R$  – средняя глубина проникновения ионов в подложку,  $\theta$  – угол падения ионов, отсчитываемый от нормали к плоской поверхности.

Исследовано влияние дисперсионно-диссипативных слагаемых пятого и шестого порядка в модельном уравнении (4) на процесс формирования диссипативных структур на поверхности подложки при ионной бомбардировке. Обсуждается временная эволюция средней высоты профиля поверхности подложки и дисперсии. Показано, что в случае наклонного падения ионов учет слагаемых пятого и шестого порядков существенно влияет на поверхностную морфологию подложки. Установлено, что в случае нормального падения ионов на поверхность подложки учет слагаемых выше четвертого порядка в модельном уравнении не влияет на процессы формирования диссипативных структур даже на длительных временах распыления.

Изучены процессы формирования диссипативных структур на поверхности подложки при нормальном падении ионов. Численные эксперименты показали, что в зависимости от глубины проникновения ионов в материал подложки наблюдается формирование двух типов поверхности, что иллюстрируется на Рис. 6. Показано, что первый тип

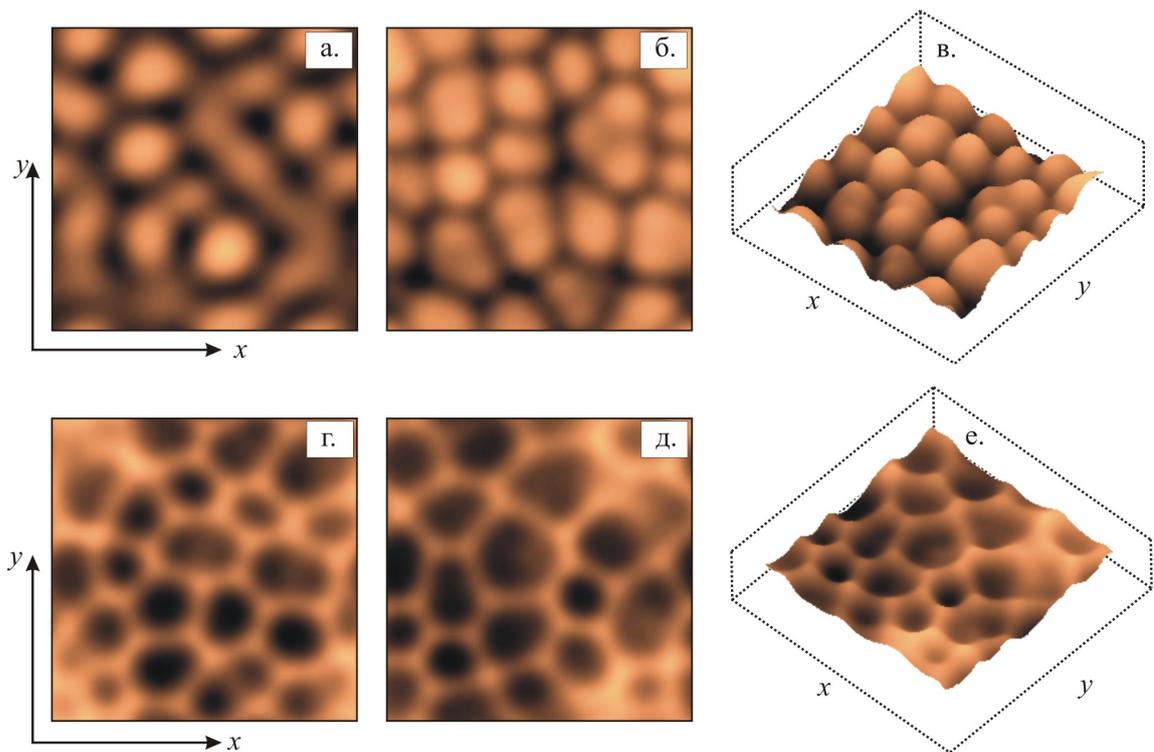


Рис. 6. Типы поверхностной морфологии. Нормальное падение ионов  $\theta = 0$ . а, б –  $R = 0.5$  нм при  $t = 500, 35 \times 10^3$  с; г, д –  $R = 2$  нм при  $t = 500, 50 \times 10^3$  с. При  $\epsilon = 3$  кэВ.

структуры характеризуется формированием упорядоченных бугорков на поверхности подложки, второй – формированием на поверхности шестигранных впадин. Определены диапазоны изменения физических параметров задачи, для которых имеют место процессы формирования бугорков и впадин. Характерный размер полученных структур варьировался в пределах от 1 нм до 30 нм.

Рассмотрены процессы формирования диссипативных структур на поверхности подложки при наклонном падении ионов. Изучено влияние угла падения ионов на процессы формирования диссипативных структур. Исследовано влияние глубины проникновения ионов в материал подложки на процессы формирования диссипативных структур. Установлено, что данный процесс при ионной бомбардировке наклонным пучком делится на три стадии. В частности, показано, что вторая стадия соответствует процессам формирования устойчивой ряби на поверхности подложки, как показано на Рис. 7. Проведена классификация дефектов, встречающихся при формировании ряби

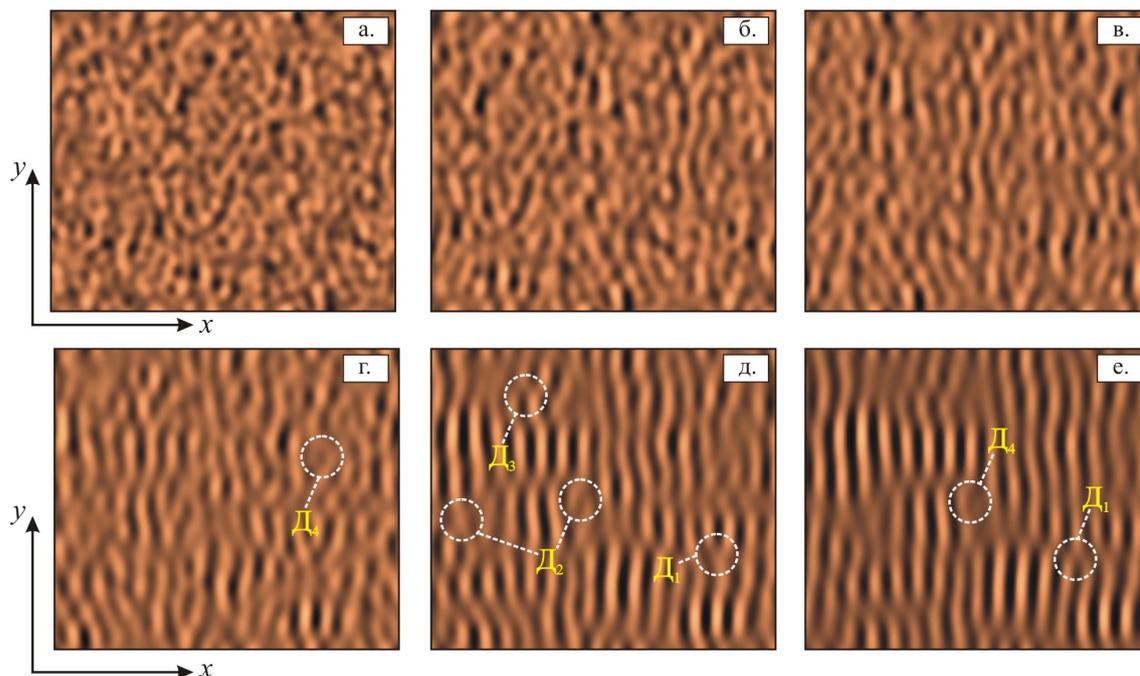


Рис. 7. Формирование поверхностной ряби. Классификация дефектов.  $a-e - t = 250, 500, 750, 1000, 2000, 3000$  с. При  $R = 3.36$  нм,  $\epsilon = 3$  кэВ,  $\theta = 40^\circ$ .

на четыре основных типа (Рис.7). Проведено сравнение полученных результатов с экспериментом. Установлено, что численные результаты качественно согласуются с экспериментами по ионной бомбардировке поверхности полупроводниковых подложек.

*Пятый раздел* содержит результаты численного моделирования процессов образования полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях.

Сформулирована постановка задачи, описывающая процессы формирования полос адиабатического сдвига в материалах при сдвиговых деформациях с учетом плоской симметрии. Приведены численные значения теплофизических и пластических характеристик исследуемых материалов, в частности, стали марки НУ-100, обедненного урана DU-0.75Ti и алюминия 7039 Al. Обсуждается актуальность исследования свойств данных материалов.

Разработан численный алгоритм решения задачи формирования полос адиабатического сдвига. Для построения конечно-разностного аналога системы уравнений, описывающей процесс формирования

ПАС, предложено использовать метод характеристик с итерационной процедурой по Ньютону. Проведено тестирование и обоснована эффективность построенного алгоритма.

Обсуждаются результаты численного моделирования процессов формирования полос адиабатического сдвига с учетом дефектов различного типа. Исследовано влияние граничных условий на процесс формирования ПАС. Показано, что в случае граничных условий первого рода процесс формирования ПАС происходит быстрее, чем в случае тепловой изоляции границ. Установлены стадии развития полосы адиабатического сдвига в материалах. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Исследовано влияние параметров задачи на процесс образования полос адиабатического сдвига. В частности, рассмотрено влияние начальной скорости пластической деформации на процесс локализации. Установлена параболическая зависимость между критической деформацией и начальной деформацией.

Рассмотрены процессы самоорганизации полос адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали. Продемонстрирован квазипериодический характер данного явления, что иллюстрируется на Рис 8. В частности, показано, что в областях локализации для алюминия имеет место скачок температуры от  $T \sim 50$  К до  $T \sim 600$  К за 0.35 мкс, для стали от  $T \sim 160$  К до  $T \sim 1000$  К за 2.5 мкс и для обедненного урана от  $T \sim 70$  К до  $T \sim 1200$  К за 0.4 мкс. Предложены две возможных оценки количества сформировавшихся полос адиабатического сдвига. Поскольку полосы адиабатического сдвига – это области, в которых за короткие промежутки времени достигаются высокие температуры и деформации, в работе используется два расчетных способа для определения количества сформировавшихся ПАС. Первый способ базируется на температурном критерии, второй – на деформационном. Согласно первому методу, количество ПАС  $N_T$  определяется как число локальных максимумов температуры в материале, величина которых превосходит наперед заданное значение  $T_n$ . Согласно второму

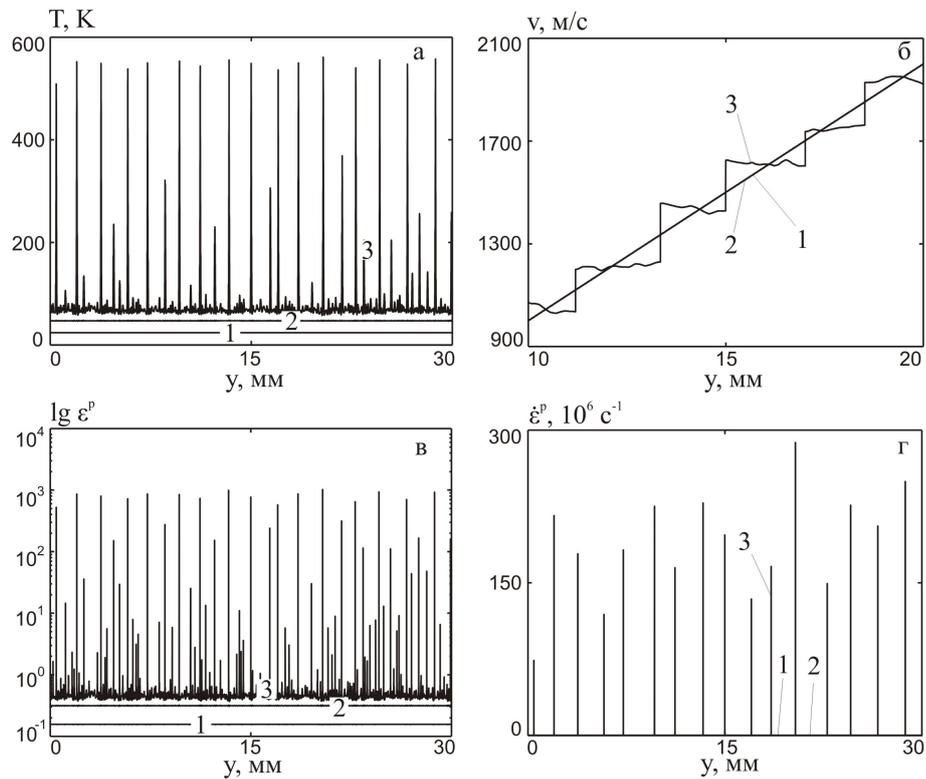


Рис. 8. Распределение теплофизических и пластических характеристик 7039-Al по высоте образца в различные моменты времени. а – температура  $T$ ; б – скорость  $v$ ; в – логарифм пластической деформации  $\lg \varepsilon^p$ ; г – скорость пластической деформации  $\dot{\varepsilon}^p$

методу, количество ПАС  $N_\varepsilon$  равно количеству локальных максимумов деформации  $\varepsilon^p$ , величина которых превосходит  $\varepsilon_n$ . Показано, что деформационный критерий позволяет более эффективно рассчитывать количество сформировавшихся полос сдвига. Исследована зависимость количества образовавшихся ПАС от величины пороговой деформации и от начальной скорости пластической деформации. При использовании метода наименьших квадратов получены соответствующие оценки

$$\begin{aligned}
 N_\varepsilon^1 &= 5.19 + 0.000228\dot{\varepsilon}_0, \\
 N_\varepsilon^2 &= 12.111 + 0.00046\dot{\varepsilon}_0, \\
 N_\varepsilon^3 &= -0.43 + 0.000268\dot{\varepsilon}_0,
 \end{aligned}
 \tag{9}$$

где  $\dot{\varepsilon}_0 \geq 10^4 \text{ с}^{-1}$  – начальная скорость пластической деформации,  $N_\varepsilon^1, N_\varepsilon^2, N_\varepsilon^3$  – это оценки по МНК для алюминия 7039 Al, обедненного урана DU-0.75Ti и стали марки НУ-100 соответственно.

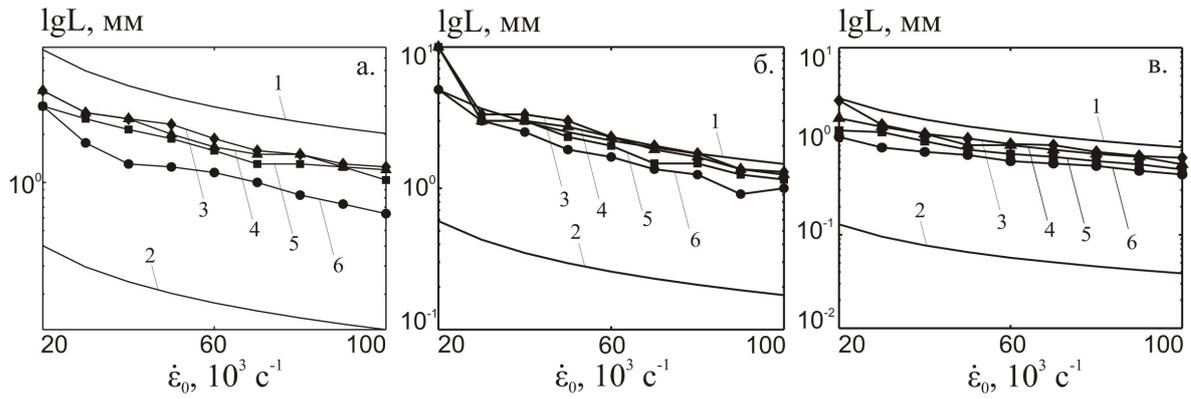


Рис. 9. Графики зависимости  $\lg(L)$  и  $\lg(L_{ГК}), \lg(L_{PO})(1,2)$  от  $\dot{\epsilon}_0$ . а,б – алюминий, сталь при  $\epsilon_n = 100, 80, 50, 10$  (3-6); в – обедненный уран  $\epsilon_n = 40, 30, 20, 10$  (3-6)

Формирование полос адиабатического сдвига в материалах приводит к возникновению трещин в местах их локализации, поэтому оценка расстояний между ПАС является важной задачей. В этой связи, на основе деформационного критерия и квазипериодичности явления предложена формула оценки среднего расстояния между полосами адиабатического сдвига

$$L = \frac{H}{N_\epsilon}, \quad (10)$$

где  $L$  – расстояние между полосами сдвига,  $N_\epsilon$  – количество полос рассчитанных по деформационному критерию,  $H$  – высота образца. По формуле (10) рассчитаны расстояния между полосами адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали в зависимости от начальной скорости пластической деформации  $\dot{\epsilon}_0$ . При  $\dot{\epsilon}_0 = 4 \times 10^4 \text{ c}^{-1}$  в алюминии расстояние между ПАС составило  $L = 2.14$  мкм, в обедненном уране  $L = 0.76$  мкм и стали  $L = 3$  мкм. Проведено сравнение полученных оценок (10) с теоретическими оценками Греди-Кипа, Райта-Оскендона (Рис.9). Установлено, что результаты численного моделирования лежат между оценкой Райта-Оскендона и оценкой Греди-Кипа. Продемонстрировано адекватное совпадение полученных результатов с теоретическими оценками Греди-Кипа.

В приложение А вынесены формулы для вычисления коэффициентов в модельном уравнении (4), описывающем процессы

образования наноструктур, возникающих при ионной бомбардировке поверхности подложки, в зависимости от реальных физических величин, таких как: угол падения ионов, глубина проникновения ионов в материал, плотность потока ионов и т.д.

В приложение В диссертации вынесен вывод формул матричной прогонки, позволяющих решать системы алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей.

## Заключение

Основные результаты, полученные при выполнении диссертационной работы, следующие

1. Сформулирована математическая модель для описания процессов распыления поверхности подложки при ионной бомбардировке;
2. Найдены точные решения эволюционных уравнений, встречающихся при описании процессов ионной бомбардировки подложки, необходимые для тестирования численных алгоритмов;
3. Определены диапазоны изменения управляющих параметров, при которых наблюдаются процессы формирования устойчивых периодических структур в одномерном случае ионной бомбардировки поверхности подложки;
4. Показано, что при наклонном падении пучка ионов на поверхность подложки учет слагаемых высокого порядка существенно влияет на поверхностную морфологию;
5. Установлено, что в случае нормального падения ионов на поверхность подложки, учет дополнительных членов в модельном уравнении не влияет на процессы формирования упорядоченных структур даже на длительных временах распыления;

6. Установлены диапазоны изменения параметров задачи, при которых наблюдаются процессы формирования упорядоченных бугорков и впадин;
7. Проведена классификация дефектов, возникающих при формировании периодической ряби на поверхности подложки при ионной бомбардировке в случае наклонного падения пучка ионов;
8. Предложено два критерия оценки количества сформировавшихся полос адиабатического сдвига в алюминии, обедненном уране и стали. На основе данных критериев получены расчетные формулы оценки количества сформировавшихся ПАС в зависимости от начальной скорости пластической деформации;
9. Предложена формула для оценки расстояния между полосами адиабатического сдвига, основанная на деформационном критерии и квазипериодичности явления.

*Основные результаты диссертации представлены в работах:*

1. Kudryashov N.A., Ryabov P.N., Sinelshchikov D.I. Nonlinear waves in media with fifth order dispersion//Physics Letters A. 2011. V. 375. P. 2051–2055;
2. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Свойства нелинейных волн в активно-диссипативной дисперсионной среде//Изв. РАН Механика жидкости и газа. 2011. №3. С. 99–107;
3. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н., Стриханов М.Н. Численное моделирование формирования наноструктур на поверхности подложки при ионной бомбардировке//Ядерная Физика и Инжиниринг. 2010. Т. 1. №2. С. 151–158;
4. Кошкин В.И., Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Численное моделирование образования полос адиабатического сдвига при деформациях//Ядерная Физика и Инжиниринг. 2010. Т. 1. №5. С. 465–474;
5. Кошкин В.И., Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Моделирование квазипериодических процессов формирования полос адиабатического сдвига при деформациях//Математическое моделирование. 2011. Т. 23. №10. С. 117-132;
6. Ryabov P.N. Exact solutions of the Kudryashov-Sinelshchikov equation//Applied Mathematics and Computation. 2010. V. 217. P. 3585–3590;
7. Kudryashov N.A., Ryabov P.N., Sinelshchikov D.I. A note on New kink-shaped solutions and periodic wave solutions for the  $(2 + 1)$ -dimensional Sine-Gordon equation//Applied Mathematics and Computation. 2010. V. 216. P. 2479–2481;
8. Kudryashov N.A., Ryabov P.N. Comment on Application of the  $(G'/G)$ -method for the complex KdV equation [Huiqun

- Zhang, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat 15;2010:1700-1704]//Communication in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2011. V. 16. P. 596–598;
9. Kudryashov N.A., Ryabov P.N., Sinelshchikov D.I. Comment on "new types of exact solutions for nonlinear Schrodinger equation with cubic nonlinearity"//Journal of Computational and Applied Mathematics. 2011. V. 235. №15. P. 4513–4515;
  10. Рябов П.Н. Численное моделирование возникновения наноразмерных структур на поверхности подложки при ионной бомбардировке// "Всероссийский конкурс научно-исследовательских работ студентов в области нанотехнологии и наноматериалов", Сборник студенческих работ, НИЯУ МИФИ. 2009. С. 420;
  11. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Периодические структуры возникающие в обобщенной модели Курамото-Сивашинского для описания турбулентности //Науч. сессия МИФИ–2009: Аннотации докладов. Т. 2. С. 128;
  12. Зеленцов А.В., Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Численное моделирование формирования наноразмерных структур на поверхности плоских подложек при ионной бомбардировке//Научная сессия НИЯУ МИФИ–2009. Сборник научных трудов. Т. 4. С. 24–26;
  13. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н., Синельщиков Д.И. Численное моделирование формирования наноразмерных структур на поверхности плоских подложек при ионной бомбардировке//II Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях". Сборник тезисов и докладов. М.:МИФИ. 2009. С. 372-373;
  14. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н., Чмыхов М.А. Образование наноразмерных структур на поверхности плоских подложек

- при ионной бомбардировке//Школа-семинар "Нанотехнологии производству". 2009. Тезисы докладов. М.:МИСиС. 2009. С. 237–240;
15. Рябов П.Н., Кудряшов Н.А. Самоорганизация периодических структур и структур с гексагональной симметрией на подложке при ионной бомбардировке//Научная сессия НИЯУ МИФИ - 2010. Аннотации докладов. Т. 2. С. 321;
  16. Рябов П.Н. Образование полос адиабатического сдвига при экстремальных сдвиговых нагрузках//Международная конференция аспирантов и молодых ученых "Ломоносов - 2010", Тезисы докладов;
  17. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Формирование квазипериодических полос адиабатического сдвига в материалах при деформациях//Материалы IX Международной школы "Хаотические автоколебания и образование структур". 2010. С. 81;
  18. Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Математическое моделирование формирования полос адиабатического сдвига при деформациях//Научная сессия НИЯУ МИФИ – 2011. Аннотации докладов. Т. 2 С. 188;
  19. Кошкин В.И., Кудряшов Н.А., Рябов П.Н. Численное исследование процессов формирования полос// Материалы конференции "Математические идеи П. Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания". 2011. С. 121.