

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики
Кафедра математического анализа и моделирования
Направление подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
Направленность (профиль) образовательной программы Математическое и программное обеспечение вычислительных систем

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
И.о. зав. кафедрой
_____ Н.Н. Максимова
« _____ » _____ 2019 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Моделирование распределения радиационных точечных дефектов
в кристаллах

Исполнитель
студент группы 7520м

(подпись, дата)

А.В. Поддубная

Руководитель
доцент, канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

Е.М. Веселова

Руководитель научного
содержания программы
магистратуры

(подпись, дата)

А.Г. Масловская

Нормоконтроль
старший преподаватель

(подпись, дата)

Л.И. Мороз

Рецензент
канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

И.А. Голубева

Благовещенск 2019

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики
Кафедра математического анализа и моделирования

УТВЕРЖДАЮ
И.о. зав. кафедрой
_____ Н.Н. Максимова
« _____ » _____ 2019 г.

З А Д А Н И Е

К магистерской диссертации студента Поддубной Анны Валерьевны

1. Тема магистерской диссертации: Моделирование распределения радиационных точечных дефектов в кристаллах (утверждена приказом от 04.02.2019 № 214-уч).
 2. Срок сдачи студентом законченной работы: 18.06.2019 г.
 3. Исходные данные к магистерской диссертации: отчет по преддипломной практике, средства автоматизации вычислений – ППП Matlab, COMSOL Multiphysics, учебная и научная литература.
 4. Содержание магистерской диссертации (перечень подлежащих разработке вопросов): постановка задачи, исследование задачи методом конечных разностей по явной и неявной схеме, разработка и расчет математической модели в ППП Matlab и COMSOL Multiphysic.
 5. Перечень материалов приложения: листинг вычислительных программ – реализация метода конечных разностей по явной схеме, реализация метода конечных разностей по неявной схеме.
 6. Консультанты по магистерской диссертации: рецензент – Голубева И.А., Голубева И.А., доцент кафедры физики, ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», канд. физ.-мат. наук; нормоконтроль – Мороз Л.И., старший преподаватель.
 7. Дата выдачи задания: 19.02.2019 г.
- Руководитель магистерской диссертации: Веселова Елена Михайловна, доцент, канд. физ.-мат. наук, доцент.

Задание принял к исполнению (19.02.2019): _____ Поддубная А.В.

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 59 с., 18 рисунков, 2 таблицы, 2 приложения, 19 источников.

ДИФФУЗИЯ, ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ, МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, MATLAB, ОБЛУЧЕНИЕ, COMSOLMULTIPHYSICS

Объект исследования – модель распределения точечных дефектов в кристаллах после облучения.

Цель магистерской диссертации – моделирование процесса распределения радиационных точечных дефектов в кристаллах, описываемого диффузионным уравнением.

В работе представлены результаты численного и компьютерного моделирования воздействия высокоэнергетического пучка электронов на цилиндрический образец лазерного кристалла. Для расчета концентрации точечных дефектов по длине образца была разработана прикладная программа в ППП Matlab. В среде COMSOL Multiphysics построена модель, позволяющая визуализировать результаты расчета.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
1 Теоретическое описание процесса образования радиационных точечных дефектов в кристалле	9
1.1 Радиационные дефекты в кристаллах	9
1.2 Механизмы радиационного дефектообразования в кристаллах	16
2 Методы математического исследования нелинейных процессов радиационного дефектообразования	
2.1 Современные подходы математического описания процесса радиационного дефектообразования в кристаллах	22
2.2 Статистический подход к описанию радиационного дефектообразования	27
3 Численное и компьютерное моделирование распределения точечных дефектов в кристалле после облучения	34
3.1 Решение одномерного нестационарного диффузионного уравнения с источником в ППП Matlab явной схемой метода конечных разностей	35
3.2 Неявная схема метода конечных разностей решения нестационарного диффузионного уравнения с источником в ППП Matlab	38
3.3 Результаты расчетов и моделирования дифференциального уравнения в среде COMSOL Multiphysics	43
4 Использование результатов магистерской диссертации в педагогической деятельности	48
4.1 Пример решения неоднородного диффузионного уравнения	48
4.2 Пример индивидуального задания по дисциплине «Численные методы и математическое моделирование»	50
Заключение	51
Библиографический список	53
Приложение А Реализация задачи методом конечных разностей по явной схеме	56

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время перспективными методами исследования физических процессов является математическое и компьютерное моделирование. Варьируя начальные параметры модели, можно прогнозировать поведение материала или изменение его свойств в экстремальных условиях эксплуатации, к которым можно отнести радиационное воздействие, без проведения экспериментальных исследований.

Современным мощным инструментом проведения расчетов и моделирования различных физических процессов, основанных на дифференциальных уравнениях в частных производных, является среда COMSOL Multiphysics. Отличительной особенностью среды является мощный графический интерфейс и наглядная визуализация результатов моделирования.

Исследование распределения точечных дефектов в кристалле после облучения является актуальной задачей, т.к. вследствие воздействия излучения меняется структура материала и его свойства. Для получения новых материалов с заранее заданными свойствами или прогнозирования поведения материала в экстремальных условиях эксплуатации целесообразным является применение численного и компьютерного моделирования. Что позволяет избежать проведения большого числа дорогостоящих и трудозатратных экспериментов.

Основная задачей по теме магистерской диссертации была разработка программного решения и проведение вычислительного эксперимента по оценке изменения концентрации точечных дефектов в облучаемом кристалле, производимым высокоэнергетическим пучком электронов, в рамках реакционно-диффузионной модели.

Объект исследования – модель распределения точечных дефектов в кристаллах после облучения.

Предмет исследования – процесс распределения радиационных точечных дефектов в кристаллах.

Цель магистерской диссертации – моделирование процесса распределения радиационных точечных дефектов в кристаллах, описываемого диффузионным уравнением.

Задачи исследования:

- формализация исследуемого процесса в виде математической модели распределения точечных дефектов в облучаемом кристалле;
- численная реализация математической модели в ППП Matlab;
- разработка приложения в пакете COMSOL для анализа изменения структуры материалы в следствии образования дефектной структуры.

Методы исследования: математическое и компьютерное моделирование.

Научная новизна работы заключается в исследовании распределения точечных дефектов в кристаллах инструментами ППП Matlab и среды COMSOL Multiphysics.

Результаты работы докладывались и обсуждались на научной конференции «День науки» в АмГУ (2018-2019 гг.) и на научно-методических семинарах кафедры математического анализа и моделирования ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет» (2018-2019 гг.).

По теме магистерской диссертации опубликовано четыре работы, одна из которых в журнале, входящем в систему РИНЦ «Вестник АмГУ». Две работы в сборниках материалов региональной научно-практической конференции «Молодёжь XXI века: шаг в будущее» (2018-2019 гг.) и одна работа в сборнике материалов II Всероссийской национальной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и наука: актуальные проблемы фундаментальных и прикладных исследований» (8-12 апреля 2019 г.), Комсомольский-на-Амуре государственный университет.

Результаты магистерской диссертации могут быть использованы в образовательном процессе при преподавании и изучении дисциплин «Численные методы», «Уравнения в частных производных» (направление подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика), «Численные методы и мате-

математическое моделирование» (направление подготовки 03.03.02 Физика) в рамках проведения практических (или лабораторных) занятий.

Структура работы: в первой главы магистерской диссертации приведено теоретическое описание процесса образования радиационных точечных дефектов в кристалле. Рассмотрена теория по радиационным дефектам в кристаллах и механизмы их образования.

Во второй главе приведены методы математического исследования нелинейных процессов. Рассмотрены современные подходы математического описания процесса радиационного дефектообразования в кристаллах.

В третьей главе приведены результаты численного и компьютерного моделирования распределения точечных дефектов в кристалле после облучения. Приведена постановка задачи в виде одномерного нестационарного диффузионного уравнения. Решение данного уравнения выполнено в ППП Matlab явной и неявной схемой метода конечных разностей. В первом пункте первой главы приведен алгоритм численного решения диффузионного уравнения явной схемой метода конечных разностей, во втором пункте – неявной схемой. В третьем пункт приведены результаты моделирования рассматриваемого процесса в среде COMSOL Multiphysics.

В четвертой главе продемонстрировано использование результатов магистерской диссертации в педагогической деятельности. Приведен пример аналитического решения неоднородного диффузионного уравнения. Также приведен пример индивидуального задания по дисциплине «Численные методы и математическое моделирование», выполнение которого предусматривает реализацию решения дифференциального уравнения параболического типа по явной схеме метода конечных разностей в ППП Matlab.

1 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛЕ

1.1 Радиационные дефекты в кристаллах

Твердые тела, имеющие форму многогранников, которая возникает в результате упорядоченного расположения атомов, называются кристаллами.

Точечные дефекты, дислокации и другие несовершенства структуры, которые существуют в кристалле, определяют свойства кристалла, управляют процессами диффузии, оказывают большое влияние на тепловые, магнитные и электрические свойства тел, которые сопутствуют деформации. Поэтому без понимания дефектов структуры нет возможности использовать кристаллы [1].

Идеальным называется кристалл, у которого атомы находятся в строго периодическом расположении, т.е. их можно изобразить в форме правильного многогранника как показано на рисунке 1(а). Если сместить идеальный кристалл на величину, равную трансляционному вектору, он совмещается сам с собой. В результате происходит единичный сдвиг, который полностью восстанавливает исходную кристаллографическую конфигурацию атомов и, следовательно, сохраняется прежняя кристаллическая структура [2]. В природе идеальные по форме кристаллы встречаются редко.

Свойства идеального кристалла можно рассмотреть на примере кристаллов четырех типов:

- ионные кристаллы. Представляют собой кубическую кристаллическую структуру из регулярно расположенных положительных и отрицательных ионов. Они обладают высокой симметрией. Примеры ионных кристаллов: галогениды щелочных и фториды щелочноземельных металлов.

- полупроводниковые кристаллы, которые являются в большей степени ковалентными, а в меньшей степени ионными кристаллами;

- ковалентные кристаллы. Чаще всего, имеют однотипный состав атомов. Примеры ковалентных кристаллов: алмаз, германий.;

- кристаллы инертных газов и молекулярные кристаллы. Имеют плотную структуру. [3]

Реальный кристалл отличается от идеального искаженной кристаллической решеткой, что отображает рисунок 1 (б).

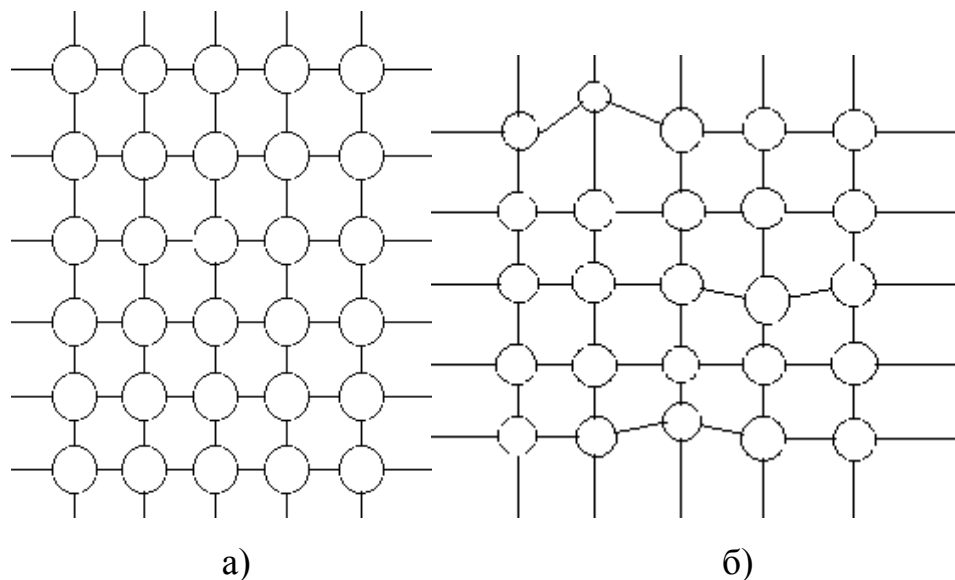


Рисунок 1 – Кристаллические решетки а) идеального кристалла;
б) реального кристалла

Закономерности формирования физико-химических кристаллических структур помогают объяснить свойства реальных кристаллов, такие как плотность, удельная теплоемкость, диэлектрическая проницаемость и упругость. Целый ряд очень важных свойств твердых систем (прочность, теплопроводность, электрическая проводимость, магнитные и оптические свойства, каталитическая активность) существенно зависят от того отклонения кристаллических структур веществ от идеальных. Реальные кристаллы всегда содержат структурные нарушения, которые называют несовершенствами или дефектами. Любое искажение или нарушение регулярности в расположении атомов кристалла естественно считать дефектом кристаллической решетки. Дефекты, которые мы можем наблюдать в реальных кристаллах - это то, что отличает его от идеального кристалла. Характер влияния дефекта на физические свойства кристалла существенно зависит от размерности дефекта, так как ряд свойств реального кристалла зависит от влияния на него дефектов.

Дефекты кристаллов могут сообщить твердым телам ценные свойства, поэтому их реализуют искусственным путем. Кроме них, кристалл содержит химические несовершенства в виде посторонних атомов. Эти несовершенства влияют на свойства атомов.

Одна из важных проблем в современной физике и химии твердого тела заключается в дефектном состоянии твердых тел различной природы. Понятие дефектности электронной и атомной структур кристалла лежат в основе описания многих процессов. Химические взаимодействия, в которых участвуют твердые тела, перенос массы, описание всех структурных и других свойств твердых тел.

Говоря о структурных дефектах, представляют собой неполноту контакта и неполное развитие химических связей двух поверхностей, приведенных в соприкосновение. Такие дефекты ухудшают свойства кристаллов. Структурные дефекты реальных кристаллов разнообразны.

Дефекты можно классифицировать несколькими способами. Самые простые из них заключается в делении дефектов на собственные и примесные,

Дефекты можно также разделить по энергетическому состоянию. Выделяют равновесные и неравновесные дефекты.

Главная особенность примесных дефектов заключается в наличии чужеродных молекул или атомов.

Собственные дефекты называются дефекты, образованные из собственных атомов или вакансий. Изменение количественного состава кристалла без качественного объясняется влиянием температуры, механических, радиационных и многих других видов воздействия на твердую фазу.

Концентрация равновесных дефектов зависит от значения температуры. Чем она выше, тем выше концентрация дефектов. При ее снижении значение концентрации уменьшается. После возвращения кристалла к исходному состоянию концентрация будет соответствовать исходной, которая для данной системы определяется только температурой.

Температура оказывает влияние на неравновесные дефекты.

Дефекты обычно делят по размерному признаку, а именно, по числу измерений макроскопической протяженности дефекта. Различают 4 типа дефектов:

а) Линейные (одномерные) дефекты. Характеризуется искажением линейной последовательности узлов решетки, которые нарушают чередования обрыва и сдвига слоев. Также называют дислокациями. Самый распространенный представитель данного типа – краевая дислокация.

б) Поверхностные (двумерные) дефекты. Самый простой пример поверхностного дефекта – поверхность кристалла. Особенность поверхностных дефектов заключается в изменении периодичности расположения атомов. Дефекты такого типа можно наблюдать как на поверхности кристалла, так и внутри.

в) Объемные (трехмерные дефекты). К данному типу относятся нарушения целостности материала, например, трещины, микропустоты, поры. Такой тип дефектов влияет на физические и химические свойства материалов, такие как прочность, электрические и магнитные и др. Снижают свойства материалов также, как и дислокации.

г) Точечные (нульмерные) дефекты. Они малы во всех измерениях, их размеры не превосходят нескольких атомных диаметров. Существует два элементарных типа таких дефектов. Вакансия - узел атомной решетки без атома, отображенный на рисунке 2(а). Второй тип – это маленькая область кристалла, в которой расположен избыточный атом. Его также называют междуузельным атомом и при этом исходят их представления о том, что лишний атом как бы втиснулся между двумя узлами, как показано на рисунке 2(б).

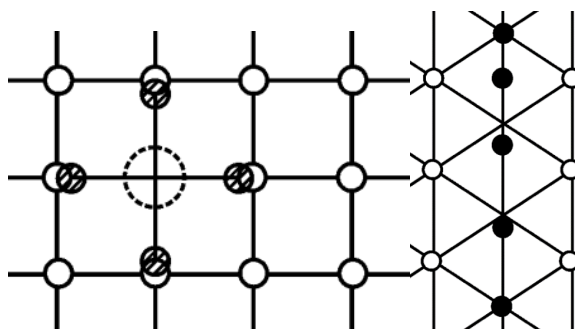


Рисунок 2 – Точечные дефекты в кристаллической решетке:
вакансия и междуузлие

Русский ученый Френкель был первым, кто в 1926 г. ввел концепции точечных дефектов. Он предположил, что тепловое возбуждение вызывает переход атомов их нормального положения в узле решетки в междуузельное положение, оставляя вакансии в решетке. В настоящее время этот тип называют дефектом по Френкелю.

В начале 30-х годов Вагнер и Шоттки рассмотрели довольно общий случай беспорядка в бинарных соединениях, учитывая возможность существования вакансий, междуузлий и антиструктурных дефектов в обеих подрешетках [4].

Точечные дефекты можно классифицировать по причине их образования:

- тепловые дефекты. В результате обмена теплом кристалла с внешней средой образуются междуузельные атомы и вакансии, т.е. нарушается структура кристаллической решетки. При 0 К тепловые дефекты не происходят. Максимальную концентрацию таких дефектов можно наблюдать при температуре, близкой к температуре плавления.

Нарушение также можно наблюдать, когда атом покидает свой узел в решетке и занимает место между узлами. Соседние атомы смещаются от центра междуузлия к периферии. Данный процесс занимает большое количество энергии. На месте занявшего положение между узлами атома образуется вакансия. Перемещение из положения в положения может продолжаться пока действуют тепловые колебания. Процесс прекращается, когда атом попадет в вакансию, которая будет у него на пути.

В результате тепловых флуктуаций могут возникать не только точечные дефекты. Резкое охлаждение – еще один способ получить достаточно большое количество точечных дефектов. Пересыщенный точечными дефектами (преимущественно вакансиями) кристалл отличается поведением при пластической деформации.

Еще один способ создания избыточных дефектов заключается в сильной деформации кристалла, например, ковкой, прокаткой или волочением. Решетка в данном случае по-прежнему сохранит свою кристаллическую природу, но при

такой обработке возникают многочисленные дефекты структуры, в том числе и точечные.

И наконец, увеличить количество точечных дефектов можно в результате радиационного облучения металлов частицами с высокой энергией. Быстрые частицы соударяются с атомами решетки и выбивают их из положения равновесия, образуя при этом дефекты по Френкелю. Количество дефектов будет зависеть не от температуры, а от природы кристалла и энергии бомбардирующих частиц. Таким типом облучения можно достичь заметного количества концентрации "выбитых" атомов, которое приводит к ощутимым изменениям свойств.

Единичные точечные дефекты могут объединяться в комплексы. Таким образом, образуются парных вакансий (или бивакансий), то есть, две одиночные вакансии формируют единую комбинацию в результате взаимодействия (слияния). Также вероятны случаи образования комплексов другого типа – «вакансия-примесный атом внедрения».

Подобные объединения точечных дефектов имеют свою особенность, связанную с большей диффузионной подвижностью.

В реальном кристалле все время появляются и исчезают точечные дефекты.

- дефекты нестехиометрии и дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Изменение химического состава кристалла связано с его обменом с внешней средой. Отклонение химического состава от стехиометрического приводит к образованию вакансий и междоузельных атомов – дефектов нестехиометрии.

Причиной образования вакансий и междоузельных атомов также можно назвать и присутствие в кристалле примесных атомов. Точечные дефекты в кристаллах могут меняться при их легировании, то есть при введении малых количеств добавок. Вещества, используемые в качестве примесей, обычно образуют с основным веществом твёрдые растворы. Примесные дефекты делятся на дефекты, которыми являются сами примесные атомы или ионы в решётке,

дефекты, которые возникают в следствии замещения основного атома решётки атомом примеси.

- электронные дефекты. Электроны условно можно поделить на связанные, которые образуют связь между атомами или локализованы на них, и свободные, которые перемещаются по кристаллу.

При 0 К все электроны локализованы на атомах и химических связях между соседними атомами. Кристалл может стать проводящим. Это связано с повышением температуры. Некоторые электроны изменяют своё связанное положение, и становятся свободными. Другими словами, изменение температуры от 0 К, можно рассматривать как отклонение положения электрона от некоторого идеализированного. А в системе ковалентно связанных атомов после удаления электрона остаётся вакантное место – дырка, заряженная положительно.

Антиструктурные дефекты. Изменение температур характеризуется изменением способа расположения частиц в решетке для многих двух- и более компонентных кристаллов. Такие процессы получили название «переходам типа порядок-беспорядок». Известным случаем беспорядка является случайное расщепление различных атомов по позициям, которые при невысоких температурах (наличие порядка) предусмотрены определённому типу атомов.

Возникновение порядка в расположении атомов разного сорта сопровождается появлением максимумов на рентгенограммах. Особенностью антиструктурных дефектов (беспорядков) заключается в возможности возникать в самых разных классах твёрдых веществ – от металлов до химических соединений.

Точечные, как и другие типы дефектов считаются микроскопическими, так как по крайней мере в одном направлении их протяженность измеряется лишь несколькими атомными диаметрами.

Особенностью точечных дефектов является то, что их трудно наблюдать непосредственно. Поэтому изучать и обнаруживать их приходится в основном по тому, какое влияние они оказывают на физические свойства кристалла.

Вторая особенность таких дефектов заключается в том, что даже в кристалле, находящемся в термодинамическом равновесии, концентрация дефектов может быть значительной (то есть они являются равновесными дефектами).

Кристалл имеет способность сохранять точечные дефекты. Она зависит от подвижности точечных дефектов в кристалле, так как дефект, который находится в равновесии и обладает большой подвижностью, довольно быстро исчезнет. Точечные дефекты, соединяясь с другими точечными дефектами, могут разрушаться на поверхности кристалла. Подвижность дефекта, который находится в равновесии, также является важной характеристикой, так как атомы могут переходить сквозь кристалл за счет движения равновесных точечных дефектов.

1.2 Механизмы радиационного дефектообразования в кристаллах

Существуют различные механизмы образования радиационных дефектов. Наиболее часто встречающимся в различных материалах является механизм упругого соударения быстрой частицы излучения с частицами вещества. На основе физической модели упругого соударения был разработан широкий математический аппарат, описывающий процессы, происходящие в веществе при взаимодействии его с излучением.

В данном параграфе будут описаны процессы, развивающиеся в твердом теле при взаимодействии его с ионизирующим излучением, и в частности, с потоками моноэнергетических электронов, а также будет рассмотрено математическое описание этих процессов.

Радиационное дефектообразование – это многосторонний процесс, включающий в себя упругие и неупругие взаимодействия бомбардирующих частиц излучения с атомами (ионами) твердого тела, каскады атомных (ионных) соударений, диффузию атомов (ионов) вещества, процессы эволюции дефектной структуры, различного рода деформации материалов и т.д., приводящие к изменению их свойств. Общая картина радиационного дефектообразования в материалах представлена на рисунке 3.

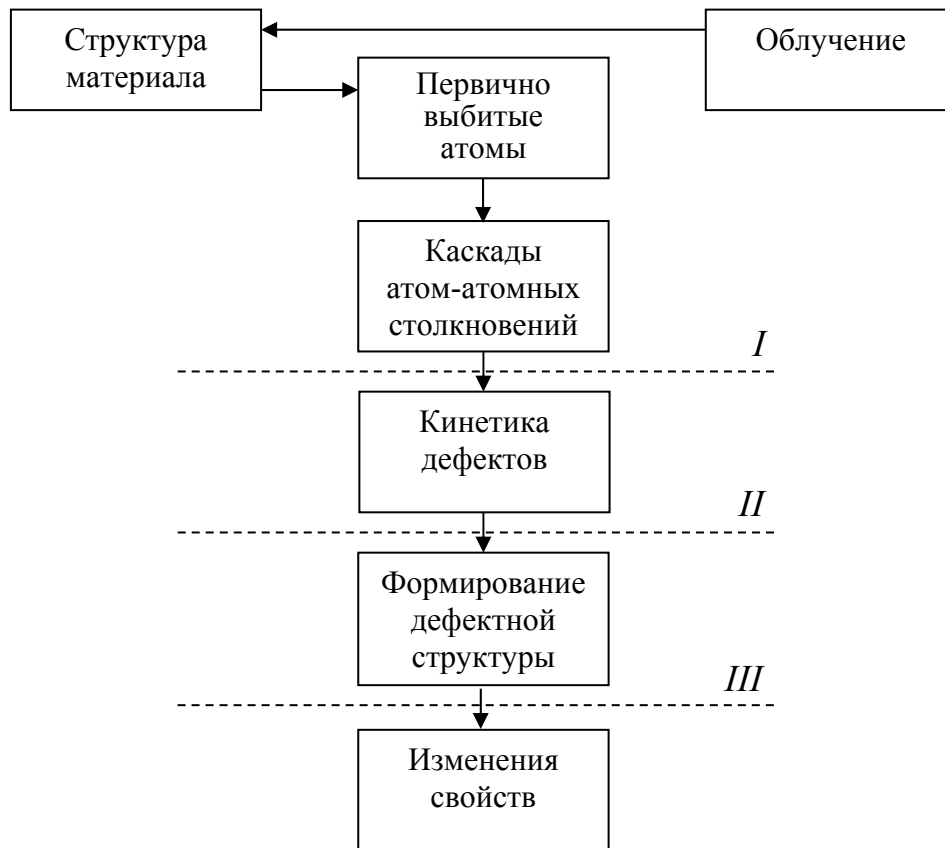


Рисунок 3 – Схема основных стадий радиационной повреждаемости материалов. I –динамическая стадия; II-диффузионная стадия; III-стадия эволюции стоков

Материал, взаимодействуя с облучающими частицами, изменяет свою структуру. Атомы (ионы) смещаются из узлов решетки кристалла под воздействие энергии облучающих частиц. В случае, если атом(ион) оказывается выбитым из своего узла, то значит энергия частиц выше пороговой энергии смещения E_d , и образуются первично выбитый атом (ПВА). Последующие столкновения образуют вторичные, а они уже третичные и т.д. В результате образуется каскад движущихся атомов (ионов), изображенный на рисунке 4.

В области облучаемого твердого тела, по которому прошел каскад (каскадной области), возникает большое количество (до нескольких тысяч) френкелевских пар и происходит локальный нагрев материала. В результате прохождения каскада вокруг мест соударений облучающей частицы с атомами (иона-

ми) вещества возникает сложная по составу область (эмбриональное повреждение материала), состоящая из зон обеднения и обогащения.

Картину развития радиационного каскада от момента возникновения первично выбитых атомов до образования в этой области твердого тела характерных структур можно представить в виде схемы, изображенной на рисунке 5.

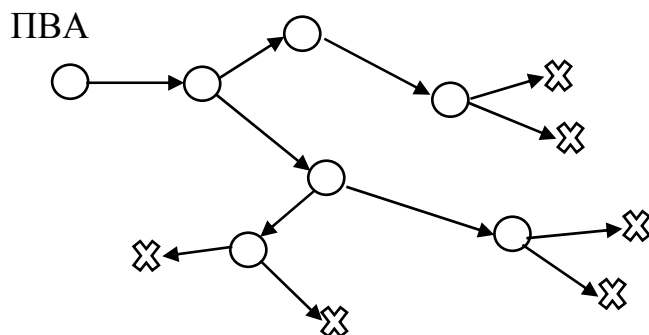


Рисунок 4 – Схема развития каскада движущихся атомов (ионов).

Квадрат – вакансия, *крестик* – междоузельный атом

При больших потоках облучения возрастает вероятность прохождения каскада движущихся атомов по уже поврежденным участкам кристалла. Каждое послекаскадное распределение дефектов по размерам в пространстве, образовавшееся за время 10^{-13} - 10^{-14} с, стремится прийти в равновесие с окружающей кристаллической решеткой. Но при облучении потоками частиц высокой плотности по этому неустановившемуся дефектному состоянию может пройти новый каскад атом-атомных соударений, причем его эволюция будет осложнена. На все эти процессы накладывается влияние тепловых колебаний решетки, механических напряжений и других внешних воздействий.

Одновременно с генерацией точечных дефектов энергия излучения расходуется на ионизацию и возбуждение электронов атомов (ионов) решетки, а также на увеличение тепловой энергии электронов проводимости. Происходит перестройка электронной подсистемы кристалла, в результате которой в действие вступают дополнительные механизмы образования точечных дефектов.

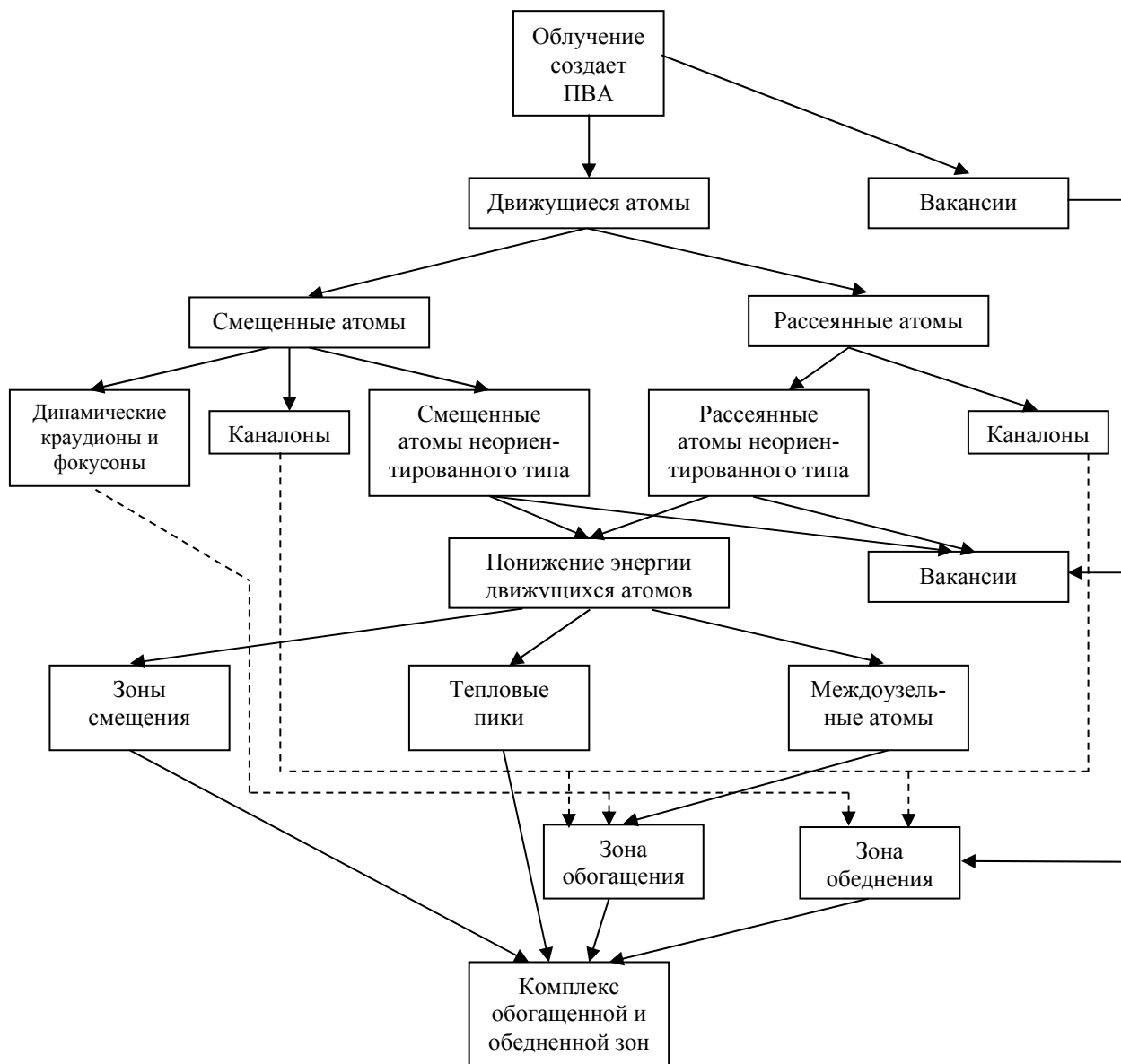


Рисунок 5 – Схема процессов при развитии каскадов движущихся атомов (ионов)

Сильное возбуждение электронной подсистемы может привести к возникновению резких локальных повышений температуры и к эффектам местного нагрева. В результате вакансии и междоузельные атомы начинают мигрировать по кристаллу. При этом они могут уходить на стоки – дислокации, границы зерен, объединяться в кластеры, образуя при этом поры и дислокационные петли. Разноименные дефекты при встрече могут рекомбинировать, причем не только попарно, но и попадая на кластеры противоположного знака.

После прохождения каскада и сопутствующих ему процессов завершается динамическая стадия радиационной повреждаемости и начинается диффузионная стадия. На диффузионной стадии происходит отжиг дефектов, что приводит к изменению первичной (эмбриональной) дефектной структуры, сформированной в каскадных областях. При этом устанавливаются диффузионные распределения точечных дефектов и образуются их скопления благодаря реакциям исчезновения дефектов, как в результате рекомбинации, так и в результате ухода на стоки (поверхность кристалла, границы зерен, дислокации, трещины) и образования кластеров.

В последствие дефекты эволюционируют под действием внешних факторов (облучения, температуры, деформации), что в свою очередь приводит к изменению макроскопических свойств материалов под облучением.

Таким образом, из всего вышесказанного видно, что все три стадии радиационного дефектообразования тесно связаны одна с другой, и математическое описание радиационного дефектообразования должно охватывать все процессы, происходящие на этих стадиях.

2 МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ РАДИАЦИОННОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ

Использование в расчетах и проектировании вычислительного оборудования дало толчок к быстрому развитию современной физики и техники. Вычислительного эксперимента заключается в решении численными методами уравнений математической модели. Использование ресурсов электронно-вычислительной техники позволяет процесс нахождения решения автоматизировать или упростить трудоемкие вычисления за счет уменьшения количества итераций, которые так необходимы для нахождения точного или приближенного решения (например, при решении систем линейных алгебраических уравнений).

Численные методы решения позволяют найти как приближенное, а иногда, и точное решение, уравнений. Решение будет представлено в виде значений аргументов для алгебраических уравнений. Решение дифференциальных уравнений отображается в виде таблицы. Методы имеют свое исключение, они не находят общего решения для систем. Они позволяют найти только частное решение. Численные методы применяются для большого количества различных уравнений и задачам для них.

Численные методы имеют исключения, они рассчитаны только для корректно поставленных задач. Для решения обыкновенных дифференциальных уравнений необходимо соблюдать условие обусловленности. Это означает, что даже при малейших изменениях начальных условий, не приводящих к изменениям интегральных кривых, искомое решение должно быть устойчивым. Для численного решения задачи использована явная и неявная разностные схемы.

Метод Эйлера - простейший численный метод решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, описанный Леонардом Эйлером в 1768 году в работе «Интегральное исчисление». Метод Эйлера является явным, одношаговым методом первого порядка точности, основанный на аппроксимации интегральной кривой кусочно-линейной функцией, так называемой ломаной Эйлера.

Метод Эйлера являлся исторически первым методом численного решения задачи Коши. О. Коши был использован данный метод для доказательства существования решения задачи Коши. Однако, метод обладает недостатком, заключающимся в невысокой точности и вычислительной неустойчивости. Поэтому этот метод редко используется.

Несмотря на свои недостатки, метод считается несложным и находит своё применение в теоретических исследованиях дифференциальных уравнений, задач вариационного исчисления и ряда других математических проблем.

2.1 Современные подходы математического описания процесса радиационного дефектообразования в кристаллах

Большое количество физических свойств материалов обусловлены диффузионными процессами, которые играют большую роль в определении механических свойств материалов.

В настоящий момент возникла необходимость в материалах, которые будут обладать набором необходимых свойств. В связи с чем, обильно развиваются технологии, которые используют процессы, контролирующие неравновесную диффузию. Например, при моделировании управления установлением стационарного распределения примесей в кристалле, используется произвольная зависимость коэффициента диффузии от времени. Постепенно изменяя показатели температуры кристалла, с течением времени изменится коэффициент диффузии. Это обусловлено зависимостью коэффициента диффузии от температуры по экспоненциальному закону.

Большое прикладное значение имеют задачи, в которых математические формулировки моделей сводятся к нестационарным задачам параболического типа для уравнений диффузии. Современные технические приложения показали острую необходимость изучать процесс эволюции концентрации примесей, точечных дефектов или температурного поля, когда соответствующий коэффициент переноса не является постоянным.

При моделировании распределения напряжений в облучаемых деформируемых материалах неравновесность коэффициента диффузии зависит от дозы.

Данная зависимость по линейному закону приводит к тому, что изменение плотности точечных дефектов радиационного происхождения и предела текучести облучаемого материала с накоплением дозы происходит неравномерным образом. При учете эффекта насыщения в зависимости неравновесного коэффициента диффузии при определенных значениях параметров облучения (температуры, энергии и интенсивности потока налетающих частиц) достаточно быстро происходит дозовое насыщение предела текучести.

В работах Красильникова показано, что увеличение температурно-энергетического фактора приводит к понижению характерного значения предела текучести, до которого происходит насыщение, вследствие влияния энергии потока налетающих частиц, которая передается атомам образца. В рассмотренном обобщении модели Вуттига-Бирнбаума неравновесность дислокационных трубок обуславливается релаксацией избыточной энергии их границ, что приводит к необходимости считать зависящим от времени коэффициента диффузии внутри дислокационной трубки.

Результатом диффузии при постоянной температуре является выравнивание химических потенциалов. В однофазной системе при постоянной температуре и при отсутствии внешних сил диффузия выравнивает концентрацию компонента фазы во всей системе. Если на систему действуют внешние силы или поддерживается градиент температуры, то в результате диффузии устанавливаются градиенты концентраций отдельных компонентов (термодиффузия, электродиффузия и другие процессы).

Уравнение диффузии представляет собой частный вид дифференциального уравнения в частных производных. Бывает нестационарным и стационарным. В смысле интерпретации при решении уравнения диффузии речь идет о нахождении зависимости концентрации вещества (или иных объектов) от пространственных координат и времени, причем задан коэффициент (в общем случае также зависящий от пространственных координат и времени), характеризующий проницаемость среды для диффузии.

Физически в том и другом случае предполагается отсутствие или пренебрежимость макроскопических потоков вещества. Таковы физические рамки применимости этих уравнений. Также, представляя непрерывный предел указанных задач (то есть не более, чем некоторое приближение), уравнение диффузии и теплопроводности в общем не описывают статистических флуктуаций и процессов, близких по масштабу к длине и времени свободного пробега, также весьма сильно отклоняясь от предполагаемого точного решения задачи в том, что касается корреляций на расстояниях, сравнимых (и больших) с расстояниями, проходимыми звуком (или свободными от сопротивления среды частицами при их характерных скоростях) в данной среде за рассматриваемое время. Это в подавляющей части случаев сразу же означает и то, что уравнения диффузии и теплопроводности по области применимости далеки от тех областей, где становятся существенными квантовые эффекты или конечность скорости света, то есть в подавляющей части случаев не только по своему выводу, но и принципиально, ограничиваются областью классической ньютоновской физики.

Результатом диффузии при постоянной температуре является выравнивание химических потенциалов. В однофазной системе при постоянной температуре и при отсутствии внешних сил диффузия выравнивает концентрацию компонента фазы во всей системе. Если на систему действуют внешние силы или поддерживается градиент температуры, то в результате диффузии устанавливаются градиенты концентраций отдельных компонентов (термодиффузия, электродиффузия и другие процессы).

Рассмотрим случай трехмерной диффузии в однородной среде. Первый закон Фика имеет вид:

$$j = -D \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -D \operatorname{grad} u = -D \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1)$$

где j – поток диффузианта через единицу поверхности;

D – коэффициент диффузии;

u – концентрация дефектов.

Градиент концентрации направлен по нормали к изоконцентрационной поверхности. Вектор градиента принимает положительное значение в том случае, если направлен в сторону возрастания концентрации. В частном случае одномерной диффузии, величина $gradu = \frac{\partial u}{\partial x}$ представляет собой повышение концентрации в направлении оси x .

Второй закон имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2)$$

При одномерной диффузии (например, диффузии в неограниченной пластине) закон диффузии Фика принимает формы:

$$j = -DS \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = D^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (2a)$$

где S – площадь поверхности, через которую проходит диффузионный поток.

Первое уравнение описывает скорость, с которой диффузانت проникает сквозь поверхность среды. Поток стационарен. Скорость выражается через градиент концентрации и постоянную - коэффициент диффузии D .

Второе уравнение отображает время, с которым диффузانت накопится в определенной точке среды. Это уравнение описывает нестационарное состояние потока.

Первый закон Фика раскрывает физический смысл коэффициента диффузии. Коэффициент показывает на сколько эффективно диффузионное перемещение частиц исследуемого вещества. Он численно равен плотности потока диффузанта, при значении градиента концентрации равном единице. Коэффициент имеет размерность $\text{м}^2/\text{с}$. При заранее заданных условиях система в состоянии сравнить разность концентраций. Данный процесс происходит, поскольку поток вещества стремится выровнять перепад потенциала или концентрации. Следует

учитывать, что перемещения, вызванные диффузией в разных материалах протекают с разной скоростью. Поэтому коэффициент диффузии может быть как скалярной, так и тензорной величиной.

Зависимость коэффициента диффузии от времени может быть использована при моделировании диффузионных процессов. Например, такую зависимость можно встретить при управлении установлении стационарного распределения примесей в кристалле.

Если коэффициент диффузии зависит от времени $D = f(\tau)$, то можно воспользоваться решениями уравнений для постоянного коэффициента диффузии, используя подстановку:

$$D = \frac{1}{t} \int_0^t D(\tau) d\tau. \quad (3)$$

Непрерывное изменение коэффициента диффузии с течением времени можно получить, непрерывно меняя температуру кристалла, поскольку коэффициент диффузии зависит от температуры по экспоненциальному закону:

$$D(t) = D_0 \cdot e^{-\frac{E_d}{k_b T(t)}}, \quad (4)$$

где $T(t)$ – температура испытания;

E_d – энергия активации диффузии и миграции;

$D_0 = av^2$, где a – длина перескоков; v – частота перескоков.

Для некоторых расчетов оценочного характера оказывается достаточным воспользоваться первым законом Фика. Однако практическое использование первого закона диффузии для экспериментального определения коэффициентов диффузии возможно лишь в тех случаях, когда условия опыта позволяют измерять поток и градиент концентрации одновременно. Для этого следует, например, поддерживать постоянный градиент концентрации, т.е. создавать условия для установления стационарного состояния, что не всегда легко осуществимо. Поэтому возникает задача исследовать нестационарный процесс диффузии.

При наличии источника, диффузионное уравнение приобретает следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D^2 \frac{\partial^2 u(x,)}{\partial x^2} + F(x, t, c), \quad (5)$$

где F – функция источника.

Особенность решений уравнений в частных производных параболического типа, каковым является уравнение (2), состоит в том, что возмущение распространяется с бесконечной скоростью. Более точный анализ явления диффузии приводит к уравнениям гиперболического типа, решения которых характеризуются конечной скоростью распространения возмущений. Однако большая часть задач математической теории диффузии связана с вычислением распределения концентрации как функции пространственных и временной координат.

2.2 Статистический подход к описанию радиационного дефектообразования

Поскольку в процессе радиационного дефектообразования происходит взаимодействие частиц пучка излучения с большим числом частиц вещества, то при рассмотрении данного явления и при математическом его описании необходимо использовать статистический подход. Данный подход основан на протекании того или иного процесса взаимодействия. За меру плотности вероятности события при взаимодействии частиц излучения с атомами (ионами) твердого тела принято сечение (дифференциальное, парциальное, полное) реакции, или иначе взаимодействия или рассеяния

$$\sigma = m' / \varphi, \quad (6)$$

где σ – эффективное сечение взаимодействия; m' – число взаимодействий в единицу времени.

В общем случае дифференциальное сечение взаимодействия определяется как отношение числа взаимодействий в единицу времени к плотности потока φ - количеству частиц, падающих нормально на единичную площадку за единицу времени, при этом рассеянные частицы имеют энергию в интервале от E до $E+dE$.

$$d\sigma = dm'(E) / \varphi. \quad (7)$$

Дифференциальное сечение рассчитывается для разных типов облучения с учетом особенностей взаимодействия быстрых частиц с атомами (ионами) твердого тела. В случае облучения кристалла моноэнергетическими электронами упругое рассеяние электронов с энергией порядка мегаэлектронвольт описывается дифференциальным сечением релятивистского Резерфордского рассеяния в кулоновском поле точечного ядра. Эта формула была получена Моттом без учета экранирования. Она довольно сложна и при расчетах ею пользоваться затруднительно, поэтому на практике применяют приближенную формулу Маккинли и Фешбаха. Дифференциальное сечение процесса передачи атому (иону) энергии отдачи между E и $E+dE$ в приближении Маккинли и Фешбаха представляется формулой

$$d\sigma = \frac{4\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4} \cdot \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \cdot \frac{E_m}{E} \cdot \left\{ 1 - \beta^2 \frac{E}{E_m} + \frac{\pi Z \beta}{137} \cdot \left[\left(\frac{E}{E_m} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{E}{E_m} \right] \right\}, \quad (8)$$

где Z – порядковый номер рассеивающего атома (иона), e и m – соответственно заряд и масса покоя электрона, c – скорость света, $\beta = v/c$, v – скорость электрона, E_m – максимально возможная энергия, которую электрон может передать атому (иону), определяемая из соотношения:

$$E_m = \frac{2E_e}{Mc^2} (E_e + mc^2), \quad (9)$$

где M – масса рассеивающего атома (иона), E_e – энергия электрона, m – масса электрона.

Погрешность вычислений по формуле для $Z \leq 40$ не превышает 1%, а значит, может использоваться и для щелочно-галогидных кристаллов.

На динамической стадии радиационного дефектообразования основным процессом является развитие каскада. Для математического описания развития радиационного каскада необходима функция, которая характеризовала бы среднее число смещенных атомов (ионов) в каскаде. Такая функция называется каскадной функцией – это интегральная характеристика и она не несет информации о распределении дефектов внутри каскадной области. Каскадная функция вы-

числялась во многих моделях с использованием различных упрощений, обзор некоторых моделей каскадных функций представлен в работах авторов [1, 2, 15]. Наиболее распространенной моделью является модель Кинчина-Пиза, предполагающая, что атомы ведут себя как твердые шары, все их соударения упругие, а каскад представляет собой последовательность соударений одинаковых атомов, когда каждому из них при столкновении передается одинаковая энергия. В теории Кинчина-Пиза выражение для среднего числа смещенных атомов одним первично выбитым атомом с энергией E_a представлено формулой:

$$\nu(E_a) = \begin{cases} 1, & 0 < E_a < 2E_d \\ E_a / 2E_d, & 2E_d < E_a < E_i, \\ E_i / 2E_d, & E_a > E_i \end{cases} \quad (10)$$

где E_i – это энергия движущегося атома (иона) выше которой вся энергия теряется на возбуждение электронов, а ниже вся идет на смещение атомов (ионов).

В качестве международного стандарта для расчета числа смещений в каскаде принята модель Торренса-Робинсона-Норгетта. Согласно данной модели расчет образования френкелевских пар дефектов в каскаде ведется на основе формулы:

$$\nu(E_a) = \frac{B(E_a - J)}{2E_d} = \frac{BE_a^*}{2E_d}, \quad (11)$$

где J – общие электронные потери в каскаде; B – эффективность смещений ($B = 0,8$ для всех энергий первично выбитых атомов).

Данная модель позволяет учитывать неупругие потери энергии, которые подсчитываются в соответствии с методом Линдхарда с использованием аппроксимации универсальной функции

$$E_a^* = \frac{E_a}{1 + \chi g(\varepsilon)}, \quad (12)$$

$$\chi = 0,1337 \frac{Z^{1/2}}{M^{1/2}}, \quad (13)$$

$$g(\varepsilon) = 3.4008 \varepsilon + 0.40244 \varepsilon + \varepsilon, \quad (14)$$

$$\varepsilon = \frac{E_a}{86.931 \cdot Z^{1/2}}, \quad (15)$$

где Z , M – соответственно порядковый номер и массовое число частицы-мишени.

Образование смещений в каскаде быстрыми частицами излучения может протекать с различными скоростями, что зависит от многих факторов - строения вещества, его температуры, типа и мощности излучения и т.д. В общем, виде скорость создания смещений при облучении кристаллов потоком частиц типа j ($j = \nu$ соответствует вакансии, а $j = i$ соответствует междоузельному атому) определяется следующим выражением:

$$Q_j = \int_{E_d}^{\infty} dE_a \nu(E_a) \cdot \int_{E_{\min}}^{\infty} \varphi_j(E) \frac{d\sigma_j(E, E_a)}{dE_a} dE, \quad (16)$$

где $\nu(E_a)$ – каскадная функция, характеризующая среднее число смещенных атомов в каскаде соударений; $\varphi_j(E)$ - спектральная плотность потока частиц; $\frac{d\sigma_j(E, E_a)}{dE_a}$ - дифференциальное сечение образования первично выбитых атомов (ионов) с энергией E_a при энергии налетающей частицы E ; E_{\min} – минимальная энергия, при которой частица способна привести к смещению атомов (ионов).

На практике для оценки скорости создания смещений пользуются следующими уравнениями:

- при слабо разветвленном каскаде столкновений

$$Q_j = \sigma_d(E) \nu(\overline{E_a}) (1 + \nu(\overline{E_a})) \varphi_j \quad (17)$$

- при $\nu(\overline{E_a}) \gg 1$

$$Q_j = \sigma_d(E) \nu(\overline{E_a}) \varphi_j, \quad (18)$$

где $\sigma_d(E)$ – сечение создания смещений частицей с энергией E .

Вышеуказанные формулы характеризуют процессы, происходящие с дефектами двух сортов – междоузельных атомов (ионов) и вакансий, но не учитывают, что твердое тело может состоять из нескольких сортов атомов (ионов). Вещества, имеющие сложную структуру, по сравнению с простыми(одноатомными) веществами имеют более сложную каскадную картину явлений. Это объясняется тем, что пороговая энергия смещения частиц различна. Энергия, которая передается от атома к атому, пропорциональна соотношению масс частиц. Поэтому при расчете концентрации дефектов по всем сортам атомов (ионов) и связанной с ней скоростью образования дефектов авторы [12, 13] предлагают считать, что как в простом, так и в сложном веществе каскады происходят одинаково. Значение суммарной концентрации дефектов будем находить из рассчитанных отдельно друг от друга концентраций дефектов по каждому сорту атомов (ионов)

$$n = \sum_i q_i n_i, \quad (19)$$

где q_i – относительная доля i -ой компоненты сложного вещества.

За динамической стадией радиационного дефектообразования следует диффузионная. Описание диффузионных процессов было предложено Фиком в 1855 году. Поскольку на тот момент никаких экспериментальных данных по диффузии в твердых телах не существовало, то уравнения Фика были написаны по аналогии с законами Фурье и Ома, описывающими теплопроводность и электропроводность.

Первый закон Фика описывает плотность макроскопического потока диффундирующих атомов (ионов):

$$J(r, t) = -D \nabla n(r, t). \quad (20)$$

Второй закон связан с законом сохранения вещества и характеризует изменение концентрации диффундирующих атомов (ионов) со временем:

$$\frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = -\text{div } J(r, t), \quad (21)$$

или

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \Delta n(\mathbf{r}, t), \quad (22)$$

где n – концентрация диффундирующих атомов (ионов), D – коэффициент диффузии, определяемый выражением]

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{(E_m + E_f)}{kT}\right), \quad (23)$$

где E_m и E_f – соответственно энергия миграции и энергия формирования дефекта.

Второй закон Фика не точен, поскольку описывает только образование дефектов, но не учитывает механизмов, приводящих к понижению их количества. К последним относятся рекомбинации разноименных дефектов, взаимодействия с дефектами более высокой размерности, образование скоплений точечных дефектов, диссоциации комплексов точечных дефектов.

Для описания перечисленных процессов используют теорию скоростей реакций, в рамках которой была получена еще в 1918 году формула Смолуховского [1]

$$\Theta = 4\pi R_B (D_1 + D_2) C_1 C_2, \quad (24)$$

где Θ – число реакций объектов в единицу времени (скорость реакции), D_1, D_2 – коэффициенты диффузии двух мигрирующих типов объектов, C_1, C_2 – их абсолютные концентрации, R_B – радиус взаимодействия - расстояния на которые должны приблизиться объекты, чтобы с вероятностью, равной единице, между ними произошла реакция.

Для учета перечисленных процессов закон Фика дополняется согласно формуле Смолуховского вкладками для различных механизмов исчезновения дефектов [1, 30]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_j(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & Q_j + \operatorname{div} \mathbf{J}_j(\mathbf{r}, t) - \mu D_i n_i(\mathbf{r}, t) n_v(\mathbf{r}, t) - D_j n_j(\mathbf{r}, t) k_j^2 - \\ & - \sum_m \alpha_{mj}^j D_j n_j(\mathbf{r}, t) n_{mj}(\mathbf{r}, t) + 2\chi_{2j} n_{2j}(\mathbf{r}, t) + \chi_{3j} n_{3j}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (25)$$

где первое слагаемое – это скорость генерации точечных дефектов типа j ; $n_j(\mathbf{r}, t)$ – концентрация дефектов типа j ($j = v$ соответствует вакансии, а $j = i$

соответствует междоузельному атому); $k_j^2 = \sum_{q=1}^{m_j} S_q$ – сумма сил стоков типа q

для дефектов типа j , m_j – число стоков типа q для дефектов типа j ; $\alpha_{mj}^j = 4\pi R_{mj}^j$,

R_{mj}^j – радиус захвата дефекта типа j кластером, состоящим из m дефектов типа j ;

третье слагаемое – это рекомбинационный член, учитывающий диссоциацию междоузлия и вакансии; четвертое слагаемое – вклад стоков в поглощение дефектов типа j ; пятое слагаемое – это член, учитывающий поглощение дефектов на кластерах, шестое и седьмое слагаемое соответственно – это элементы, учитывающие захват дефектов типа j ди- и трископлениями дефектов типа j .

В случае если необходимо учесть полевое взаимодействие дефектов типа j со стоками, то в законе Фика для плотности потока $J_j(r, t)$ дефектов типа j добавляется член, учитывающий энергию их взаимодействия $E_q^j(r, t)$

$$J_j(r, t) = -D \left[\nabla n_j(r, t) + \frac{n_j(r, t)}{kT} \nabla E_q^j(r, t) \right]. \quad (26)$$

Система уравнений с учетом перечисленных каналов реакций является сложной системой дифференциальных уравнений, зависящих как от пространственных переменных, так и от времени. Аналитические решения таких систем удается получить только в некоторых частных упрощенных случаях.

Помимо механизмов упругого рассеяния радиационное дефектообразование сопровождается неупругими взаимодействиями быстрых частиц с твердым телом, при котором изменяется направление их движения и энергия, то есть происходит их торможение. Так потери энергии, обусловленные неупругим рассеянием, при электронном облучении, вызываются двумя видами потерь: радиационными и ионизационными.

3 ЧИСЛЕННОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛЕ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ

С появлением и развитием электронно-вычислительных машин (ЭВМ) произошло революционное изменение во многих научных отраслях, в том числе и математики. Современные исследования математических моделей, описывающих физические процессы, происходят при помощи разработанных вычислительных алгоритмов на ЭВМ. Разработка и исследование вычислительных алгоритмов и их применение к решению конкретных задач составляет содержание огромного раздела математики – компьютерная математика.

В широком смысле, компьютерная математика представляет собой раздел математики, изучающий вопросы, связанные с использованием ЭВМ. В узком смысле – раздел математики, изучающий теорию численных методов и алгоритмов решения поставленных математических задач.

С быстрым и интенсивным развитием компьютерной техники параллельно развивается и направление компьютерной математики. Такие темпы развития способствовали образованию спроса и распространения программных комплексов, называемых система компьютерной математики.

Компьютерная математика — новое направление в науке и образовании, возникшее на стыке фундаментальной математики, информационных и компьютерных технологий.

Система компьютерной математики (СКМ) представляет собой комплекс программ, обеспечивающих обработку математических задач автоматически на специально разработанном языке.

Современные системы компьютерной математики представляют собой программы с многооконным графическим интерфейсом, развитой системой помощи, что облегчает их освоение и использование.

Шагом к развитию СКМ является рост математических возможностей, особенно в сфере аналитических и символьных вычислений. Способствовало и существенное расширение средств визуализации всех этапов вычислений, широкое

применение 2D- и 3D-графики, интеграция различных систем друг с другом и другими программными средствами, широкий доступ в сеть Internet, организация совместной работы над образовательными и научными проектами в сети Internet, использование средств анимации и обработки изображений, средств мультимедиа и др.

3.1 Решение одномерного нестационарного диффузионного уравнения с источником в ППП Matlab явной схемой метода конечных разностей

Matlab – пакет прикладных программ (ППП) для решения задач технических вычислений.

MATLAB представляет собой высокоуровневый язык технических расчетов. Интерактивная среда программы служит для разработки алгоритмов и анализа данных. По сравнению с традиционными языками программирования (C/C++, Java, Pascal, FORTRAN) позволяет сократить время решения типовых задач и значительно упрощает разработку новых алгоритмов.

В данной главе приведены результаты численного и компьютерного моделирования воздействия высокоэнергетического пучка электронов на цилиндрический образец кристалла форстерита Mg_2SiO_4 .

Концептуальная постановка задачи: провести моделирование установившейся концентрации точечных дефектов в стержне лазерного кристалла длиной $L=3$ см, диаметром $d = 0,1$ см под воздействием направленного на его центр пучка электронов. Концентрация дефектов на боковых поверхностях принимается равной нулю, как показано на рисунке 6.

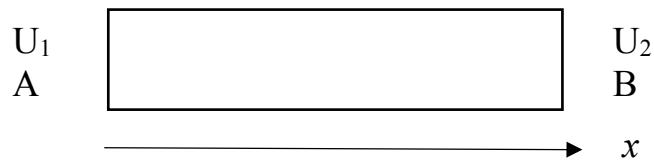


Рисунок 6 – Геометрическая модель математической задачи

Для формализации математической модели использовалось одномерное нестационарное диффузионное уравнение с источником:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + f(x, t) \quad (27)$$

где c – концентрация точечных дефектов;

α – коэффициент диффузии;

$f(x, t)$ – функция источника, которая имеет вид:

$$f(x, t) = k \cdot e^{-\frac{(x-1)^2}{\sigma^2}}, \quad (28)$$

где k – постоянная в функции источника;

σ – сечение образования пар.

Решение должно удовлетворять начальному условию – концентрация дефектов в начальный момент времени известна: $u(x, 0) = u_0(x)$ – заданная функция на отрезке $[0, L]$, где происходит диффузия.

Граничные условия имеют вид (граничные условия I рода): $u(0, t) = 0$, $u(L, t) = 0$.

Для численного решения задачи использована явная разностная схема.

Для замены условия, начальных и граничных условий используют совокупность узлов, называемую шаблоном.

Запишем разностную схему для уравнения (27) в соответствии с рисунком 7:

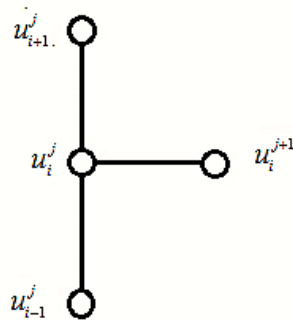


Рисунок 7 – Разностная схема для уравнения (27)

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} = \alpha \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2} + f(x_i, t). \quad (29)$$

Вычисляем значение уравнения (27) в узле $(j+1)$ -го шага:

$$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{\alpha\tau}{h^2}(u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j) + f(x_i, t). \quad (30)$$

В крайнем левом и правом узлах каждого слоя значение функции определяется из граничных условий: $u_i^0 = u(x_i)$, $u = 0$, $u_N^{j+1} = 0$.

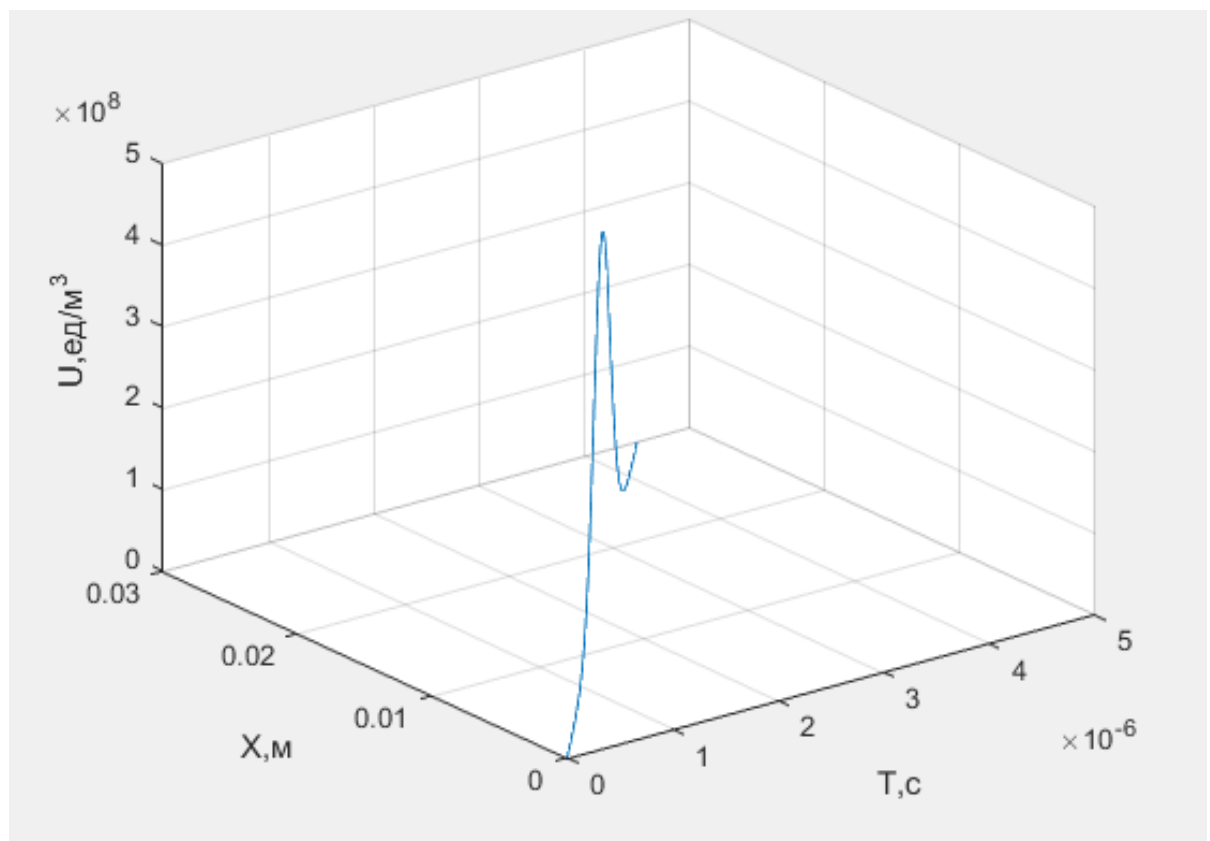
По известным значениям решения на нулевом временном слое, мы можем вычислить все значения $u(i)$ на первом временном слое, затем все значения $u(i)$ на втором временном слое и т. д.

Необходимые для моделирования значения представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Значение показателей

№	Наименование	Обозначение	Ед. измерения	Значение
1	Время наблюдения процесса	t	с	10
2	Сечение образования пары	σ	см ²	$5 \cdot 10^{-3}$
3	Постоянная в функции источника	k	ед/м ³ ·с	10^{14}
4	Коэффициент диффузии	α	м ² /с	10^{-6}

Результаты численного решения дифференциального уравнения явной схемой метода конечных разностей показаны на рисунке 8.



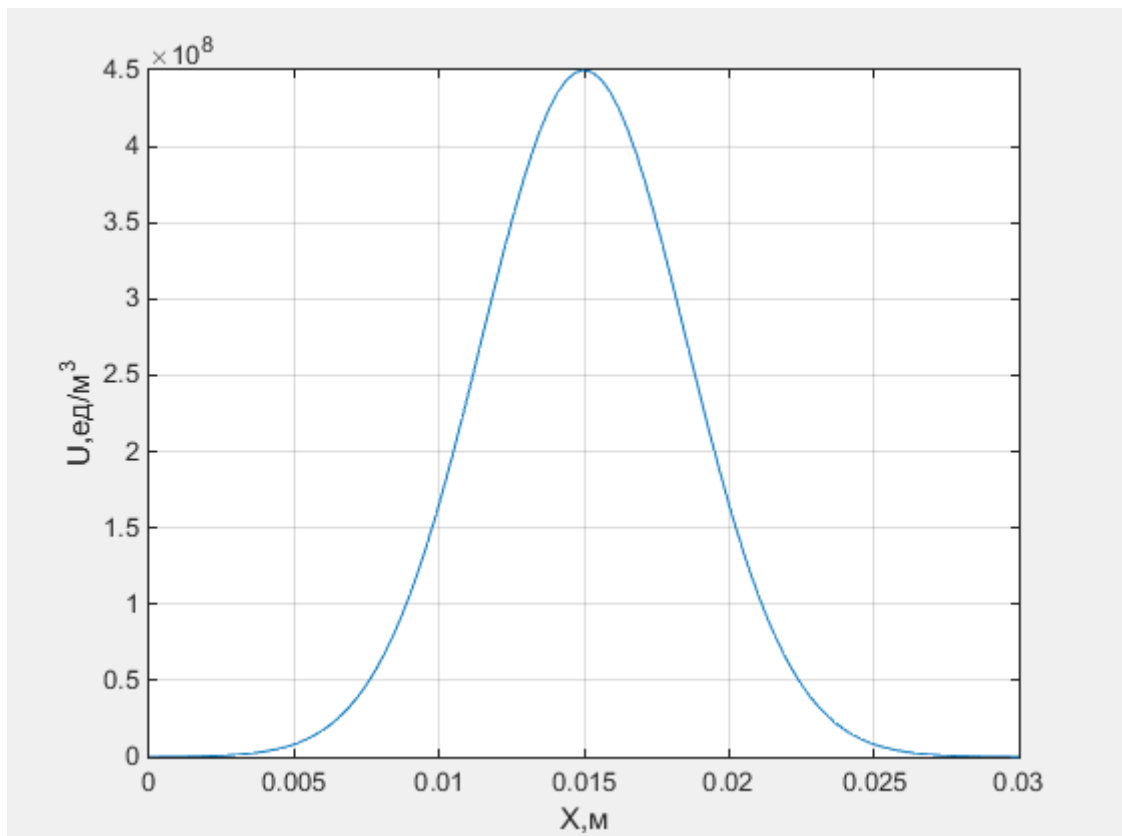


Рисунок 8 – Численное решение уравнения (27) методом конечных разностей (явная схема)

По оси абсцисс – длина стержня L . По оси ординат отображается время процесса. Ось аппликата демонстрирует изменение концентрации дефектов. По полученным графикам можно сделать следующий вывод: концентрация дефектов достигает своего максимального значения в $4 \cdot 10^8$ в центре рассматриваемого образца. В последствии, концентрация начинает уменьшаться. После возвращения объекта исследования к исходному состоянию, концентрация будет в точности соответствовать исходной.

3.2 Неявная схема метода конечных разностей решения нестационарного диффузионного уравнения с источником в ППП Matlab

Концептуальная постановка задачи: провести моделирование установившейся концентрации точечных дефектов в стержне лазерного кристалла длиной $L=3$ см, диаметром $d = 0,1$ см под воздействием направленного на его центр пучка электронов. Концентрация дефектов на боковых поверхностях принимается равной нулю.

Для численного решения задачи (27) – (28) использована неявная разностная схема.

Дифференциальное уравнение с заданными нулевыми начальными и граничными условиями (граничные условия Ирода) имеет вид:

Введём множество узлов:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varpi_h = \left\{ x_n = nh, n = 0, \dots, 100, h = \frac{1}{100} \right\}, a = 0, b = 1, N = 100. \\ \varpi_\tau = \left\{ t_s = st, s = 0, \dots, 100, t = \frac{10}{100} \right\}, T = 10, S = 100. \end{array} \right. \quad (33)$$

Заменим функцию $f(x, t) = k \cdot e^{-\frac{(x-\frac{1}{2})^2}{\sigma^2}}$ на сеточную $\phi_n^s = k \cdot e^{-\frac{(\pi n - \frac{1}{2})^2}{\sigma^2}} \cdot s$

Введём сеточную функцию, аппроксимирующую функцию $u(x, t)$:

$$y_{h\tau}(x_n, t_s) = y_n^s$$

Заменим дифференциальный оператор L на разностный $L_{h\tau}$, получим систему линейных алгебраических уравнений (используем неявную схему):

$$\frac{y_n^{s+1} - y_n^s}{\tau} - \frac{y_{n+1}^{s+1} - 2y_n^{s+1} + y_{n-1}^{s+1}}{h^2} = \phi_n^s, n = 1, \dots, 99; s = 0, \dots, 99. \quad (34)$$

Начальные условия:

$$y_n^0 = 0, n = 0, \dots, 100. \quad (35)$$

Граничные условия:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0^s = \chi_1^s y_1^s + \mu_1^s \\ y_{100}^s = \chi_2^s y_{99}^s + \mu_2^s \end{array} \right.; s = 0, \dots, 100. \quad (36)$$

Найдём чему равны коэффициенты $\chi_1, \mu_1, \chi_2, \mu_2$, по формулам, представленным выше.

В данной задаче $c_1 = 1, d_1 = 0, \psi_1(t_s) = 0; c_2 = 1, d_2 = 0, \psi_2(t_s) = 0;$

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1^s = 0, \mu_1^s = 0; s = 0, \dots, S \\ \chi_2^s = 0, \mu_2^s = 0; s = 0, \dots, S \end{array} \right. \quad (37)$$

Таким образом, граничные условия:

$$\begin{cases} y_0^s = 0 \\ y_{100}^s = 0 \end{cases}; s = 0, \dots, 100. \quad (38)$$

Имеем разностную схему задачи, аппроксимируя исходную задачу:

$$\begin{cases} \frac{y_n^{s+1} - y_n^s}{\tau} - \frac{y_{n+1}^{s+1} - 2y_n^{s+1} + y_{n-1}^{s+1}}{h^2} = \phi_n^s, n = 1, \dots, 99; s = 0, \dots, 99 \\ y_n^0 = 0, n = 0, \dots, 100 \\ y_0^s = 0; s = 0, \dots, 100 \\ y_{100}^s = 0; s = 0, \dots, 100 \end{cases}. \quad (39)$$

Таким образом нужно разрешить 100 линейных алгебраических уравнения методом прогонки:

$$\begin{cases} A_n y_{n-1} - C_n y_n + B_n y_{n+1} = -F_n, n = 1, \dots, 99 \\ y_0 = 0; \\ y_N = 0; \end{cases}. \quad (40)$$

Для любого $s = 0, \dots, 100$ и для любого $s = 0, \dots, 100$ имеем:

$$A_n = B_n = \frac{1}{h^2}, C_n = \frac{2}{h^2} + \frac{1}{\tau}, F_n = \frac{1}{\tau} y_n^s + \phi_n^s. \quad (41)$$

Находим прогоночные коэффициенты:

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \chi_1 = 0, \beta_1 = \mu_1 = 0, \\ \alpha_{n+1} = \frac{B_n}{C_n - \alpha_n A_n}, \beta_{n+1} = \frac{A_n \beta_n + F_n}{C_n - \alpha_n A_n}, n = 1, \dots, 99. \end{aligned} \quad (42)$$

Далее находим $y_N = 0$, и идёт обратная прогонка.

Значение сеточной функции:

$$y_n = \alpha_{n+1} y_{n+1} + \beta_{n+1}, n = 99, \dots, 0. \quad (43)$$

Итак:

$$\left. \begin{aligned} N = 100 \\ S = 100 \\ T = 10 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \text{Количество узлов} \\ & \text{Максимальное время} \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} h = \frac{\pi}{N} \\ t = \frac{T}{S} \end{aligned} \right\} \text{Шаги}$$

$y_n^0 = 0, n = 0, \dots, N$ Начальные условия

$A = B = \frac{1}{h^2}, C = \frac{2}{h^2} + \frac{1}{\tau}$ Коэффициенты A, B, C постоянны

$\alpha_1 = 0, \beta_1 = 0$ Начальные значения прогоночных коэффициентов

$$\begin{cases} F = \frac{1}{\tau} y + \phi \\ \alpha = \frac{B}{C - \alpha A}, b = \frac{A\alpha + F}{C - \alpha A}, \end{cases} n = 0, \dots, N - 1 \text{ Вычисление для } s = 1 \text{ слоя}$$

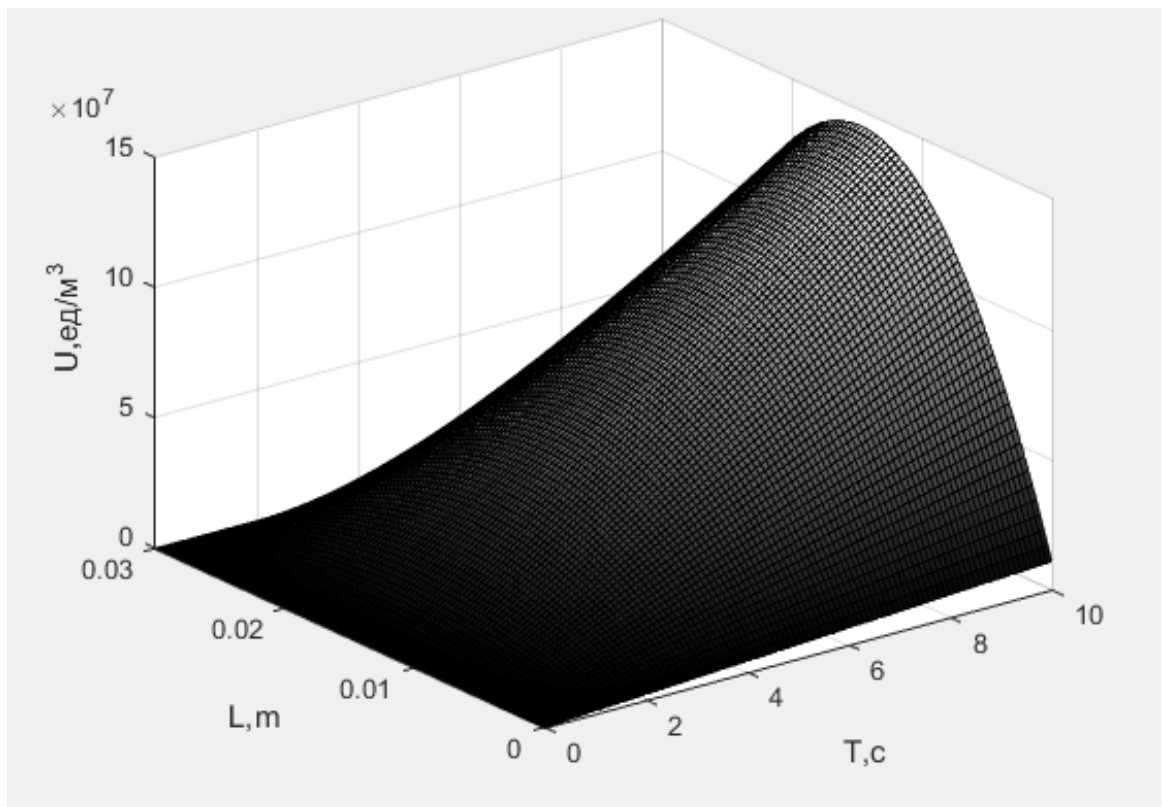
$s = 1, \dots, S$ Для любого s

$$\begin{cases} F = \frac{1}{\tau} y + \phi \\ \alpha = \frac{B}{C - \alpha A}, \beta = \frac{A\beta + F}{C - \alpha A}, \end{cases} n = 0, \dots, N - 1 \text{ Прямая прогонка}$$

$y = 0$

$y = \alpha y + \beta, n = N - 1, \dots, 0$ Обратная прогонка

Результаты численного решения дифференциального уравнения неявной схемой метода конечных разностей показаны на рисунке 9.



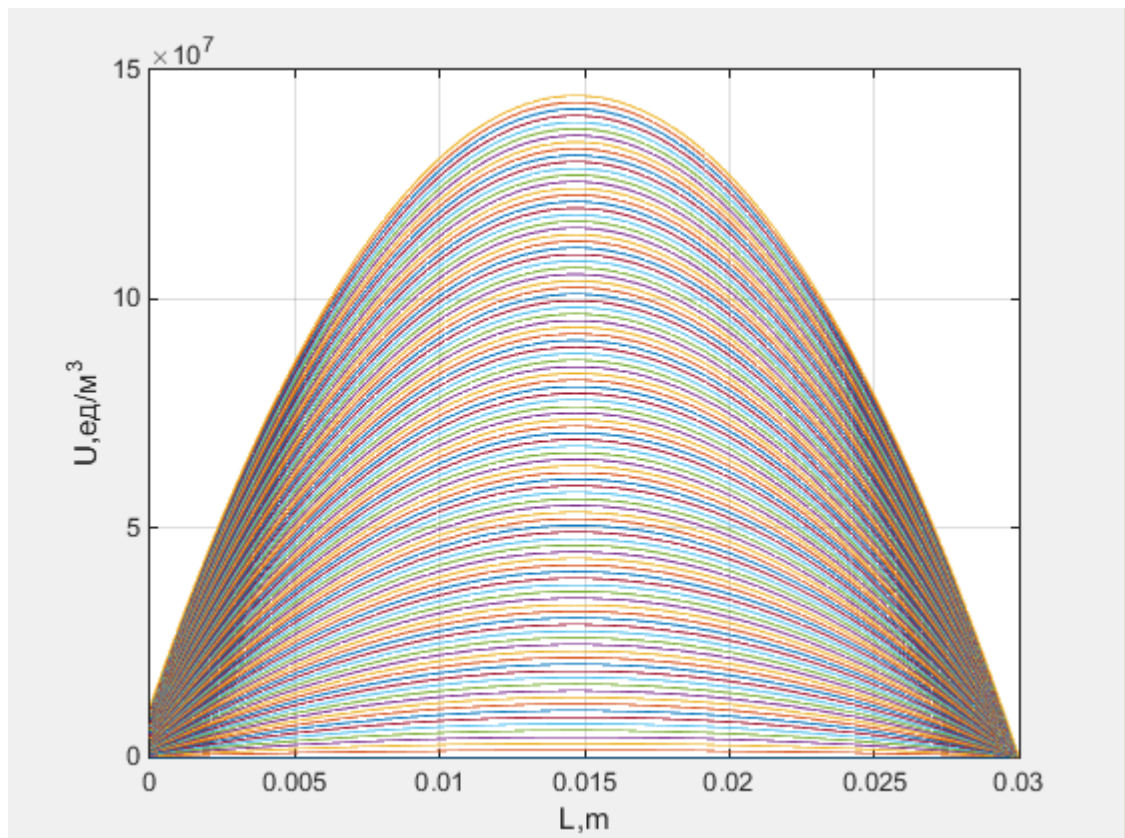


Рисунок 9 – Численно решение уравнения (27) методом конечных разностей (неявная схема)

Выделим основные различия между явной и неявной схемой метода конечных разностей.

Таблица 2 – Сравнение схем метода конечных разностей

Явная схема	Неявная схема
Одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями	Одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями
Граничные условия аппроксимируются на $(n + 1)$ -ом шаге по времени для удобства последующего изложения метода и алгоритма решения схемы	Граничные условия аппроксимируются на $(n + 1)$ -ом шаге по времени для удобства последующего изложения метода и алгоритма решения схемы
Порядок аппроксимации $O(\Delta t, h^2)$	Порядок аппроксимации $O(\Delta t, h^2)$
Ограничение на выбор расчётного шага по одной из независимых переменных: $\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\sigma}$	Неявная разностная схема абсолютно устойчива, т.е. вне зависимости от выбора интервала деления на разностной сетке, погрешность решения неявной разностной схемы в процессе вычислений возрастать не будет.

3.3 Результаты расчетов и моделирования дифференциального уравнения в среде COMSOL Multiphysics

Процесс, описанный дифференциальным уравнением (27), далее был смоделирован в среде визуализации COMSOL Multiphysics.

COMSOL Multiphysics – это универсальная среда численного моделирования систем, устройств и процессов во всех областях проектирования, производства и научных исследований. Помимо использования инструментов мультифизического моделирования для собственных проектов, пользователь может превращать разработанные модели в приложения для дальнейшего применения.

Для проведения компьютерного моделирования в ПО необходимо в «Построителе моделей» выполнить ряд шагов, таких как: определение размерности модели; выбор типа исследования; создание геометрии; выбор материалов и задание их свойств; задание глобальных и локальных переменных; генерация сетки; проведение исследования; отображение и анализ результатов.

При проведении данного исследования была построена трехмерная модель нестационарного процесса (Time Dependent), как показано на рисунке 10.

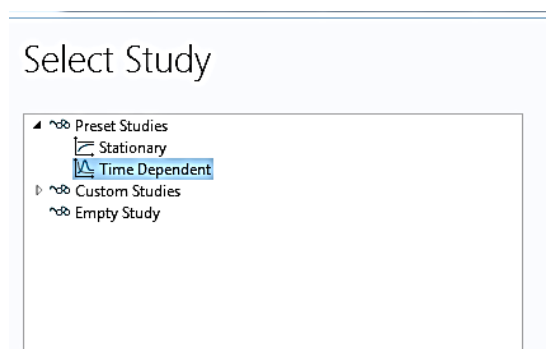


Рисунок 10 – Выбор процесса исследования.

Для проведения исследования был выбран материал образца – кристалл форстерита Mg_2SiO_4 , изображенный на рисунке 11.

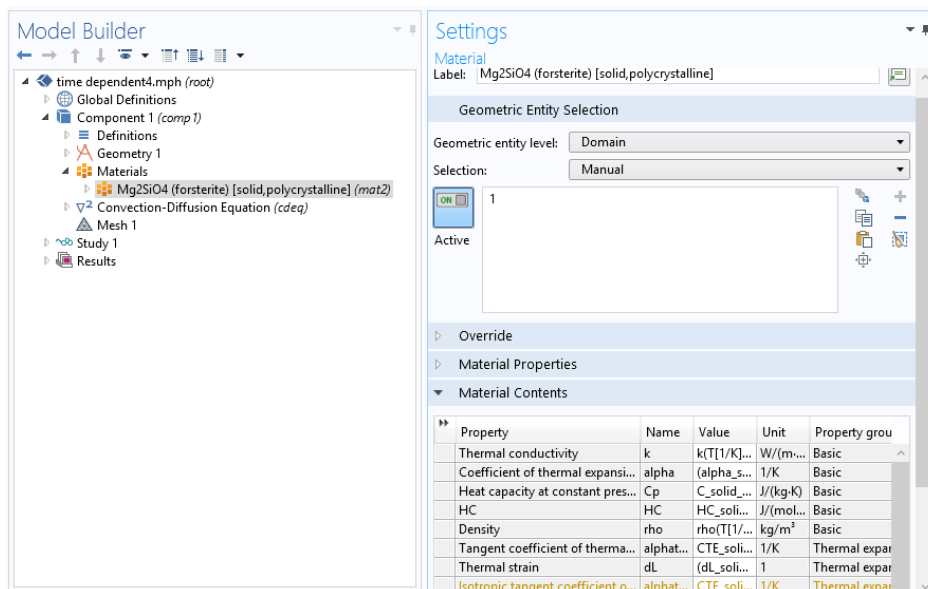


Рисунок 11 – Выбор материала образца

Для вычислительного эксперимента был использован следующий набор параметров модели: цилиндрический стержень длиной 3 см и диаметром 0,1 см, как показано на рисунке 12, на центр которого воздействует пучок электронов $1,4 \cdot 10^{14}$ (электрон/см²).

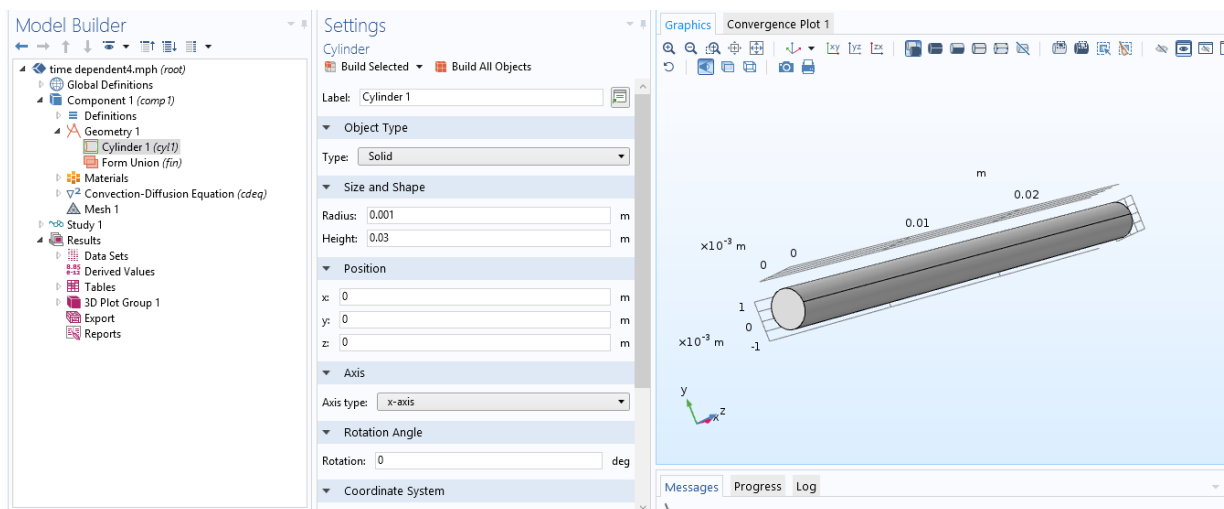


Рисунок 12 – Геометрия исследуемого образца

В системе COMSOL Multiphysics представлен большой выбор различных модулей, что делает ее универсальной средой для моделирования сложных систем. В нашем случае был выбран модуль «Convection-Diffusion Equation», как показано на рисунке 13.

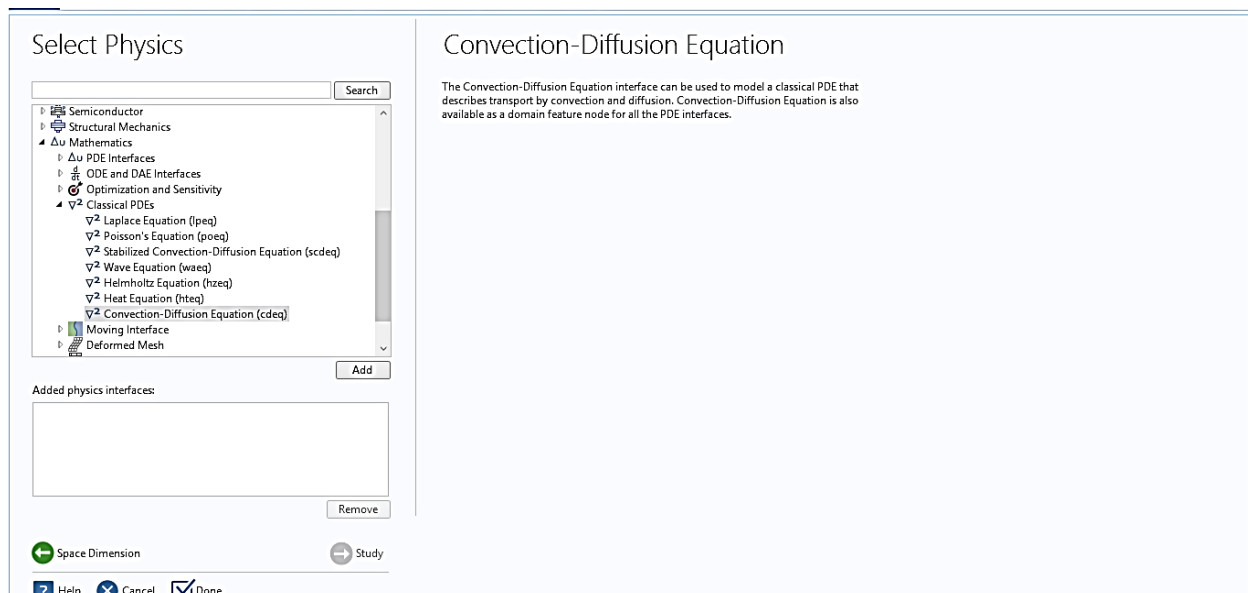


Рисунок 13 – Выбор модели исследования

Для уравнения (31) задаем значения коэффициента диффузии и функции источника, изображенные на рисунке 14.

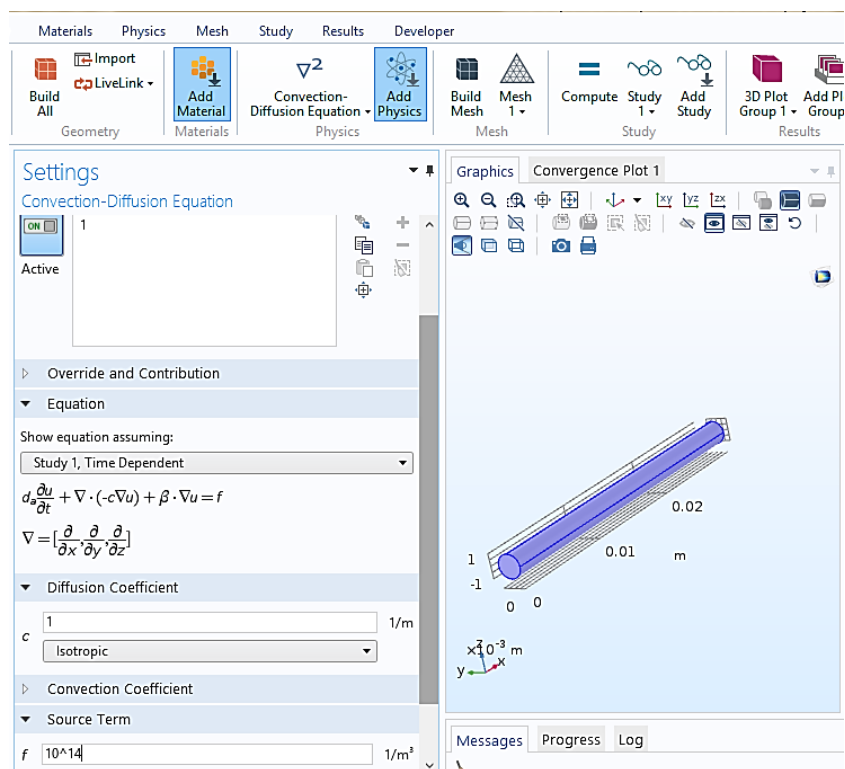


Рисунок 14 – Параметры уравнения и функции источника

Далее нам необходимо задать начальные и граничные условия. Начальное условие Initial Values равно 0, как изображено на рисунке 15.

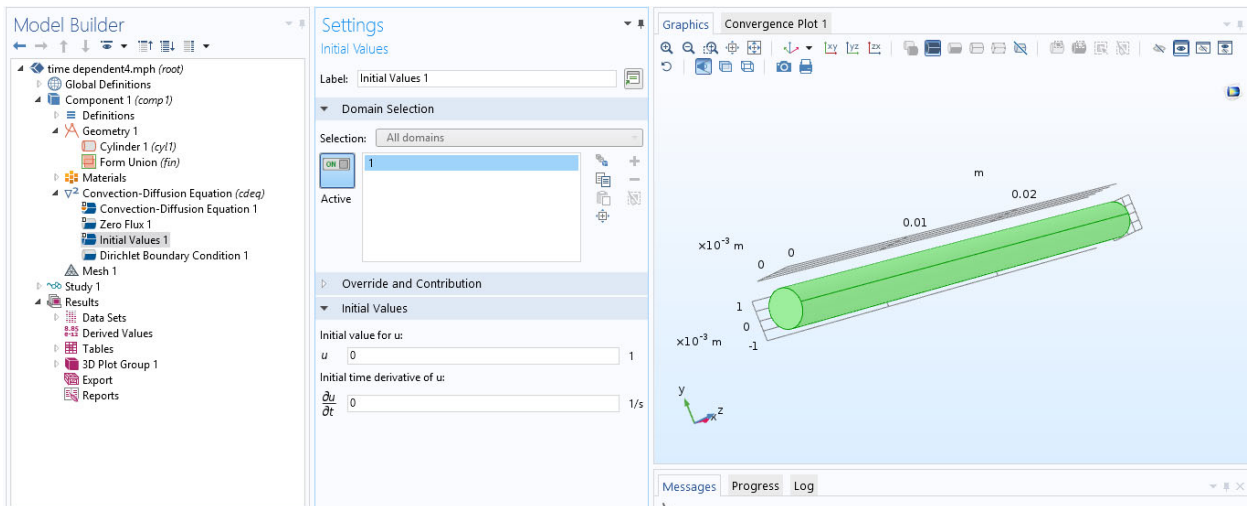


Рисунок 15 – Начальное условие

Граничное условие Dirichlet Boundary Condition, также равное 0, показано на рисунке 16.

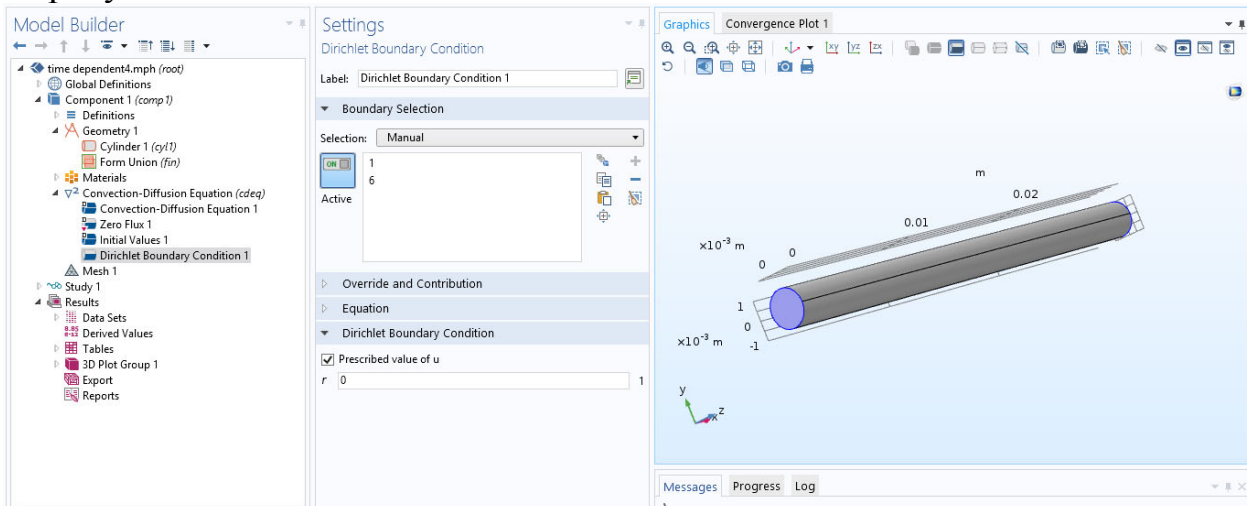


Рисунок 16 – Граничное условие

В данной модели вычисление в COMSOL выполняется методом конечных элементов, для использования которого необходимо задать сетку разбиения образца – Mesh, изображенная на рисунке 17. В модели была выбрана сетка triangular – трехгранная, размер сетки – fine.

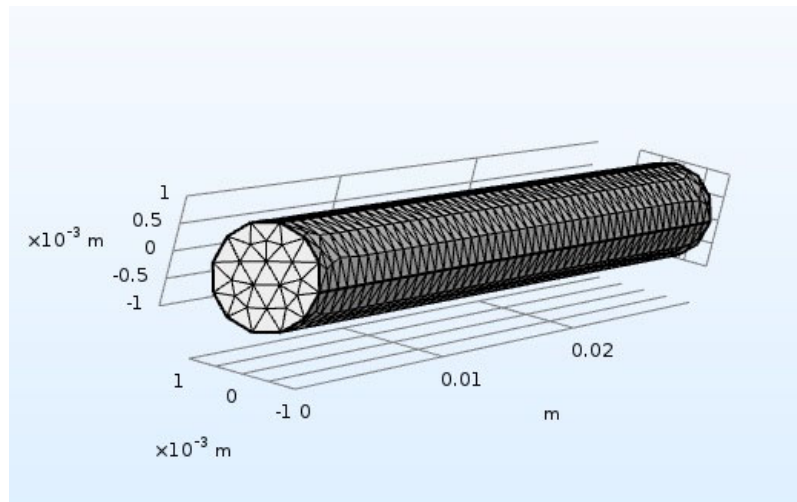


Рисунок 17 – Генерация сетки

После задания основных характеристик модели можно проводить исследование. После запуска расчета модели в среде COMSOL Multiphysics получаем результат моделирования процесса распределения точечных дефектов в цилиндрическом образце лазерного кристалла, показанный на рисунке 18.

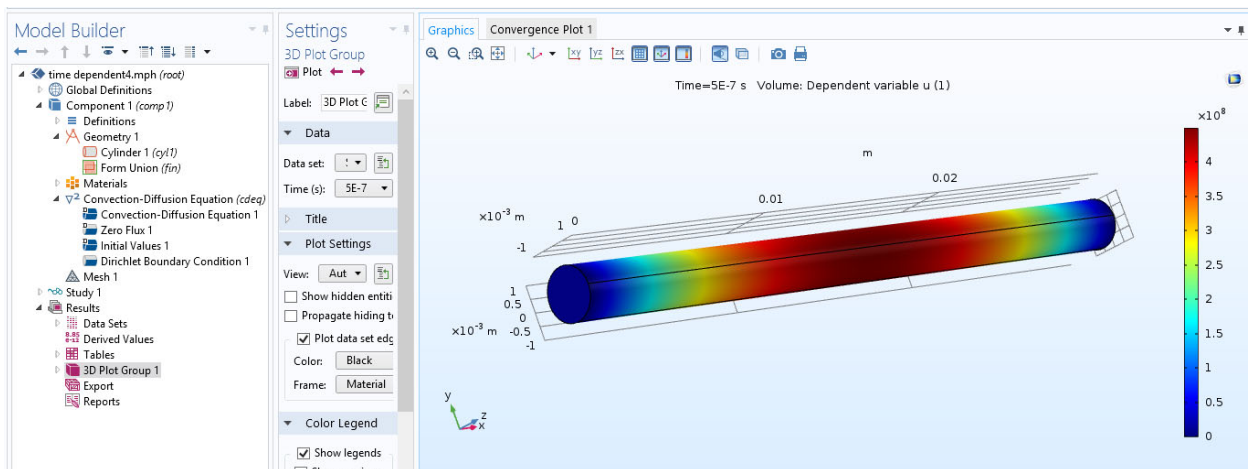


Рисунок 18 – Результат моделирования процесса в COMSOL Multiphysics

Источник облучения воздействует на центральную часть цилиндрического образца, поэтому максимальное значение концентрации дефектов приходится на его центр. Сравнивая полученные значения с результатами, полученными в ППП Matlab, имеем небольшую погрешность.

4 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МАГИСТЕРСКОЙ ДИССЕРТАЦИИ В ПЕДАГОГИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Результаты магистерской диссертации могут быть использованы в образовательном процессе при преподавании и изучении дисциплин «Численные методы», «Уравнения в частных производных» (направление подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика), «Численные методы и математическое моделирование» (направление подготовки 03.03.02 Физика) в рамках проведения практических (или лабораторных) занятий.

4.1 Пример решения неоднородного диффузионного уравнения

При преподавании и изучении курса «Уравнения в частных производных» большая часть материала составляет изучение уравнений параболического типа, к которым относится диффузионное уравнение.

Ниже приведена формулировка и решение краевой задачи для неоднородного диффузионного уравнения, разновидность которого была рассмотрена в магистерской диссертации.

Формулировка задачи: найти решение $u = u(x, t)$ смешанной задачи для неоднородного уравнения с начальными и граничными условиями, представленными ниже:

$$\begin{aligned} u_t &= u_{xx} + x(t^2 + 1), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ u_x|_{x=0} &= t, \quad u|_{x=1} = t, \quad u|_{t=0} = 0. \end{aligned} \tag{44}$$

Решение. Подберем функцию $U(x, t)$, удовлетворяющую граничным условиям $U(x, t) = xt$.

Будем искать решение исходной задачи в виде $u = v + xt$. Для нахождения функции получим следующую задачу:

$$\begin{aligned} v_t &= v_{xx} + xt^2, \\ v_x|_{x=0} &= v|_{x=1} = 0, \\ v|_{t=0} &= 0. \end{aligned} \tag{45}$$

Применим метод разделения переменных для решения однородного уравнения $v_t - v_{xx} = 0$. Решение будем искать в виде: $v(x,t)=X(x) \cdot T(t)$. Подставляя предполагаемое решение в уравнение, получим задачу Штурма-Лиувилля:

$$X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0, \quad X'(0) = 0, \quad X(1) = 0. \quad (46)$$

Решая данную задачу находим систему собственных значений и собственных функций:

$$\lambda_k = \frac{(2k+1)\pi}{2}, \quad X_k(x) = \cos \lambda_k x. \quad (47)$$

Решение задачи ищем в виде $v(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} T_k(t) \cos \lambda_k x$.

Разложим функцию x в ряд Фурье по системе функций $x = \sum_{k=0}^{\infty} D_k \cos \lambda_k x$,

$$D_k = 2 \int_0^1 x \cos \frac{(2k+1)\pi x}{2} dx = \frac{4}{\pi(2k+1)} - x \sin \frac{(2k+1)\pi x}{2} \Big|_0^1 - \frac{4}{\pi(2k+1)} * \\ * \int_0^1 \sin \frac{(2k+1)\pi x}{2} dx = \frac{4(-1)^k}{\pi(2k+1)} - \frac{8}{\pi^2(2k+1)^2}. \quad (48)$$

Подставляя полученные выражения в исходное уравнение, получим:

$$T_k' + \lambda_k^2 T_k = D_k t^2 \text{ и начальное условие } T_k(0) = 0.$$

Решение этой задачи будет $T_k = A_k e^{-\lambda_k^2 t} + \tilde{T}_k$.

Здесь \tilde{T}_k частное решение неоднородного уравнения, его можно искать в виде $\tilde{T}_k = b_k t^2 + c_k t + d_k$.

Используя граничные условия, находим коэффициенты b_k, c_k, d_k , полу-

$$\text{чим } \tilde{T}_k(t) = A_k e^{a^2 \lambda_k^2 t} + \frac{D_k}{\lambda_k^2} \left(t^2 - \frac{2t}{\lambda_k^2} + \frac{2}{\lambda_k^4} \right).$$

Из начального условия следует, что $A_k = -\frac{2D_k}{\lambda_k^6}$.

Следовательно, $T_k = \frac{D_k}{\lambda_k^2} \left(t^2 - \frac{2t}{\lambda_k^2} + \frac{2}{\lambda_k^4} (e^{-\lambda_k^2 t} - 1) \right)$.

Тогда решение исходной задачи можно записать в виде:

$$u(x,t) = tx + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{D_k}{\lambda_k^2} \left(t^2 - \frac{2t}{\lambda_k^2} + \frac{2t}{\lambda_k^4} (e^{-\lambda_k^2 t} - 1) \right) \cos \lambda_k x, \quad (49)$$

$$\text{где } \lambda_k = \frac{\pi(2k+1)}{2}, \quad D_k = \frac{4}{\pi(2k+1)} \left((-1)^k - \frac{2}{\pi(2k+1)} \right).$$

4.2 Пример индивидуального задания по дисциплине «Численные методы и математическое моделирование»

Постановка задачи: используя явную схему метода конечных разностей, составить решение смешанной задачи для дифференциального уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (50)$$

при заданных начальном и граничных условиях:

$$U(x,0) = (2x^2 + 3)e^{-x}, \quad U(0,t) = 3, \quad U(1,t) = \frac{5}{e}, \quad x \in [0,1]. \quad (51)$$

Шаги сетки по координате и времени установить самостоятельно. Решение задачи выполнить для промежутка времени $t \in [0;0,5]$.

Привести конечно-разностную аппроксимацию задачи. Алгоритм реализовать в ППП Matlab. Вывести результат моделирования для последнего момента времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы по теме магистерской диссертации проведен литературный обзор по вопросу распределения точечных дефектов в кристаллах. Современными инструментами математического и компьютерного моделирования физических процессов, описываемых уравнениями в частных производных или их системами, являются ППП Matlab и среда COMSOL Multiphysics.

В рамках магистерской диссертации численно решено неоднородное диффузионное уравнение с использованием метода конечных разностей по явной и неявной схеме, а также выполнена визуализация рассматриваемого процесса в пакете COMSOL Multiphysics.

В результате исследования процесса распределения радиационных точечных дефектов в кристаллах получены следующие результаты:

- исследуемый процесс формализован в виде нестационарного одномерного диффузионного уравнения;
- численная реализация математической модели выполнена в ППП Matlab явной и неявной схемой метода конечных разностей;
- процесс распределения дефектов визуализирован в среде COMSOL Multiphysics для кристалла форстерита Mg_2SiO_4 .

Результаты работы докладывались и обсуждались на научной конференции «День науки» в АмГУ (2018-2019 гг.) и на научно-методических семинарах кафедры математического анализа и моделирования ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет» (2018-2019 гг.).

По теме магистерской диссертации опубликовано четыре работы, одна из которых в журнале, входящем в систему РИНЦ «Вестник АмГУ». Две работы в сборниках материалов региональной научно-практической конференции «Молодёжь XXI века: шаг в будущее» (2018-2019 гг.) и одна работа в сборнике материалов II Всероссийской национальной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и наука: актуальные проблемы фунда-

ментальных и прикладных исследований» (8-12 апреля 2019 г.), Комсомольский-на-Амуре государственный университет.

Результаты магистерской диссертации могут быть использованы в образовательном процессе при преподавании и изучении дисциплин «Численные методы», «Уравнения в частных производных» (направление подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика), «Численные методы и математическое моделирование» (направление подготовки 03.03.02 Физика) в рамках проведения практических (или лабораторных) занятий.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- 1 Асабина, Е.А. Дефекты в твердых телах и их влияние на свойства функциональных материалов: электронное учебно-методическое пособие / Асабина Е.А. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2012. – 65 с.
- 2 Бондаренко, Г.Г. Радиационная физика, структура и прочность твердых тел / Г.Г. Бондаренко. – М.: ООО Лаборатория знаний, 2016. – 186 с.
- 3 Селищев, П.А. Самоорганизация в радиационной физике / П.А. Селищев. – РХД, 2008. – 208 с.
- 4 Формалев, В. Ф. Численные методы. / В. Ф. Формалев, Д. Л. Ревизников. – М.: Физматлит, 2006. – 397 с.
- 5 Численные методы: использование инструментальных средств и реализация алгоритмов на базе ППП MATLAB: учеб. пособие / А. Г. Масловская, А. В. Павельчук. – Благовещенск: Изд-во Амур. гос. ун-та, 2016. – 212 с.
- 6 Масловская, А.Г. Математическое и компьютерное моделирование сложных систем: методические рекомендации к выполнению курсовой работы / А.Г. Масловская – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2017. – 40 с.
- 7 Кондаков, Н.С. Основы численных методов: практикум / Н.С. Кондаков. [электронный ресурс]. – М.: Московский гуманитарный университет, 2014. – 92 с. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/39690>. – ЭБС «IPRbooks»
- 8 Плотников, С.В. Расчет пространственного распределения неравновесных точечных дефектов при облучении пучком электронов / С.В. Плотников, Д.В. Постников // В кн: сборник тезисов докладов 5-ой Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (24-28 июня 2000 года) – Барнаул: Изд-во ООО «Научно-исследовательский центр «Системы управления», 2000. – С. 107-109
- 9 Денисенко, С.Г., Авсеев, А.Л. Определение нестационарного распределения радиационных точечных дефектов в кристалле при их аннигиляции на атомах примеси / С.Г. Денисенко, А.Л. Авсеев // Математическое моделирование. Москва: Российская академия наук, 1994. – Т. 6. – № 3. – с. 25-35.

10 Пузанов, Д.Н. Особенности расчета распределения концентрации собственных точечных дефектов в монокристаллах кремния: автореф. диссертации на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук: 01.04.10 / Д.Н. Пузанов. – Москва: Изд-во ФГУП ОКБ «Гидропресс», 2007. – 23 с.

11 Веселова, Е.М. Модель распределения радиационных точечных дефектов в диэлектрических материалах / Е.М. Веселова, Е.А. Ванина // В кн.: Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: Материалы Всероссийской молодежной научной конференции. – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2012. – С. 34-37

12 Красильников, В.В. Особенности радиационного упрочнения и распределения концентрации точечных дефектов при неравновесной диффузии / В.В. Красильников, С.Е. Савотченко // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. Тамбов: Изд-во Тамбовский гос. универ. им. Г.Р. Державина. – Том 20. – № 1. – 2015. – С. 112-117

13 Поддубная, А.В. Система нелинейных дифференциальных уравнений для описания распределения радиационных точечных дефектов в диэлектрических материалах / А.В. Поддубная // В кн: сборник материалов XIX региональной научно-практической конференции «Молодёжь XXI века: шаг в будущее» (23 мая 2018 года) – Благовещенск: Изд-во ДальГАУ, 2018. – С. 53

14 Власова, Е.А. Приближенные методы математической физики. Выпуск 13 / Е.А. Власова, В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. – 700 с.

15 Красников, Г.Е. Моделирование физических процессов с использованием пакета COMSOL Multiphysics: учебное пособие / Г.Е. Красников, О.В. Нагорнов, Н.В. Старостин. – М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 184 с.

16 Введение в COMSOL Multiphysics [электронный ресурс] www.comsol.ru

17 Поддубная, А.В. Компьютерное моделирование распределения радиационных точечных дефектов в кристалле / А.В. Поддубная, Е.М. Веселова //

Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2019. – Вып. 85. –С. 35-39.

18 Поддубная, А.В. Компьютерное моделирование изменения концентрации радиационных точечных дефектов в пакете Comsol Multiphysics/ А.В. Поддубная, Е.М. Веселова // в сборнике материалов II Всероссийской национальной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и наука: актуальные проблемы фундаментальных и прикладных исследований», 8-12 апреля 2019 г. – Комсомольский-на-Амуре государственный университет (в печати)

19 Поддубная А.В. Моделирование изменения концентрации радиационных точечных дефектов в кристаллах форстерита/ А.В. Поддубная // Молодежь XXI века: шаг в будущее: материалы XX региональной научно-практической конференции (23 мая 2019 г., Благовещенск): в 3 томах. – Благовещенск: Изд-во Амурского гос. ун-та, 2019. – С. 171-173

ПРИЛОЖЕНИЕ А
Реализация задачи методом конечных разностей по явной схеме

```
clear all
clc
M=100;
N=100;
U=zeros(N+1,M+1);
sig=0.5;

t=10;
si=5*10^(-3); %Сечение образования пары
F=10^14; % Константа в функции источника
L=0.03; %Длина стержня
alpha=10^(-6); %Коэффициент диффузии

h=L/N;
k=sig*(h^2);
%initial condition
for i=1:N+1
    U(i,1)=0;
end

% boundary conditions
for j=1:M+1
    t(j)=(j-1)*k;
    U(1,j)=0;
end
for j=1:M+1
    t(j)=(j-1)*k;
    U(N+1,j)=0;
end

for i=1:N+1
    x(i)=(i-1)*h;
    f(i)=F*exp(-((x(i)-L/2).^2)/(si^2));
end

for j=2:M+1
for i=2:N
    U(i,j)=(alpha*k/(h*h))*U(i+1,j-1)+(1-
2*alpha*k/(h*h))*U(i,j-1)+(alpha*k/(h*h))*U(i-1,j-
1)+f(i)*k;
end
end
```


Продолжение ПРИЛОЖЕНИЕ А

```
end
```

```
size(U)
length(x)
N
M
plot(x,U(:,M+1));
%xlabel('T,с')
xlabel('X,м')
ylabel('U,ед/м^3')
title('Явная схема метода конечных разностей');
grid on
```

ПРИЛОЖЕНИЕ Б
Реализация задачи методом конечных разностей по неявной схеме

```
function diff_eq

si=5*10^(-3); %Сечение образования пары
G=10^14; % Константа в функции источника
L=0.03; %Длина стержня
alpha=10^(-6); %Коэффициент диффузии
k=10^(-21);

%Устанавливаем количество узлов
N = 100; %для координаты
S = 100; %для времени

T = 10; %Максимальное время

%Устанавливаем шаг
h = (0.03/N); %по координате
tau = (T/S); %по времени

%Устанавливаем диапазон вывода результатов
Yrange = 0:h:0.03; %для координаты
Xrange = 0:tau:T; %для времени

% Инициализируем сеточную функцию и обнуляем её
for n=1:N+1,
for s=1:S+1,
y(n,s)=0;
end;
end;

%задаём начальные условия
for n=1:N+1,
    y(n,1)=0;
end;

%Задаём коэффициенты для метода прогонки
A=1/(h.^2);
B=1/(h.^2);
C=2/(h.^2) + 1/tau;

%Устанавливаем начальные прогоночные коэффициенты
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЕ Б

```
a(1)=0;
b(1)=0;

% Устанавливаем начальные прогоночные коэффициенты s=2
F = ((1/tau)*y(1,1)) + G*exp(-((y(n,1)-L/2).^2)/(si^2));
a(1) = B/(C - a(1)*A);
b(1)=(A*b(1) + F)/(C - a(1)*A);

%Запускаем обсчет по всем временам s
for s=2:S+1,
    for n=1:N, %прямая прогонка
        %последний необходимый коэффициент для метода прогонки,
        %учитывающий неоднородность уравнения
        F = ((1/tau)*y(n,s-1)) + G*exp(-((y(n)-
        L/2).^2)/(si^2))*(s-1);
        %Прогоночные коэффициенты, вычисляющиеся по редукции
        a(n+1)=B/(C - a(n)*A);
        b(n+1)=(A*b(n) + F)/(C - a(n)*A);
    end;
    y(N+1,s) = 1; %Правая граница
    for n=N:-1:1, %обратная погонка
        y(n,s)=(a(n+1)*y(n+1,s)+b(n+1)); %вычисление се-
        точной функции.
    end;
end;
%plot(Yrange,y)
surf(Xrange,Yrange,y); %строим график
colormap gray %Устанавливаем черно-белую цветовую карту.
%Рисуем надписи
xlabel('T,c')
ylabel('L,m')
zlabel('U,ед/м^3')
title('Неявная схема метода конечных разностей');
grid on
```