

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи



МУЗАФАРОВ Дилшод Зикриёходжаевич

**Численное исследование некоторых  
нелинейных эволюционных моделей  
конденсированных состояний**

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование, численные  
методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Дубна – 2011

Работа выполнена в *Лаборатории информационных технологий  
Объединенного института ядерных исследований.*

Научные руководители: доктор физико-математических наук  
**Дидык Александр Юрьевич**  
*Лаборатория ядерных реакций ОИЯИ*

кандидат физико-математических наук  
**Амирханов Илькизар Валиевич**  
*Лаборатория информационных технологий ОИЯИ*

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
доцент  
**Цирулев Александр Николаевич**  
*Тверской государственный университет*

доктор физико-математических наук,  
профессор  
**Красильников Владимир Владимирович**  
*Белгородский государственный университет*

Ведущая организация: **Российский университет дружбы народов,  
г. Москва**

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2011 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании Диссертационного совета Д 720.001.04 в *Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области.*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *Объединенного института ядерных исследований.*

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

Ученый секретарь Диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук,

профессор



*Иванченко Иосиф Моисеевич*

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** В диссертации выполнено численное исследование математических моделей двух сложных физических процессов. Рассмотрены следующие математические модели:

- Нелинейная трехмерная модель термического пика для описания тепловых процессов и изучения физических эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий;
- Динамическая модель полярона для изучения эволюции возбужденных состояний полярона.

Эти модели объединены в диссертации объектом численного исследования, которым являются нелинейные задачи для систем дифференциальных уравнений в частных производных.

Одной из перспективных и быстро развивающихся областей применения математического моделирования является радиационная физика как область физической науки, возникшая на стыке физики твердого тела, ядерной физики и физики высоких энергий. Значение радиационной физики непрерывно растет в связи с ее многочисленными приложениями для космических исследований, ядерной энергетики и т.д. Результаты радиационной физики представляют не только прикладной, но и общепознавательный интерес, позволяя, в частности, объяснить некоторые вопросы теории конденсированного состояния и фазовых переходов.

Активные исследования в области радиационной физики показали, что радиационно-стимулированные процессы приводят к качественному изменению свойств облучаемых материалов. Данное обстоятельство помимо чисто научного интереса породило значительные надежды на возможность технологического применения ускорителей заряженных частиц для модификации физико-химических свойств материалов и изделий. Одна из наиболее важных задач в разработке радиационных технологий – прогноз изменения структурно-фазового состояния облучаемой поверхности, которое зависит как от физических параметров вещества, так и от интенсивности источника излучения.

В основе модифицирующего воздействия заряженных частиц на твердое тело лежат тепловые процессы. Твердое тело при облучении плавится, испаряется, в нем образуются термомеханические напряжения, усиливается миграция атомов.

Значительный интерес также представляют исследования процессов перемешивания компонент при облучении тяжелыми ионами высоких энергий двухслойных структур в виде относительно тонкого слоя, нанесенного на более массивную подложку. В этом случае удастся получить достаточно

хорошую адгезию, то есть перемешивание материалов двухслойной структуры на границе раздела, а также достигнуть перемешивания взаимно нерастворимых структур. Исследование процессов образования треков тяжелых ионов в различных материалах, отличающихся теплофизическими и структурными свойствами, дает возможность более детально изучить механизмы взаимодействия налетающих частиц с материалами.

Большой интерес представляет исследование динамической модели полярона, позволяющей выявить общие условия образования локализованных структур в конденсированных средах. Так, сравнительно недавно был обнаружен переход поверхности оксидных диэлектриков в высокопроводящее состояние под действием ионного облучения, при котором имеет место рост поверхностной электропроводимости более чем в 5-6 раз. Одной из популярных моделей описания этих изменений в кристаллах является модель поляронов (поляроны малого радиуса, моно- и биполярны). Помимо этого, поляронные состояния используются в современной наноэлектронике при описании переходов в квантовых точках. Поляронными эффектами объясняются полосы поглощения центров окраски в ионных кристаллах. В полярных средах сольватированные состояния электронов представляют собой поляронные состояния и определяют химические реакции, играя роль сильнейшего восстановителя. В полимерах поляроны являются основными носителями тока. Их проводящие свойства используются при создании сверхлегких проводников и аккумуляторов. В биологии поляроны объясняют возможность переноса энергии на большое расстояние. Их изучение дает основу для создания таких качественно новых устройств нанобиоэлектроники, как нанобиочипы и электронные нанобиосенсоры.

В связи с тем, что проведение натуральных экспериментов в этих областях сопряжено с большими трудностями, особенно важную роль приобретает проведение математического моделирования. Для этого требуется разработка эффективных вычислительных схем и алгоритмов, а также проведение достаточно трудоемких вычислительных экспериментов, но в ряде случаев этот путь намного выгоднее, чем проведение натуральных экспериментов.

**Целью диссертационной работы является**

1. Развитие методов математического моделирования взаимодействий ускоренных заряженных частиц с веществом. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:
  - Обобщение трехмерной модели термического пика, учитывающее нелинейную зависимость теплофизических параметров модели от температуры;

- Построение математических моделей процессов, имеющих практическую ценность, таких как воздействие тяжелых заряженных частиц на однослойные, двухслойные и анизотропные материалы;
  - Разработка эффективных вычислительных схем, алгоритмов и программ для решения вышеперечисленных задач;
  - В рамках предложенных моделей изучение влияния тепловых процессов на формирование треков в различных материалах.
2. Проведение численного эксперимента по изучению динамики поляронных состояний:
- Разработка алгоритма и программы для моделирования эволюции полярона с учетом трения в системе;
  - Изучение эволюции полярона с различными начальными распределениями заряда.

### **Научная новизна.**

1. Впервые проведено численное исследование трехмерной модели термического пика с учетом нелинейности теплофизических параметров. Проведены численные эксперименты для исследования температурных процессов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий и их влияния на образование треков.
  - а) Показано, что в нелинейной модели тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем при постоянных теплофизических параметрах.
  - б) В проведенных численных экспериментах определены максимальные размеры областей, в которых температура кристаллической решетки достигает температуры плавления материала.
  - в) Исследовано влияние тепловых процессов на улучшение взаимного смешивания слоёв в двухслойных структурах при облучении тяжелыми ионами.
2. Впервые проведено численное исследование динамической модели полярона с учетом трения в системе.
  - а) Численные эксперименты показали, что если в начальный момент времени полярон находился в (основном или возбужденном) стационарном состоянии, то он сохраняется в этом состоянии независимо от наличия или отсутствия трения в системе.

- б) Показано, что начальное распределение заряда, заданное суперпозициями стационарных состояний полярона, при наличии в системе трения эволюционирует в основное состояние. При отсутствии трения эволюция в основное состояние не наблюдается в течение физически значимого промежутка времени.

**Практическая значимость.** В диссертации впервые в рамках трехмерной нелинейной модифицированной модели термического пика исследованы тепловые процессы в различных материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий, что позволяет получить новую информацию о процессах изменения свойств облучаемых материалов.

Исследования облучения никелевой мишени ионами урана с энергией 700 МэВ показали, что полученные оценки параметров треков (диаметр 230Å) качественно описывают экспериментальные данные.

При облучении двухслойных образцов на примере Ni(2 мкм)/W ионами висмута с энергией 710 МэВ оценены размеры области вдоль траектории иона, где происходят процессы плавления. Это приводит к увеличению коэффициента адгезии, т.е. взаимного перемешивания компонент двух материалов, что является весьма важным при создании двухслойных структур из материалов с различными свойствами.

Выполненные численные исследования тепловых процессов при облучении высоко-ориентированного пиролитического графита (ВОПГ) показали, что при облучении ионами  $^{209}\text{Bi}$  (710 МэВ) температура ВОПГ превышает температуру сублимации и приводит к дефектным структурам типа кратеров на поверхности, которые отсутствуют при облучении ионами  $^{86}\text{Kr}$  (253 МэВ), что подтверждается экспериментальными данными.

Разработанные в диссертации вычислительные схемы, алгоритмы и комплексы программ для исследования модели термического пика в настоящее время используются в ОИЯИ для исследования тепловых процессов и оценок параметров треков при облучении различных конденсированных сред тяжелыми ионами высоких энергий.

Алгоритм и программа для решения динамической модели полярона используются в ОИЯИ, а также в ИМПБ РАН г. Пущино.

**Апробация работы.** Основные положения и результаты представлены и докладывались на международных и российских конференциях: „XV Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов»” (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, 2008); II Международная Конференция „Математическая Биология и Биоинформатика” (Пущино, Россия, 2008); „X и XII научные конференции молодых

ученых и специалистов ОИЯИ (Дубна, 2006, 2008); „V и VI Национальные конференции по применению Рентгеновского, Синхротронного излучений, Нейтронов и Электронов для исследования наноматериалов и наносистем” (РСНЭ НАНО-2005 и 2007, ИК РАН, Москва), а также на семинарах по вычислительной физике Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований и на заседании программно-консультационного комитета ОИЯИ по физике конденсированных сред.

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 14 печатных работах, из которых 6 статей в рецензируемых журналах [М1-М6] рекомендуемых ВАК, и 8 работ в материалах конференций [М7-М14] .

**Личный вклад автора.** Формулировки решенных в диссертации задач, разработка математических моделей, алгоритмов и комплексов программ, а также компьютерные расчеты и анализ результатов выполнены соискателем самостоятельно. Более общие постановка задач, физическая интерпретация, анализ точности и достоверности полученных результатов проводились соискателем совместно с научными руководителями и соавторами.

**Степень достоверности результатов.** Достоверность результатов численного моделирования подтверждается тестированием разработанных комплексов программ и сопоставлением результатов, полученных с использованием различных вычислительных схем (явная схема и схема переменных направлений), расчетами на последовательностях сгущающихся сеток, на модельных задачах, а также сравнением с экспериментальными данными и численными результатами других авторов.

Оценки полученных в диссертации параметров треков качественно подтверждаются экспериментальными данными, полученными в ЛЯР ОИЯИ при облучении различных материалов тяжелыми ионами высоких энергий.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и приложения. Список литературы содержит 95 наименования. Полный объем диссертации 105 страниц машинописного текста, включая 4 таблицы и 23 рисунка.

## Содержание работы

**Во Введении** обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются цели работы, обосновываются новизна и научная значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения. Описывается структура диссертации и ее краткое содержание по главам.

**Первая глава** диссертации посвящена общей постановке задач и численным методам их решения. Подробно приводятся конечно-разностные методы численного решения систем нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка.

В первом параграфе рассматриваются основные модели взаимодействия тяжелых заряженных частиц с веществом. В частности, рассмотрены модели термического пика и кулоновского взрыва. Приведен основной математический аппарат исследования модели термического пика с помощью численных методов. Особое внимание уделяется конечно-разностным методам: явные, неявные и экономичные численные схемы, их преимущества и недостатки для решения систем уравнений модели термического пика.

В первом пункте первого параграфа сформулирована система уравнений, описывающая нелинейную трехмерную модель термического пика. Эта система в цилиндрической системе координат (с учетом зависимости удельной теплоемкости и теплопроводности от температуры) имеет вид:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_e)(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (1)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) - g(T_e)(T_e - T_i). \quad (2)$$

Ось  $z$  направлена перпендикулярно облучаемой поверхности мишени, т.е. по направлению движения тяжелого иона. Производная по углу отсутствует ввиду цилиндрической симметрии удельных ионизационных потерь тяжелого иона. Здесь  $T_e(r, z, t)$  и  $T_i(r, z, t)$  – температуры электронного газа и кристаллической решетки,  $C_e(T_e)$ ,  $C_i(T_i)$  и  $\lambda_e(T_e)$ ,  $\lambda_i(T_i)$  – соответственно удельные теплоемкости и теплопроводности электронного газа и решетки, зависящие от температуры,  $g$  – коэффициент, характеризующий взаимодействие электронной подсистемы с решеткой (в общем случае, зависящий от температуры электронного газа). Функция  $A(r, z, t)$  – объемная плотность вносимой ионом мощности (энергии), имеет вид:

$$A(r, z, t) = b S_{inel}(z) \exp \left( -\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2} \right) \exp \left( -\frac{r}{r_0} \right), \quad (3)$$

где функция  $S_{inel}(z)$  – профиль ионизационных потерь иона,  $\sigma_t = t_0 \simeq (1 - 5) \cdot 10^{-15}$ с,  $r_0 \simeq 1$  нм,  $b$  – нормирующий множитель.

Система уравнений (1)–(2) дополняется начальными

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300K, \quad (4)$$

и граничными условиями:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, & \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \\ T_{e,i}(R_{\max}, z, t) &= T_{e,i}(r, Z_{\max}, t) = T_0. \end{aligned} \quad (5)$$

В граничных условиях (5)  $R_{\max}$  – радиус удаления от траектории иона, а  $Z_{\max}$  – глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которых решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при  $r > R_{\max}$  и  $z > Z_{\max}$  равной  $T_0$ . Система (1)–(2) называется моделью термического пика.

Второй пункт первого параграфа посвящен численным методам решения дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Рассматривается уравнение теплопроводности

$$C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + f(r, z, t) \quad (6)$$

в прямоугольнике  $\Omega = \{0 < r < R_{\max}, 0 < z < Z_{\max}\}$ , при  $t > 0$ . Уравнение (6) дополняется условиями

$$\begin{aligned} T(r, z, 0) &= T_0 = \text{const}, \\ \left. \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, & \left. \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \\ T(R_{\max}, z, t) &= T(r, Z_{\max}, t) = T_0. \end{aligned} \quad (7)$$

Обсуждены проблемы нахождения приближенного решения задачи (6)–(7) конечно-разностными методами. Конечно-разностные (сеточные) методы основаны на переходе от функций непрерывного аргумента к функциям дискретного аргумента. В нашем случае, на  $\Omega$  вводятся точки (узлы)

$$\begin{aligned} r_i &= ih_r \in (0, R_{\max}), & i &= 1, 2, \dots, M-1, & r_0 &= 0, & r_M &= R_{\max}, \\ z_j &= jh_z \in (0, Z_{\max}), & j &= 1, 2, \dots, N-1, & z_0 &= 0, & z_N &= Z_{\max}, \\ t_k &= kh_t \in (0, T_{\max}), & k &= 1, 2, \dots, L-1, & t_0 &= 0, & t_L &= T_{\max}, \end{aligned}$$

образующие сетку  $\bar{w}_h = w_h + \partial w_h$ , где  $w_h$  – множество внутренних, а  $\partial w_h$  – граничных узлов. Параметры  $h_r, h_z, h_t$  характеризуют эту сетку (шаги сетки). Приближенное решение непрерывной задачи (6)–(7) ищется в узлах сетки и обозначается  $T_{i,j}^k \approx T(r_i, z_j, t_k)$ . Рассмотрены консервативные схемы: явная, чисто неявная и схема метода переменных направлений. Численная схема метода переменных направлений для уравнения (6) состоит

из двух шагов. Сначала по известному  $T_{i,j}^k$  находится вспомогательная сеточная функция (которую обозначим через  $T_{i,j}^{k+1/2}$ ) из уравнения

$$C_{i,j}^k \frac{T_{i,j}^{k+1/2} - T_{i,j}^k}{0,5h_t} = \frac{1}{h_r} \Lambda_1^{k+1/2}(a_i^k) + \frac{1}{h_z} \Lambda_2^k(a_j^k) + f_{i,j}^k, \quad (8)$$

где

$$\Lambda_1^k(a_i^k) = a_i^k \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i,j}^k}{h_r} - a_{i-1}^k \frac{T_{i,j}^k - T_{i-1,j}^k}{h_r},$$

$$\Lambda_2^k(a_j^k) = a_j^k \frac{T_{i,j+1}^k - T_{i,j}^k}{h_z} - a_{j-1}^k \frac{T_{i,j}^k - T_{i,j-1}^k}{h_z},$$

и

$$a_i^k = \frac{\lambda_{i+1,j}^k + \lambda_{i,j}^k}{2}, \quad a_j^k = \frac{\lambda_{i,j+1}^k + \lambda_{i,j}^k}{2},$$

$$C_{i,j}^k = C(T_{i,j}^k), \lambda_{i,j}^k = \lambda(T_{i,j}^k), f_{i,j}^k = f(r_i, z_j, t_k).$$

Интерпретируя  $T_{i,j}^{k+1/2}$  как решение на момент времени  $t_{k+1/2} = t_k + h_t/2$ , можно заметить, что (8) соответствует определению решения согласно неявной схеме по переменной  $r$  и согласно явной схеме по переменной  $z$ .

Второй шаг метода переменных направлений будет соответствовать использованию уравнения

$$C_{i,j}^{k+1/2} \frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^{k+1/2}}{0,5h_t} = \frac{1}{h_r} \Lambda_1^{k+1/2}(a_i^{k+1/2}) + \frac{1}{h_z} \Lambda_2^{k+1}(a_j^{k+1/2}) + f_{i,j}^{k+1/2}. \quad (9)$$

Тем самым, второй шаг соответствует использованию явной схемы по переменной  $h_r$  и неявной по переменной  $h_z$ .

Во втором параграфе приводятся динамическая и стационарная системы уравнений полярона, подробное описание этих задач. Динамическая модель полярона с учетом трения в системе описывается следующей системой уравнений (в безразмерных единицах):

$$\begin{cases} \left[ i2\bar{m} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\bar{m} \frac{\varphi}{x} \right] \psi = 0, \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \Theta, \\ \left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial}{\partial t} + \omega^2 \right] \Theta = -\frac{\omega^2 |\psi|^2}{\bar{\varepsilon} x}, \end{cases} \quad (10)$$

где  $\psi$  – волновая функция,  $\varphi$  – потенциал,  $\Theta$ ,  $\bar{m}$ ,  $\gamma$ ,  $\omega$ ,  $\tilde{\varepsilon}$  – безразмерные параметры модели. Система (10) дополняется следующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} \psi(x, t)|_{t=0} &= \Psi_k(\cos \lambda_k \tau + i \sin \lambda_k \tau), \\ \Theta(x, t)|_{t=0} &= -\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\Psi_k^2}{x}, \quad \left. \frac{\partial}{\partial t} \Theta(x, t) \right|_{t=0} = 0, \\ \psi(0, t) &= 0, \quad \psi(\infty, t) = 0, \quad \varphi(0, t) = 0, \quad \varphi'(\infty, t) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $\lambda_k$  и  $\Psi_k$  – собственные значения и собственные функции соответствующей стационарной задачи:

$$\begin{cases} \left[ \frac{d^2}{dx^2} - 2\bar{m}\lambda + 2\bar{m} \frac{\Phi(x)}{x} \right] \Psi(x) = 0, \\ \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) = -\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\Psi^2(x)}{x}, \quad 0 < x < \infty, \end{cases} \quad (12)$$

с граничными условиями и с условием нормировки:

$$\begin{aligned} \Psi(0) &= 0, \quad \Phi(0) = 0, \quad \int_0^\infty \Psi^2(x) dx = 1, \\ \Psi(\infty) &= 0, \quad \Phi'(\infty) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

В третьем пункте второго параграфа приведена численная схема для первого уравнения системы (10) – динамического уравнения Шредингера. Для этого введена равномерная сетка по переменным в уравнении, т.е.:  $\bar{w} = \bar{w}_h \times \bar{w}_\tau$ ,  $\bar{w}_h = \{x_m = mh, m = 0, 1, \dots, M, hM = X_{\max}\}$ ,  $\bar{w}_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, 2, \dots\}$ , где  $h$  и  $\tau$  – соответственно шаги по переменным  $x$  и  $t$ .

Построим двухслойную конечно-разностную схему с весами <sup>1</sup>.

$$\begin{aligned} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{\tau} &= i \left\{ \sigma \left[ \frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h^2} + \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ &\quad \left. + (1 - \sigma) \left[ \frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h^2} + \frac{\varphi_m^n}{mh} \psi_m^n \right] \right\} \\ m &= 1, 2, \dots, M-1, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Эта схема имеет порядок точности

$$\begin{aligned} O(\tau^2 + h^2) &\quad \text{при } \sigma = 0, 5, \\ O(\tau^2 + h^4) &\quad \text{при } \sigma = \frac{1}{2} - \frac{ih^2}{12\tau} = \sigma_*, \\ O(\tau + h^2) &\quad \text{при } \sigma \neq 0, 5 \text{ и } \sigma \neq \sigma_*. \end{aligned}$$

<sup>1</sup> Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. с. 296-300

Для проведения расчета по этой схеме на каждом временном слое необходимо решать систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. Для этого использован метод прогонки.

**Во второй главе** исследуются тепловые процессы при облучении никеля ионами урана с энергией 700 МэВ в рамках модели термического пика с учетом зависимости теплофизических параметров (удельная теплоемкость и теплопроводность) от температуры. Актуальность исследования этих процессов связана с исследованиями воздействия высокоионизирующих заряженных частиц на материалы в связи с созданием ускорителей и накопительных колец тяжелых ионов высокой энергии. На основе проведенных вычисленных экспериментов сделан вывод, что в случае облучения никеля ионами урана с энергией 700 МэВ температура мишени превышает температуру плавления (т.е. могут происходить фазовые переходы). Вычислены максимальные размеры области в никеле, где температура превышает температуру плавления. Проведенный сравнительный анализ с линейной моделью (не учитывающей зависимость удельной теплоемкости и теплопроводности от температуры) термического пика показал, что при учете зависимости теплофизических параметров от температуры тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем при постоянных теплофизических параметрах.

Во втором параграфе с целью изучения тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ сформулирована нелинейная модель термического пика в цилиндрической системе координат, описывающая эволюцию температуры в образце на основе системы уравнений (1)–(2).

В третьем параграфе приведен метод численного решения нелинейной модели термического пика с помощью численной схемы (8)–(9). Для проверки сходимости численной схемы проводился численный эксперимент при фиксированных шагах  $h_r$ ,  $h_t$  и на сгущающейся сетке по  $z$ , т.е.  $h_z$ ,  $h_z/2$ ,  $h_z/4$  ( $h_r = 10^{-3}$ ,  $h_z = 4 \cdot 10^{-2}$ ,  $h_t = 10^{-5}$ ). Как показали проведенные численные эксперименты, найденные относительные разности профилей температур на сгущающейся сетке уменьшаются согласно теоретическим оценкам<sup>2,3</sup>.

В четвертом параграфе приведены результаты численного моделирования. На рис. 1 для сравнительного анализа представлены зависимости от времени температуры электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) на поверхности никеля, облучаемого ионами урана на различных расстояниях от оси трека  $r = 0; 50; 100; 150 \text{ \AA}$  в рамках линейной (свер-

---

<sup>2</sup> Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987, с. 251

<sup>3</sup> Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978, с. 74-78

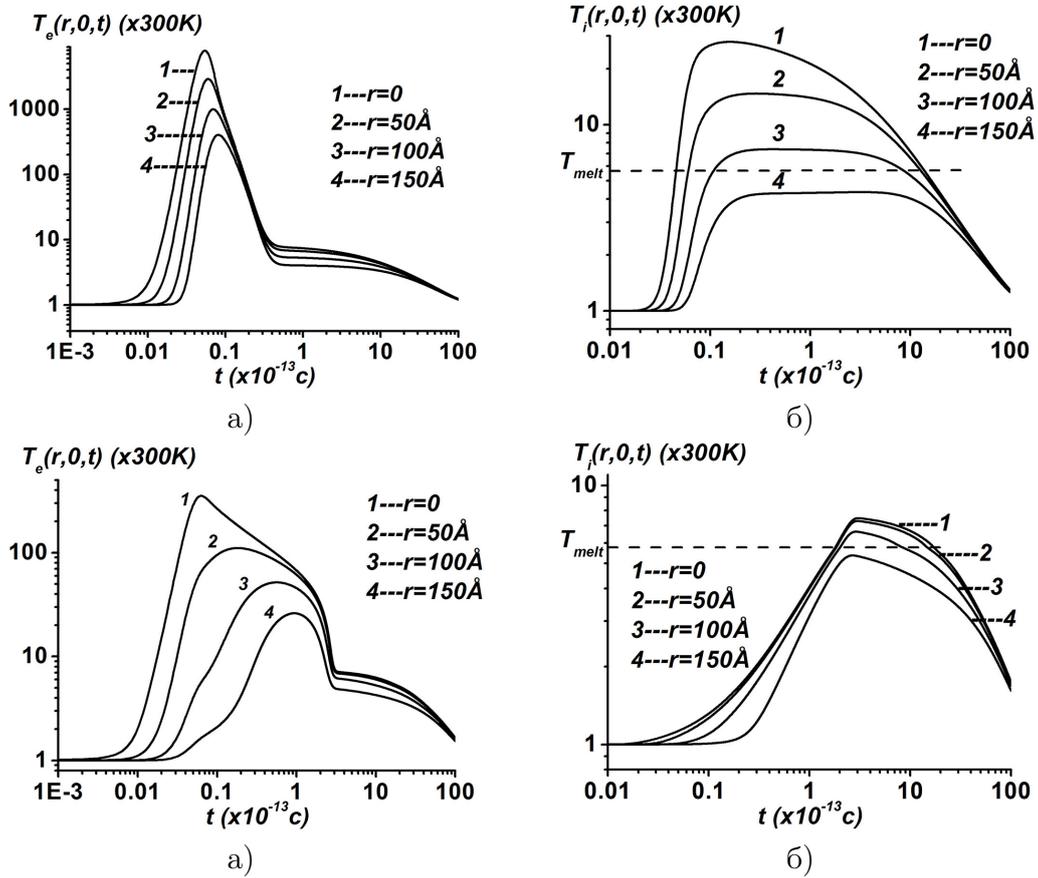


Рис. 1. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) при  $z = 0$  облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от оси трека в рамках линейной (сверху) и нелинейной (снизу) моделей термического пика (штриховой прямой выделена температура плавления никеля).

ху) и нелинейной (снизу) двухтемпературной модели термического пика. Из сравнения этих графиков видно, что при учете зависимости теплофизических параметров от температуры температура электронного газа и кристаллической решетки значительно меньше, чем в случае постоянных теплофизических параметров, взятых при комнатной температуре. Особенность нелинейной модели характеризуется тем, что тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем в линейном случае.

**В третьей главе** в рамках нелинейной модели термического пика в трехмерном случае рассчитаны температуры в двухслойных структурах и анизотропных материалах при их облучении тяжелыми ионами высоких

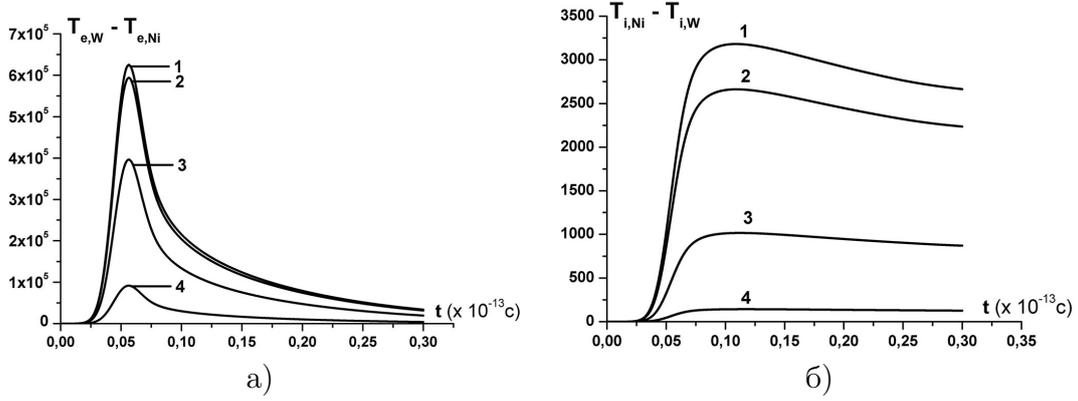


Рис. 2. Временная зависимость разности температур (в абсолютных значениях) в слоях на границе раздела двух материалов для электронной подсистемы (а) и кристаллической решетки (б) в случае неидеального контакта для различных значений коэффициента  $\theta$  (**1** —  $\theta = 10^4$ , **2** —  $\theta = 10^5$ , **3** —  $\theta = 10^6$ , **4** —  $\theta = 10^7$ ).

энергий.

Двухслойная структура представляет собой массивную подложку из вольфрама и нанесенный на нее относительно тонкий слой никеля (толщиной 2 мкм). Детально исследованы изменения температур на границе раздела такой структуры в зависимости от значения коэффициента конвективного теплообмена  $\theta$ , характеризующего изменение градиента температур на границе раздела, а следовательно, и определяющего тип теплового контакта. Сравнительный анализ линейной и нелинейной моделей показал, что при учете температурной зависимости теплофизических параметров процесс изменения температуры электронного газа и кристаллической решетки происходит значительно медленнее, а достигаемый максимум температуры существенно меньше, чем в случае постоянных теплофизических параметров, взятых при комнатной температуре. Показано, что при увеличении коэффициента  $\theta$  имеет место переход от неидеального контакта к идеальному контакту (рис. 2).

В рамках модели термического пика проведены исследования температурных эффектов при облучении ВОПГ ионами висмута  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ и криптона  $^{86}\text{Kr}$  с энергией 253 МэВ в зависимости от коэффициента электрон-фононного взаимодействия  $g$ . Исходя из экспериментальных данных по изучению изменений структуры поверхности монокристалла ВОПГ, облученного ионами висмута с энергией 710 МэВ и криптона с энергией 253 МэВ и на основании расчетов сделан вывод, что рассматриваемая в работе модель термического пика позволяет объяснить наличие структур типа кратеров (с глубиной  $H_{cr} > 1$  нм и диаметром на поверхно-

сти  $D_{cr} \approx 5 - 7$  нм) на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута и их отсутствие в случае облучения ионами криптона.

В первом параграфе рассматривается применение модели термического пика в трехмерном случае для вычисления температуры решетки и электронов в двухслойном материале на примере структуры Ni(2 мкм)/W при облучении ионами  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ при неидеальном тепловом контакте на границе раздела материалов. Рассматривается система уравнений (1)–(2) для обоих слоев, с начальными и граничными условиями (4)–(5) и условиями сопряжения на границе раздела двух материалов:

$$\begin{aligned} \lambda_{n,1}(T_{n,1}) \frac{\partial T_{n,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \lambda_{n,2}(T_{n,2}) \frac{\partial T_{n,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \\ \lambda_{n,1}(T_{n,1}) \frac{\partial T_{n,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \\ &= \theta [T_{n,1}(r, z = H - 0, t) - T_{n,2}(r, z = H + 0, t)]. \end{aligned} \quad (14)$$

В записи (14)  $\lambda_{n,v}$  индекс  $n = e, i$  соответствует электронной подсистеме и кристаллической решетке, а индекс  $v = 1, 2$  первому и второму слоям соответственно.  $H = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$  граница раздела двух материалов. Предполагается, что  $R_p < Z_{\max} \leq l_p$ ,  $H < R_p$ , где  $R_p$  – длина проективного пробега иона;  $l_p$  – толщина второго слоя.

Во втором параграфе в рамках модели термического пика численно исследованы тепловые процессы в ВОПГ при облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ и криптона с энергией 253 МэВ. Система уравнений модели термического пика в этом случае запишется в виде:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e^\perp(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e^\parallel(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_e)(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (15)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_i^\perp(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_i^\parallel(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) - g(T_e)(T_e - T_i).$$

Символы " $\perp$ " и " $\parallel$ " означают, что теплопроводность зависит от направления, а именно: перпендикулярно и вдоль облучаемой поверхности. Система уравнений (15) дополняется начальными и граничными условиями (4)–(5), а функция  $A(r, z, t)$  имеет вид (3).

Система уравнений (15) решалась численно с использованием экономичного конечно-разностного метода (метод переменных направлений). Проводился численный эксперимент для исследования сходимости вычислительной схемы на сгущающихся сетках. В конце параграфа сделано за-

ключение, где, в частности, по результатам сравнительного анализа полученных решений и экспериментальных данных, указывается диапазон значений коэффициента электрон-фононного взаимодействия для ВОПГ, удовлетворяющий двойному неравенству  $400g_k \leq g \leq 10^3g_k$ , где  $g_k = 3, 12 \cdot 10^{12}$  Вт/(см<sup>3</sup>·К).

**В четвертой главе** исследована численная схема для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих эволюцию полярона. Выполнен анализ точности схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов сделан вывод, что если в начальный момент времени полярон находился в стационарном состоянии (основном или возбужденном), то он сохраняется в этом состоянии независимо от наличия или отсутствия трения в системе. Показано, что начальные распределения заряда, заданные суперпозициями стационарных состояний при наличии в системе трения с течением времени эволюционируют в основное состояние. При отсутствии трения эволюция в основное состояние не наблюдается.

В первом параграфе описывается актуальность и цель исследования, обосновывается необходимость проведения вычислительных экспериментов в рамках динамической модели полярона.

Во втором параграфе формулируется система уравнений (10)–(11), описывающих динамическую модель полярона. Представлены первые три собственные функции и собственные значения стационарной системы полярона (12).

В третьем параграфе приводятся численная схема и алгоритм для решения системы уравнений динамической модели полярона, проводится тестирование вычислительной схемы с помощью модельных расчетов и на последовательности сгущающихся сеток. Задача (10)–(11) решается с использованием следующей неявной конечно-разностной схемы порядка аппроксимации  $O(h_t + h_x^2)$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ \sigma \left[ \frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \left. + (1 - \sigma) \left[ \frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{\varphi_m^n}{mh_x} \psi_m^n \right] \right\} \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1} \\ \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\frac{\omega^2 |\psi_m^n|^2}{\bar{\varepsilon} mh_x}, \end{array} \right. \quad (16)$$

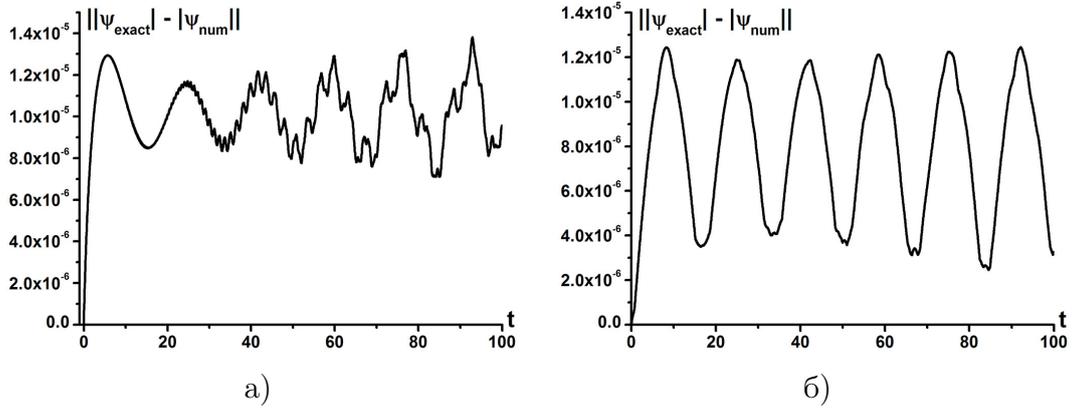


Рис. 3. Результаты сравнительного анализа численного и точного решений уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом: а) – для основного состояния, б) – для первого возбужденного состояния.

$$\begin{aligned} \psi_m^0 &= \Psi_k(\cos \lambda_k \tau + i \sin \lambda_k \tau); \Theta_m^{-1} = -\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \frac{|\psi_m^0|^2}{mh_x}; \\ \Theta_m^0 &= \Theta_m^{-1}; \varphi_0^n = 0; \varphi_l^n = \varphi_{l-1}^n; \\ m &= 1, 2, \dots, l; n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

где  $\sigma = 0, 5$ .

Для решения задачи (10)-(11) по схеме (16) на каждом слое с номером  $n$  предлагается следующий алгоритм:

1. Решается третье уравнение при известном  $\psi^n$  относительно  $\Theta^{n+1}$ ;
2. Решается второе уравнение для найденного  $\Theta^{n+1}$ , определяется  $\varphi^{n+1}$ ;
3. Решается первое уравнение и вычисляется  $\psi^{n+1}$  на следующем временном слое;
4. Повторяется весь алгоритм.

Проводилось тестирование вычислительной схемы (16) с помощью модельных расчетов для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом, которое совпадает с первым уравнением системы (10) при  $\varphi = 1$ . Такой подход обусловлен тем, что в этом случае для уравнения Шредингера можно написать точные аналитические решения и провести их сравнительный анализ с численными результатами. По результатам проведенного сравнительного анализа численных и точных решений уравнения Шредингера выбирались значения шагов сетки  $h_t$  и  $h_x$  для последующих расчетов (рис. 3).

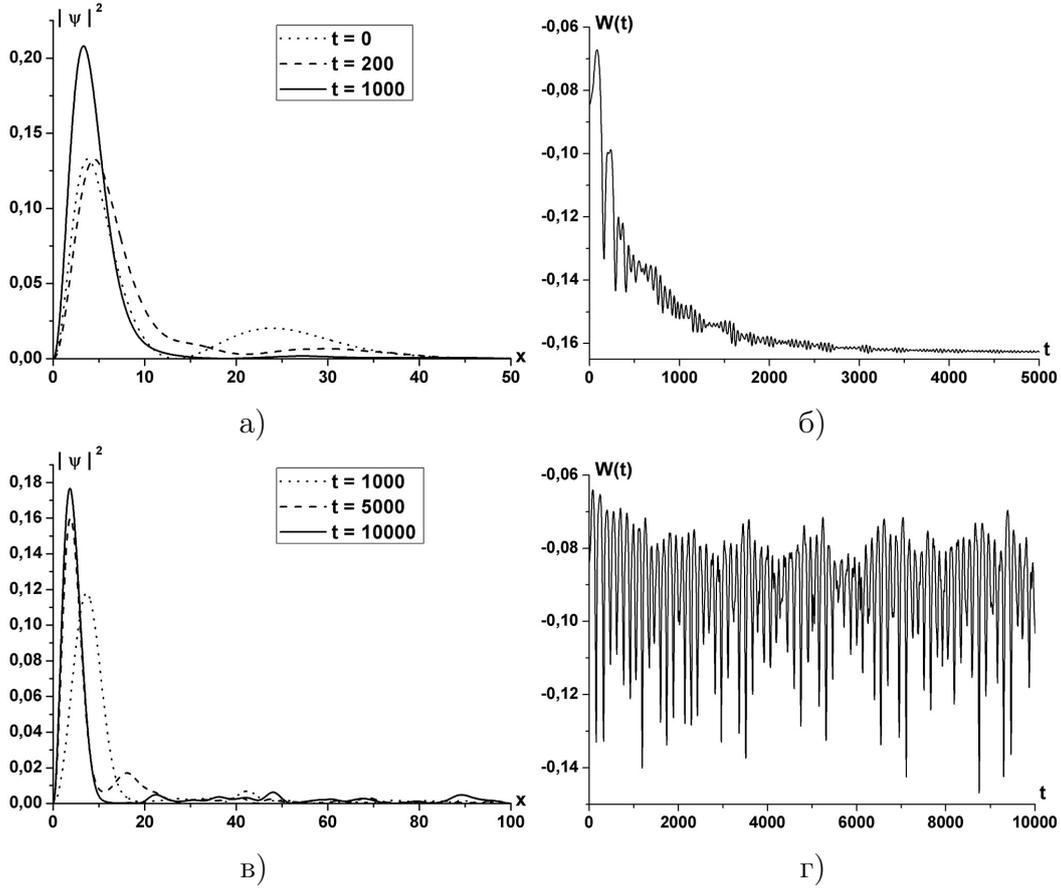


Рис. 4. Эволюция полярона из состояния (17) и соответствующая энергия электрона  $W(t)$  при коэффициентах трения  $\gamma = 4$  (а, б) и  $\gamma = 0$  (в, г).

В четвертом параграфе обсуждаются полученные результаты. Для визуализации численных результатов были вычислены „величины энергии” (в безразмерных единицах)  $W(t)$  по формуле:

$$W(t) = \frac{1}{2\bar{n}} \int \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \int \frac{\varphi(x, t) |\psi(x, t)|^2}{x} dx.$$

На рис. 4 показана эволюция полярона в случае, когда начальные условия выбирались в виде комбинации двух стационарных состояний

$$\Psi(x, t)|_{t=0} = N \left[ \Psi_0 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_0}{4}\right) + \Psi_1 \exp\left(i\pi \frac{\lambda_1}{4}\right) \right], \quad (17)$$

где  $N$  – нормировочная константа,  $\Psi_0$  – волновая функция основного состояния,  $\Psi_1$  – волновая функция первого возбужденного состояния, при

значениях параметров  $\bar{m} = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $\tilde{\varepsilon} = 1$ ,  $\gamma = 0$  и 4. Из рисунка следует, что начальное распределение заряда, заданное суперпозицией (17), с течением времени эволюционирует в основное состояние. Этот вывод является общим при наличии в системе трения ( $\gamma \neq 0$ ). При  $\gamma = 0$  численные исследования показывают, что эволюция в основное либо возбужденное состояние не наблюдается.

**В Заключение** сформулированы основные результаты диссертации которые выносятся на защиту:

1. Разработаны алгоритмы, созданы, протестированы и применены эффективные вычислительные схемы и программы с использованием экономичных консервативных разностных схем для решения нелинейных систем дифференциальных уравнений в частных производных для модели термического пика. Проведено численное исследование и получены следующие результаты:
  - а) Проведен сравнительный анализ результатов исследования линейной и нелинейной моделей термического пика. Показано, что учет нелинейности приводит к тому, что моделируемые тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем при постоянных теплофизических параметрах. Оценены максимальные области в материалах, где могут образоваться треки.
  - б) В случае облучения никеля ионами урана с энергией 700 МэВ максимальные размеры области в никеле, где температура превышает температуру плавления, равны  $D_{\max}^{melt} \simeq 230\text{\AA}$ ;  $Z_{\max}^{melt} \simeq 140 \cdot 10^3\text{\AA}$  ( $D_{\max}^{melt}$  – оценка максимального диаметра и  $Z_{\max}^{melt}$  – оценка максимальной глубины, где может происходить плавление);
  - в) При облучении двухслойной структуры  $Ni(2\text{мкм})/W$  ионами висмута с энергией 710 МэВ и при неидеальных условиях теплопередачи (теплового контакта) в плоскости стыковки материалов максимальные размеры, где может происходить плавление, равны  $D_{\max}^{melt}(z = 0) \simeq 222\text{\AA}$  (на поверхности никеля);  $D_{\max}^{melt}(z = H) \simeq 219\text{\AA}$  ( $z = H$  – граница раздела материалов);
2. Модель термического пика обобщена для исследования облучения двухслойных материалов. Исследовано влияние температурных эффектов облучения двухслойных структур тяжелыми ионами высоких энергий на улучшение адгезии на границе двух материалов.
3. Модель термического пика адаптирована для исследования тепловых процессов в анизотропных материалах, облучаемых тяжелыми

ионами. На основании численного моделирования подтверждены экспериментальные данные о наличии структур типа кратеров на поверхности ВОПГ при облучении ионами  $^{209}\text{Bi}$  и их отсутствие в случае облучения ионами  $^{86}\text{Kr}$ .

4. Разработаны алгоритмы, создано программное обеспечение и проведено численное исследование уравнений, описывающих динамику поляронных состояний с учетом трения в системе.
  - а) Для численного решения и визуализации процесса эволюции поляронных состояний разработан комплекс программ с использованием графических средств Compaq Visual Fortran для ОС Windows.
  - б) Показано, что начальное распределение заряда, заданное суперпозициями стационарных состояний при наличии в системе трения эволюционирует в основное состояние. При отсутствии трения эволюция в основное состояние не наблюдается.

**В приложении** к диссертации дано описание графической программы для численного решения и визуализации процесса эволюции поляронных состояний, разработанный с использованием графических средств Compaq Visual Fortran для ОС Windows.

**По теме диссертации опубликованы следующие работы:**

- [M1] I. V. Amirkhanov, A. Yu. Didyk, D. Z. Muzafarov, I .V. Puzynin, T. P. Puzynina, N. R. Sarkar, I. Sarkhadov, Z. A. Sharipov. *Investigation of Thermal Processes in One- and Two Layer Materials under Irradiation with High-Energy Heavy Ions within the Thermal Peak Model* // **Crystallography Reports**. 2006. v. 24. Suppl. 1. P. 32–43.
- [M2] И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар, И. Сархадов, З. А. Шарипов. *Применение нелинейной модели термического пика для расчета температурных эффектов в двухслойных структурах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий* // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**. 2009. № 12. С. 58–66.
- [M3] И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар, И. Сархадов, З. А. Шарипов. *Нелинейная модель термического пика в пиролитическом графите при*

*облучении тяжелыми ионами  $^{86}\text{Kr}$  и  $^{209}\text{Bi}$  высокой энергии // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 5. С. 78–86.*

- [M4] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Численное исследование динамики полярных состояний // Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика. 2009. 2[13]. С. 5–14.*
- [M5] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Численное моделирование эволюции состояний полярона // Вестник РУДН. Серия: Математика, Информатика, Физика. 2010. № 2, вып. 2. С. 64–69.*
- [M6] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Математическое моделирование эволюции полярных состояний // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. № 1. С. 66–70.*
- [M8] И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар, И. Сархадов, З. А. Шарипов. *Исследование тепловых процессов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках общей модели термического пика // Тезисы докладов V Национальной конференции „РСНЭ–НАНО–2005”. ИК РАН, Москва. 2005. С. 321.*
- [M7] Д. З. Музафаров. *Исследование тепловых процессов при облучении материалов тяжелыми ионами высоких энергий // Труды X научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ. Дубна. 2006. С. 43–47.*
- [M9] И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар, И. Сархадов, З. А. Шарипов. *Применение нелинейной модели термического пика для расчета температурных эффектов в двухслойных структурах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий // Тезисы докладов VI Национальной конференции „РСНЭ–НАНО–2007”. ИК РАН, Москва. 2007. С. 450.*
- [M10] Д. З. Музафаров. *Изучение динамических уравнений для полярона в бесконечной полярной среде // Труды XII научной конференции молодых учёных и специалистов ОИЯИ. Дубна. 2008. С. 96–99.*

- [M11] Д. З. Музафаров. *Численное исследование динамических уравнений для полярона* // Материалы XIII международной научной конференции молодых ученых „Ломоносов-2008”. Москва, МГУ. 2008. С. 74–76.
- [M12] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Численное исследование динамики поляронных состояний* // Доклады II международной конференции Математическая Биология и Биоинформатика. Пущино. 2008. С. 15–16.
- [M13] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Математическое моделирование эволюции поляронных состояний* // Тезисы докладов VII Национальной конференции „РСН–НБИК–2009”. ИК РАН, РНЦ КИ, Москва. 2009. С. 498.
- [M14] И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, Д. З. Музафаров, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, З. А. Шарипов. *Численное решение системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающей эволюцию полярона* // Материалы международной конференции „Математическое моделирование и вычислительная физика”. Дубна, ЛИТ, ОИЯИ. 2009. С. 40–41.