

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева»

На правах рукописи

Морозов Виталий Михайлович

**НЕЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ
РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННОЙ ДИФФУЗИИ
ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И РОСТА КОГЕРЕНТНЫХ СТРУКТУР
В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРЕДАХ**

Специальность 1.3.3 — Теоретическая физика

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. Журавлев В.М.

Москва – 2024

Содержание

Введение	6
Глава 1. Модели радиационно-стимулированного роста когерентных структур и методы их анализа	14
1.1 Когерентные структуры в кристаллических средах	14
1.1.1 Влияние точечных дефектов на структуру и свойства материалов	15
1.1.2 Характерные особенности сверхрешеток точечных дефектов и процессов, лежащих в основе их роста	19
1.2 Модели роста сверхрешеток	21
1.2.1 Распад пересыщенных твердых растворов	24
1.2.3 Кинетические модели роста кластеров точечных дефектов	26
1.2.3 Модели радиационно-стимулированного роста кластеров из атомов примесей и скоплений точечных дефектов	29
1.2.4 Локализованные структуры и концентрационные неустойчивости в системах с диффузией	32
1.2.5 Нелинейная диффузия точечных дефектов	37
1.3 Методы анализа нелинейных моделей	40
1.3.1 Точечные и контактные преобразования	40
1.3.2 Принцип суперпозиции для решений нелинейных уравнений	47
1.3.2 Метод исследования симметрий	50
1.3.3 Метод обратной задачи и преобразования Бэклунда	54
1.4 Выводы	58
Глава 2. Квазилинейные структуры в среде с линейной диффузией	

ей	60
2.1 Схема построения решений	61
2.2 Вещественный потенциал	71
2.3 Примеры классических решений	73
2.4 Многолистные решения	74
2.5 Роль точек ветвления	78
2.6 Многозначные решения уравнения диффузии с квадратичной неод- нородностью	80
2.7 Связь линейного уравнения диффузии с уравнениями гидродина- мики и ривертонами	88
2.8 Выводы	94
Глава 3. Локализованные решения уравнения нелинейной диффу- зии и нелинейные функциональные подстановки	96
3.1. Частные решения уравнения быстрой диффузии	97
3.2 Нелинейные функциональные подстановки	101
3.2.1 Волновые решения уравнения быстрой диффузии	110
3.2.2 Автопреобразование решений уравнения быстрой диффузии	119
3.2.3 Взаимные коэффициенты диффузии	124
3.3 Метод функциональных подстановок для кинетических моделей кластеризации	129
3.3.1 Метод функциональных подстановок для сеточных произ- водных	129
3.3.2 Интегралы движения	134
3.3.3 Примеры цепочек с ограниченным числом элементов	137
3.3.4 Циклические цепочки	137

3.3.5 Ограниченные цепочки	140
3.3.6 Цепочки с условиями отражения	141
3.3.7 Построение решений вспомогательных уравнений и уравнений цепочек	143
3.4 Выводы	145

Глава 4. Модель радиационно-стимулированного роста сверхрешеток в среде с нелинейной диффузией **147**

4.1 Уравнение нелинейной диффузии одного типа ТД	147
4.2 Метод многомасштабных разложений	151
4.3 Уравнение для амплитудного фактора	153
4.4 Условие усиления сверхрешетки постоянным источником	155
4.5 Уравнение нелинейной диффузии нескольких типов дефектов	157
4.6 Неоднородное пространственное распределение источника точечных дефектов	160
4.8 Оценки пространственных масштабов сверхрешеток	168
4.7 Выводы	170

Глава 5. Модель "быстрая релаксация-медленная диффузия" с учетом эффекта насыщения **172**

5.1 Уравнение переноса радиационного излучения в кристаллической среде и нелинейная диффузия точечных дефектов	173
5.2 Разделение пространственных и временных масштабов	175
5.3 Уравнения релаксации	179
5.4 Режимы роста когерентных структур	182
5.5 Уравнение асимптотики концентрации	183

5.6 Уравнение для АФ	184
5.7 Решение для концентрации частиц излучения в первом порядке . .	187
5.8 Вычисление функции $A_1(\mathbf{X}, T)$	187
5.9 Асимптотический режим роста когерентной структуры	190
5.10 Релаксационный режим роста	195
5.11 Получение высококонтрастной макроструктуры	206
5.12 Оценка масштабов сверхрешетки	209
5.12 Выводы	212
Заключение	214
Используемые сокращения	217
Список литературы	218
Список опубликованных работ по теме диссертации	258
Приложения	262
Приложение 1	262
Приложение 2	265
Приложение 3	268
Приложение 4	270
Благодарности	272

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы

Прогнозирование поведения новых материалов в различных условиях и методы получения материалов с заданными свойствами, являются одними из самых актуальных направлений теоретических исследований в области физики конденсированного состояния. Результаты этих исследований имеют широкий спектр применения от создания компонент микроэлектронных устройств и элементов космических аппаратов до атомной техники [1–4].

Одним из подходов к дизайну новых материалов является модификация структуры кристаллов с помощью сверхрешеток из кластеров точечных дефектов с пространственной периодичностью, значительно превышающей постоянную решетки. Для роста кластеров необходимо создание высокой неравновесной концентрации дефектов, что может быть достигнуто облучением материала различными частицами или лазерным излучением.

Среди различных моделей роста когерентных структур можно выделить следующие: модели кинетики кластеров, где фактором, приводящим к росту макроструктуры, является объединение кластеров меньшего размера, и задача состоит в выяснении условий, при которых данный процесс энергетически выгоден [5,6]; модели, учитывающие влияние температуры и упругих деформаций на поверхностную диффузию дефектов [7,8,54]. Также существует широкий класс моделей, основанных на уравнениях диффузии. Известно, что радиационно-стимулированная диффузия вакансий и межузлий в отдельных случаях приводит не к деградации материала, а к образованию в нем упорядоченных структур [210], которые улучшают механические [10,11], электрические [12] и другие свойства материала [13].

Нелинейный характер взаимодействия дефектов между собой и с внешним излучением приводит к нелинейным моделям, что усложняет их аналитический анализ и приводит к значительным упрощениям, связанным, прежде всего, с линеаризацией уравнений. Численное же решение уравнений модели [9, 14] находится для конкретного набора параметров и начального условия, что не позволяет проанализировать поведение решения во всем диапазоне значений совокупности параметров и приводит к потере информации об особых режимах. Поэтому особую ценность в данном случае имеют аналитические методы, которые позволяют проанализировать поведение системы, выявить характерные особенности и использовать формализованные результаты в дальнейших исследованиях.

К основным аналитическим методам относятся: метод групповых преобразований [15], позволяющий в отдельных случаях упростить исходную систему и получить частное решение; качественный анализ сосредоточенных динамических систем вблизи стационарной точки, что соответствует большим (по сравнению с переходными процессами) временам облучения, а также различные функциональные и дифференциальные подстановки [16]. Наиболее часто [9] применяется анализ динамической системы вблизи стационарной точки, т.е. в асимптотике $t \rightarrow \infty$, однако, хорошо известно, что длительное облучение приводит к деградации материала [17] даже в случае образования в нем сверхрешеток, поэтому такой подход не выявляет всех возможных режимов роста.

К недостаткам уже существующих моделей на основе уравнений диффузии точечных дефектов можно отнести следующее [210]:

а) использование постоянных коэффициентов диффузии дефектов, т.е. усредненных параметров (вычисленных для необлученного кристалла) в то-

чечной модели;

b) отсутствие теоретического описания необходимых условий для возникновения периодических структур;

c) методы анализа нелинейных уравнений модели не адаптированы к целям конкретной задачи и не дают функциональные зависимости параметров сверхрешетки от интенсивности внешнего излучения [18, 19];

d) отождествление постоянного источника дефектов с источником излучения, что справедливо лишь на начальной стадии роста, когда кристаллическая решетка не сильно повреждена и, как следствие, не учитывается влияние дефектов на процесс их генерации.

Задачи, связанные с перечисленными выше недостатками современных моделей, определяют актуальность настоящего исследования. Наряду с разработкой физической модели роста когерентных структур и выяснением процессов, приводящих к их образованию, есть необходимость в создании методов анализа нелинейных моделей диффузии в кристаллической среде.

Целью работы являются критерии радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллических средах и новые методы анализа нелинейных уравнений для выяснения физических закономерностей нелинейной диффузии точечных дефектов.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи:**

1. Разработать математическую модель радиационно-стимулированной диффузии точечных дефектов, на основе процессов быстрой релаксации и медленной диффузии.

2. Разработать методы анализа уравнений нелинейной диффузии точечных

дефектов.

3. Получить условия возникновения и роста когерентных структур в кристаллических средах и зависимость периода сверхрешеток от интенсивности внешнего излучения.

4. Учесть взаимодействие частиц излучения с кристаллической решеткой в модели "быстрая релаксация-медленная диффузия" и описать эффект насыщения концентраций. Получить распределения концентрации по глубине материала.

Научная новизна работы заключается в следующих оригинальных результатах:

1. Для линейного двумерного уравнения с постоянным коэффициентом диффузии впервые получены квазилинейные многолистные решения, описывающие рост сингулярных структур.

2. Разработана модификация метода функциональных подстановок — нелинейные функциональные подстановки (НФП), для решения уравнений нелинейной диффузии (УНД) и кинетических уравнений кластеризации. С помощью НФП получены новые решения, описывающие распространение автоволн в среде с быстрой диффузией.

3. В рамках оригинальной модели радиационно-стимулированной нелинейной диффузии точечных дефектов — "быстрая релаксация-медленная диффузия" (БРМД) исследованы условия возникновения и роста пространственно-периодических и локализованных решений, а также зависимость периода структуры от интенсивности внешнего излучения.

4. В модели БРМД получены уравнения для амплитудных факторов (АФ), описывающих крупномасштабные когерентные структуры в среде с нелинейной

диффузией.

5. Рассмотрена система БРМД с ограниченным источником и эффектом насыщения концентрации. Получено уравнение, описывающее асимптотический рост когерентных структур.

Теоретическая и практическая ценность результатов заключается в возможности применения полученных критериев роста сверхструктур и зависимости их параметров от характеристик падающего излучения в исследованиях материалов с заданными свойствами, а также исследованиях поведения материалов под облучением. Разработанные математические методы могут быть применены для исследования широкого класса нелинейных дифференциальных уравнений теоретической и математической физики, химической и биологической кинетики.

Методология и методы исследования. В работе использовались как широко известные методы анализа нелинейных дифференциальных уравнений: метод многомасштабных разложений, групповой анализ, качественная теория дифференциальных уравнений, дифференциальные подстановки и их модификации, так и развитый в данной работе оригинальный метод нелинейных функциональных подстановок.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Линейные уравнения диффузии в среде с размерностью $d > 1$ и распределенными источниками и стоками специального вида допускают многолистные решения, описывающие перемещение локализованных сингулярных структур. Такие структуры возникают, в том числе и в однородной среде.

2. Нелинейные функциональные подстановки (НФП) позволяют находить точные частные решения и симметрии нелинейных уравнений диффузии. С по-

мощью НФП найдено преобразование, связывающее решения уравнений с взаимными коэффициентами диффузии. Обобщение метода на случай дискретных систем позволяет выписать решения и интегралы движения уравнений кластеризации под действием излучения.

3. Уравнение быстрой диффузии с источником обладает классом локализованных волновых решений, для которых функция источника связана с волновыми компонентами решений. С помощью нелинейных функциональных подстановок показано наличие, в том числе, автоволнового режима возникновения когерентных структур.

4. В модели с быстрой релаксацией и медленной диффузией (БРМД) точечных дефектов, когерентная структура описывается функцией, удовлетворяющей линейному уравнению с коэффициентом диффузии, зависящим от интенсивности внешнего излучения. При заданном коэффициенте диффузии интенсивность внешнего излучения определяет критическое значение волнового числа, начиная с которого происходит рост сверхрешетки.

5. В модели БРМД с ограниченным источником дефектов существует два режима роста упорядоченных структур — релаксационный и асимптотический. В первом случае высококонтрастное распределение концентрации точечных дефектов достигается за конечный отрезок времени с последующим насыщением. В асимптотическом режиме макроструктура сохраняется при установлении динамического равновесия и не зависит от начального распределения.

Апробация работы. Основные результаты, полученные в данном исследовании были представлены в докладах на следующих конференциях: «Все-российская научно-практическая конференция по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники» (РУДН, Москва, 2015, 2017,

2018, 2021, 2022, 2023 г.); XII, XIV и XV Международные научные конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» (Саранск, 2017, 2021, 2022 г.); «Математическая физика и ее приложения» (Самара, 2014 г.); Международный научный семинар «Нелинейные модели в механике, статистике, теории поля и космологии» GRACOS-16 (Казань, КФУ, 2016 г.); Международные научные конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2017», «Ломоносов-2018», «Ломоносов-2019» (Москва, МГУ, 2017, 2018, 2019); Международный научный семинар «Нелинейные модели в механике, статистике, теории поля и космологии» GRACOS-18 (Казань, КФУ, 2018 г.); XIII Всероссийская научная конференция молодых ученых «Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика» (Саратов, Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, 2018). А также на научно-технических семинарах в НИТИ им. С.П. Капицы УлГУ.

Личный вклад автора. Постановка задач и основные теоретические положения разработаны автором совместно с научным руководителем доктором физико-математических наук, профессором В.М. Журавлевым. Модель диффузии с ограниченным источником предложена автором. Все расчеты выполнялись автором лично или при его участии. Автор принимал непосредственное участие в обсуждении и анализе результатов исследования и подготовке публикаций и докладов конференций.

Реализация результатов работы. Теоретические и практические результаты диссертационной работы использованы в НИР «Разработка методов и средств проведения перспективных фундаментальных космических исследований на базе наноспутников для занятия и удержания лидерских позиций в освоении и использовании космического пространства» (проект 0777-2020-0018,

финансируемый из средств госзадания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России).

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, четырех приложений, списка опубликованных работ и списка литературы. Объем диссертационной работы составляет 272 страницы и содержит 20 рисунков и 6 таблиц. Список литературы включает 266 наименований.

Глава 1. Модели радиационно-стимулированного роста когерентных структур и методы их анализа

В настоящей главе приводится краткий обзор литературы, посвященной исследованию роста когерентных структур в кристаллических средах под облучением. Основное внимание уделено математическим моделям, основанным на уравнениях диффузии точечных дефектов и методам их анализа.

1.1 Когерентные структуры в кристаллических средах

Открытие механизмов диффузии в кристаллических средах и способов модификации структуры материалов с помощью облучения связано с активным развитием ядерной и ускорительной техники в первой четверти прошлого века. Новые методы анализа микроструктуры вещества привели к открытию механизмов диффузии в кристаллах, основанных на наличии в решетке дефектов.

Идея, что атомы решетки могут быть выбиты частицами излучения из положений равновесия с образованием пары точечных дефектов вакансия-междоузлие, предложенная Озеровым и Зейтцем [89], позволила объяснить наличие в экспериментальных данных порогового значения энергии частиц падающего излучения, при котором электрические и механические свойства облученного материала изменяются. В частности, дополнительное рассеяние носителей на межузельных атомах приводит к росту электрического сопротивления облучаемого образца. Данный эффект наблюдался как на чистых металлах, так и на сплавах [178–181]. При этом, последующий отжиг требует энергии, равной энергии активации самодиффузии [158–162]. На основе этих фактов была выдвинута гипотеза о том, что самодиффузия в кристаллах осуществляется

с помощью миграции ТД.

Данные открытия определили направление дальнейших теоретических исследований, которые стали основываться на моделях диффузии ТД.

1.1.1 Влияние точечных дефектов на структуру и свойства материалов

Наличие неравновесной концентрации ТД в облученном материале, прежде всего, приводит к изменению его микроструктуры. Как полезные для практического применения, так и негативные эффекты, связанные с модификацией кристаллической решетки облучением, связаны с ростом скоплений дефектов — кластеров.

Предположение о том, что ТД могут образовывать кластеры было высказано в работах Мэррея и Тейлора [95–97], в которых проведена аналогия между радиационно-стимулированным ростом кластеров ТД и ростом зародышей новой фазы в пересыщенном твердом растворе. При нейтронной бомбардировке сопротивление пересыщенного твердого раствора растет быстрее, чем в чистом металле, Мэррей и Тейлор объяснили этот эффект беспорядочным ростом кластеров ТД — в результате упругого взаимодействия атомов решетки, оказывается более энергетически выгодной конфигурация, при которой "пустоты" и междоузлия объединяются в соответствующие кластеры, чей рост обеспечивается высокой неравновесной концентрацией, поддерживаемой внешним облучением.

Диффузионный механизм переноса, основанный на наличии в решетке ТД, также проявляется в частичном упорядочении и разупорядочении твердых растворов. В работах Кинчина и Пиза [98, 99] был предложен механизм разупорядочения, которое объясняется большим числом столкновений, в которых дви-

жущиеся атомы обмениваются местами с неподвижными атомами. В каждом столкновении происходит замена атома упорядоченной решётки атомом из беспорядочного распределения.

Рост кластеров оказывает влияние и на макроскопические свойства материала. У облученных образцов сплавов наблюдается эффект упрочнения и увеличение их поверхностной твердости [163, 164], что объясняется замедлением движения дислокаций, вызванным скоплениями ТД [102], а энергия, необходимая для устранения радиационного упрочнения равна энергии активации диффузии ТД

Исследования, посвященные упрочнению [165–170] и охрупчиванию [171–177] сплавов тесно связаны с развитием реакторной техники. Т.к. получение устойчивых к деградации элементов реакторов — одна из актуальных задач в этой области. Но знания о механизмах упрочнения и охрупчивания далеко не полны, т.к. эксперименты, моделирующие поведение материалов в ядерных реакторах требуют высоких доз облучения, что создает существенные сложности при их воспроизведении.

В некоторых случаях удается воспроизвести эффекты, получаемые при облучении нейтронами, протонами и другими высокоэнергетическими частицами с помощью облучения ионами [116, 117]. В реакторе поведение зародышеобразования пустот похоже на двойное ионное облучение с гомогенным зародышеобразованием [183]. Это позволяет в экспериментах поддерживать высокую неравновесную концентрацию ТД с помощью различных видов радиационного излучения.

В экспериментах по радиационному упрочнению в работе [165] части реакторов из нержавеющей стали облучались наряду с протонами с энергией 240

кэВ, также ионами Хе с энергией 6 МэВ при комнатной температуре. Эффект радиационного упрочнения наблюдался в обоих случаях и большее радиационное повреждение приводило к большему увеличению твердости. В работе [183] представлен случай, когда распухание [182] образцов два года облучаемых в ядерном реакторе, было воспроизведено с использованием двойного ионного облучения, примерно за 1 день с точным контролем степени повреждения.

Открытие механизмов радиационного повреждения кристаллической решетки послужило стимулом для развития не только экспериментальных исследований, но и позволило развить теорию радиационно-стимулированной диффузии «Radiation Enhanced Diffusion» [210]. первый эксперимент, подтвердивший, что при облучении активизируются диффузионные процессы был проведен Каллендином, Ридольфо и Пулом в 1952 г. [103]. В облученном кобальте, покрытым слоем золота и помещенным между графитовыми пластинами, наблюдалась диффузия кобальта в графит, что могло быть объяснено диффузией, вызванной радиацией.

При столкновении налетающей частицы с занятым узлом кристаллической решетки, при энергиях, превышающих энергию активации самодиффузии, образуется пара точечных дефектов вакансия-междоузлие, которые затем за счет флуктуаций поля упругих напряжений решетки скачкообразно перемещаются в объеме материала. При достаточно больших энергиях излучения выбитый атом способен далее выбивать атомы решетки, что приводит к каскаду атомных смещений. При встрече ТД разных типов они рекомбинируют, либо, в отдельных случаях, образуя комплексы. Дефекты одного типа способны образовывать устойчивые скопления — кластеры.

Наряду с ТД, могут образовываться линейные (дислокации, вакансион-

ные петли) и пространственные (поры, трещины) дефекты. А также комплексы дефектов типа вакансия-вакансия, вакансия-междоузлие, междоузлие-междоузлие и проч. Как правило, концентрации крупных комплексов дефектов на порядки меньше концентраций самих ТД [118], что позволяет пренебрегать ими при построении моделей, либо рассматривать их как постоянный "фон", при этом ограничиваясь рассмотрением ТД и комплексов только из двух ТД.

Дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования, начиная с 80-х г. прошлого века посвящены, в том числе, получению различных типов когерентных (упорядоченных) структур. Наблюдаемые эффекты в кристаллах при облучении электронами [104, 105], протонами [106–108], ионами [109–111] и нейтронами [111–115] можно разделить на несколько групп: вакансионные поры, кластеры из межузельных и примесных атомов, паттерны из вакансионных и межузельных петель, дефекты упаковки и пузырьки газов.

Образование макроскопических скоплений дефектов кардинально изменяет свойства материала. В случае их упорядочения это может приводить к улучшению электрических, механических и прочих свойств. При этом физические характеристики материала, в том числе коэффициент диффузии, изменяются и начинают зависеть от концентраций ТД, что усложняет прогнозирование поведения материала под облучением и его моделирование. Для практического применения важно научиться получать условия роста сверхрешетки и ее пространственные масштабы.

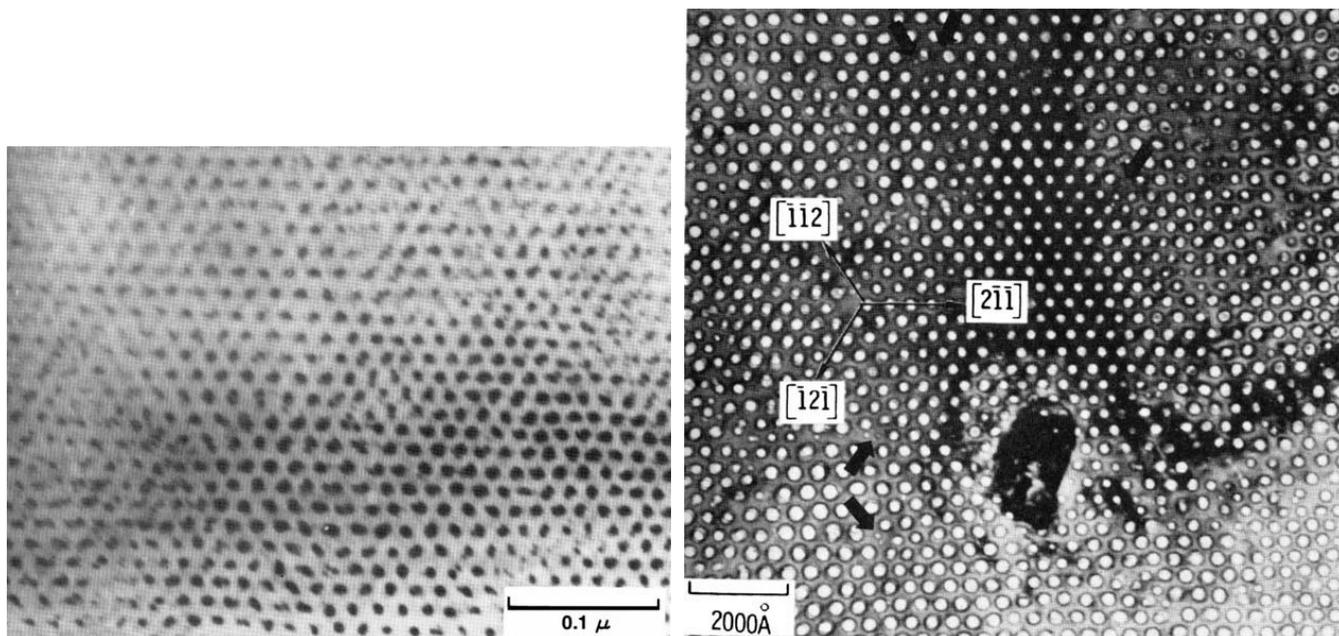


Рис. 1: Сверхрешетки в молибдене ($2 \text{ MeV } N^+$, 100 dpa , $870 \text{ }^\circ\text{C}$) и ниобии ($7.5 \text{ MeV } Ta^+$, 300 dpa , $800 \text{ }^\circ\text{C}$) [210].

1.1.2 Характерные особенности сверхрешеток точечных дефектов и процессов, лежащих в основе их роста

Для разработки модели, описывающей рост когерентных структур под облучением, необходимо выяснить какими характерными особенностями они обладают, что должно быть положено в основу модели и с помощью каких критериев можно оценить ее эффективность. На Рис.1-2 приведены снимки структур, возникающих на поверхности и в объеме кристаллических материалов при облучении их как радиационным, так и лазерным излучением.

В таблице, приведенной на Рис.3 указаны длины волн λ возникающих сверхрешеток и условия облучения. Одной из главных особенностей подобных структур, которая имеет значение для практического применения, является значительное (на порядки) превышение их пространственных масштабов ($\lambda \sim 10^{-8} - 10^{-7} \text{ м}$) размеров постоянной решетки облученного материала ($d \sim 10^{-10} \text{ м}$), т.е. наблюдается разделение масштабов в системе на "большие "

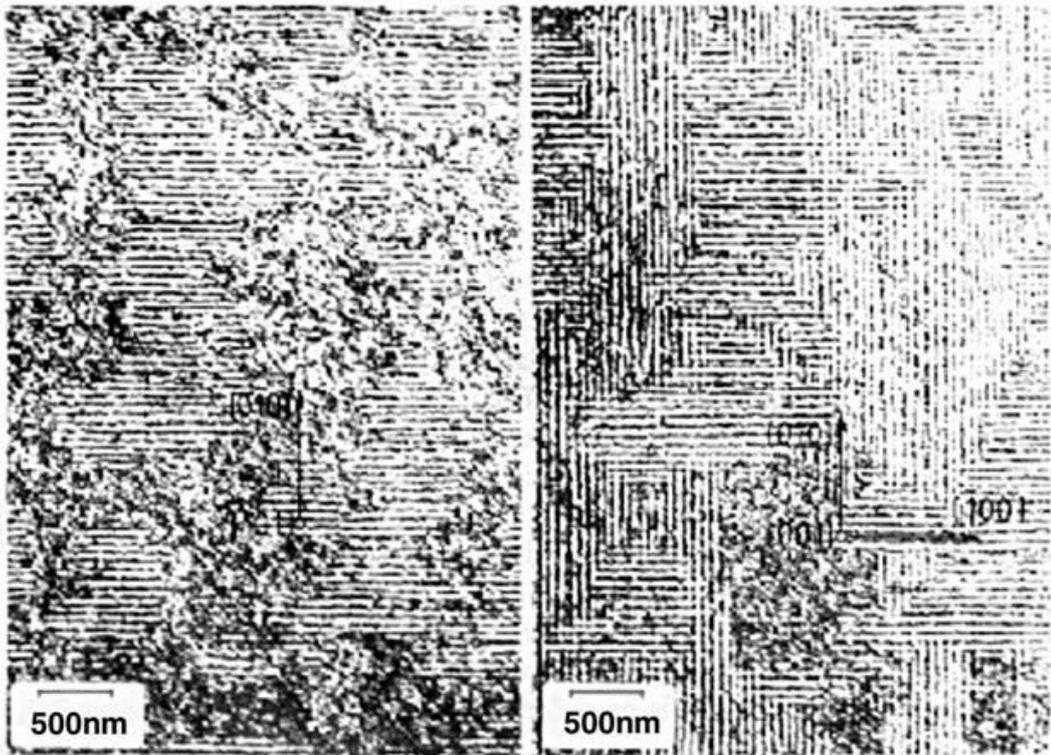


Рис. 2: Периодические структуры из вакансионных петель в меди (p , $2 dpa$) [210].

, описывающие когерентную структуру и "малые" — характеризующие кристаллическую решетку. Из табличных данных следует, что сверхрешетки растут в широком диапазоне энергий налетающих частиц и при различных видах облучения. Т.е. для возникновения условий, при которых наблюдается рост, принципиальное значение имеет высокая концентрация ТД.

Разделение масштабов наблюдается также и во временной области. Характерные времена диффузии в кристаллах лежат в пределах $\tau_{dif} \sim 10^{-13}$ [20]. Воздействие же излучения, необходимое для возникновения сверхрешетки в случае радиационного облучения τ_{rad} — от нескольких секунд до нескольких минут [149, 152–155], а иногда и дней [183]. При лазерном облучении τ_{las} изменяется в широком диапазоне, как правило, это $10^{-6} - 10^{-3}c$ [150–152]. В обоих случаях, характерное время роста макроструктуры на порядки превышает ха-

ракетные времена релаксации.

На Рис.4-(b) приведен график зависимости концентрации кластеров ТД от дозы облучения, показывающий, что с ростом дозы облучения, концентрации выходят на некоторые постоянные значения, характерные для каждого материала, т.е. в системе наблюдается насыщение, соответствующее установлению динамического равновесия между процессами генерации и рекомбинации дефектов. Другой характерной особенностью, связанной с установлением динамического равновесия, является форма профиля концентрации ТД и налетающих частиц по глубине. На Рис. 4. приведены характерные профили, на которых видно, что соответствующие концентрации имеют максимум на некотором расстоянии от границы на которую падает излучение.

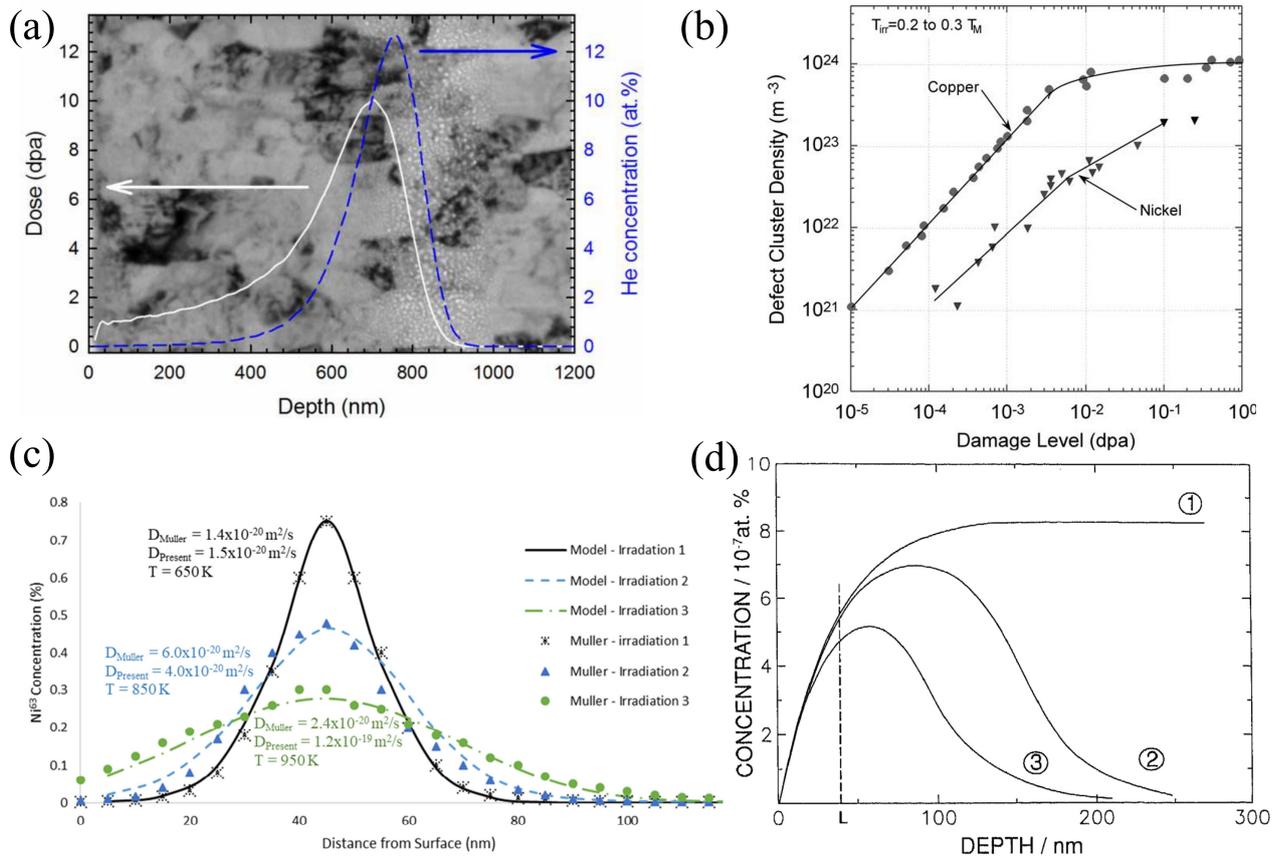
Основным параметром, характеризующим условия возникновения сверхрешетки, является интенсивность внешнего излучения (поглощённая доза). На Рис.5 представлены диаграммы облучения в переменных $T - g$ (температура – поглощенная доза) [212]. Росту сверхрешетки соответствуют определенные области значений переменных T, g . При фиксированной температуре условие роста сводится к диапазону значений поглощенной дозы.

1.2 Модели роста сверхрешеток

Можно выделить два общих подхода к моделированию роста кластеров ТД. Модели первого типа, как правило, не учитывают пространственное распределение кластеров в объеме. Рассматриваются концентрации $n_k(t)$ кластеров, состоящих из k — частиц и система кинетических уравнений не учитывает пространственное распределение их в объеме [141, 214–216]. Интерес представляет направление динамики в такой системе — при каких условиях будет наблю-

Metal	Irradiation conditions	Cluster density $\times 10^{-22}$ (m^{-3})	Experimental λ (nm)
Ni [66]	5 MeV Ni+; 280-450°C; 5×10^{-3} dpa s^{-1} ; 15 dpa	4	40
Ni [67]	5 MeV Ni+; 280°C; 5×10^{-3} dpa s^{-1} ; 1-15 dpa	4	35
Ni [67]	5 MeV Ni+; 370°C; 5×10^{-3} dpa s^{-1} ; 1-15 dpa	3.3	40
Ni [67]	5 MeV Ni+; 423°C; 5×10^{-3} dpa s^{-1} ; 1-15 dpa	2	45
Ni [68]	2.8 MeV Ni+; 350-400°C; 7×10^{-4} dpa s^{-1} ; 13 dpa	1-3.5	30-42
	2.8 MeV Ni+; 375-425°C; 7×10^{-2} dpa s^{-1} ; 13 dpa	2.4-6.5	30-42
Ni [69]	0.5 MeV Ni+; 450°C; 2×10^{-3} dpa s^{-1} ; 24 dpa	5	40-45
Ni [70]	14 MeV Ni+; 200°C; $0.15 - 1.5 \times 10^{-3}$ dpa s^{-1} ; 0.7-7 dpa	2	40
	14 MeV Cu+; 400°C; $1.5 - 5 \times 10^{-3}$ dpa s^{-1} ; 30-100 dpa	2.2	41
Ni [71]	14 MeV Ni+; 400°C; $0.6 - 6 \times 10^{-3}$ dpa s^{-1} ; 5-50 dpa	5	35
Ni [72]	3 MeV H+; <100°C; 1×10^{-5} dpa s^{-1} ; 1.1 dpa	-	48
Ni [28]	Fission neutrons; 300°C; 5×10^{-7} dpa s^{-1} ; 1 dpa	>1	35
Ni [73]	Fission neutrons; 260°C; 1×10^{-6} dpa s^{-1} ; ≈ 1 dpa	-	-
Ni [74]	Fission neutrons; 230°C; 9×10^{-7} dpa s^{-1} ; 0.1 dpa	19	30-60
Ni [74]	Fission neutrons; 230°C; 9×10^{-7} dpa s^{-1} ; 0.25 dpa	20	45
Cu [72]	3 MeV H+; <100 °C; 1×10^{-5} dpa s^{-1} ; 0.1 dpa	-	25-90

Рис. 3: Экспериментальные данные по росту сверхрешеток [210]

Рис. 4: Профили по глубине: *a* — поглощенная доза [212], *b* — концентрация кластеров ТД [210], *c* — концентрация примеси [211], *d* — концентрация вакансий [213].

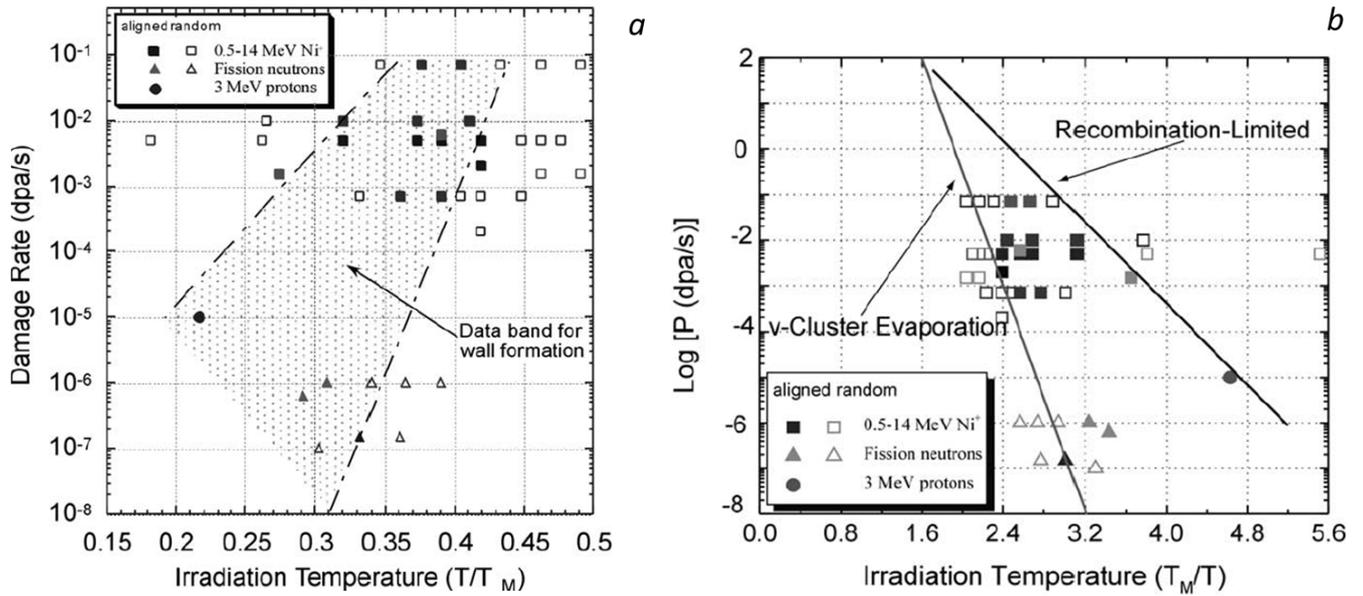


Рис. 5: Диаграммы облучения с формированием кластеров в никеле (а) и меди (b) [210].

даться увеличение концентрации кластеров с большими значениями k за счет поглощения кластеров меньшего размера. Величиной, характеризующей кластер, является критический радиус, начиная с которого скопление становится устойчивым [25, 28, 34].

Недостатком данного подхода является то, что в нем рассматривается заданное распределение кластеров ТД по объему, а случай эволюции неоднородного распределения приводит к значительным сложностям и м.б. проанализирован лишь численно. При том, что во многих случаях представляет интерес именно пространственное распределение кластеров.

Основу моделей второго типа [210, 211, 217] составляют уравнения диффузии ТД. При этом может рассматриваться как перенос ТД в области одного кластера (при заданном их пространственном распределении), так и задача вычисления распределений концентрации в масштабах растущей сверхрешетки.

При составлении уравнений модели необходимо учитывать взаимодействие

различных видов ТД между собой, а также с дефектами больших размерностей (атомы примесей, дислокации и дислокационные петли, трещины, границы зерен). Учет этого взаимодействия выражается в наличии нелинейных слагаемых в правых частях уравнений (прежде всего рекомбинационные члены) и в зависимости коэффициентов диффузии ТД от соответствующих концентраций. Пространственные дефекты, как правило, считаются неподвижными и либо описываются стационарным распределением (зачастую однородным), либо характеризуются некоторым пространственным параметром (радиус петли, скопления и т.д.), для которого записывается отдельное уравнение. При этом кластеры рассматриваются не как самостоятельные структуры, чье распределение задано, а как область с повышенной концентрацией ТД одного типа.

1.2.1 Распад пересыщенных твердых растворов

Одним из механизмов упорядочения точечных дефектов в облученных кристаллах, при их высокой неравновесной концентрации, является распад пересыщенного твердого раствора [23, 24]. В этом случае кластеры образуются из атомов примесей и могут выступать в качестве стоков для собственных точечных дефектов, что может быть использовано для подавления явления радиационного распухания.

В теории распада пересыщенного твердого раствора выделяют два механизма: спинодальный распад и зарождение новой фазы в результате флуктуации концентрации примеси [34].

Спинодальный распад сопровождается уменьшением свободной энергии и не требует зарождения новой фазы — раствор распадается на два твердых раствора с близкими параметрами решеток.

Во втором случае обычно выделяются несколько стадий формирования кластеров: стадия зародышеобразования, стадия роста и стадия коалиценции. Макроскопическое описание упорядочения возможно лишь на последней стадии, когда зародыши достигают достаточно больших размеров. В этом случае рост можно описать уравнениями кинетики ТД [25].

Кластер рассматривается как переходный этап формирования преципитатов новой фазы. Число частиц в кластере (размер), вычисляется из условия равенства химических потенциалов в точке данного фазового перехода: $\mu_c(i) = \mu_p(i)$, где i — число частиц, а химические потенциалы имеют вид: $\mu_{c,p}(i) = \frac{\partial G_{c,p}}{\partial i}$. Выражение для свободной энергии зависит от геометрии кластера и в общем случае может быть записано так: $G(i) = -\nu(i)i + \sigma(i)i^{\gamma(i)}$ [34].

Более сложный анализ макроскопического роста [33], проводится с учетом некоторых ограничивающих рост факторов, в частности, с учетом диффузии атомов матрицы. В этом случае записывается простейшее уравнение диффузии атомов: $\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = D\Delta C(r,t)$, с постоянным коэффициентом диффузии D . Предполагается, что концентрация частиц внутри кластера постоянна и равна концентрации на границе ($r = r_i$) раздела. Вне кластера (на бесконечности), концентрация равна концентрации примеси в пересыщенном растворе. Величиной, описывающей рост, является скорость перемещения границы кластера:

$$\nu = \frac{dr_i}{dt} = \frac{D}{C_\beta - C_\alpha} \frac{\partial C}{\partial r_i}.$$

В работе Зинера [26] было получено такое выражение для скорости роста: $r_i = q_i \sqrt{Dt}$. Параметр q_i вычисляется из трансцендентного уравнения:

$$\frac{C_\beta - C_\alpha}{C_m - C_\alpha} (q_i)^i = 2/\sqrt{\pi} \left[1 - \operatorname{erf}(q_i/2\sqrt{Dt}) \right]^{-1} \exp(-q_i^4/4).$$

В результате распада, твердый раствор превращается в области, с равновесным распределением концентрации.

На более поздней стадии распада характерной величиной является критический радиус выделений R_c , при котором они находятся в равновесии с пересыщенным твердым раствором. Исследования Лифшица и Слезова [27, 28], показали, что на данном этапе уменьшение свободной энергии связано с взаимным поглощением выделений новой фазы.

Система уравнений, описывающих распад, для разных типов диффузионного переноса, имеет вид:

$$\begin{aligned} f_t + \frac{\partial}{\partial R} \left(f \frac{dR}{dt} \right) &= 0, \\ \frac{dR}{dt} &= \frac{D_n a^{n-3}}{R^{n-3}} \left(\Delta - \frac{\alpha}{R} \right), \\ \Delta_0 + q_0 &= \delta + q, \end{aligned}$$

где R — радиус выделений, f — функция распределения выпавшей фазы по размерам, q, q_0 — количество атомов, $\Delta = \bar{c}_0 - c_\infty$ — пересыщение. Анализ асимптотики записанной системы приводит к таким результатам:

$$R_k^3 = R_{k0}^3 + \frac{4}{9} D \alpha t, \quad \Delta \sim t^{-1/3}.$$

Т.е. объем среднего размера частиц линейно растет со временем.

1.2.2 Кинетические модели роста кластеров точечных дефектов

При кинетическом подходе кластер рассматривается как скопление дефектов определенного типа, размер которого (число частиц-мономеров i в нем) увеличивается за счет поглощения мономеров и скоплений меньшего размера. Каж-

дому i соответствует определенная концентрация $N_i(t)$ — число кластеров такого размера в единице объема. Поскольку кластер может состоять из огромного числа частиц, то анализ системы кинетических уравнений, как правило нелинейных, представляет в общем случае сложную задачу. Для ее упрощения проводится усреднение числа частиц в кластере, либо совершается переход от концентраций к функции распределения скоплений по размерам. При этом геометрия кластера, от которой зависят коэффициенты модели, считается заданной и не изменяется в процессе роста.

Рассмотрим вначале подход основанный на сведении системы уравнений, описывающих динамику концентрации кластеров ТД заданного размера $N_i(t)$, к системе уравнений, содержащей уравнение Фоккера-Планка. Данный переход осуществляется следующим образом [34]:

$$N_{i\pm 1}(t) = C(i \pm 1, t) \approx C(i, t) \pm \frac{\partial C(i, t)}{\partial i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C(i, t)}{\partial i^2}.$$

В простейшем случае кинетическое уравнение записывается в таком виде:

$$\frac{\partial C(i, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial i} \left[(k(i)N(t) - g(i)) C(i, t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial i^2} \left[(k(i)N(t) + g(i)) C(i, t) \right], \quad (1)$$

где $k(i)$ — кинетический коэффициент (определяется режимом роста), $g(i) = g_i \approx g_{i+1}$ — скорость захвата и выброса мономера из центра зарождения, $N(t)$ — концентрация свободных частиц.

Поведения решения уравнения (1), определяется величиной $i_c^{\gamma-1}(t) = \frac{kT}{\gamma\sigma} \ln(N(t)/N_E)$. Рост скопления будет происходить при условии $i > i_c$.

Решение уравнения Фоккера-Планка сводится к отысканию зависимости среднего значения $\langle i \rangle$ и дисперсии w числа частиц от времени, при заданной

функции распределения по размерам:

$$C(i, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi w^2(t)}} \exp \left[-\frac{(i - \langle i \rangle(t))^2}{2w^2(t)} \right].$$

Для решения уравнения используются численные схемы [31], [32]. Предполагается, что димеры, тримеры и т.д. неподвижны по сравнению с мономерами.

Описание системы состоящей из мономеров и скоплений, может быть сведено [29] к системе двух уравнений, описывающих среднее число частиц в скоплении $\langle i \rangle(t)$ и концентрацию мономеров $N(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle i \rangle}{dt} &= k_D(N(t) - N_e)(\langle i \rangle + m)^\alpha \\ \frac{dN}{dt} &= -k_D N_c^{1-\alpha}(t)(N(0) + mN_c(t) - N)^\alpha. \end{aligned}$$

Здесь N_e — равновесная концентрация мономеров, N_c — концентрация центров зарождения.

Как правило, данная система решается численно, но в некоторых случаях удается получить аналитическое решение [34]. В частности, предполагается, что концентрация центров зарождения постоянна. Для $\alpha = 1$ (цилиндрический кластер), получается такое решение:

$$\frac{N(t) - N_e}{N(0) - N_e} = \frac{N(0) + mN_B - 2N_e}{N(0) - N_e + (mN_c - N_e) \exp((N(0) + mN_B - 2N_e)k_{dt})}.$$

В общем случае $\alpha \in [0, 1)$ получается закон изменения среднего размера кластеров со временем [30] : $\langle i \rangle \sim t^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}$.

На стадии коалесценции [34] в уравнении роста одиночного скопления:

$$\frac{di}{dt} = \tilde{k}i^\lambda N(t) \frac{\gamma\sigma}{KT} \left(\frac{1}{i_c^{1-\gamma}} - \frac{1}{i_c^\gamma} \right) \quad (2)$$

переходят к радиусу скопления $R = ai^{1/d}$. Решение уравнения (2), позволяет вычислить зависимость критического радиуса скоплений от времени $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{d-d\lambda+1}}$, где d — размерность кластера, а параметр λ определяется конфигурацией.

Функция распределения скоплений $\phi(u, \tau)$ записывается в неявной форме:

$$\phi(u, \tau) = -A \exp\left(-\frac{\tau d}{p+1}\right) \frac{d}{(p+1)\nu_u} \exp\left(\tau(u) \frac{d}{p+1}\right),$$

$$\tau = (p+1) \ln R_c(t), \quad u = R(t)/R_c(t).$$

1.2.3 Модели радиационно-стимулированного роста кластеров из атомов примесей и скоплений точечных дефектов

В модели роста скоплений наряду с кинетическим уравнением для их концентрации может рассматриваться уравнение для числа частиц i в отдельном скоплении.

Рассмотрим эту модель на примере задачи о формировании вакансионных пор. В этом случае уравнение Фоккера-Планка (1) может быть сведено [34] к уравнению среднего числа частиц в кластере. В итоге получаем такую систему уравнений:

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} = G - K_v N_c N_v i^\alpha + D_v \Delta N_v,$$

$$\frac{\partial i}{\partial t} = K_v N_v i^\alpha + D_{cl}(i) \Delta i.$$

Здесь G — скорость генерации вакансий внешним источником.

Анализ подобных систем, как правило, производится в стационарном режиме $\frac{\partial N_v}{\partial t} = 0$, вблизи средних значений $i^s(t)$, N_v^s .

Далее ищется решение для малых отклонений $\delta N_v(r)$, $\delta i(r, t)$ от средних значений, что приводит к линеаризации системы уравнений и поиску решения в виде преобразований Лапласа и Фурье. Из условия $\frac{\partial \lambda(k_m)}{\partial k_m} = 0$, вычисляется пространственный период решетки:

$$d = \frac{2\pi}{k_m} = \left[\left(\frac{D_v}{D_{cl}(i^s)\alpha K_v^2 N_c N_v^s (i^s)^{2\alpha-1}} \right)^{1/2} - \frac{1}{\alpha K_v N_v^s (i^s)^{\alpha-1}} \right]^{-1/2}.$$

В некоторых случаях рост кластеров может происходить за счет скопления атомов примеси в пересыщенном твердом растворе, а концентрацией собственных ТД можно пренебречь [40].

На основе уравнения непрерывности атомов примеси выводится уравнение Кана-Хилларда:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M\Delta \left(\frac{\partial f}{\partial c} - \lambda^2 \Omega \Delta c \right).$$

Здесь M — подвижность атомов, а плотность свободной энергии f имеет вид: $f(c) = \Omega c(1-c) + KTc \ln c + KT(1-c) \ln(1-c)$.

Изначально полагается, что кластер имеет сферическую симметрию, тогда концентрация c зависит от одной пространственной переменной r . Граничные условия записываются таким образом [41] $\frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=0, r_{max}} = 0$, $j_r(r, t) \Big|_{r=0, r_{max}} = 0$, где r_{max} — граница рассматриваемой области вещества, значительно превосходящей размеры кластера.

На основе уравнения Кана-Хилларда исследуются различные варианты поведения кластера — рост, распад, сохранение размера.

Различные режимы поведения кластера регулируются соотношением между химическими потенциалами матрицы и внутри кластера. Рост кластера наблюдается, если химический потенциал $\mu = \frac{\delta f}{\delta c}$ примеси внутри кластера ниже, чем в матрице. Это приводит к снижению свободной энергии раствора. Граница кластера r_c находится из условия:

$$\left. \frac{\partial^2 c(r, t)}{\partial r^2} \right|_{r=r_c} = 0.$$

Т.е. радиус кластера соответствует точке перегиба концентрации. Растворению кластера соответствует химический потенциал выше, чем в матрице.

Рост кластеров прекращается, когда концентрация атомов примеси в матрице истощается, либо когда образуется кластер критического размера (метастабильное состояние) — в обоих случаях химический потенциал имеет стационарное распределение. В простейшем случае переходная область между кластером и матрицей не имеет протяженности, что не соответствует реальности. Для учета переходной области вводится затухающее на некотором расстоянии от центра кластера начальное распределение примеси.

В качестве начального распределения концентрации внутри кластера в [41] предложено такое распределение (Рис.6):

$$c_0(r) = \frac{c_B^\beta + c_B^\alpha}{2} - \frac{3}{4}(c_B^\beta - c_B^\alpha) \left[\frac{2(r - R)}{l} - \frac{8}{3} \frac{(r - R)^3}{l^3} \right],$$

учитывающее конечность ширины переходного слоя l .

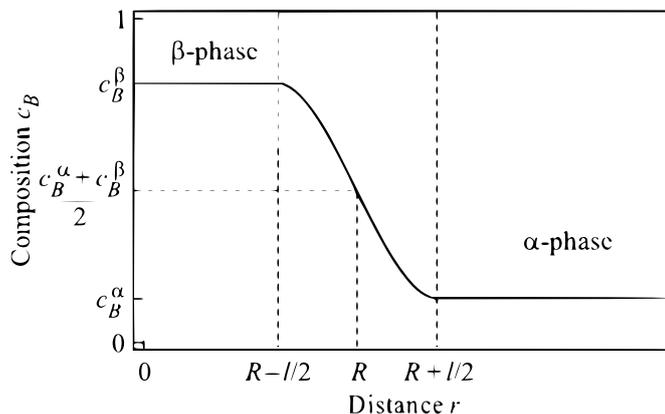


Рис. 6: Схематическое изображение профиля концентрации на границе раздела между матрицей и сферическим выделением второй фазы [41].

1.2.4 Локализованные структуры и концентрационные неустойчивости в системах с диффузией

Наиболее распространенной задачей при анализе систем уравнений, описывающих кинетику скоплений дефектов, является выяснение условий, при которых в системе возникают разного рода неустойчивости с помощью методов качественной теории дифференциальных уравнений.

При этом кинетические уравнения, рассмотренные выше могут быть дополнены уравнениями, учитывающими различные поля, например, температуры или деформации. Для поиска соответствующих локализованных решений рассматривается либо случай однородного по пространству распределения, либо вводятся специальные замены переменных, в частности, волновая переменная, позволяющие свести исходную систему уравнений в частных производных к системе ОДУ.

Неоднородное и переменное по времени поле температуры, вызванное разогревом за счет поглощенного излучения, а также энерговыделением за счет рекомбинации ТД учитывается введением в рассмотрение уравнения теплопроводности. Простейший вариант подобной модели рассмотрен в [42], где для

пространственно-однородного распределения концентраций и температуры получены условия возникновения автоколебаний в тонкой пленке, находящейся в термостате. Для периодических по времени решений найдены области на диаграмме K, T_i , где K — скорость генерации ТД, а T_i — температура термостата. При увеличении энерговыделения в результате взаимной рекомбинации ТД, частота автоколебаний понижается, как и значение K , необходимое для возникновения автоколебаний.

В качестве управляющего параметра, регулирующего режимы роста локализованных решений наряду со скоростью генерации, которая в общем случае сама зависит от концентрации ТД, могут выступать и другие параметры, такие как коэффициент диффузии [47], скорость рекомбинации и проч. [46, 48]

В случае зависимости источника ТД от координат и времени, связанной как с неоднородным распределением потока внешнего излучения [44], так и с взаимодействием частиц излучения с узлами решетки и самими дефектами, роль управляющего параметра могут играть коэффициенты диффузии. В работе [43] рассматривается подобная интерпретация системы типа "реакция-диффузия", в которой $u(x, t)$, $w(x, t)$ — это концентрации ТД и частиц излучения. Одно из уравнений описывает диффузию ТД с нелинейной рекомбинацией [45] и генерацией излучением, а второе — диффузию частиц излучения с учетом рождения ТД:

$$u_t = \varepsilon^2 u_{xx} + 2(u - u^3) + w,$$

$$\tau w_t = Dw_{xx} - u + \beta.$$

Локализованные в пространстве и периодические по времени решения данной системы реализуются при условиях $0 < \varepsilon \ll 1$, $D \gg 1$ — т.е. при быстрой

диффузии частиц источника и медленной диффузии ТД.

Если коэффициент диффузии является функцией концентрации, то рост локализованной структуры может происходить в некоторой области пространства, где коэффициент диффузии, как функция концентрации, удовлетворяет условию роста. При этом сам коэффициент может принимать и отрицательные значения.

В работах [56–61] исследованы волновые режимы образования локализованных структур в системе с одним типом дефектов и переменным источником. В частности в [56] в случае линейной диффузии одного типа дефектов для скорости их генерации предложена следующая формула:

$$g(n) = G_0 \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(E_{f0} - 2zU_0 \frac{\Omega_0 n}{1 + \Omega_0^2 n^2} \right) \right],$$

где зависимость $g(n)$ учитывает влияние точечных дефектов на их энергию активации, в приближении ближайших "соседей" .

Соответствующее уравнение диффузии ТД имеет вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g(n) + D \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} - \frac{n}{\tau_d}. \quad (3)$$

Качественный анализ показывает, что оно имеет три стационарные точки (Рис.7). При этом концентрации n_1 и n_3 соответствуют двум устойчивым состояниям, т.е. описывают две фазы — низкодефектную и высокодефектную. Локализованное же решение описывает распространение волны переключения концентрации.

Случай модуляции управляющего параметра (скорость генерации ТД, энергия взаимной рекомбинации, коэффициент диффузии) полями упругих дефор-

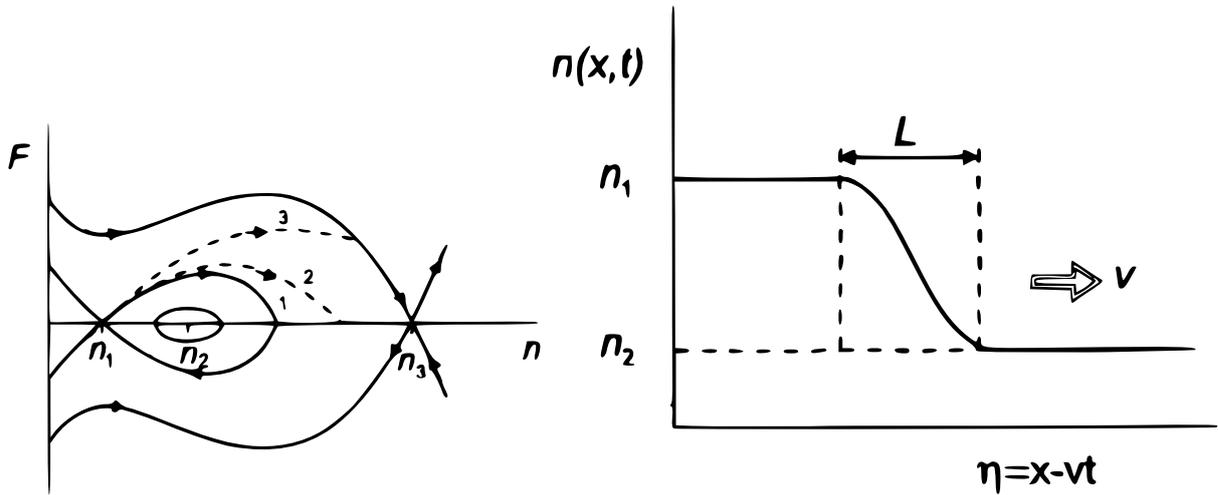


Рис. 7: Фазовый портрет системы (3) и решение, описывающее волну переключения концентрации ТД [57].

маций кристаллической решетки и температурой подробно рассмотрен в работах В.И. Емельянова. В [49–54] показано, что экспоненциальный рост флуктуаций концентраций ТД обусловлен силами, пропорциональными градиентам концентрации и температуры, при этом могут образовываться различного рода когерентные структуры — сверхрешетки, кольца, полосы, вакансионные поры. Тип возникающей неустойчивости зависит от того, какой параметр среды модулируется полем деформации.

В качестве дефектов могут выступать как вакансии и междоузлия (при радиационном облучении), так и электронно-дырочные пары (лазерное облучение полупроводника). Соответствующие модели основана на следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} &= \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x}, \\ \frac{\partial n_j}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\frac{D_j n_j}{k_B T} \nabla \mu_j \right) &= G_j - L_j, \\ T \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} J_q &= H_q - H_p. \end{aligned}$$

Первое уравнение описывает динамику упругой среды (ρ — плотность, u_i — компоненты вектора деформаций, σ_{ik} — компоненты тензора напряжений), второе — диффузию точечных дефектов (N_j — концентрации, μ_j — химические потенциалы, G_j , L_j — скорости генерации и рекомбинации ТД), третье уравнение — теплопроводности (J_q — плотности теплового потока, H_q и H_p учитывают разогрев и потери тепла). При этом разогрев может быть как внешним, так и в результате рекомбинации ТД. Т.е. в общем случае слагаемые в правой части третьего уравнения зависят от концентраций ТД.

Величины μ_j , σ_{ik} , S вычисляются после задания плотности свободной энергии. Далее проводится анализ устойчивости стационарного решения приведенной системы уравнений. Для случая, когда поверхность кристаллического материала облучается лазерным излучением, получены оценки времени образования структуры $\tau \sim 2c$ и ее период $d \sim 3 \cdot 10^{-3}$ см для экспериментальных данных из работы [55].

Автоколебаниям концентрации ТД в тонких пленках посвящена работа [42]. В этом случае необходимо учитывать влияние неоднородного распределения температуры на кинетику ТД, поэтому наряду с уравнениями для концентраций ТД, рассматривается уравнение теплопроводности, с учетом энерговыделения за счет рекомбинации ТД. Диффузия дефектов не учитывается. Рассматривается пространственно-однородное распределение ТД и температуры внутри пластины, помещенной в термостат с температурой T_i и облучаемой пространственно-однородным потоком излучения. С помощью качественной теории дифференциальных уравнений найдены области на фазовой диаграмме в переменных K , T_i (K — скорость генерации ТД), отвечающие периодическим по времени решениям. Показано, что при увеличении энерговыделения в ре-

зультате взаимной рекомбинации ТД, частота автоколебаний понижается, как и значения K , необходимое для создания колебаний.

1.2.5 Нелинейная диффузия точечных дефектов

Наличие температурных, деформационных и прочих неустойчивостей не является необходимым условием для упорядочения элементов среды в системах реакция-диффузия. В биологии активно используются модели с коэффициентом диффузии клеток, зависящим от их концентрации, что приводит к группировке элементов в упорядоченные структуры [70–75]. При достаточно большом количестве клеток такую среду можно рассматривать как непрерывную и ввести концентрацию клеток $U(\mathbf{r}, t)$ и соответствующий коэффициент диффузии, который, как функция концентрации, может принимать отрицательные значения — это позволяет провести аналогию между диффузией клеток и диффузией ТД.

Простейший вариант модели, с одним сортом клеток и одной пространственной переменной, рассматривается в [70, 76]:

$$U_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(U) \frac{\partial U}{\partial x} \right) + R(U).$$

Где для коэффициента диффузии и кинетического члена предложены такие формулы:

$$D(U) = D_i (1 - 4U + 3U^2) + D_g (4U - 3U^2), \quad D_{i,g} = \text{const};$$

$$R(u) = \lambda_g U(1 - U) + (\lambda)i - \lambda_g - K_i + K_g)U(1 - U)^2 - K_g U.$$

Здесь D_i — коэффициент диффузии изолированного элемента (клетки), а D_g

— находящего в группе. Данный выбор коэффициента диффузии, не является единственно возможным, в [77] рассматривается уравнение с $D(u) = D(U/K)^n$, $D, K, n = \text{const} > 0$. А в [78] введено более общее выражение:

$$D(U) = 1 - 2U(1 - U) \frac{f'(U)}{f(U)},$$

где $f(U)$ — функция связки, определяющая предпочтительное место, которое займет элемент в зависимости от своего окружения. В работе рассматриваются модели с $f(U) = e^{\pm AU}$, $f(u) = e \exp(A(U - B)^2)$ $A, B = \text{const} > 0$;

При этом полагается, что "эффективный" коэффициент диффузии $D(U)$ может принимать отрицательные значения в некотором интервале концентраций $\alpha < U < \beta$ [70] и описывать "отрицательную" диффузию.

Как в простейшем случае, так и в случае системы из нескольких компонент [70, 73], с помощью численного моделирования и исследования асимптотик решения, показано наличие в подобных системах решений, описывающих группировку элементов в крупномасштабные упорядоченные массивы, а также наличие автоволновых решений соответствующих уравнений.

В физике твердого тела на зависимость коэффициента диффузии от концентрации, обращали внимание еще в ранних работах 50-60 х г., посвященных росту преципитатов. В частности в работе [79], посвященной исследованию параметра роста преципитатов, зависимость коэффициента диффузии от концентрации $0 < v < 1$ определяется следующей функцией: $g(v) = \frac{1}{1-\alpha v}$, $\alpha = \text{const} > 0$.

В работе [80] исследуется диффузия в многокомпонентном слое адсорбата на поверхности монокристалла. Предполагается, что диффузия протекает по вакансионному механизму. Основное внимание уделено вычислению компонент

матрицы диффузии $D_{\alpha pr}$:

$$\frac{\partial \theta_p}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{r=1}^{s-1} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D_{\alpha pr} \frac{\theta_r}{\partial x_\alpha} \right), \quad p = \overline{1, s-1},$$

где θ_p — концентрации компонент адсорбата.

При этом, компоненты $D_{\alpha pr}$ являются функциями θ_k , $k = p = \overline{1, s-1}$ [81].

Предполагается, что диффузия протекает по вакансионному механизму. С помощью малой распределенной модели, вычисляются вероятности миграции компонент и, в конечном счете, компоненты $D_{\alpha pr}$. Показано, что в случае однокомпонентного слоя коэффициенты диффузии не зависят от концентраций, в более общем случае, при отсутствии латерального взаимодействия, коэффициенты $D_{\alpha pr}$ линейно зависят от концентраций:

$$D_{\alpha pr} = K_{pM} \left(\theta_p + 1 - \sum_{j=1}^{s-1} \theta_j \right), \quad r = p;$$

$$D_{\alpha pr} = K_{pM} \theta_p, \quad r \neq p.$$

Дальнейшее изучение зависимости $D_{\alpha pr}$ показало наличие областей, где компоненты $D_{\alpha pr}$ терпят разрыв, как функции θ_i , а также могут принимать исчезающе малые значения. Наличие разрывов интерпретируется как переходы порядок-беспорядок, а второй случай соответствует образованию двух фаз (газ-жидкость, жидкость-кристалл, газ-кристалл). Характерной особенностью вычисленных зависимостей, в том числе, является то, что коэффициенты диффузии могут принимать отрицательные значения. Зависимость коэффициента диффузии типа $D(n) \sim n^\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}$ используется во многих работах [73, 77, 82–88] и характерна как для диффузии точечных дефектов, так и для задач диффузии примесей в полупроводниках [84], газах, жидкостях, полимерах и проч.

1.3 Методы анализа нелинейных моделей

Зависимость от концентрации коэффициента диффузии, а также коэффициентов генерации и рекомбинации приводит к тому, что уравнения диффузии ТД становятся нелинейными и для отыскания их аналитических решений необходимы специальные методы.

Для поиска точного решения и упрощения уравнения существуют различные точечные и контактные преобразования переменных [62], варианты обобщенного разделения переменных [143–145], метод обратной задачи [235, 236], преобразования Бэклунда и проч [237, 238]. При анализе сложных нелинейных уравнений или для поиска новых решений часто применяют комбинирование нескольких преобразований.

1.3.1 Точечные и контактные преобразования

Если в уравнение входит неизвестная функция двух независимых переменных $u(x, y)$, то точечное преобразование можно записать в виде: $x = X(\xi, \eta, \psi)$, $y = Y(\xi, \eta, \psi)$, $u = U(\xi, \eta, \psi)$. В общем случае, после преобразования, сама неизвестная функция рассматривается как одна из независимых переменных. Дифференцированием приведенных выражений вычисляются соответствующие производные от первоначальной функции u , которые выражаются через производные от новых переменных. Порядок уравнения при этом не изменяется.

Усложнением точечных преобразований являются контактные преобразования, отличие которых заключается во введении в качестве независимых переменных производных от неизвестной функции [62]. Наиболее известными типами таких преобразований являются преобразования Лежандра и Эйлера [35]. Преобразование Эйлера задается следующими формулами: $u(x, y) + \psi(\xi, \eta) =$

$x\xi$, $x = \psi_\xi$, $y = \eta$. Откуда видно, что в качестве замены координаты выбрана производная от искомой функции. Преобразование Лежандра имеет следующий вид: $u(x, y) + \psi(\xi, \eta) = x\xi + y\eta$, $x = \psi_\xi$, $y = \psi_\eta$, при этом исходное уравнение:

$$F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}) = 0$$

преобразуется в некоторое другое уравнение:

$$F(\psi_\xi, \psi_\eta, \xi\psi_\xi + \eta\psi_\eta - \psi, \xi, \eta, J\psi_{\eta\eta}, -J\psi_{\xi\eta}, J\psi_{\xi\xi}) = 0,$$

где $1/J = \psi_{\xi\xi}\psi_{\eta\eta} - \psi_{\xi\eta}^2$ — якобиан преобразования. Приведенные преобразования позволяют не только получать частные решения, но и в случае линеаризации исходного уравнения, решить задачу Коши.

Присутствие якобиана в формулах контактных преобразований ограничивает их использование, т.к. упрощение исходного уравнения, как правило, происходит, когда J сокращается после преобразования. Для этого необходимо, чтобы каждый член уравнения содержал производную старшего порядка. В случае уравнения диффузии, которое принадлежит к параболическому типу, данные преобразования имеют смысл только в стационарном случае.

Нелинейные уравнения типа диффузии и теплопроводности с коэффициентами диффузии/теплопроводности, зависящими от неизвестной функции:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla (D(\theta) \nabla \theta) + J(\theta), \quad (4)$$

исследовались с конца 50-х годов прошлого века [125–128, 130].

Определение зависимости $D(\theta)$ до сих пор является сложной задачей. Малое

количество экспериментальных данных в этом направлении, особенно в прошлом, тормозило развитие идеи нелинейной диффузии, но методы решения подобных уравнений продолжали развиваться и находили применение, в том числе, в работах по изучению уравнения нелинейной теплопроводности [131–134].

Отдельной задачей является поиск преобразований решений уравнения (4), относительно которых оно остается инвариантным [239].

В работах Э. И. Семенова [68, 69] для решений $u(x, y, t)$ двумерного УБД:

$$u_t = \Delta \ln u$$

найден преобразование следующего типа: $u(x, y, t) = \rho(x, y)v(\xi, \eta, t)$, $\rho = |\nabla\eta|^2$. Здесь $\xi(x, y)$, $\eta(x, y)$ — сопряженные гармонические функции, удовлетворяющие условиям Коши-Римана: $\xi_x = \eta_y$, $\xi_y = -\eta_x$. На основе свойств функций $\xi(x, y)$, $\eta(x, y)$ доказывается, что новая функция $v(\xi, \eta, t)$ также удовлетворяет УБД. Развитый подход обобщается на случай системы n уравнений: $u_{i,t} = \delta \ln u_i + f_i(u_1, u_2, \dots, u_m)$, ($i = \overline{1, n}$, $m \leq n$), если функции f_i обладают следующим свойством: $f(\lambda u_1, \lambda u_2, \dots, \lambda u_m) = \lambda f_i(u_1, u_2, \dots, u_m)$.

Использование свойств гармонических функций позволяет редуцировать исходное двумерное УБД к его одномерному аналогу. Если $u(x, y, t)$ — некоторое решение УБД, то преобразование $u = (\eta_x^2 + \eta_y^2)v(\eta, t)$ приводит к одномерному УБД для функции v : $v_t = \frac{\partial}{\partial \eta^2} v$. Также справедливо и обратное — если известно решение одномерного УБД — $v(\eta, t)$ и некоторая гармоническая функция $\eta(x, y)$, то можно построить решение двумерного УБД.

J.R. Philip в своих работах [125] рассматривает одномерное УНД (4) с $J = (\theta)$ при заданных начальных и граничных условиях. Для решения используется простая подстановка в виде автомодельной переменной, с последующей

сменной переменных, в которой искомая функция становится независимой переменной: $\phi = xt^{-1/2} = F(\theta)$. После подстановки в (4) находится выражение для коэффициента диффузии, как функции θ , при котором уравнение выполняется:

$$D(\theta) = -\frac{1}{2} \frac{dF}{d\theta} \int_0^\theta F d\theta.$$

Далее в работе ищутся такие формы $F(\theta)$, другими словами $D(\theta)$, при которых решение удовлетворяет заданным условиям. В частности уже в этой работе введена зависимость $D(\theta) = D_0/(1 - \lambda\theta)$.

Подход, основанный на введении автомодельной переменной широко использовался для решения подобных задач [129]. В [254] рассмотрены режимы образования локализованных структур с обострением для уравнения типа УНД со степенными зависимостями коэффициента диффузии и нелинейного члена: $u_t = (u^\sigma u_x)_x + \alpha u^{\sigma+1} + \delta u$; $\sigma > 0$. Локализация структуры происходит на фундаментальной длине $L_s = \sqrt{(\sigma + 1)\alpha^{-1}/\sigma}$, которая не зависит от δ — т.е. нелинейный член в правой части УНД не влияет на пространственную структуру решения.

В более общем виде, автомодельное решение, является одним из вариантов метода обобщенного разделения переменных — когда искомая функция представляется в виде выражения, содержащего функции, которые зависят от переменных, которые сами являются линейно независимыми функциями исходных переменных:

$$\theta(x, t) = t^\beta f(xt^\gamma); \quad \theta(x, t) = \phi(t)^\beta f(x\psi(t)).$$

Метод разделения переменных, применяемый при решении линейных уравнений, позволяет построить общее решение, удовлетворяющее заданным началь-

ным и граничным условиям. В случае же нелинейного уравнения, разделение переменных служит для поиска и анализа частных решений. Условие существования подобных решений может накладывать дополнительные ограничения на вид коэффициентов нелинейного уравнения. В некоторых случаях разделением переменных удастся свести нелинейное уравнение к системе, содержащей линейные уравнения, для которых справедлив принцип суперпозиции решений. Если полученное по одной из переменных уравнение автономно, то это дает возможность исследовать условия существования локализованных (по этой переменной) решений.

В работе Полянина [135] различные варианты разделения переменных: $T = \phi(x)\psi(t)$, $\phi(x) + \psi(t)$, $\phi(x)\psi_1(t) + \psi_0(t)$, $\sum_{k=0}^N \phi_k(x)\psi_k(t)$, применяются для решения нелинейного уравнения теплопроводности $T_t = \frac{\partial}{\partial x}(a(T)T_x) + \Phi(T)$ со следующими типами нелинейностей: $a \sim T^n$, $a \sim e^{\beta T}$. Функция нелинейного источника $\Phi(T)$ подбирается в такой форме, чтобы уравнение допускало разделение переменных.

При описании тепло и массопереноса встречается уравнение с двойной нелинейностью в "диффузионном" члене: $\nabla(u^{m-1}|\nabla u^k|^{p-2}\nabla u^l)$ и подобные ему системы с двумя компонентами. В работе [142] с помощью обобщенного разделения переменных автомодельного типа найдены его точные решения и условия их существования при заданных начальных и граничных условиях. Для приведения исходного нелинейного уравнения к ОДУ были использованы такие преобразования:

$$u(t, x) = \bar{u}(t)f(\eta), \quad \eta = |\xi|/[\tau(t)]^{1/p},$$

$$\xi = x - \int_0^t v(y)dy, \quad \tau = \int [\bar{u}(t)]^{k(p-2)+m+l-2} dt.$$

В данном случае η является обобщенной автомодельной переменной, а функция $\bar{u}(t)$ удовлетворяет уравнению $d\bar{u}/dt = -\gamma(t)\bar{u}^\beta$ и ее использование устраняет один из нелинейных членов исходного уравнения.

Как правило, разделение переменных проходит для уравнений с достаточно простой структурой и при определенных ограничениях, налагаемых на коэффициенты уравнения [131, 136], что ограничивает его применение.

Для решения нелинейного уравнения типа теплопроводности $k(T)T_{xx} = C(T)T_t$, используется преобразование Кирхгофа — $\frac{1}{k_0} \int_0^T k(\xi)d\xi$, которое сводит его к линейному уравнению с переменным коэффициентом: $\Phi_{xx} = \frac{1}{\alpha(T)}\phi_t$, для решения которого используется метод функции Грина, который позволяет, при определенной форме $C(T), k(T)$ связать решение Φ с решением исходной задачи, удовлетворяющим начальным и граничным условиям.

В работах В.А. Галактионова [132, 137–139] и А.Д. Полянина [140, 141] с коллегами, а также в работах [142–144] развивается обобщенный метод разделения переменных. В частности, рассматриваются уравнения типа УНД с различными нелинейными источниками:

$$u_t = (u^\sigma u_x)_x + u^{\sigma+1},$$

$$u_t = (|u_x|u_x)_x + u^2,$$

$$u_t = \nabla(e^u \nabla u)_x + e^{-u}(e^u - \gamma)^2.$$

Соответствующие решения ищутся в следующем виде:

$$u = \phi(t)[\psi(t) + \eta(t)], \quad u = e^{\phi(t)[\psi(t)+\eta(t)]} - 1,$$

$$u(t, x) = \ln [\gamma + e^{-\gamma t}(C - t)^{-1}[e^{\gamma t} + \eta(x)]].$$

В каждом случае, подстановка решения в исходное нелинейное уравнение, сводит его к системе ОДУ, которая в общем случае может и не интегрироваться, но траектории которой определяют типы решений исходного уравнения.

Похожая замена переменной соответствует методу Клаксона-Крускалла [146, 147, 150], который используется в работе [145] для нелинейного уравнения типа диффузии или теплопроводности со степенной нелинейностью и радиальной симметрией: $u_t = u \left(u_{\rho\rho} + \frac{\nu}{\rho} u_\rho \right) + \frac{u^2}{\sigma} + \alpha u^\beta$. Вариант метода Клаксона-Крускалла выражается в следующих заменах переменных: $u = \phi(t)v(z)$, $z = \rho/a_1(t) + a_2(t)$. С условием $v(0) = 0$. Получающаяся после подстановки решения система ОДУ имеет несколько нетривиальных решений

Более сложным вариантом точечного преобразования, является преобразование годографа [63, 125], когда в качестве новой неизвестной функции выбирается одна из переменных, например x : $x = \psi(t, u)$, тогда $u_x = 1/\psi_u$, $u_t = -\psi_t/\psi_u$, $u_{xx} = -\psi_{uu}/\psi_u^3$. В применении к уравнениям диффузионного типа, это преобразование рассматривается в работах [64–66]. В диссертации расширяются возможности применения данного метода, введением нелинейных функциональных подстановок.

УНД достаточно общего вида [134, 148, 149]:

$$u_t = (F(u)u_x)_x + G(u)u_x + H(u),$$

может быть сведено к интегрируемой системе ОДУ для функций $w_{1,2}$:

$$\begin{aligned} \frac{w_1'}{w_1} + \frac{\lambda_1}{w_1^2} + \frac{\lambda_2}{w_1} + \lambda_3 &= 0, \\ \frac{w_2'}{w_1} + \frac{\mu_1}{w_1^2} + \frac{\mu_2}{w_1} + \mu_3 &= 0 \end{aligned}$$

с помощью преобразования $x = w_1(t)\phi(u) + w_2(t)$, которое наряду с поиском решения в неявной форме сочетает также обобщенное разделение переменных. Поскольку разделение переменных в общем случае не проходит, то задача состоит не только в поиске решений, но и в определении функций $F < G, H$, при которых данное преобразование работает. Для приведенной подстановки в [134] получены следующие выражения:

$$G(u) = \lambda_2\phi(u) + \mu_2, \quad H(u) = \lambda_3\phi(u)/\phi'(u) + \mu_3/\phi'(u).$$

Тогда допустимо разделение переменных и решение имеет вид:

$$F(u) = \left(\lambda_1 \int \phi(u)du + \mu_1 u + A \right) \phi'(u), \quad \lambda_{1,2,3}, \mu_{1,2,3}, A = const.$$

1.3.2 Принцип суперпозиции для решений нелинейных уравнений

Линейный принцип суперпозиции, справедливый для решений линейных дифференциальных уравнений в некоторых случаях выполняется для определенного класса решений нелинейных уравнений [202–204], в том числе и диффузионного типа [67]. Отыскание такого класса решений является отдельным методом анализа. Обобщением данного подхода является нахождение решений, которые могут быть связаны более общим, нелинейным алгебраическим выражением.

В отдельных случаях принципом суперпозиции может обладать некоторая линейная система, к которой сводится исходное нелинейное уравнение. Так, УНД следующего вида: $u_{tt} + u_t - (u^m u_x)_x = 0$ [146] при $m = -2$ представляется в виде эквивалентной линейной системы: $p_s - q_r = 0, \quad p_r - r^{-2}q_s = 0$ с помощью таких преобразований переменных: $x = p(r, s), \quad t = \ln |q(r, s)|, \quad u(x, t) = r/q(r, s), \quad v(x, t) = s$. Дополнительная функция $v(c, t)$ вводится в связи с тем,

что исходное уравнение может быть записано в виде закона сохранения [147], т.е. переписано в виде потенциальной системы: $v_x - u_t - u = 0$, $v_t - u^{-2}u_x = 0$. Поскольку уравнения для функций p , q линейны, то их решение может быть построено в виде суперпозиции, таким образом каждому суперпозиционному решению этой системы отвечает новое решение исходного уравнения для функции $u(x, t)$. Также этим уравнениям можно придать такой вид: $q_{ss} - r^2 q_{rr}$, $p_s - (r^2 p_r)_r = 0$ и рассматривать формулы перехода к новым переменным как преобразование Бэклунда исходного уравнения к данной системе.

Примером нелинейного суперпозиционного принципа является следующая форма решения:

$$u^{III} = 2 \left[\frac{1}{u^I(\tau^I, t)} + \frac{1}{u^{II}(\tau^{II}, t)} \right]^{-1}. \quad (5)$$

Здесь u^{III} — новое, суперпозиционное решение, а u^I, u^{II} — уже известные решения нелинейного уравнения. При этом они зависят от разных аргументов. Решения вида (5) существуют для следующего нелинейного уравнения [148]:

$$u_t - \partial_x(k_1 u + k_2 + u^{-2}u_x) = 0$$

при условии, что функции τ^I, τ^{II} удовлетворяют таким уравнениям:

$$\begin{aligned} \tau_t^I + k_1 - k_1 \tau_x^I - \frac{\tau_{xx}^I}{(u^I(\tau^I, t)\tau_x^I)^2} &= 0 \\ \tau_t^{II} + k_1 - k_1 \tau_x^{II} - \frac{\tau_{xx}^{II}}{(u^{II}(\tau^{II}, t)\tau_x^{II})^2} &= 0 \\ u^I(\tau^I, t)d\tau^I &= u^{II}(\tau^{II}, t)d\tau^{II}, \quad x = \frac{\tau^I + \tau^{II}}{2}. \end{aligned}$$

Построению точных решений УБД, основанных на принципах суперпозиции посвящены работы [202, 209]. В первой из них исследуются решения двумерного

УБД с линейной добавкой в правой части: $u_t = \Delta \ln u + \lambda u$, описывающей выход на стоки, либо генерацию от рассеяния ТД на мишенях с постоянной концентрацией. Решения представляются в следующем виде $u(x, y, t) = 1/\Psi(z, \bar{z}, t)$, где $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$. Функция Ψ имеет вид квадратичной формы — суперпозиции линейно независимых функций $\psi_i(z)$ следующего вида:

$$\Psi(z, \bar{z}, t) = \sum_{i,j=1}^N h_{ij}(t) \psi_i(z) \psi_j^*(\bar{z}).$$

Для случая $N = 2$ функции связаны таким соотношением $\psi_1 \frac{d\psi_2}{dz} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dz} = A\psi_1 + B\psi_2$, здесь A, B — комплексные постоянные. Из приведенного выше выражения видно, что пространственная структура решения определяется функциями ψ_i — модами, которые эволюционируют с разными амплитудами. Подстановка решения в таком виде в случае $N > 3$ приводит к трудоемким вычислениям, поэтому в работе предлагается другой способ получения точных решений в случае $N > 3$. Сделаем замену переменной $u_i = \frac{1}{\Psi_i}$, где u_i — некоторое решение УБД. Тогда функция $u = u_1 + u_2 + \dots + u_n = \frac{1}{\Psi_1} + \frac{1}{\Psi_2} + \dots + \frac{1}{\Psi_n}$ также будет решением УБД, при условии:

$$\sum_{i=1}^N \prod_{j=1, j \neq i}^n \psi_j(z, \bar{z}, t) + \psi_2(z, \bar{z}, t) = G(z, t)G^*(\bar{z}, t),$$

где $G(z, t)$ — некоторая комплексная функция.

Обобщение данного подхода дано в работе [209], где суперпозиционное решение выражается через полиномы специального вида:

$$u_N = \sum_{k=1}^N \frac{1}{\Phi_k} = \frac{P_1(\Phi_1(x, t), \dots, \Phi_N(x, t))}{P_0(\Phi_1(x, t), \dots, \Phi_N(x, t))}.$$

Исходя из свойств этих полиномов показано, что решения u_N также удовлетворяют квазилинейному уравнению первого порядка:

$$\frac{\partial u_N}{\partial t} - \left(kA\mathcal{D}_0 - \frac{\gamma}{Ak} \right) \frac{\partial u_N}{\partial x} + \left(\mu + \frac{\gamma}{A} \right) u_N = 0.$$

Использование полиномов позволяет построить решения УБД:

$$\frac{\partial w_n}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln w_N + m_1(x, t)w_N + \gamma_1(t)w_N^2 + g(x, t) = 0$$

с квадратичным рекомбинационным членом и источником $g(x, t)$.

1.3.2 Метод исследования симметрий

Одним из наиболее распространенных методов анализа нелинейных уравнений, в том числе, уравнений типа диффузии/теплопроводности, является метод группового анализа (метод Ли, метод исследования симметрий) [150]. Его преимуществом является то, что он, в общем случае, не приводит к линеаризации уравнения, а следовательно, получаемые частные решения сохраняют нелинейные свойства.

Некоторое нелинейное уравнение (в данном случае — второго порядка):

$$F(x, y, T, T_x, T_y, T_{xx}, T_{xy}, T_{yy}) = 0 \quad (6)$$

рассматривается как алгебраическое выражение, содержащее наряду с независимыми переменными x, y — аргументами искомой функции $T = T(x, y)$, также и другие независимые переменные $T, T_x, T_y, T_{xx}, T_{xy}, T_{yy}$ — ее частные производные.

Уравнение (6) должно быть инвариантно, относительно некоторого преобразования координат $\bar{x} = \phi_1(x, y, T, \varepsilon)$, $\bar{y} = \phi_2(x, y, T, \varepsilon)$, $\bar{T} = \psi(x, y, T, \varepsilon)$ и соответствующих преобразований производных T_y , T_{xx} , T_{xy} , T_{yy} . Здесь ε — малый параметр.

Приведенные выше формулы преобразований, должны удовлетворять групповым свойствам:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \phi_1(\bar{x}, \bar{y}, \bar{T}, \varepsilon) = \phi_1(x, y, T, \varepsilon + \bar{\varepsilon}), \\ \bar{y} &= \phi_2(\bar{x}, \bar{y}, \bar{T}, \varepsilon) = \phi_2(x, y, T, \varepsilon + \bar{\varepsilon}), \\ \bar{T} &= \psi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{T}, \varepsilon) = \psi(x, y, T, \varepsilon + \bar{\varepsilon}).\end{aligned}$$

Далее, новые функции и их производные раскладываются в ряд по ε , с точностью до членов первого порядка. Дифференциальный оператор, соответствующий такому преобразованию, называется инфинитезимальным:

$$\hat{L} = \xi(x, y, T) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y, T) \frac{\partial}{\partial y} + \zeta(x, y, T) \frac{\partial}{\partial T}.$$

Если функции ξ, η, ζ известны, то можно вычислить формулы преобразований из системы квазилинейных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{d\phi_1}{d\varepsilon} &= \xi(\phi_1, \phi_2, \psi), \quad \frac{d\phi_2}{d\varepsilon} = \eta(\phi_1, \phi_2, \psi), \quad \frac{d\psi}{d\varepsilon} = \zeta(\phi_1, \phi_2, \psi); \\ \phi_1|_{\varepsilon=0} &= x, \quad \phi_2|_{\varepsilon=0} = y, \quad \psi|_{\varepsilon=0} = T.\end{aligned}$$

Т.к. в общем случае, производные от неизвестной функции рассматриваются

как независимые переменные, то оператор второго продолжения имеет вид:

$$\hat{L}_2 = \xi \frac{\partial}{\partial} + \eta \frac{\partial}{\partial y} + \zeta \frac{\partial}{\partial T} + \zeta_1 \frac{\partial}{\partial T_x} + \zeta_2 \frac{\partial}{\partial T_y} + \zeta_{11} \frac{\partial}{\partial T_{xx}} + \zeta_{12} \frac{\partial}{\partial T_{xy}} + \zeta_{22} \frac{\partial}{\partial T_{yy}}.$$

Функции ξ, η, ζ вычисляются из условия равенства нулю коэффициентов алгебраического уравнения:

$$\hat{L}_2 F(x, y, T, T_x, T_y, T_{xx}, T_{xy}, T_{yy}) = \sum A_{k_1 k_2 k_3 k_4} (T_x)^{k_1} (T_y)^{k_2} (T_{xx})^{k_3} (T_{xy})^{k_4} = 0,$$

где производная T_{yy} вычислена из уравнения (6).

Как правило, найденные решения (за исключением очень простых), записываются в неявной форме, либо, найденная замена переменной сводит исходное уравнение к некоторому нелинейному ОДУ.

В [254] приведены примеры групповой классификации симметрий УНД со степенной зависимостью коэффициента диффузии и нелинейного источника от концентрации. Показано, что двумерное ($N = 2$) УБД является особым случаем, когда степень в коэффициенте диффузии равна $-2/N$ — расширение ядра основных групп в этом случае не получается из трехмерного случая (координаты x_1, x_2, x_3) при $x_3 = 0$. Т.е. при понижении размерности происходит существенное изменение функциональных свойств решений УБД.

Анализ симметрий стационарного уравнения диффузии со степенной нелинейностью в правой части [150] $N_{xx} + N_{yy} = N^k$ приводит к замене переменной $N = x^{-2/(k-1)} \Phi(y/x)$, которая сводит его к линейному ОДУ для $\Phi(z)$, решение

которого записывается в параметрической форме:

$$z = \operatorname{tg} Q,$$

$$\Phi = \tau(\operatorname{tg}^2 Q + 1)^{1/(1-k)},$$

$$Q = (k^2 - 1) \int \frac{d\tau}{\sqrt{2(k-1)^2\tau^{k+1} - 4(k+1)\tau^2 + A_1}} + A_2, \quad A_{1,2} = \operatorname{const}.$$

В работе [151] с помощью группового анализа было исследовано УНД без источника, но с коэффициентом диффузии вида $D(u) = a/(u+b)^2$ и найдено преобразование, переводящее это уравнение в уравнение с постоянным коэффициентом диффузии. В [157] также исследуются симметрии уравнения диффузии/теплопроводности с нелинейным коэффициентом и нелинейным объемным источником:

$$T_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(K(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q(T), \quad K(T) > 0.$$

В работе рассматриваются следующие типы нелинейностей: $K = e^T$, $K = T^\sigma$ ($\sigma \neq -4/3$), $K = T^{-4/3}$, $K = 1$, с соответствующими каждому случаю нелинейными источниками вида: $Q = \pm e^{\beta T} + \delta$, $Q = 0$, $Q = \pm T^{\sigma+1} + \delta T$, $Q = \delta T \ln T$.

Симметрии уравнения вида:

$$u_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(u^{-2} u_x + \frac{1}{2} u^{-1} \right)$$

были исследованы в работах [151–154, 156]. В частности, было найдено преобразование данного уравнения к уравнению Бюргерса:

$$v_z = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(v_\xi - \frac{1}{2} v^2 \right).$$

Для этого нужно выполнить следующие точечные преобразования: $u = \psi_x$, $\psi(x, t) = \xi$, $x = v(\xi, z)$, $t = z$.

В [155] приведен перечень симметрий, найденных с помощью метода Ли, для уравнения типа:

$$\frac{\partial u}{\partial x_0} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(A(u) \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + B(u) \frac{\partial u}{\partial x_1} + C(u).$$

Показано, что уравнение со степенными нелинейностями в правой части:

$$w_t = \frac{\partial}{\partial x} [w^k w_{x_1}] + \alpha_1 (3k + 4) w^k w_{x_1} + 2\alpha_1^2 (k + 2) w^{k+1}$$

связано с простым УНД:

$$U_t = [U^k U_x]_x$$

с помощью преобразований: $x = -\frac{1}{\alpha_1 k} \exp(\alpha_1 k x_1)$, $U = w \exp(2\alpha_1 x_1)$.

1.3.3 Преобразования Бэклунда и метод обратной задачи рассеяния

В некоторых случаях рассматриваемое нелинейное уравнение диффузии:

$$w_t = H(t, x, w, w_x, w_{xx}) \quad (7)$$

может быть записано в виде условия совместности пары соотношений на производные некоторой вспомогательной функции $u(x, t)$:

$$u_t = P_1(t, x, u; w, w_t, w_x), \quad u_x = P_2(t, x, u; w, w_t, w_x), \quad (8)$$

где функции P_1, P_2 такие, что соотношение $u_{xt} = u_{tx}$, дает уравнение (7). Если при этом условием совместности соотношений для w_t, w_x , выраженных из (8):

$$w_t = Q_1(t, x, w; u, u_t, u_x), \quad w_x = Q_2(t, x, w; u, u_t, u_x), \quad (9)$$

является уравнение для функции $u(x, t)$, в которое не входит $w(x, t)$:

$$S(t, x, u, u_t, u_x, u_{tt}, u_{tx}, u_{xx}) = 0, \quad (10)$$

то говорят, что пара уравнений (7), (10) связана преобразованием Бэклунда (8), (9)

В качестве известных примеров [16] можно привести преобразование Бэклунда для уравнения Бюргерса:

$$w_t = w_{xx} + ww_x,$$

записанное в виде следующих соотношений:

$$u_t = \frac{1}{2} \frac{\partial(wu)}{\partial x}, \quad u_x = \frac{1}{2} wu. \quad (11)$$

Обратное преобразование приводит к линейному уравнению диффузии: $u_t = u_{xx}$.

Стационарное уравнение диффузии с экспоненциальным нелинейным источником:

$$u_{xx} + u_{yy} = \alpha e^{\beta u}$$

приводится к уравнению Лапласа — $w_{xx} + w_{yy} = 0$ с помощью преобразования

такого вида:

$$u_x = -\frac{\beta}{2}w_y + \sqrt{\frac{\alpha\beta}{2}}e^{\frac{1}{2}\beta w} \sin u, \quad u_y = -\frac{\beta}{2}w_x + \sqrt{\frac{\alpha\beta}{2}}e^{\frac{1}{2}\beta w} \cos u.$$

У соотношений (11) есть обобщение на случай системы типа уравнений Бюргера, состоящей из n компонент и заданной в n -мерном координатном пространстве:

$$u_{i,t} + \sum_{j=1}^n u_j u_{i,x} - \mu \Delta u_i u_i = 0, \quad i = \overline{1, n},$$

которое дается в работе [255] и имеет вид: $u_i = A \frac{\partial}{\partial x_i} (\ln \phi) + u_i^{(0)}$, где $u_i^{(0)}$ — решения уравнений Бюргера: $u_{i,t}^{(0)} + \sum_{j=1}^n u_j^{(0)} u_{i,x}^{(0)} - \mu \Delta u_i^{(0)}$.

Для уравнений нелинейной диффузии также существует преобразование Бэклунда, связывающее уравнения типа:

$$u_t = (u^{m-1} u_x)_x$$

со степенями в коэффициентах диффузии $m - 1$ и $-m - 1$ [256]. Формулы преобразования имеют вид [257–259]:

$$U(X, T) = \frac{1}{\bar{u}(\bar{x}, t)},$$

$$\bar{x}(x, t) = \int_0^x u(x, t) dx + \int_0^t (u^{m-1} u_x)|_{x=0} dt.$$

В более общем случае, когда уравнение нелинейной диффузии/теплопроводности может быть записано в виде закона сохранения

такого вида:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(T) - \frac{\partial}{\partial x}\left[K(T)\frac{\partial}{\partial x}T\right] = 0$$

преобразование Бэклунда:

$$T^* = \frac{1}{\Phi(T)}, \quad dx^* = \Phi(T)dx + K(T)T_x dt, \quad t^* = t$$

приводит его к линейному уравнению $T_{t^*}^* = \frac{1}{K^*}T_{x^*x^*}^*$ ($K^* = \text{const} > 0$).

В случае метода обратной задачи (МОЗ) уравнение (7) также представляется в виде условия совместности переопределенной системы уравнений для некоторой вспомогательной функции $u(x, t)$, при этом одно из уравнений является уравнением на собственные значения λ некоторого линейного оператора, содержащего производные u по x , а второе линейное уравнение описывает эволюцию функции u :

$$\begin{aligned} \hat{L}u &= \lambda u, \\ \frac{\partial u}{\partial t} &= -\hat{M}u. \end{aligned} \tag{12}$$

Условие совместности (12) записывается в таком виде:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}. \tag{13}$$

Если (13) совпадает с уравнением (7), то говорят, что найдено представление Лакса (12) для уравнения (7). Операторы \hat{L} , \hat{M} называются парой Лакса.

При нахождении представления Лакса некоторого нелинейного уравнения, как правило, коэффициенты операторов \hat{L} , \hat{M} раскладываются в ряд как по

положительным, так и по отрицательным степеням спектрального параметра. Различные разложения коэффициентов в (12) будут приводить к разным нелинейным уравнениям для функции $w(x, t)$.

Один из вариантов поиска решения уравнения (7) с помощью МОЗ заключается в использовании преобразования Дарбу для "одевания" операторов пары Лакса, при котором уравнения (12) остаются совместными [249, 250].

В [260] получены численные решения обратной задачи рассеяния для нелинейного уравнения диффузии такого типа: $u_t = u_{xx} + \lambda(x)u^\alpha$, $0 < \alpha < 1/2$ на заднем интервале времени с начальными и граничными условиями.

1.4 Выводы

Из приведенного выше обзора литературы следует, что рост упорядоченных структур в кристаллических материалах, облучаемых как частицами, так и лазерным излучением, носит универсальный характер. Следовательно, источником ТД можно рассматривать саму кристаллическую решетку, опуская рассмотрение механизмов взаимодействия ее узлов с внешним излучением. При этом необходимо учитывать повреждение решетки в процессе облучения — это приводит к снижению скорости генерации и наступлению динамического равновесия. Таким образом, в общем случае, функция источника, содержащаяся в правых частях УНД должна зависеть от концентраций ТД.

Из экспериментальных данных следует, что пространственные и временные масштабы растущих сверхрешеток на порядки превышают характерные масштабы процессов релаксации. В случае поиска приближенного решения это дает возможность использовать метод многомасштабных разложений, с помощью которого можно выделить крупномасштабные пространственно-периодические

составляющие решения.

Т.к. при длительном облучении наблюдается выход концентрации дефектов на постоянное значение, то можно предположить, что сверхструктура может также существовать на некотором конечном отрезке времени, до наступления динамического равновесия. Явление насыщения также приводит к характерному распределению концентраций ТД по глубине, при котором максимум концентрации находится на некотором расстоянии от границы материала, а структура сосредоточена в слое вблизи границы.

Как правило в диффузионных моделях ТД рассматривается либо равномерное пространственное распределение ТД, либо система в состоянии равновесия — на больших временах, но в реальности время облучения всегда конечно, поэтому особое значение имеют решения, описывающие эволюцию неоднородного пространственного распределения ТД на конечном отрезке времени.

Получающиеся при моделировании нелинейные уравнения не имеют известных общих решений, следовательно интерес представляют новые методы, позволяющие расширить класс уже известных решений.

Глава 2. Квазилинейные структуры в среде с линейной диффузией

В данной главе исследуются двумерные локализованные структуры, возникающие в линейной, в общем случае неоднородной, среде с диффузией. Решения соответствующего уравнения диффузии выражаются через решения системы квазилинейных уравнений и обладают особыми свойствами. В частности, особенностью полученных решений является их многолистность — результирующее распределение концентрации получается в результате склейки отдельных листов решения [21, 22].

Наличие многолистных решений ранее было показано для многомерных гиперболических и эллиптических уравнений и основано на связи их решений с функциями специального вида — ривертонами [233]. В случае же параболических уравнений многолистные решения строятся в двумерном случае в виде суперпозиции комплексных функций. С помощью ривертонных результаты данной главы обобщаются на случай больших размерностей.

В качестве примеров рассмотрены случаи однородной, линейной и квадратичной по пространственным координатам неоднородности среды.

Рассматриваемое уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_0 (N_{xx} + N_{yy}) + u(\vec{x}, t)N. \quad (14)$$

Здесь $\vec{x} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$, $N(\vec{x}, t)$ — концентрация собственных точечных дефектов, либо атомов примеси, а вещественный "потенциал" $u(\vec{x}, t)$ описывает распределение источников/стоков в среде. Коэффициент диффузии D_0 — вещественная постоянная.

Применяемый далее метод позволяет строить точные решения уравнений вида (14) без постоянного источника частиц. При этом концентрация начального распределения может значительно превышать равновесную, что соответствует эволюции распределения ТД в уже облученном материале.

В общем случае, уравнение (14) может содержать как комплексный потенциал, так и комплексный коэффициент $D(t)$, где переменная t может быть пространственной координатой. В зависимости от смысла неизвестной функции уравнение (14) может описывать распространение лазерного импульса в неоднородной среде, квантовый гармонический осциллятор или частицу в магнитном поле. Все приведенные далее выкладки легко обобщаются на эти случаи.

2.1 Схема построения решений

Запишем уравнение (14), используя линейный оператор $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial t} - D_0\Delta$:

$$\hat{L}N = U(\vec{x}, t)N,$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ — двумерный оператор Лапласа.

Для построения решений рассмотрим действие оператора \hat{L} на функции следующего вида:

$$N(\vec{x}, t; \lambda) = e^{\theta(\vec{x}, t) + \lambda\phi(\vec{x}, t)}. \quad (15)$$

Т.к. рассматриваемое уравнение линейно, то и вещественная и мнимая части функции (15) будут решениями (14).

Здесь λ — формальный спектральный параметр, по которому можно суммировать решения (15). Подобное представление решений используется в методе ВКБ [263] и квазиклассическом приближении в задачах квантовой механики [264].

Выпишем результат действия оператора \hat{L} на функцию (15):

$$\hat{L}N = \left[\hat{L}\theta - D_0 (\nabla\theta)^2 + \lambda \left(\hat{L}\phi - 2D_0 (\nabla\theta, \nabla\phi) \right) - \right. \\ \left. - \lambda^2 D_0 (\nabla\phi)^2 \right] N = U(\vec{x}, t; \lambda)N.$$

Для построения суперпозиционного решения нужно проинтегрировать выражение (15) по λ :

$$N_s(\vec{x}, t) = e^{\theta(\vec{x}, t)} \int_{\lambda} e^{\lambda\phi(\vec{x}, t)} d\lambda.$$

При этом потенциал не должен зависеть от спектрального параметра, что приводит к следующим условиям на фазовые функции:

$$\hat{L}\phi - 2D_0 (\nabla\theta, \nabla\phi) = 0, \quad (\nabla\phi)^2 = 0. \quad (16)$$

Первое уравнение является аналогом уравнения переноса в приближении геометрической оптики, а второе — аналогом уравнения эйконала.

Потенциал же принимает следующий вид:

$$U = \hat{L}\theta - D_0 (\nabla\theta)^2.$$

Дальнейшей задачей является нахождение функций $\theta(\vec{x}, t)$ и $\phi(\vec{x}, t)$ из системы уравнений (16), которые накладывают ограничения на вид потенциалов, допустимых в данном подходе.

Сначала рассмотрим второе уравнение из системы (16). В развернутой за-

писи оно имеет вид:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2 = 0.$$

Т.е. функция ϕ должна удовлетворять одному из уравнений:

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} + i\frac{\partial\phi}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial\phi}{\partial x} - i\frac{\partial\phi}{\partial y} = 0.$$

Общим решением первого уравнения является произвольная аналитическая функция $\phi(z, t)$, где $z = x + iy$ — комплексная переменная. Во втором случае решение зависит от комплексно-сопряженной переменной $\bar{z} = x - iy$. Из дальнейших построений следует, что оба варианта приводят к аналогичным результатам, поэтому далее будем рассматривать зависимость только от z .

Первому же уравнению можно придать более простой вид, если учесть, что $\Delta\phi(z, t) = 4\frac{\partial^2\phi}{\partial z\partial\bar{z}} = 0$:

$$\phi_t - 4D_0\frac{\partial\theta}{\partial\bar{z}}\frac{\partial\phi}{\partial z} = 0. \quad (17)$$

Введем вспомогательную функцию $v(z, t)$:

$$v(z, t) = \frac{\phi_t}{4D_0\phi_z}.$$

Тогда уравнение (17) можно решить относительно $\theta(z, \bar{z}, t)$:

$$\theta = \bar{z}v(z, t) + g(z, t),$$

где постоянной интегрирования по \bar{z} является произвольная аналитическая функция $g(z, t)$.

С учетом найденных выражений для фазовых функций, потенциал можно записать в таком виде:

$$U(z, \bar{z}, t) = \bar{z}M(z, t) + N(z, t). \quad (18)$$

Здесь $M(z, t)$, $N(z, t)$ произвольные аналитические функции, которые определяются свойствами среды. Оставшиеся произвольными функции $v(z, t)$, $g(z, t)$, $\phi(z, t)$ находятся из следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} v_t - 4D_0vv_z &= M(z, t), \\ g_t - 4D_0vg_z - 4D_0v_z &= N(z, t), \\ \phi_t - 4D_0v\phi_z &= 0. \end{aligned}$$

Таким образом, задавая $M(z, t)$ и $N(z, t)$ мы определяем общий вид решения исходного уравнения (14).

Решения приведенной системы уравнений при заданных функциях $M(z, t)$ и $N(z, t)$ находятся с помощью метода характеристик, уравнение которых в данном случае имеет вид:

$$\frac{dz}{dt} = -4D_0v. \quad (19)$$

Следует отметить, что в рассматриваемых квазилинейных уравнениях присутствует производная по переменной z , носящая формальный характер. Под $\frac{\partial}{\partial z}$ следует понимать следующее выражение: $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)$. Но использование комплексной переменной значительно упрощает дальнейшие выкладки. Покажем, что в комплексном случае метод характеристик дает результаты аналогичные классическим.

Комплексное уравнение характеристик (19) эквивалентно паре двумерных вещественных квазилинейных уравнений на плоскости x, y , объединенных в одно, со следующим оператором переноса:

$$\hat{S} = \frac{\partial}{\partial t} - \hat{Q}, \quad \hat{Q} = 4(\alpha(t)\xi - \beta(t)\eta) \frac{\partial}{\partial x} + 4(\alpha(t)\eta + \beta(t)\xi) \frac{\partial}{\partial y}, \quad (20)$$

где введены обозначения: $D(t) = \alpha(t) + i\beta(t)$, $v(z, t) = \xi(x, y, t) + i\eta(x, y, t)$ и использованы условия Коши для аналитических функций: $\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial y}$, $\frac{\partial \xi}{\partial y} = -\frac{\partial \eta}{\partial x}$.

Вводя дополнительно обозначения: $g(z, t) = p(x, y, t) + iq(x, y, t)$, $M(z, t) = P(x, y, t) + iQ(x, y, t)$, $N(z, t) = K(x, y, t) + iL(x, y, t)$, систему уравнений для функций $v(z, t)$, $g(z, t)$, $\phi(z, t)$ можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \xi_t + \hat{Q}\xi &= P(x, y, t), & \eta_t + \hat{Q}\eta &= Q(x, y, t), \\ p_t + \hat{Q}p - \hat{Q}\xi &= K(x, y, t), & q_t + \hat{Q}q - \hat{Q}\eta &= L(x, y, t). \end{aligned}$$

Уравнения вещественных характеристик приведенной системы имеют вид:

$$\frac{dx}{dt} = -4(\alpha(t)\xi - \beta(t)\eta), \quad \frac{dy}{dt} = -4(\alpha(t)\eta + \beta(t)\xi), \quad (21)$$

Из приведенных выражений следует, что с помощью переменной $z = x + iy$, (21) превращается в уравнение комплексных характеристик (19). Поэтому в дальнейшем будем работать непосредственно с уравнениями и их решениями в комплексных переменных.

Для удобства введем переменную $\tau = 4D_0 t$. Коэффициент D_0 , в общем случае, является функцией времени — в этом случае все проведенные выкладки остаются справедливыми, но при диффузионной интерпретации уравнения (14)

коэффициент диффузии, как правило, от времени не зависит, поэтому далее полагаем $D_0 = \text{const}$.

Уравнение для вспомогательных функций v и g имеют такой вид:

$$\frac{dv}{d\tau} = m(z, \tau), \quad \frac{dg}{d\tau} = v' + n(z, \tau). \quad (22)$$

Здесь введены обозначения: $m(z, \tau) = M(z, t)/4D(t)$, $n(z, \tau) = N(z, t)/4D(t)$.

Подставляя v из (19) в первое уравнение, получаем уравнение для характеристики в комплексной плоскости z :

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} = -m(z, \tau). \quad (23)$$

При произвольном выборе $m(z, \tau)$ это уравнение представляет собой нелинейное ОДУ второго порядка и имеет две постоянные интегрирования I, J , которые с точки зрения метода характеристик представляют собой независимые интегралы движения.

Если интегралы движения $I(v, z, \tau)$ и $J(v, z, \tau)$ уравнения (19) и первого уравнения (22) найдены, то функция v находится из алгебраического уравнения:

$$H\left(I(v, z, \tau), J(v, z, \tau)\right) = 0, \quad (24)$$

где $H(I, J)$ — произвольная комплексная функция. После этого вычисляется решение для $g(z, t)$, которое можно записать в виде:

$$g(z, \tau) = \int_C \left(v' + n(z, \tau)\right) d\tau + G(I, J), \quad (25)$$

где интеграл в правой части берется вдоль характеристик, а $G(I, J)$ — произ-

вольная постоянная интегрирования вдоль характеристики, т.е. функция интегралов движения I и J .

После того, как вычислено решение для $v(z, t)$, решение для $\phi(z, t)$ (224) вычисляется из уравнения:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} - 4Dv \frac{\partial\phi}{\partial z} = 0. \quad (26)$$

Следовательно, полное решение этого уравнения будет иметь следующий вид:

$$\phi = P(I, J), \quad (27)$$

где $P(I, J)$ — произвольная функция интегралов движения. Таким образом, справедливо следующее утверждение:

Утверждение 1. Уравнение (14) с потенциалом (18) имеет решения такого вида:

$$N_s = R(I, J) \exp \left[\bar{z}v(z, \tau) + \int_C \left(v_z(z, \tau) + n(z, \tau) \right) d\tau \right], \quad (28)$$

где функции $v(z, t)$ и $\phi(z, t)$ вычисляются из алгебраических уравнений (24) и (27), а функция $\theta(x, y, t)$ при этом имеет вид (25). Функция $R(I, J) = e^{G(I, J)} \int e^{P(I, J)} d\lambda$ является произвольной функцией интегралов движения.

Спектральный параметр, введенный в самом начале, имеет вспомогательное значение, т.к. общий вид решения (28) уже его не содержит. Далее кратко сформулируем все результаты в более общем виде с самого начала переходя к комплексным переменным.

Уравнение диффузии в таком случае примет вид:

$$\frac{\partial N}{\partial t} - 4D_0 \frac{\partial^2 N}{\partial z \partial \bar{z}} = U(z, \bar{z}, t)N. \quad (29)$$

Решение тоже будем с самого начала искать в комплексной форме, не содержащей спектрального параметра:

$$N(\vec{x}, t) = A(z, t)e^{\bar{z}v(z, t)}, \quad (30)$$

где $A(z, t)$, $v(z, t)$ — произвольные аналитические функции.

Условие обращения уравнения (29) в тождество распадается на следующую систему квазилинейных уравнений:

$$\begin{aligned} v_t - 4D(t)vv_z - M(z, t) &= 0, \\ A_t - \frac{\partial}{\partial z}(4D(t)Av) - N(z, t)A &= 0. \end{aligned}$$

При этом, потенциал $U(z, t) = M(z, t)\bar{z} + N(z, t)$ имеет прежний вид.

В уравнении для функции A можно выделить закон сохранения, представив ее в виде произведения: $A = QL$. Тогда уравнение для функции Q будет иметь такой вид:

$$Q_t - \frac{\partial}{\partial z}(4D(t)Qv) = 0. \quad (31)$$

Последнее уравнение в (31) теперь сводится к уравнению относительно $\Theta = \ln L$:

$$\Theta_t - 4D(t)v\Theta_z = N(z, t). \quad (32)$$

Поскольку уравнение (31) представляет собой дифференциальный закон сохра-

нения, существует функция $S(z, t)$ такая, что:

$$Q = \frac{\partial S}{\partial z}, \quad 4D(t)Qv = \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (33)$$

Сама функция $S(z, t)$ является решением уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} - 4D(t)v \frac{\partial S}{\partial z} = 0. \quad (34)$$

Таким образом, если известно решение эквивалентной (14) системы квазилинейных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} v_t - 4D(t)vv_z &= M(z, t), \\ \Theta_t - 4D(t)v\Theta_z &= N(z, t), \\ S_t - 4D(t)vS_z &= 0. \end{aligned} \quad (35)$$

где $\Theta = \ln L$, то мы можем построить частные решения исходного уравнения.

уравнения для функций v , Θ и S приводятся к такой системе уравнений на характеристиках (19):

$$\frac{dv}{d\tau} = m(z, \tau), \quad \frac{d\Theta}{d\tau} = n(z, \tau), \quad \frac{dS}{d\tau} = 0. \quad (36)$$

Если найдены оба интеграла движения $I_1(v, z, \tau)$ и $I_2(v, z, \tau)$ системы уравнений (35) и (36) и, соответственно, (23), то общее решение системы (31) и первого уравнения (36) относительно v находится из алгебраического уравнения:

$$H\left(I_1(v, z, \tau), I_2(v, z, \tau)\right) = 0, \quad (37)$$

где $H(I_1, I_2)$ — произвольная комплексная функция. Это же уравнение без ограничения общности можно записать в одной из следующих форм:

$$I_1 = h_1(I_2), \quad I_2 = h_2(I_1), \quad (38)$$

где функции $h_1(I)$ и $h_2(I)$ — взаимно обратные.

При этом решение для S представляет собой произвольную функцию от интегралов движения: $S = S(I_1(v, z, \tau), I_2(v, z, \tau))$, а решение для $L(z, \tau)$ можно записать в следующей форме:

$$L = J(I_1, I_2) e^{\int_C n(z, \tau) d\tau},$$

где $J(I_1, I_2)$ — произвольная функция интегралов движения, а интеграл в показателе экспоненты берется вдоль характеристики C . В результате решение для $A(z, \tau)$ можно записать в виде:

$$A(z, \tau) = L \frac{\partial S}{\partial z} = e^{\int_C n(z, \tau) d\tau} J(I_1, I_2) \frac{\partial S(I_1, I_2)}{\partial z}. \quad (39)$$

В силу произвольности функции $S(I_1, I_2)$ и возможности представить (37) в виде (38), наличие множителя $J(I_1, I_2)$ не существенно. Поэтому в дальнейшем мы его опускаем. Окончательно, общее решение уравнения (14) для потенциала вида $U(z, \bar{z}, \tau) = m(z, \tau)\bar{z} + n(z, \tau)$ можно записать в виде:

$$N(z, \bar{z}, \tau | H) = e^{\bar{z}v(z, \tau)} e^{\int_C n(z, \tau) d\tau} \frac{\partial S(I_1, I_2)}{\partial z}. \quad (40)$$

Функция $S = S(I_1, I_2)$ определяется из начальных и граничных условий.

Форма потенциала $U(z, \bar{z}, \tau)$ также не зависит от выбора функции $H(I_1, I_2)$

в уравнении (37). Этот дополнительный произвол можно назвать топологическим вырождением рассматриваемых решений. Таким образом, полное решение, учитывающее топологическое вырождение, можно записать в виде:

$$N = \sum_H C(H) N(z, \bar{z}, \tau | H), \quad (41)$$

где сумма берется по всем неэквивалентным функциям $H(I_1, I_2)$ (решениям уравнения (37)) с произвольными постоянными коэффициентами $C(H)$.

2.2 Вещественный потенциал

Для рассматриваемых задач потенциал U , определенный в (31), должен быть вещественной функцией. В случае $D(t) = D_0 \in \mathbb{R}$ это условие сводится к двум соотношениям:

$$m(z, \tau) = a(\tau)z + b(\tau), \quad n(z, \tau) = \bar{b}(\tau)z + c(\tau), \quad (42)$$

где $a(\tau)$ и $c(\tau)$ — произвольные вещественные функции, а $b(\tau)$, $\bar{b}(\tau)$ — произвольные комплексно-сопряженные функции.

В этом случае имеем:

$$U(z, \bar{z}, \tau) = 4D_0 \left(a(\tau)|z|^2 + b(\tau)\bar{z} + \bar{b}(\tau)z + c(\tau) \right). \quad (43)$$

Отметим, что общая форма потенциала соответствует нескольким существенно различающимся вариантам среды. При $a(\tau) \neq 0$ потенциал — квадратичная функция. В случае $a(\tau) = 0$ имеем линейно меняющийся в плоскости $x - y$ потенциал, а при дополнительном условии $b(\tau) = 0$ постоянный потенциал.

В рассматриваемом случае уравнения (36) с учетом (42) превращаются в линейные уравнения на характеристиках:

$$\frac{dv}{d\tau} = a(\tau)z + b(\tau), \quad \frac{dL}{d\tau} = \bar{b}(\tau)z + c(\tau), \quad \frac{dS}{d\tau} = 0. \quad (44)$$

Уравнение характеристик (23) теперь будет иметь вид:

$$\frac{d^2z}{d\tau^2} + a(\tau)z = -b(\tau). \quad (45)$$

Пусть $Z_1(\tau), Z_2(\tau)$ являются парой линейно-независимых решений однородной части уравнения (45), а $Z_0(\tau)$ — некоторым решением неоднородного уравнения.

Тогда общее решение для z и v на характеристике можно записать в виде:

$$\begin{aligned} z(\tau) &= I_1 Z_1(\tau) + I_2 Z_2(\tau) + Z_0(\tau), \\ v(\tau) &= -I_1 \dot{Z}_1(\tau) - I_2 \dot{Z}_2(\tau) - \dot{Z}_0(\tau). \end{aligned} \quad (46)$$

Постоянные интегрирования I_1 и I_2 — интегралы движения, вычисляются как решения системы алгебраических уравнений (46):

$$I_1 = \frac{1}{K} \left(\xi \dot{Z}_2 + \eta Z_2 \right), \quad I_2 = -\frac{1}{K} \left(\xi \dot{Z}_1 + \eta Z_1 \right), \quad (47)$$

где $K = Z_1 \dot{Z}_2 - Z_2 \dot{Z}_1 = \text{const}$ и $\xi = z - Z_0$, $\eta = v + \dot{Z}_0$. После подстановки I_1, I_2 в решения (37), (39) и (40) дают в результате полное решение уравнения (14) для случая квадратичного потенциала (207).

2.3 Примеры классических решений

Классические — однолистные решения уравнения диффузии являются частным случаем и соответствуют определенному выбору произвольной функции $H(I_1, I_2)$. Рассмотрим случай простейшего потенциала $U(z, \bar{z}, \tau) = \text{const} \in \mathbb{R}$, что соответствует условию $a(\tau) = b(\tau) = 0$.

В результате уравнение для характеристик принимает следующий вид:

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} = 0. \quad (48)$$

Отсюда:

$$z = I_1 \tau + I_2. \quad (49)$$

Т.е. характеристики, описываемые этим уравнением, представляют собой множество прямых линий, заданных в параметрической форме:

$$x(\tau) = \text{Re}[I_1]\tau + \text{Re}[I_2], \quad y(\tau) = \text{Im}[I_1]\tau + \text{Im}[I_2].$$

Соответствующие интегралы движения имеют вид:

$$I_1 = -v, \quad I_2 = z + v\tau. \quad (50)$$

Простейшее "классическое" решение для функции Ψ соответствует выбору функции $H(I_1, I_2)$ в следующем виде:

$$H(I_1, I_2) = I_2 = z + v\tau = 0.$$

Отсюда $v = -z/\tau$. Характеристики (49) в этом случае — это прямые, выхо-

дящие из начала координат при $\tau = 0$. Соответствующее общее решение для $N(z, \bar{z}, \tau)$ (40) теперь выглядит так:

$$N = \frac{1}{\tau} e^{-|\zeta|^2/\tau} e^{\int c(\tau) d\tau} A(z/\tau), \quad (51)$$

где:

$$A(z/\tau) = \left[I_2(-v, 0) \frac{\partial}{\partial v} S(-v, 0) \right]_{v=-z/\tau}.$$

Решение (51) представляет собой классическое решение двумерного уравнения диффузии, записанное в комплексной форме.

2.4 Многолистные решения

Неклассические многозначные (многолистные) решения исходного уравнения в случае постоянного потенциала связаны с многозначными решениями уравнения (37). Эти решения можно записать в двух эквивалентных формах. Вариант уравнения для $v(z, t)$, обозначаемый в дальнейшем как (II), можно представить в следующем виде:

$$z + v\tau = h_2(v), \quad (52)$$

где функция $h_2(v)$ определяется начальным условием: $z = h_2(v(z, 0))$. Соответствующее решение (40) для N примет такой вид:

$$N = e^{\bar{z}v(z,t)} e^{\int c(\tau) d\tau} B(v)v_z, \quad (53)$$

где:

$$B(v) = \frac{\partial}{\partial v} W(-v, h_2(v)). \quad (54)$$

Простейшее многозначное (двулистное) решение соответствует выбору

функции $h_2(v)$ в виде:

$$h_2(v) = a_2 v^2 + b_2 v + c_2. \quad (55)$$

Здесь $a, b, c = \text{const}$ — некоторые комплексные постоянные. В этом случае имеем два решения уравнения (52):

$$v_{\pm}(z, \tau) = \frac{1}{2a_2} \left(\tau - b_2 \pm \sqrt{(\tau - b_2)^2 + 4a_2 z - 4a_2 c_2} \right) = f_2(\tau) \pm \frac{1}{2a_2} p_2(z, \tau), \quad (56)$$

где

$$p_2(z, \tau) = \sqrt{(\tau - b_2)^2 + 4a_2 z - 4a_2 c_2}, \quad f_2(\tau) = \frac{1}{2a_2} (\tau - b_2).$$

Каждое из этих решений порождает свое решение (53):

$$N_{\pm} = \mp \frac{B_{\pm}(v_{\pm})}{p_2(z, \tau)} e^{\bar{z}(f_2(\tau) \pm p_2(z, \tau)/(2a_2))} e^{\int c(\tau) d\tau}. \quad (57)$$

Асимптотическое поведение этого решения при $|z| \rightarrow \infty$ определяется показателем экспоненты в этом решении. При $|z| \rightarrow \infty$ имеем:

$$\bar{z} v_{\pm}(z, \tau) \rightarrow \pm \frac{1}{\sqrt{a_2}} \bar{z} z^{1/2} = \pm \frac{i}{\sqrt{a_2}} |z|^{3/2} e^{-i \arg z/2}. \quad (58)$$

Отсюда следует, что основной вещественный множитель, управляющий асимптотикой решения, ведет себя при $|z| \rightarrow \infty$ так:

$$N \sim e^{\pm \frac{1}{\sqrt{a_2}} |z|^{3/2} \sin(\arg z/2)}. \quad (59)$$

Функция N убывает к нулю только в отдельных секторах плоскости $x - y$, где знак показателя отрицателен. При этом, в каждом секторе решение на одном листе убывает к нулю, а на другом неограниченно растет, и наоборот. Общее

решение можно представить в виде суперпозиции:

$$N = \int_{\mathcal{V}} \frac{e^{\bar{z}f_2(\tau)}}{p_2(z, \tau)} F(v_+, v_-, a_1, b_1, c_1, z, \tau) da_1 db_1 dc_1, \quad (60)$$

где интеграл по параметрам a_1, b_1, c_1 берется по некоторой заданной области \mathcal{V} их допустимых значений и введены обозначения:

$$F(v_+, v_-, a_1, b_1, c_1, z, \tau) = B_-(v_-) e^{-\Theta_2(z, \tau) + \int_{c_-} c(\tau) d\tau} - B_+(v_+) e^{\Theta_2(z, \tau) + \int_{c_+} c(\tau) d\tau},$$

Функции $B_{\pm}(v_{\pm})$ произвольны и связаны с функциями $W_{\pm}(I_1, I_2)$ соотношениями (54), функции v_{\pm} соответствуют решениям (56), а функция $\Theta_2(z, \tau)$ определена таким образом:

$$\Theta_2(z, \tau) = \frac{\bar{z}p_2(z, \tau)}{2a_2}.$$

Другой вариант двулистного решения, обозначаемый в дальнейшем как (I), имеет такой вид:

$$v = h_1(z + v\tau). \quad (61)$$

Такая форма решения демонстрирует другое асимптотическое поведение. Полагая:

$$h_1(\zeta) = a_1\zeta^2 + b_1\zeta + c_1, \quad \zeta = z + v\tau, \quad (62)$$

приходим к следующему варианту двулистного решения. Именно:

$$\zeta = a_1\tau\zeta^2 + b_1\tau\zeta + c_1\tau + z.$$

Отсюда:

$$v_{\pm} = -\frac{z}{\tau} + f_1(\tau) \pm \frac{1}{2a_1\tau} p_1(z, \tau). \quad (63)$$

Здесь:

$$p_1 = \sqrt{(1 - b_1\tau)^2 - 4a_1(c_1\tau + z)}, \quad f_1(\tau) = \frac{1}{2a_1\tau}(1 - b_1\tau).$$

Теперь решение для N выглядит следующим образом:

$$N_{\pm} = -\frac{1}{\tau} e^{-|z|^2/\tau} e^{\bar{z}(f_1(\tau) \pm p_1(z, \tau))/(2a_1(\tau))} e^{\int c(\tau) d\tau} B(v_{\pm}) \left(1 \pm \frac{1}{p_1(z, \tau)} \right). \quad (64)$$

При $|z| \rightarrow \infty$: $p_1(z) \rightarrow 2\sqrt{-a_1}z^{1/2}$. Поэтому основной множитель в выражении для N будет иметь вид:

$$N \sim e^{-\frac{1}{\tau}|z|^2 \pm \frac{1}{\sqrt{a_1}}|z|^{3/2} \sin(\arg z/2)}.$$

Теперь асимптотика решения такова, что оба листа удовлетворяют граничному условию $N \rightarrow 0$ при $|z| \rightarrow \infty$. Общее решение можно представить в виде суперпозиции:

$$N = -\frac{1}{\tau} e^{\bar{z}f_1(\tau)} e^{-|z|^2/\tau} \left(e^{\Theta_1 + \int c_+(\tau) d\tau} B_+(v_+, z, \tau) + e^{-\Theta_1 + \int c_-(\tau) d\tau} B_-(v_+, z, \tau) \right),$$

где введены обозначения:

$$B_{\pm}(v_{\pm}, z, \tau) = \left(1 \pm \frac{1}{p_1(z, \tau)} \right) \frac{\partial}{\partial v} W(-v, h_1(v)), \quad \Theta_1 = \frac{\bar{z}p_1(z, \tau)}{2a_1(\tau)}.$$

Двулистные решения являются частным случаем многолистных решений, которым соответствует выбор функций $h_1(z + v\tau)$ или $h_2(v)$, для которых уравнения (52), (61) имеют число корней относительно v больше 2. Примером такого случая является выбор $h_1(z + v\tau)$ или $h_2(v)$ в виде полинома конечной степени. Анализировать такие решения в аналитическом виде сложно, поскольку реше-

ния алгебраических уравнений степени выше 4 не выражаются, как известно, в радикалах. Однако для описания общего поведения таких решений полезно ввести в рассмотрение динамику точек ветвления многолистных решений.

2.5 Роль точек ветвления

Как было показано в предыдущем разделе, классические решения уравнения диффузии с постоянными коэффициентами в рамках развитого метода соответствуют только одному выбору уравнений на характеристиках, именно, линейной функции $H(I_1, I_2)$. Все остальные варианты выбора $H(I_1, I_2)$ будут приводить к многозначным решениям. Суть отличия многозначных решений от классических состоит в том, что эти решения состоят из нескольких листов "сцепленных" в единое целое в точках ветвления. Сразу отметим, что комплексной точке ветвления z_0 , в которой решение имеет особенность, далее будут соответствовать кривые в вещественном пространстве, вдоль которых склеиваются отдельные ветви для получения решения во всем пространстве.

Для двулистных решений, рассмотренных выше, точками ветвления являются такие значения z , при которых оба корня уравнения (61) (соответственно (52)) относительно v , совпадают. Отсюда следует, что точки ветвления для первого типа двулистных решений (63) могут быть найдены как решения алгебраических уравнений $p_1(z, \tau) = 0$, а для второго типа решений (56) как решения уравнения: $p_2(z, \tau) = 0$. Эти решения можно записать для (63) как:

$$z_1 = \frac{(\tau - b_1)^2}{4a_1} - c_1\tau,$$

а для (56) — так:

$$z_2 = c_2 - \frac{(\tau - b_2)^2}{4a_2}.$$

Точки ветвления перемещаются в пространстве с постоянным ускорением, причем траектории движения для каждого двулистного решения отличаются друг от друга. В силу этого, двулистные решения отличающиеся коэффициентами a_i, b_i, c_i имеют не совпадающие между собой почти при всех τ точки ветвления. Закон движения точек ветвления однозначно определяет вид двулистного решения за исключением произвольного множителя $B(v)$. Поскольку в точках ветвления $p_1(z, \tau) = 0$ (соответственно, $p_2(z, \tau) = 0$), решения (64) и (57) содержат множители, имеющие сингулярность в точках ветвления.

В случае многолистных решений ситуация оказывается аналогичной. При наличии M листов уравнения (61) и (52) относительно v будут иметь по M корней, часть из которых может совпадать. Общее уравнение для отыскания точек ветвления можно получить, вычисляя производную от неявной функции v_z . Для каждого из вариантов I и II имеем:

$$(I) \quad v_z = h'_1(z + v\tau)(1 + v_z\tau); \quad (II) \quad 1 + v_z\tau = h'_2(v)v_z.$$

Отсюда находим:

$$(I) \quad v_z = \frac{h'_1(\zeta)}{1 - h'_1(\zeta)\tau}, \quad (II) \quad v_z = \frac{1}{h'_2(v) - \tau}. \quad (65)$$

По определению в точках ветвления производная v_z должна иметь особенность. В результате находим, что положение точек ветвления можно найти из решения

алгебраических (или, возможно, трансцендентных) уравнений:

$$(I) \quad h'_1(z + v\tau) = \frac{1}{\tau}, \quad (II) \quad h'_2(v) = \tau, \quad (66)$$

в которые еще необходимо подставить решения для $v(z, t)$. Заметим, что в общем решении (53) входит множитель v_z . Согласно (65) этот множитель имеет особенность в точках ветвления, определенных соотношениями (66). Поэтому в каждой точке ветвления функция N (53) будет так же иметь точечную особенность. Отсюда следует, что основным признаком многозначности решения является наличие точечных особенностей в структуре решения уже в начальный момент времени.

2.6 Многозначные решения уравнения диффузии с квадратичной неоднородностью

Рассмотрим квадратичный вещественный потенциал (207) [265], получающийся при следующем выборе произвольных функций : $a(\tau) = \Omega^2 = \text{const}$, $b_1(\tau) = b_2(\tau) = c(\tau) = 0$. В случае диффузионной интерпритации уравнения (14), потенциал в правой части может быть как положительным ($\Omega \in R$), так и отрицательным ($\Omega = i\Xi, \Xi \in R$). В первом случае, слагаемое с положительным коэффициентом соответствует генерации частиц неоднородным источником, взаимодействующим с дефектами и имеющим квадратичное распределение. Во втором случае, слагаемое описывает поглощение частиц на стоках, неравномерно распределенных в среде.

В случае генерации имеем характеристическое уравнение (45) типа уравне-

ния гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} + \Omega^2 z = 0,$$

решениями которого являются функции:

$$Z_1 = e^{i\Omega\tau}, \quad Z_2 = e^{-i\Omega\tau}, \quad (67)$$

тогда $K = Z_1 \dot{Z}_2 - Z_2 \dot{Z}_1 = -2i\Omega$, а $Z_0(\tau) = 0$ т.к. правая часть уравнения (67) равна нулю. Интегралы движения (162) имеют теперь такой вид:

$$I_1 = \frac{1}{2\Omega} (\Omega z + iv) e^{-i\Omega\tau}, \quad I_2 = \frac{1}{2\Omega} (\Omega z - iv) e^{i\Omega\tau}.$$

Характеристиками в этом случае являются эллипсы, параметрически задаваемые уравнением: $z(\tau) = x(\tau) + iy(\tau) = I_1 e^{i\Omega\tau} + I_2 e^{-i\Omega\tau}$.

По аналогии с уравнением без источников, в следующем частном случае:

$$H(I_1, I_2) = I_2 = 0, \quad v = -i\Omega z, \quad I_1 = e^{-i\Omega\tau} z,$$

получаем классические решения уравнения диффузии с квадратичным потенциалом $U = \Omega^2(x^2 + y^2)$. Решение (40) будет в данном случае иметь такой вид:

$$N = A(I_1) e^{-i(\Omega|z|^2 + \Omega\tau)}, \quad (68)$$

где $A(I_1)$ — произвольная, связанная с $W(I_1, I_2)$ соотношением: $A(I_1) = \frac{\partial}{\partial I_1} W(I_1, 0)$.

Аналогично, полагая $H(I_1, I_2) = I_1 = 0$, $I_2 = e^{i\Omega\tau} z$, получаем еще одно ре-

шение. Пользуясь принципом суперпозиции, запишем решение в следующем виде:

$$N = A_-(I_1)e^{-i(\Omega|z|^2+\Omega\tau)} + A_+(I_2)e^{+i(\Omega|z|^2+\Omega\tau)}. \quad (69)$$

В решении (69) коэффициенты в степени экспоненты не зависят от τ , что совпадает с классическим решением, при этом, есть произвольные функции $A_{\pm}(I_1)$, определяющиеся из начального условия. В частном случае $A_{\pm}(I_1) = A_0/2$, имеем простое решение $N = A_0 \cos(\Omega(x^2 + y^2 + \tau))$.

Очевидное обобщение рассмотренного случая состоит в выборе $H(I_1, I_2)$ в виде:

$$H(I_1, I_2) = k_1 I_1 + k_2 I_2 + k_0. \quad (70)$$

В этом случае:

$$v = -i \frac{\Omega}{q(\tau)} \left(p(\tau) \zeta + 2k_0 \right), \quad (71)$$

где $p(\tau) = k_2 e^{i\Omega\tau} + k_1 e^{-i\Omega\tau}$, $q(\tau) = k_2 e^{i\Omega\tau} - k_1 e^{-i\Omega\tau}$. Подстановка v в (28) дает следующее решение:

$$N = \frac{A(I_1)}{q(\tau)} e^{-i\Omega(\gamma(\tau)|z|^2 + 2\beta(\tau)\bar{z})}, \quad (72)$$

где $\gamma(\tau) = p(\tau)/q(\tau)$, $\beta(\tau) = k_0/q(\tau)$,

$$I_1(z, \tau) = \frac{\Omega z + iv(z, \tau)}{2\Omega} e^{-i\Omega\tau}.$$

Наиболее существенным отличием данного решения от "классического" является то, что множитель $\gamma(\tau)$ перед $|z|^2$ в показателе экспоненты зависит от τ .

Для анализа асимптотики решения на бесконечности ($|z| \rightarrow \infty$), необходи-

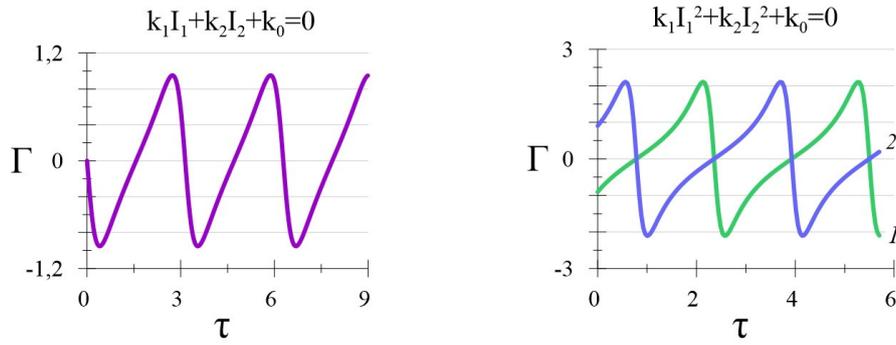


Рис. 8: Асимптотики коэффициента в степени экспоненты (72) и (73) при $|z| \rightarrow \infty$ ($\Omega = 1$, $k_0 = 1$, $k_1 = 5$, $k_2 = 2$).

мо найти вещественную часть коэффициента при $|z|^2$ в степени экспоненты. Будем далее обозначать этот коэффициент $\Gamma(\tau)$. В рассматриваемом случае $\Gamma(\tau) = \Im[\gamma(\tau)]$. График этой функции представлен на Рис.8 слева. Как видно из графика, $\Gamma(\tau)$ периодически принимает как отрицательные, так и положительные значения. Периодический рост решения на бесконечности объясняется наличием так же растущего неоднородного источника.

Решение (72) однолистное. Простейшее двулистное решение соответствует выбору $H(I_1, I_2)$ в виде квадратичной функции, например, в такой форме:

$$H(I_1, I_2) = k_1 I_1^2 + k_2 I_2^2 + k_0,$$

где функции $p(\tau)$ и $q(\tau)$ — те же, что и в (71). Решение для v теперь такое:

$$v_{1,2} = -\Omega \left(i\gamma(2\tau)z \mp \sqrt{k_1 k_2 z^2 + k_0 p(2\tau)/p(2\tau)} \right),$$

где $\gamma(\tau) = q(\tau)/p(\tau)$.

Знаки \pm соответствуют двум листам решения. Решения для N можно пред-

ставить в виде:

$$N_{1,2} = \frac{A(I_1)}{p(2\tau)} \left(e^{i\Omega\tau} \pm \frac{ik_1 e^{-i\Omega\tau} z}{\sqrt{k_1 k_2 z^2 + k_0 p(2\tau)}} \right) e^{v(z,\tau)\bar{z}}, \quad (73)$$

где

$$I_1 = (k_2 e^{i\Omega\tau} z \pm i e^{-i\Omega\tau} \sqrt{k_1 k_2 z^2 + k_0 p(2\tau)}) / p(2\tau)$$

В этом случае $\Gamma_{1,2}(\tau) = \Im[\gamma(2\tau)] \mp 2\sqrt{k_1 k_2} \Re[1/p(2\tau)]$. График этих функций представлен на Рис.8 справа (подписи 1 и 2 соответствуют двум ветвям решения (73)). В этом случае, асимптотика решения, также периодически зависит от времени.

Все выкладки для случая отрицательного коэффициента в потенциале $U = -\Xi^2(x^2 + y^2)$ аналогичны рассмотренным выше, поэтому сразу приведем результаты для тех же примеров выбора функции $H(I_1, I_2)$.

Интегралы (для этого случая введем обозначения $I_1 = J_1$, $I_2 = J_2$) имеют вид:

$$J_1 = \frac{\Xi z - v}{2\Xi} e^{-\Xi\tau}, \quad J_2 = \frac{\Xi z + v}{2\Xi} e^{\Xi\tau}. \quad (74)$$

В первом примере ($H(J_1, J_2) = J_{1,2} = 0$) имеем следующее решение:

$$N = B_-(J_1) e^{-\Xi|z|^2 - \tau} + B_+(J_2) e^{\Xi|z|^2 + \tau}, \quad (75)$$

где $J_1 = e^{-\Xi\tau} z$, $J_2 = e^{\Xi\tau} z$, $B_{\pm}(J)$ — так же произвольные функции одного из интегралов движения.

Отличием данного решения от рассмотренного выше является вещественный показатель экспоненты, что позволяет добиться убывания решения на бес-

конечности, что соответствует росту распределения стоков в источнике.

Второму примеру, когда $H(J_1, J_2) = k_2 J_2 + k_1 J_1 + k_0 = 0$, соответствует такое решение:

$$N = B(J_1) e^{-\Xi(\sigma(\tau)|z|^2 + 2\mu(\tau)\bar{z})}, \quad J_1 = (k_2 z + k_0 e^{-\Xi\tau}) / h(\tau), \quad (76)$$

где $\sigma(\tau) = s(\tau)/h(\tau)$, $\mu(\tau) = k_0/h(\tau)$ выражаются через новые вспомогательные функции:

$$s(\tau) = k_2 e^{\Xi\tau} + k_1 e^{-\Xi\tau}, \quad h(\tau) = k_2 e^{\Xi\tau} - k_1 e^{-\Xi\tau}.$$

В третьем случае $H(J_1, J_2) = k_2 J_2^2 + k_1 J_1^2 + k_0 = 0$, аналогичные вычисления дают два листа решения для функции $v(z, \tau)$:

$$v_{1,2}(z, \tau) = v_{\pm} = \Xi \left[-h(2\tau)z \pm 2\sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2} \right] / s(2\tau) \quad (77)$$

и, соответственно, два решения исходного уравнения:

$$N_{1,2} = \frac{B(J_{\mp})}{s(2\tau)} \left(k_2 e^{\Xi\tau} \pm \frac{k_1 k_2 z}{\sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2}} e^{-\Xi\tau} \right) e^{v_{\pm}(z, \tau)\bar{z}}, \quad (78)$$

где соответствующий v_{\pm} интеграл движения имеет вид:

$$J_{\pm} = \left(k_2 e^{\Xi\tau} z \pm e^{-\Xi\tau} \sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2} \right) / s(2\tau). \quad (79)$$

На Рис.9 представлены графики $\Gamma(\tau)$ для трех рассмотренных выше случаев: $\Gamma(\tau) = -s(\tau)/h(\tau)$, $\Gamma_{1,2} = -(h(2\tau) \mp 2\sqrt{-k_1 k_2}) / s(2\tau)$. При соответствующем выборе знаков коэффициентов $k_{0,1,2}$ эти функции вещественны и отрицательны,

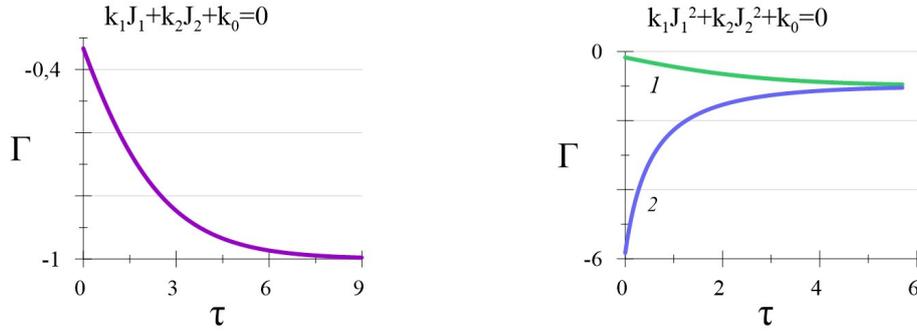


Рис. 9: Асимптотики коэффициента в степени экспоненты (76) и (78) при $|z| \rightarrow \infty$ ($\Omega =$, $k_0 = k_1 =$, $k_2 =$).

что обеспечивает убывание решения на бесконечности.

Решения (78) имеют особенность в точках $z_0(\tau) = \pm \sqrt{-k_0 s(2\tau)/(k_1 k_2)}$, в которых подкоренное выражение в знаменателе обращается в ноль. Как видно из (77) эти же точки являются точками ветвления, т.к. две ветви функции $v(z, \tau)$ равны в них, а так же в них принимают одинаковые значения и интегралы движения (79). Этот факт позволяет устранить особенности в решении (78). Для этого рассмотрим сумму функций $N = N_1 + N_2$, которая так же является решением исходного линейного уравнения:

$$N = \frac{B(J_-) + B(J_+)}{s(2\tau)} k_2 e^{\Xi\tau} + k_1 k_2 z e^{-\Xi\tau} \frac{B(J_-) e^{v_1(z, \tau)\bar{z}} - B(J_+) e^{v_2(z, \tau)\bar{z}}}{\sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2}}. \quad (80)$$

Исследуем поведение данного решения вблизи точек z_0 , для этого рассмотрим предел $z \rightarrow z_0(\tau)$. Предел первого слагаемого в (80):

$$L_1 = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{B(J_-) + B(J_+)}{s(2\tau)} k_2 e^{\Xi\tau} = 2k_2 \frac{B(J_0)}{p(2\tau)} e^{v_0 \bar{z} + \Xi\tau}, \quad (81)$$

где индекс "0" имеют соответствующие величины при $z = z_0$.

Для нахождения предела второго слагаемого необходимо применить прави-

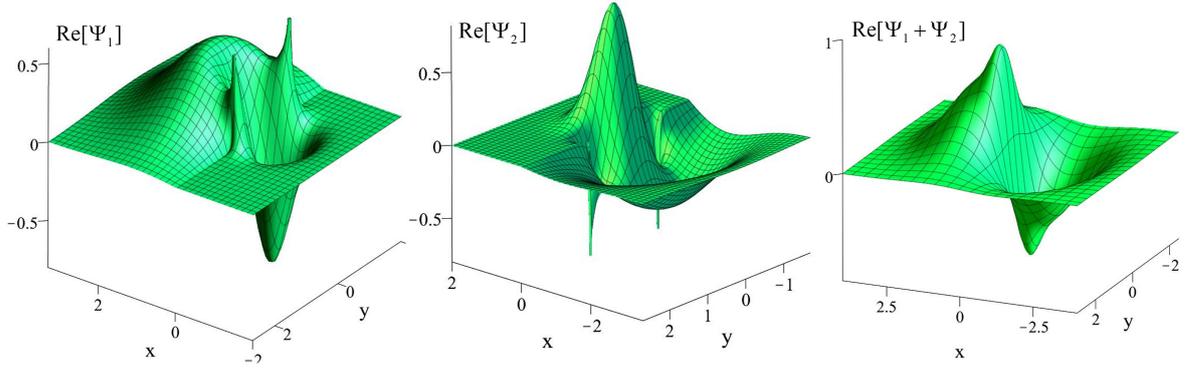


Рис. 10: Вещественная часть решения (78) при значениях параметров: $B(J) = 1$, $\Xi = 0.3$, $k_0 = -1$, $k_1 = -1$, $k_2 = 5$.

ло Лопиталья, т.к. числитель и знаменатель стремятся к нулю при $z \rightarrow z_0$:

$$\begin{aligned}
 L_2 &= C_0 \lim_{z \rightarrow z_0} z \frac{B(J_-)e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} - B(J_+)e^{v_2(z,\tau)\bar{z}}}{\sqrt{z_0^2 - z^2}} = \frac{0}{0} = \\
 &= C_0 \lim_{z \rightarrow z_0} \left[B'_- J'_- e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} - B'_+ J'_+ e^{v_2(z,\tau)\bar{z}} + B_- v'_1 e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} - \right. \\
 &\quad \left. - B_+ v'_2 + e^{v_2(z,\tau)\bar{z}} \right] / \left[\frac{-z}{\sqrt{z_0^2 - z^2}} \right].
 \end{aligned}$$

где $C_0 = \sqrt{k_1 k_2} e^{-\Xi \tau} / s(2\tau)$, $B_{\pm} = B(J_{\pm})$.

После некоторых вычислений получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 L_2 &= -C_0 \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{\sqrt{z_0^2 - z^2}}{z} \left[\frac{e^{\Xi \tau} k_2}{s(2\tau)} \left(B'_- e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} - B'_+ e^{v_2(z,\tau)\bar{z}} \right) - \right. \\
 &\quad \frac{\Xi h(2\tau)}{s(2\tau)} \left(B_- e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} - B_+ e^{v_2(z,\tau)\bar{z}} \right) + \frac{e^{-\Xi \tau} \sqrt{k_2 k_2}}{s(2\tau)} z \left(\frac{B'_- e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} + B'_+ e^{v_2(z,\tau)\bar{z}}}{\sqrt{z_0^2 - z^2}} \right) \\
 &\quad \left. - \frac{2\Xi \sqrt{k_1 k_2}}{s(2\tau)} z \left(\frac{B_- e^{v_1(z,\tau)\bar{z}} + B_+ e^{v_2(z,\tau)\bar{z}}}{\sqrt{z_0^2 - z^2}} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Первые два члена стремятся к нулю, т.к. слагаемые входящие в разности $(v_{1,2}, J_{\pm}, B_{\pm})$ равны в точке z_0 . Слагаемые в суммах в третьем и четвертом членах так же равны в точке z_0 .

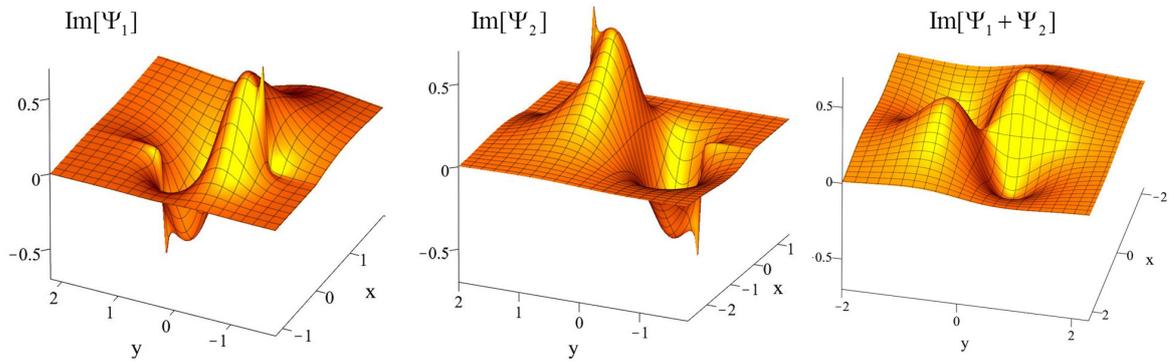


Рис. 11: Мнимая часть решения (78) при значениях параметров: $B(J) = 1$, $\Xi = 0.3$, $k_0 = -1$, $k_1 = -1$, $k_2 = 5$.

Окончательно получается следующее выражение для предела:

$$\lim_{z \rightarrow z_0} N = L_1 + L_2 = 2k_2 B_0 \frac{s(2\tau)e^{\Xi\tau} + 2\Xi k_1 z_0 e^{-\Xi\tau}}{s^2(2\tau)} e^{v_0 \bar{z}} - \frac{2k_1 k_2 z_0}{s^2(2\tau)} B'_0 e^{v_0 \bar{z} - 2\Xi\tau}. \quad (82)$$

Таким образом, сумма сингулярных в точках ветвления решений, относящихся к разным ветвям, образует новое решение, не имеющее особенностей в точках ветвления. На Рис.10-11 представлены вещественная и мнимая части решения (80).

2.7 Связь линейного уравнения диффузии с уравнениями гидродинамики и ривертонами

В последнем разделе данной главы рассмотрим связь развитого подхода с другими разделами физики, а также возможные обобщения, связанные с введением уравнений большей размерности.

2.7.1 Гидродинамическая аналогия

На наличие у рассматриваемого типа параболических уравнений многозначных решений указывает, в том числе, возможность сформулировать задачу диффузии в форме уравнений гидродинамики, для которых хорошо известно наличие многозначных решений, описывающих опрокидывание волн [265]. Связь уравнения (14) с квазилинейными уравнениями гидродинамики позволяет обобщить результаты данной главы на случай уравнений большей размерности с помощью решений специального типа — ривертонов, введенных в работах [205–208] для многомерных эллиптических и гиперболических уравнений.

Покажем, что уравнение (14) связано с гидродинамическими уравнениями потенциального потока вязкой жидкости [233].

Для этого введем функцию $\Phi = \ln N$, играющую роль потенциала вязкого гидродинамического течения:

$$\Phi_t = D(t)\Delta\Phi + D(t)\left[(\Phi_x)^2 + (\Phi_y)^2\right] + U(\mathbf{x}, t). \quad (83)$$

Далее введем градиентное векторное поле $\mathbf{u} = -2D(t)\nabla\Phi = (u_x, u_y)$. Вычисляя компоненты градиента из уравнения (83), приходим к следующему уравнению для $\mathbf{u}(x, y, t)$:

$$\mathbf{u}_t + (\mathbf{u}, \nabla)\mathbf{u} = 2D(t)\Delta\mathbf{u} - \mathbf{F}, \quad (84)$$

где поле объемных сил \mathbf{F} имеет вид:

$$\mathbf{F} = 2D(t)\nabla U + 2\frac{d \ln D}{dt}\mathbf{u}.$$

Коэффициент $2D(t)$ имеет смысл кинематической вязкости.

Проделанные вычисления переносятся на уравнение (14) в произвольной координатной размерности.

Связь линейных параболических уравнений с нелинейным уравнением Навье-Стокса (84) указывает на принципиальную возможность существования в диффузионной среде структур, обладающих волновыми свойствами — опрокидыванием волновых фронтов и многозначностью, которая в гидродинамике объясняется возникновением ударных волн.

Функция $v(z, t)$, участвующая в записи решения (40), связана с компонентами скорости гидродинамического потока:

$$u_x + iu_y = -2D \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} + i \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) = -D \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{z}} = -2D(t)v(z, t) = V, \quad (85)$$

где учтено что $\Phi = \ln N = \ln A + v(z, t)\bar{z}$.

В связи с этим, первое уравнение системы (35) можно интерпретировать как уравнение гидродинамического течения, записанное в комплексной форме. Для вещественной и мнимой компонент скорости потока $W = 8D(t)v(z, t) = w_x + iw_y$ приходим к паре уравнений Эйлера (без вязкости):

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_x}{\partial t} + w_x \frac{\partial w_x}{\partial x} + w_y \frac{\partial w_x}{\partial y} &= F_x, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} + w_x \frac{\partial w_y}{\partial x} + w_y \frac{\partial w_y}{\partial y} &= F_y, \end{aligned} \quad (86)$$

где F_x и F_y — компоненты объемной силы: $F(z, t) = -8D(t)M(z, t) + 8\frac{d \ln D}{dt}v(z, t) = F_x + iF_y$.

Для стандартного случая $D = D_0 = \text{const}$ представим функцию F в виде

производной по z от функции $\Pi(z, t) = -p(x, y, t) - iq(x, y, t)$:

$$F(z) = \frac{1}{2} \frac{d\Pi}{dz} = -\frac{\partial p}{\partial x} + i \frac{\partial p}{\partial y}. \quad (87)$$

Тогда система уравнений для компонент скорости примет такой вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_x}{\partial t} + w_x \frac{\partial w_x}{\partial x} + w_y \frac{\partial w_x}{\partial y} &= -p_x, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} + w_x \frac{\partial w_y}{\partial x} + w_y \frac{\partial w_y}{\partial y} &= p_y. \end{aligned} \quad (88)$$

где функция p удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\Delta p = 0.$$

Нестандартный вид объемной силы затрудняет использование полученной аналогии в прикладных гидродинамических задачах. С другой стороны, можно сказать, что диффузионному процессу соответствует объемная сила специфического вида $\mathbf{F} = (-p_x, p_y)$ (87).

2.7.2 Многозначные решения уравнения диффузии в размерности $d > 2$ и ривертонны

В случае многомерного уравнения диффузии введение ривертоннов [205–208] связано с решением второго уравнения системы (16):

$$(\nabla\phi)^2 = \sum_{k=1}^d \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_k} \right)^2 = 0, \quad (89)$$

которое в этом случае не решается с помощью введения комплексных переменных. Но существует особый класс решений квазилинейных уравнений, который удовлетворяет, в том числе, уравнению (89). Приведем без доказательства основные результаты, необходимые для построения решений.

Утверждение 2.

Комплексная функция $\phi(\mathbf{x}, t)$, где \mathbf{x} — вектор в R^d , удовлетворяющая системе квазилинейных уравнений первого порядка:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x^\alpha} = A_\alpha(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad \alpha = \overline{1, d} \quad (90)$$

может быть найдена как решение алгебраического уравнения

$$H(\phi, \tau + \mathbf{x}\mathbf{A}(\phi)) = 0$$

с произвольной дифференцируемой функцией $H(\phi, \xi)$ и комплексной вектор-функцией $\mathbf{A}(\phi) = (A_1(\phi), A_2(\phi), \dots, A_d(\phi))$.

Функции $\phi(\mathbf{x}, t)$, удовлетворяющие системе уравнений (90) называются **ривертонами**.

Утверждение 3.

При выполнении условия

$$\sum_{\alpha=1}^d [A_\alpha(\phi)]^2 = 0 \quad (91)$$

функция $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ удовлетворяет d -мерным уравнениям Лапласа и Эйконала:

$$\Delta \phi = 0, \quad (\nabla \phi)^2 = 0.$$

Построенные таким образом функции можно выбрать в качестве решений уравнения (89).

Поскольку ϕ по определению удовлетворяет (90), то при условии $\phi_t \neq 0$, уравнение для $\theta(\mathbf{x}, t)$ сводится к линейному уравнению первого порядка:

$$2D(\nabla\theta, \mathbf{A}(\phi)) = 1. \quad (92)$$

Учитывая, что на d компонент вектор-функции $\mathbf{A}(\phi)$ накладывается только одно условие (91), решение уравнения (92) относительно $\theta(\mathbf{x}, t)$ будем искать в следующем виде:

$$\theta = \frac{1}{2D}(\mathbf{B}(\phi), \mathbf{x}) + Q(\phi), \quad (93)$$

где векторное поле $\mathbf{B}(\phi)$ и функция $Q(\phi)$ некоторые вспомогательные функции ϕ . В результате приходим к единственному уравнению, определяющему выбор вектор-функции $\mathbf{B}(\phi)$:

$$(\mathbf{A}(\phi), \mathbf{B}(\phi)) = 1, \quad (94)$$

при произвольном выборе $Q(\phi)$.

Используя подстановку (93), вычисляем явный вид потенциала $U(\mathbf{x}, t)$:

$$U(\mathbf{x}, t) = -D(\mathbf{B}, \mathbf{B}) - 2D(\mathbf{B}'(\phi), \mathbf{A})\phi_t. \quad (95)$$

Таким образом, можно сформулировать Утверждение 4:

Для любого комплексного значения параметра λ функция $N(\mathbf{x}, t; \lambda)$:

$$N(\mathbf{x}, t; \lambda) = e^{\lambda\phi(\mathbf{x}, t)} \exp\left((\mathbf{B}(\phi), \mathbf{x}) + Q(\phi)\right), \quad (96)$$

является решением параболического уравнения (14) с потенциалом (95), не за-

висящим от λ , при выполнении условий:

- 1) функция ϕ является ривертоном (т.е. является решением системы (90)),
- 2) θ имеет вид (93) с произвольной функцией $Q(\phi)$,
- 3) вектор-функции $\mathbf{A}(\phi)$ и $\mathbf{B}(\phi)$ удовлетворяют двум алгебраическим уравнениям:

$$(\mathbf{A}(\phi), \mathbf{A}(\phi)) = 0, \quad (\mathbf{A}(\phi), \mathbf{B}(\phi)) = 1. \quad (97)$$

В [247] подробно рассмотрены различные варианты потенциалов.

2.8 Выводы

Найдено представление линейного уравнения диффузии в виде системы квазилинейных уравнений первого порядка, а также построена процедура нахождения соответствующих решений, описывающих эволюцию квазилинейных структур. Связь решений исходного уравнения с решениями квазилинейных уравнений определяет особые свойства полученных решений, такие как многолистность и наличие сингулярностей в точках ветвления.

Показано, что поведение решения определяется законом движения точек ветвления, который, в свою очередь, однозначно определяется потенциалом уравнения. В случае неоднородного распределения источников/стоков ТД (функция потенциала в уравнении), вещественный потенциал соответствует степеням неоднородности по пространственным переменным не выше 2.

Найденные решения являются обобщением частного случая — классических решений, получаемых с помощью метода разделения переменных. Предложенный алгоритм вычисления решений работает и в случае, когда переменные в уравнении не разделяются, в частности, для потенциала, зависящего от времени.

Наличие дополнительного вырождения многолистных решений, связанного с выбором произвольных функций, позволяет использовать их для решения краевых задач. В случае многолистных решений, результирующее решение может быть получено склейкой решений, соответствующих отдельным листам.

Получанная система квазилинейных уравнений тождественна уравнениям гидродинамики вязкой жидкости, что позволяет использовать результаты работ [205–208, 247] для обобщения алгоритма построения решений на случай произвольной размерности.

Глава 3. Локализованные решения уравнения нелинейной диффузии и нелинейные функциональные подстановки

Как правило, диффузия ТД описывается нелинейным уравнением, содержащим в правой части различные добавки, учитывающие взаимную рекомбинацию, генерацию источником излучения, выход на стоки и проч. При облучении материала создаются высокие неравновесные концентрации ТД, что приводит к изменению структуры материала и, как следствие, изменению его физических характеристик. Коэффициент диффузии в этом случае начинает зависеть от концентраций ТД. Т.е. для реалистичного описания роста сверхрешеток в твердом теле необходимо рассмотрение нелинейных уравнений диффузии. Данная глава посвящена исследованию когерентных структур, возникающих в нелинейной среде со степенной зависимостью коэффициента диффузии от концентрации дефектов: $\mathcal{D}(n) \sim n^p$, в частности, среде с быстрой диффузией ($p = -1$).

Для поиска точных решений соответствующих нелинейных уравнений диффузии, развивается обобщение метода функциональных подстановок (МФП) — нелинейные функциональные подстановки (НФП) [249, 251, 252, 261]. С помощью предложенного метода строятся точные решения уравнения нелинейной диффузии, в том числе, волновые решения уравнения быстрой диффузии (УБД) и исследуются симметрии этих уравнений.

Метод НФП формулируется для случая одной пространственной переменной, но, как отмечалось в [254], случаи низкой размерности представляют особый интерес, как не перегруженные деталями и позволяющие лучше выявить нелинейные особенности рассматриваемых процессов.

3.1. Частные решения уравнения быстрой диффузии

В общем виде, в случае одного типа дефектов, одномерное УБД записывается следующим образом:

$$n_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{D_0}{n + n_0} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + J(n_x, n, x, t). \quad (98)$$

Здесь под x следует понимать декартову координату, принимающую как любые вещественные значения, так и только положительные — в случае, когда ось X направлена в глубь материала с границей $x = 0$. D_0 и n_0 — некоторые размерные постоянные. От постоянной D_0 можно избавиться выполнив замены переменных, а в случае $J = J(n_x, x, t)$ УБД может быть записано в виде $\tilde{n}_t = (\ln \tilde{n})_{xx} + \tilde{J}(\tilde{n}_x, x, t)$.

Простейший вариант выбора функции источника дефектов $J = g = const$ соответствует генерации ТД с постоянной скоростью, т.е. без учета влияния их концентрации на этот процесс и без учета взаимодействия их друг с другом.

Основные результаты этой главы получены с помощью нелинейных функциональных подстановок — расширения метода функциональных подстановок. Прежде чем формулировать алгоритм нахождения решения с помощью данных методов, покажем на некоторых примерах, что нелинейная диффузия является фактором, приводящим к образованию когерентных структур. Т.е., что УНД имеет некоторые частные решения, описывающие растущие или устойчивые локализованные в пространстве структуры. При этом эти решения будут получены с помощью подстановок, аналогичных МФП и НФП.

Пример 1

В качестве примера, рассмотрим уравнение УБД такого вида [266]:

$$n_t = (\ln n)_{xx} + n_x + \gamma, \quad (99)$$

где $n(x, t)$ и γ — безразмерные концентрация и источник. Слагаемое n_x в правой части может описывать перенос, не связанный с диффузией. Также от этого слагаемого легко избавиться перейдя от переменных (x, t) к переменным $(x + t, t)$.

Покажем, что уравнение (99) имеет локализованные в пространстве решения.

Перепишем уравнение в следующем виде:

$$n_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{n_x}{n} \right) + \frac{n_x}{n} n + \gamma.$$

Далее сделаем дифференциальную подстановку $w(x, t) = n_x/n$, тогда уравнение (99) можно записать в виде эквивалентной ему системе двух линейных уравнений:

$$n_x = wn, \quad n_t = wn + w_x + \gamma,$$

в которые входит неизвестная функция $w(x, t)$, которая не может быть найдена из самого уравнения (99). Для ее отыскания необходимо воспользоваться условием совместности уравнений системы: $n_{xt} = n_{tx}$. Выполняя дифференцирование и приравнявая смешанные производные, получаем следующие уравнения для функции w :

$$w_t - w_x = 0, \quad w_{xx} - ww_x - \gamma w = 0.$$

Из первого уравнения следует, что $w(x, t) = \tilde{w}(x + t)$. Второму уравнению, с помощью подстановки $\tilde{w} = -2 (\ln Z)'$ можно придать вид:

$$Z'' - \gamma Z (\ln |Z| - C_0/\gamma) = 0, \quad (100)$$

где C_0 — постоянная интегрирования. Выполним замены: $U = cZ$, $C_0 = -\gamma \ln c$, тогда уравнение (100) примет вид:

$$U'' - \gamma U \ln |U| = 0. \quad (101)$$

Уравнение (101) автономное, что позволяет провести качественный анализ его решений, т.е. получить условия существования локализованных структур. Соответствующая ему динамическая система:

$$U' = W, \quad W' = \gamma U \ln |U| \quad (102)$$

имеет следующие стационарные точки: $(U_0, W_0) = (0, 0)$, $(\pm 1, 0)$. Первая из них приводит к решению, обращаемому в бесконечность в стационарной точке, что не представляет интереса с физической точки зрения. Поэтому исследуем решение вблизи оставшейся пары точек $(\pm 1, 0)$.

Соответствующее характеристическое уравнение имеет вид:

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ \gamma(\ln |U_0| + 1) & -\lambda \end{bmatrix} = 0,$$

откуда вычисляем собственные значения: $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\gamma}$.

Периодическим вблизи стационарной точки решениям соответствуют мни-

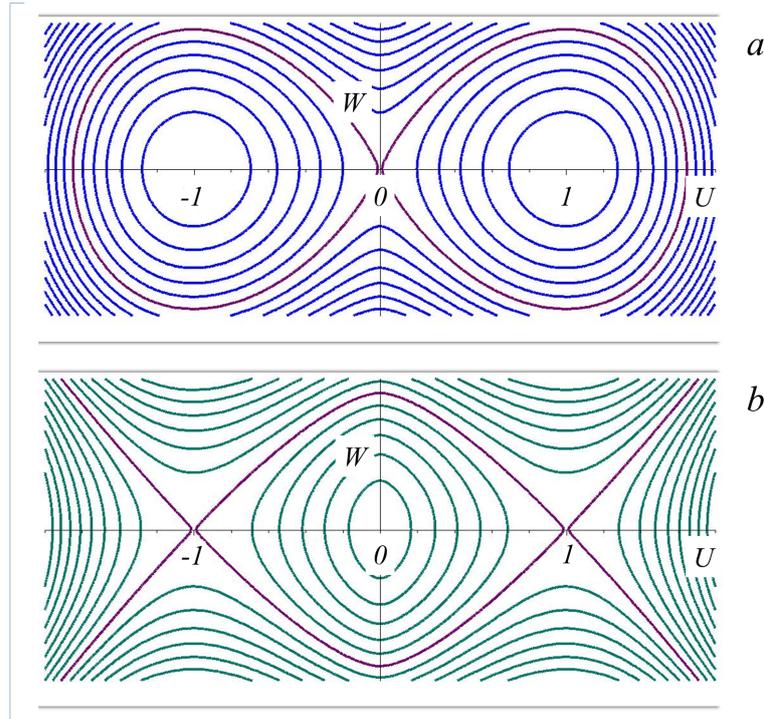


Рис. 12: Фазовые портреты системы (102) для случаев: а) $\gamma = -1$, б) $\gamma = 1$.

мые собственные значения, т.е. случай, когда $\gamma < 0$ и соответствующее слагаемое описывает равномерное распределение стоков ТД.

Система (102) имеет следующий интеграл:

$$2W^2 + \gamma (2U^2 \ln U - U^2) = w_0,$$

описывающий фазовые траектории. На Рис.12 приведены фазовые портреты для двух случаев $\gamma > 0$ — генерация ТД и $\gamma < 0$ — поглощение.

Для нахождения вида функции $n(x, t)$ нужно решить эквивалентную уравнению (99) систему уравнений. Откуда с учетом того, что $w(x, t) = -2(\ln Z(x + t))'$ находим:

$$n(x, t) = \frac{c_1 t + c_0}{Z^2(x + t)}.$$

Здесь $c_{0,1}$ — постоянные интегрирования. Таким образом, условие существования локализованных решений, в данном случае, регулируется только знаком источника в правой части УБД.

Полученное решение соответствует обобщенному разделению переменных, т.е. решению вида $n = F_1(t)F_2(x+t)$. Но важно то, что оно было проанализировано без решения исходного уравнения. Т.е. если УНД может быть представлено в виде некоторой эквивалентной ему системы уравнений, то задача сводится к поиску решения уравнения совместности.

3.2 Нелинейные функциональные подстановки

Вначале рассмотрим метод функциональных подстановок (МФП) [240–243] на примере уравнения быстрой диффузии вида $n_t = (\ln n)_{xx}$. Суть метода заключается в рассмотрении системы уравнений, называемых базовыми соотношениями:

$$T_x = A(x, t)T, \quad T_t = B(x, t)T. \quad (103)$$

Функции A , B называются базовыми функциями, а $T(x, t)$ — некоторая вспомогательная функция. Условием совместности пары уравнений (103) является соотношение: $B_x = A_t$. При этом полагается, что функция $T(x, t)$ является известным решением некоторого вспомогательного уравнения, называемого добавочным. В случае уравнения быстрой диффузии она должна удовлетворять следующему уравнению:

$$T_t T_x = T_{xx} T. \quad (104)$$

Выполняя в (104) замены производных с помощью базовых соотношений и используя условие совместности, получаем уравнение для одной функции $A(x, t)$:

$$A_t = (\ln A)_{xx} + A_x.$$

Или, делая замены переменных $z = x + t$, $A(x + t, t) = n(z, t)$, получаем уравнение быстрой диффузии: $n_t = (\ln n)_{zz}$. Таким образом, решения исходного уравнения можно получать зная решения добавочного уравнения. В данном случае: $n(z, t) = \frac{\partial}{\partial z} \ln A(z - t, t)$. Модификацией уравнения (104) можно добиться наличия в уравнении быстрой диффузии различных слагаемых, например внешнего источника, а также расширить класс получаемых решений.

Поскольку уравнение (104) само является нелинейным и его общее решение не известно, то для его анализа также необходимы специальные методы.

Рассмотрим нелинейное уравнение (исходное или добавочное) в общем виде:

$$F(T, T_x, T_t, T_{xx}, T_{xt}, T_{tt}, \dots, x, t) = 0. \quad (105)$$

Обобщая выражения для подстановок (103), запишем первые производные в виде некоторых функций переменных T, x, t :

$$T_x = u(T, x, t), \quad T_t = v(T, x, t). \quad (106)$$

Условие совместности соотношений (106) имеет вид:

$$u_t + vu_T = v_x + uv_T. \quad (107)$$

Подставляя же (106) в исходное уравнение (105), получаем его представление в

виде уравнения относительно u и v :

$$F(T, u, v, u_x + uu_T, v_t + vv_T, u_t + vu_T, \dots, x, t) = 0, \quad (108)$$

как функций трех переменных x, t, T . При этом, порядок уравнения понижается. Совокупность уравнений (107) и (108) эквивалентна выполнению исходного уравнения.

Отыскание решений системы уравнений (107) и (108) в общем случае оказывается не менее сложной задачей, чем решение исходного уравнения (105), поэтому удобно задавать зависимость u и v от T , что позволяет находить частные решения (105) интегрированием системы базовых соотношений (107).

Эта процедура имеет множество разновидностей, которые определяются функциональной формой $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$. Например, можно использовать полиномиальные подстановки:

$$u(T, x, t) = \sum_{k=0}^M U_k(x, t)T^k, \quad v(T, x, t) = \sum_{k=0}^M V_k(x, t)T^k. \quad (109)$$

В этом случае (107) и (108) сводятся к совокупности уравнений для функций $U_k(x, t)$, $V_k(x, t)$, интегрирование которых оказывается простым. В других ситуациях совокупность уравнений для $U_k(x, t)$, $V_k(x, t)$ представляет замкнутую систему новых нелинейных уравнений, что означает, что получено одно из преобразований Бэклунда исходного уравнения. Далее рассмотрим несколько примеров применения НФП к уравнениям диффузионного типа.

Пример 1

Будем искать решение УНД следующего вида [266]:

$$T_t - \frac{\partial}{\partial x} (D(T)T_x) + J(T_x, T) = 0. \quad (110)$$

Зависимость коэффициента диффузии и источника от T определим из условий применимости конкретного типа подстановок к решению (110).

В качестве первого варианта рассмотрим решения, которые удовлетворяют следующим базовым соотношениям:

$$T_x = g(x, t)U(T) = u(T, x, t), \quad T_t = f(x, t)V(T) + W(T) = v(T, x, t). \quad (111)$$

Подставляя эти соотношения в уравнение (110), приходим к следующему выражению:

$$f(x, t)V(T) + W(T) = g_x(x, t)R(T) + g^2(x, t)R'(T)U(T) + J(T). \quad (112)$$

Здесь введено обозначение: $R = D(T)U(T)$. Уравнение совместности (107) в данном случае примет такой вид:

$$g_t(x, t)U(T) - f_x(x, t)V(T) + f(x, t)g(x, t)[U, V] + g[U, W] = 0. \quad (113)$$

Для сокращения записи введено обозначение: $[U, V] = U'(T)V(T) - U(T)V'(T)$.

В обоих уравнениях для построения решений необходимо провести разделение переменных. Рассмотрим два варианта разделения переменных.

Первый класс решений соответствует выбору функций $g(x, t)$ и $f(x, t)$ в

следующей форме: $g = g(x)$, $f = f(x)$, с условиями:

$$g_x = \lambda + \mu g^2, \quad f = \beta + \alpha g^2, \quad \mu R + R'U = \alpha V, \quad J + \lambda R = \beta V, \\ \gamma V = [U, V], \quad [U, W] = 0, \quad \lambda = \gamma\beta/(2\alpha), \quad \mu = \gamma/2.$$

Система уравнений для R , J , U и V состоит из трех уравнений, поэтому одна функция остается произвольной, что позволяет, задавая ее получать точные решения (110). В качестве произвольной функции удобно выбрать функцию $V(T)$. В этом случае функцию $U(T)$ можно представить в таком виде: $U = V(T)P(T)$.

Из приведенной выше системы находим: $P(T) = \gamma \int \frac{dT}{V(T)}$, $W = F(U)$, где $F(U)$ — произвольная дифференцируемая функция $U(T)$. Решение же для R имеет вид: $R = D(T)U(T) = C(T)e^{-\Theta(T)}$, $\Theta(T) = \int \frac{dT}{V(T)P(T)}$. Для функции $C(T)$ получаем следующее соотношение: $C(T) = C_0 + \alpha \int \frac{e^{\Theta(T)} dT}{P(T)}$, для $J(T)$:

$$J(T) = \beta V - \lambda R + W = \beta V(T) - \lambda \left(C_0 + \alpha \int \frac{e^{\Theta(T)} dT}{P(T)} \right) e^{-\Theta(T)} + F(U(T)).$$

Уравнение для функции g интегрируется с помощью замены $g = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \ln \chi$. Функция $\chi(x)$ удовлетворяет уравнению: $\chi'' + k^2 \chi = 0$, где $k^2 = \gamma^2 \beta / (4\alpha)$. Это уравнение может иметь как периодические тригонометрические решения при $k^2 > 0$, так и гиперболические при $k^2 < 0$. Отсюда следует, что для всех типов уравнений с заданным $V(T)$ могут существовать пространственно-периодические решения, указывающие на формирование регулярных структур в средах с нелинейной диффузией и нелинейным источником.

Решение для функции T , играющей роль концентрации, должно находиться

из уравнений:

$$T_x = g(x)V(T)P(T), \quad T_t = f(x)V(T).$$

Интегрируя первое уравнение, находим: $\int \frac{dT}{VP} = \Theta(T) = \int g(x)dx + \xi(t) = \zeta(x, t)$. Из этого соотношения следует, что функция T имеет такой вид:

$$T = H(\zeta(x, t)), \quad (114)$$

где функция $H(\zeta)$ является обратной к функции $\Theta(T)$. Для того, чтобы это решение было также решением второго базового уравнения достаточно подобрать подходящим образом только функцию $\xi(t)$. Подстановка (114) во второе базовое соотношение приводит к соотношению для $\xi(t)$ следующего вида:

$$\dot{\xi} = \frac{1}{H'(\zeta)} \left(f(x)V(H(\zeta)) + F(U(H(\zeta))) \right).$$

Правая часть этого соотношения должна представлять собой либо некоторую функцию времени, либо постоянную, которые зависят от выбора функций $V(T)$ и $F(U)$.

Полученные решения для произвольного выбора $V(T)$ и $F(U)$ приводят к решениям с автомодельной переменной $\zeta(x, t)$, которая в случае периодических решений для $\chi = a \cos(kx + \phi_0)$ имеет такой вид:

$$\zeta = -\frac{2}{\gamma} \ln \left(\cos(kx + \phi_0) \right) + \xi(t).$$

Хотя эта переменная и имеет периодически расположенные сингулярности, тем не менее само решение для $T(x, t)$ может быть не сингулярным. Такие случаи интересны с точки зрения отыскания моделей, описывающих возникновение

периодических структур в диффузионной среде.

В качестве примера рассмотрим случай $V(T) = T^{-m}$, где m — вещественное число, отличное от -1 . В результате получаем коэффициент диффузии и источник со степенными зависимостями от T следующего вида:

$$D = -\frac{2\alpha(m+1)^2}{\gamma^2(m-1)}T^{-m-1}, \quad J = -\frac{2\beta m}{m-1}T^{-m} + F(U(T)).$$

Второй класс решений получается при выборе функций g и f в такой форме: $g = g(t)$, $f = f(t)$. Соответствующие уравнения имеют теперь такой вид:

$$\begin{aligned} \dot{g} &= -\gamma g(\alpha g^2 + \beta), \quad f = \beta + \alpha g^2. \\ R'U &= \alpha V, \quad J = W + \beta V, \quad [U, V] = -\gamma U, \quad [U, W] = 0. \end{aligned}$$

В этом случае в качестве произвольной функции удобно выбрать $U(T)$. Интегрируя последнюю систему уравнений находим:

$$\begin{aligned} V &= U(T)Q(T), \quad Q = \gamma \int \frac{dT}{U(T)}, \quad W = F(U), \\ D &= \frac{\alpha}{U} \int Q(T)dT, \quad J = \beta U(T)Q(T) + F(U(T)). \end{aligned}$$

Как и в предыдущем случае решение для T находится из системы:

$$T_x = g(t)U(T), \quad T_t = (\beta + \alpha g^2(t))U(T)Q(T) + F(U(T)).$$

Из первого уравнения следует, что в общем случае решения для T можно записать в автомодельном виде:

$$T = G(\zeta), \quad \zeta = g(t)x + \xi(t). \quad (115)$$

При этом, функция $\xi(t)$ должна вычисляться, исходя из подстановки (115) во второе базовое соотношение, которое принимает такой вид:

$$\dot{\xi} = (\beta + \alpha g^2(t)) \frac{V(G(\zeta))}{G'(\zeta)} - \dot{g}x.$$

Как следует из (115) решения такого типа также представляют собой автономные функции с переменной ζ . Эти функции могут быть осциллирующими по времени, в зависимости от выбора параметров уравнений для $g(t)$, $f(t)$. Для данного варианта можно также получить частные решения при конкретном выборе $V(T)$, как это было сделано в предыдущем разделе.

Пример 2

Второй пример связан с УНД с $D(T) \sim T^2$:

$$T_t = \beta T_{xx} T + kT. \quad (116)$$

В качестве нелинейной подстановки для него рассмотрим следующее соотношение:

$$u(T, x, t) = \phi(x, t) \ln(T) + \psi(x, t).$$

Исходное уравнение в результате такой подстановки преобразуется к виду:

$$v(T, x, t) = \beta \left(\phi_x T \ln T + \psi_x T + \phi(\phi \ln T + \psi) \right) + kT.$$

Подставляя это соотношение в условие совместности приходим к системе уравнений для функций ϕ и ψ , которая имеет следующее решение:

$$\phi = p(t), \quad \psi = r(t)x + n(t). \quad (117)$$

Функции $c(t)$, $b(t)$, $q(t)$ имеют вид:

$$r = k(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1}, \quad p = C_2(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1},$$

$$n = (C_3 - C_2 k t)(C_1 k e^{-kt} - \beta)^{-1}.$$

В результате уравнения (106) запишутся в таком виде:

$$T_x = p(t) \ln T + r(t)x + n(t), \quad (118)$$

$$T_t = \beta p(t) \left(p(t) \ln T + r(t)x + n(t) \right) + T(\beta r(t) + k). \quad (119)$$

Эта система первого порядка совместна по построению, но не интегрируется точно. Поэтому для построения ее решения нужно прибегать к численному решению одного из уравнений.

Следует особо подчеркнуть, что приведенный пример демонстрирует специфическую возможность метода НФП получать решения в виде упрощенных уравнений первого порядка. Такой способ представления решений можно назвать полуточным.

Заметим, что исходное уравнение можно представить с помощью замены $n = \ln T$ в виде уравнения диффузии:

$$n_t = \beta \frac{\partial}{\partial x} (e^n n_x) + k$$

с коэффициентом диффузии $D(n) = e^n$ и постоянным внешним источником с интенсивностью $J = k$.

3.2.1 Волновые решения уравнения быстрой диффузии

Используем НФП для поиска новых решений уравнения быстрой диффузии при некоторых функциях источника $J(x, t)$, не зависящих от концентрации [261]:

$$n_t = (\ln n)_{xx} + \tilde{C}n_x + J(x, t), \quad (120)$$

где $\tilde{C} = const$, а множитель D_0 в диффузионном члене в дальнейшем полагается равным единице, чего легко можно добиться заменой переменных.

Добавочное уравнение в данном случае имеет вид:

$$T_t (T_x + q(x, t)T) = T_x (CT_x + p(x, t)T) + T (T_{xx} + r(x, t)T). \quad (121)$$

Функции $q(z, t)$, $p(x, t)$, $r(x, t)$ определяются из условия перехода (121) в уравнение (120) и задают вид источника $J(x, t)$.

Структура уравнения (121) определяется тем, что в него должны входить все возможные комбинации производных и самой функции T , которые после использования базовых соотношений могут дать члены, входящие в (120).

Для перехода к УБД используем в (121) базовые соотношения введенные выше:

$$T_x = A(x, t)T, \quad T_t = B(x, t)T.$$

Подставляя в условие совместности $B_x = A_t$ функцию $B(x, t)$:

$$B = \frac{CA^2 + A_x + A^2 + pA + r}{A + q}$$

и вводя переменную $A = n(x, t) - q$ приходим к УБД вида (120) с дополнительными членами:

$$n_t = (\ln n)_{xx} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(C + 1)n + \frac{(C + 1)q^2 - pq + r - q_x}{n} \right] - 2(C + 1)q_x + p_x + q_t. \quad (122)$$

Таким образом, $n(x, t)$ — решения УБД, связаны с решениями вспомогательного уравнения $T(x, t)$: $n(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \ln T(x, t) + q(x, t)$.

Для решения вспомогательного уравнения будем использовать НФП такого вида:

$$T_x = u(x, t, T) = U_1(x, t)T + U_N(x, t)T^N,$$

$$T_t = v(x, t, T) = V_1(x, t)T + V_N(x, t)T^N;$$

$$T_{xx} = (U_{1,x} + U_1^2)T + ((N + 1)U_1U_N + U_{N,x})T^{N-1} + NU_N^2T^{2N-1}.$$

Уравнение (121) следует дополнить условием совместности для производных T_x, T_t в подстановках:

$$u_t + v \frac{\partial u}{\partial T} = v_x + u \frac{\partial v}{\partial T}.$$

После приравнивания нулю коэффициентов при разных степенях T получа-

ем такую систему уравнений на коэффициенты в подстановках:

$$(e_1) \quad U_{1,t} - V_{1,x} = 0,$$

$$(e_2) \quad U_{N,t} - V_{N,x} + (N - 1)V_1U_N - (N - 1)U_1V_N,$$

$$(e_3) \quad (C + N)U_N - V_N = 0,$$

$$(e_4) \quad U_{N,x} + (2C + N + 1)U_1U_N + (U_1 - V_1 + p)U_N - (U_1 + q)V_N,$$

$$(e_5) \quad U_{1,x} + (C + 1)U_1^2 - (U_1 + q)V_1 + (U_1 + p)U_1 + r.$$

Здесь первая пара уравнений получается из условия совместности, остальные соответствуют (121).

Чтобы придать уравнению (122) вид, аналогичный (120) необходимо выполнение следующих условий:

$$(e_6) \quad (C + 1)q^2 - pq + r - q_x = 0,$$

$$(e_7) \quad -2(C + 1)q_x + p_x + q_t = J(x, t),$$

которые наряду с приведенными выше уравнениями составляют систему, эквивалентную уравнению (120).

Из уравнений (e_1) и (e_3) находим:

$$U_1 = \phi_x, \quad V_1 = \phi_t, \quad V_N = (C + N)U_N.$$

Введем переменные $U_N = e^\theta$, $\theta = \psi - (N - 1)\phi$.

Из уравнений (e_4) , (e_5) находим функции $p(x, t)$, $r(x, t)$:

$$p = (N - C - 2)\phi_x + (C + N)q + \phi_t - \psi_x,$$

$$r = q\psi_t - \phi_{xx} + (1 - N)\phi_x^2 + [\psi_x - (C + N)q]\phi_x.$$

Уравнение (e_2) превращается в уравнение для функции $\psi(x, t)$:

$$\psi_t = (C + N)\psi_x,$$

его решение запишем в виде: $\psi = 2m H(x + (N + C)t)$, где m — некоторая постоянная.

Сделаем замену $q = -\phi_x + w(x, t)$, тогда оставшиеся уравнения примут вид:

$$w_x - 2m H'(x + (N + C)t)w + (N - 1)w^2 = 0,$$

$$w_t - (C - N + 2)w_x - 2M H''(x + (N + C)t) - J(x, t).$$

Для дальнейших вычислений удобно записать источник в таком виде:

$$J = g^{[1,0]}(x, (C - N + 2)t + x),$$

где $g^{[1,0]}(z, t) = \frac{\partial}{\partial z}g(z, t)$. Тогда из последнего уравнения находим:

$$w = F((C - N + 2)t + x) + \frac{m}{N - 1}H'(x + (N + C)t) +$$

$$-\frac{1}{C - N + 2}g(x, (C - N + 2)t + x).$$

Осталось еще одно уравнение:

$$w_x - \psi_x w + (N - 1)w^2 = 0.$$

После подстановки $m = N - 1$, $C = \sigma + N - 2$ и введения новой функции $g(x, t)$:

$$\sigma g(x, \sigma t + x) = G(x, t), \quad g(x, t) = \sigma G\left(x, \frac{t - x}{\sigma}\right),$$

получаем уравнение, связывающее функции $F(\sigma t + x)$ и $H((2m + \sigma)t + x)$, входящие в решение и функцию $G(x, t)$, определяющую источник:

$$\frac{\partial G}{\partial x} + 2mF G - m G^2 = F' + m F^2 + H'' - m (H')^2. \quad (123)$$

При нулевом источнике из уравнения (123) находятся функции $F((C - N + 2)t + x)$ и $H(x + (N + C)t)$ методом разделения переменных. При $G(x, t) \neq \text{const}$ мы получаем уравнение для функции, определяющей источник.

Выражение, связывающее источник $J(x, t)$ и вспомогательную функцию $G(x, t)$ имеет вид:

$$J(x, t) = \sigma G_x - G_t,$$

где использовано соотношение $g^{[1,0]}(x, t) = \sigma G^{[1,0]}(x, \frac{t-x}{\sigma}) - G^{[0,1]}(x, \frac{t-x}{\sigma})$.

Далее рассмотрим построение решения $T(x, t)$ добавочного уравнения (121), необходимого для нахождения концентрации $n = \frac{\partial}{\partial x} \ln T(x, t) + q(x, t)$ с помощью базовых соотношений.

С учетом вычисленных выше функций, выражения для подстановок прини-

мают следующий вид:

$$T_t = \phi_t T + (N + C)e^{\psi - (N-1)\phi} T^N,$$

$$T_x = \phi_x T + e^{\psi - (N-1)\phi} T^N.$$

Умножим оба уравнения на $e^{-\phi}$ и перепишем в такой форме:

$$(Te^{-\phi})_t = (C + N)e^{\psi} (Te^{-\phi})^N,$$

$$(Te^{-\phi})_x = e^{\psi} (Te^{-\phi})^N.$$

Откуда находим:

$$T = e^{\phi} \left[(1 - N) \int e^{\psi} dx + \beta_0 \right]^{\frac{1}{1-N}}.$$

Итоговое выражение для концентрации с первоначальным видом коэффициентов имеет вид:

$$n(x, t) = \frac{1}{1 - N} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left[(1 - N) \int e^{2(N-1)H(x+(N+C)t)} dx + \beta_0 \right] + \\ + F((C - N + 2)t + x) + H'(x + (N + C)t) - \frac{1}{C - N + 2} G(x, t).$$

Пример 1 Рассмотрим простейший случай, когда функция источника $J(x, t) = 0$ т.е. $G(x, t) = G_0 = \text{const}$.

В этом случае уравнение (123) имеет вид:

$$mG_0^2 + F' + F^2 - mF^2 - 2mG_0F + H'' - mH'^2 = 0.$$

Оно допускает разделение переменных и служит для определения функций $F(\sigma t + x)$, $H((2m + \sigma)t + x)$.

Соответствующие решения для $F(Z)$ имеют вид:

$$F(z) = G_0 + \varepsilon_1 \frac{\lambda}{m} \operatorname{th}(\lambda(z - a)) + \varepsilon_2 \frac{\lambda}{m} \operatorname{cth}(\lambda(z - a)),$$

где выбор постоянных $\varepsilon_{1,2} = \overline{0, 1}$, $\varepsilon_1 \varepsilon_2 = 0$ соответствует разным знакам постоянной интегрирования.

Для $H(z)$ имеем такое решение:

$$H(z) = -\frac{\lambda}{m} \ln \left[m (C_1 \operatorname{sh}(\lambda z) + C_2 \operatorname{ch}(\lambda z)) \right],$$

где $\lambda \neq 0$ — постоянная разделения переменных, а a , $C_{1,2}$ — постоянные интегрирования.

График соответствующего решения $n(x, t)$ (постоянная интегрирования $\beta_0 = \frac{m}{\lambda} \bar{\beta}_0$) приведен на Рис.13-1.

Поскольку решение уходит в отрицательную область значений, то нужна дополнительная его интерпретация. Нужно либо рассматривать решение на конечном отрезке времени, пока концентрация положительна (затухание начального распределения), либо к решению можно добавить постоянную $n_0 > 0$, такую, что решение будет положительным, в этом случае в уравнении коэффициент диффузии изменится на $D(n) = \frac{1}{n - n_0}$ и оно будет описывать рост полости. Замена $n(x, t)$ на $-n(x, t)$ также приводит к положительному решению, но соответствует более редкому случаю, когда в уравнении член со второй производной отрицателен, т.е. процессу не диффузии, а сегрегации.

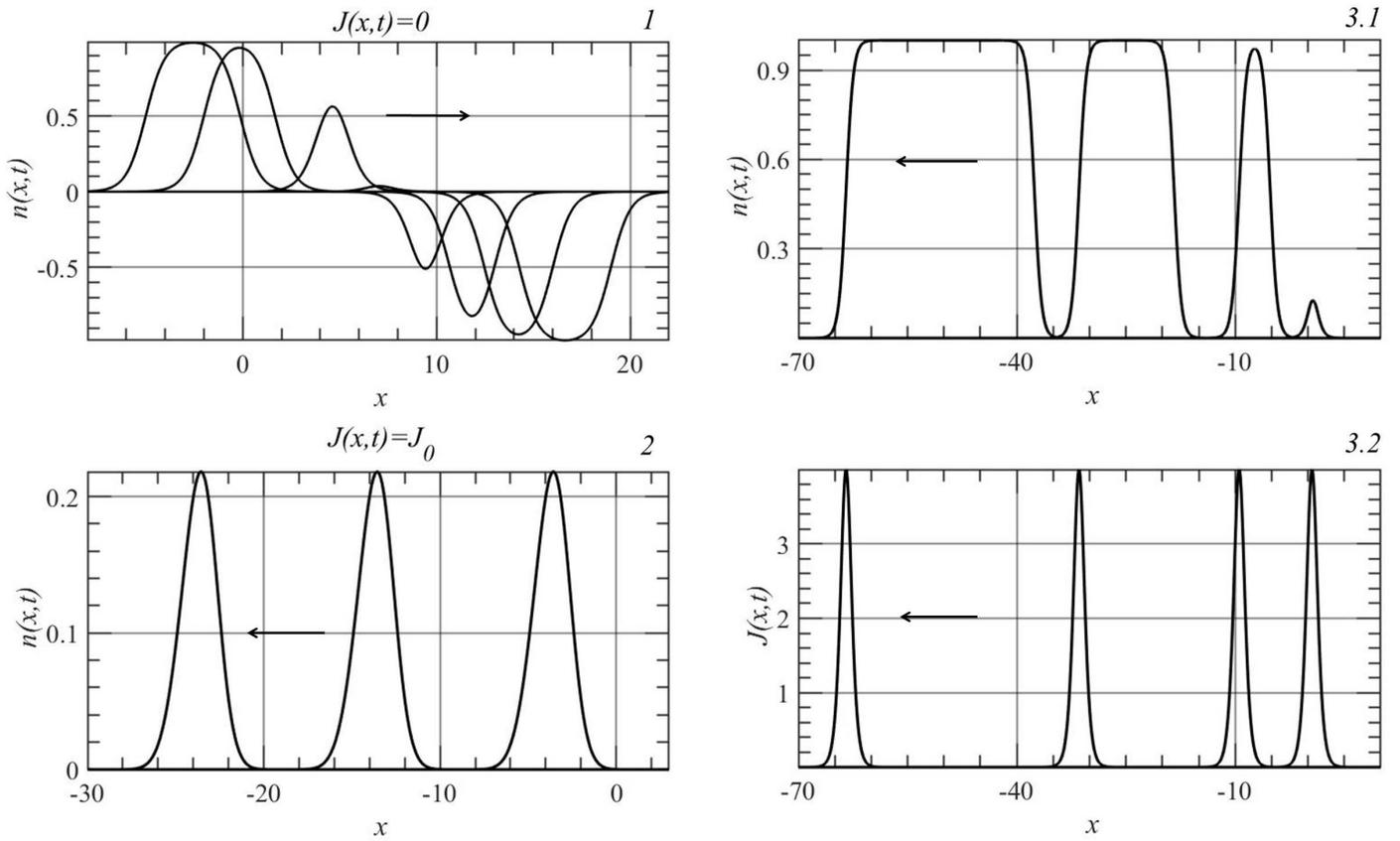


Рис. 13: Распределения концентраций при разных значениях источника $J(x, t)$.
 1— $t = 0.3 k$, $k = \overline{0, 8}$, $m = 2$, $\lambda = 1$, $C = -9$, $a = -5$, $C_1 = 0$, $C_2 = 1$, $\beta_0 = -12$;
 2— $t = 0, 2, 4, 6$; $m = 4$, $J_0 = 1$, $H_1 = 2$, $H_2 = 1$, $\sigma = 1$, $\beta_0 = 10$, $F_0 = 1$, $H_1 = -2$, $H_2 = 1$, $\beta_0 = 4.6$;
 3— $t = 0, 1, 3.2, 6.4$, $m = 2$, $f(t) = f_1 e^{k_0 t}$, $\beta_0 = -5$, $f_1 = 1$, $H_1 = 0.5$, $k_0 = -20$

В частном случае $\lambda = 0$ решение имеет вид:

$$n(x, t) = \frac{2(t - t_0)}{(\sigma t + x + a)((\sigma + 2M)t - 2Mt_0 + a)}.$$

Данное решение сингулярное, но при интерпретации x , как координаты, направленной вглубь материала (область $x \geq 0$), при соответствующем выборе параметров, оно описывает динамику начального распределения профиля концентрации по глубине.

Пример 2 Найдем решение УБД с постоянным источником $J(x, t) = J_0 = const$. Из уравнения (123) следует, что когда мы задаем функцию источника, функция $G(x, t)$ должна выражаться через те же переменные, что и функции F , H — это необходимо для разделения переменных. Таким образом, при $G(x, t) = J\alpha(x + \sigma t) + (J_0/\sigma)x$ этого можно добиться выбрав $\alpha = -\frac{J_0}{2\sigma m}(2m + \sigma)$.

Переменные разделяются только при условии $F(z) = F_0$. Тогда для $H(z)$ получаем такое уравнение:

$$H'' - mH'^2 + \frac{1}{2m} [(J_0z + 2mF_0)^2 + 2J_0] = 0.$$

Решение которого можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} H(z) &= S(z) - \frac{1}{2m} \ln R(z), \\ S(z) &= -\frac{1}{4J_0m} (J_0^2 z^2 + 4mJ_0F_0z + 8m^2F_0^2), \\ R(z) &= \left[\frac{\pi m^2}{2J_0} \left(H_2 \operatorname{erf} \left(\frac{J_0z + 2mF_0}{\sqrt{2J_0}} \right) - H_1 \right) \right]^{-2}. \end{aligned}$$

График решения представлен на Рис.13–2. Решение описывает "импульс" концентрации, сохраняющий свою форму и распространяющийся в среде с диффу-

зией.

Пример 3 Уравнение (123) можно также рассматривать как уравнение для $G(x, t)$ при заданных функциях F и H . Выберем их в следующей форме: $F(z) = F_1 z$, $H(z) = H_1 z$. Тогда уравнение для G примет вид:

$$\frac{\partial G(x, t)}{\partial x} - mG^2 + 2mF_1(\sigma t + x) G = mF_1^2(\sigma t + x)^2 + F_1 - mH_1^2.$$

Откуда находим:

$$G(x, t) = \frac{(H_1 - F_1(\sigma t + x)) e^{2mH_1 x} + f(t) (H_1 + F_1(\sigma t + x))}{f(t) - e^{2mH_1 x}}$$

или

$$J(x, t) = 2H_1 e^{4H_1 x} \frac{4H_1 \sigma f(t) + f'(t)}{(f(t) - e^{4H_1 x})^2}.$$

Решение для концентрации запишется в следующем виде:

$$n(x, t) = 4H_1 \frac{1/2 f(t) e^{4H_1((\sigma+4)t+x)} - \beta_0 H_1 e^{4H_1 x}}{(2\beta_0 H_1 - e^{4H_1((\sigma+4)t+x)})(f(t) - e^{4H_1 x})}.$$

Графики переменного источника $J(x, t)$ и соответствующего решения приведены на Рис.13-3.1, 13-3.2.

3.2.2 Автопреобразование решений уравнения быстрой диффузии

Представление УНД в виде вспомогательного уравнения и подстановок, оказывается полезным для выяснения неочевидных свойств как самих уравнений, так и их решений. В частности, в случае быстрой диффузии удастся получить преобразование, связывающее пары соответствующих решений.

Рассмотрим введенное выше добавочное уравнение:

$$T_t T_x = T_{xx} T. \quad (124)$$

Будем искать его решение в неявной форме:

$$H(t, x, T(x, t)) = 0, \quad (125)$$

где H — искомая функция.

Вычислим необходимые производные дифференцируя (126) по x и t :

$$\begin{aligned} T_t &= -H_t / H_T, & H_x &= -H_x / H_t, \\ H_{xx} &= - \left(H_T^2 - 2H_x H_T H_{xT} + H_x^2 H_{TT} \right) / H_T^3. \end{aligned}$$

После подстановки в (124) получаем уравнение для $H(t, x, T)$, в котором T играет роль независимой переменной:

$$H_t H_x H_T + T \left[H_x^2 H_{TT} - 2H_x H_T H_{xT} + H_T^2 H_{xx} \right] = 0. \quad (126)$$

Уравнение (126) требует отдельного анализа, по структуре оно похоже на уравнение типа Монжа-Ампера и сходные с ним уравнения, но отличается от них наличием произведения трех производных первого порядка. В данном случае нас интересует не решение этого уравнения, а использование его свойств, позволяющих увидеть связь между парами решений $T(x, t)$ уравнения (124), которую сложно обнаружить другими способами.

Для этого введем переменные $s = x + t$, $\tau = \ln T$, тогда (126) принимает

вид:

$$H_t H_s H_\tau + H_s^2 H_{\tau\tau} - 2H_s H_\tau H_{s\tau} + H_\tau^2 H_{ss} = 0. \quad (127)$$

В этом уравнении переменные s и τ входят симметрично и, следовательно, перестановка $s - \tau$ в решении, приводит к функции, так же являющейся решением этого уравнения. Поскольку уравнение (126) тождественно исходному уравнению (124), то в результате преобразования $x + t = s \leftrightarrow \tau = \ln \tilde{T}$ мы получаем некоторое новое решение $\tilde{T}(x, t)$ и, следовательно, новое решение УБД.

Выпишем выражение для $\tilde{T}(x, t)$ и соответствующей концентрации после $s - \tau$ преобразования.

Пусть задано некоторое решение $T = W(x, t)$ добавочного уравнения (124), т.е. $W_t W_x = W_{xx} W$. Перейдем к переменным $s = x + t$, $\tau = \ln T$ в этом решении: $\tau = \ln W(s - t, t)$. Далее выполним преобразование и перейдем к новому решению $\tau = \ln \tilde{T}$:

$$W(\ln \tilde{T} - t, t) = e^{x+t}. \quad (128)$$

В общем случае уравнение (128) может быть трансцендентным относительно \tilde{T} и задавать эту функцию в неявном виде.

Для вычисления концентрации $\tilde{n} = \frac{\partial}{\partial x} \ln \tilde{T}$ продифференцируем (128) по x :

$$e^{x+t} = W(\ln \tilde{T} - t, t) = W^{[1,0]}(\ln \tilde{T} - t, t) \tilde{n}(x, t),$$

тогда

$$\tilde{n}(x, t) = \left[\frac{W^{[1,0]}(\ln \tilde{T} - t, t)}{W(\ln \tilde{T} - t, t)} \right]^{-1} = \frac{1}{n(\ln \tilde{T} - t, t)}. \quad (129)$$

Здесь $W^{[1,0]}(z, t) = \frac{\partial}{\partial z} W(z, t)$ и использовано выражение для исходной концентрации $n(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \ln W(x, t)$.

Результирующее выражение, связывающее преобразованные концентрацию $\tilde{n}(x, t)$ и вспомогательную функцию $\tilde{T}(x, t)$ с исходной парой функций $n(x, t)$, $T(x, t)$ записывается в виде системы двух уравнений:

$$\tilde{n}(x, t) = \frac{1}{n(\ln \tilde{T} - t, t)}, \quad T(\ln \tilde{T} - t, t) = e^{x+t}. \quad (130)$$

Верность приведенного выражения можно проверить непосредственной подстановкой в УБД с вычислением соответствующих производных:

$$\begin{aligned} \tilde{n} &= \frac{1}{n(Z, t)}, \\ \tilde{n}_x &= \left(\frac{1}{n}\right)_Z \tilde{n}, \\ \tilde{n}_{xx} &= \left(\frac{1}{n}\right)_{ZZ} \tilde{n}^2 + \left[\left(\frac{1}{n}\right)_Z\right]^2 \tilde{n}, \\ \tilde{n}_t &= \left(\frac{1}{n}\right)_t + \left(\frac{1}{n}\right)_Z \left[\left(\frac{1}{n}\right)_Z + \tilde{n} - 1\right], \end{aligned}$$

где $Z = \ln \tilde{T} - t$, $Z_x = \tilde{n}$.

После подстановки в УБД: $\tilde{n}_t = (\ln \tilde{n})_{xx} + \tilde{n}_x$ приходим к следующему выражению:

$$\left(\frac{1}{n}\right)_t + \left[\left(\frac{1}{n}\right)_Z\right]^2 = \frac{1}{n} \left(\frac{1}{n}\right)_{ZZ} + \left(\frac{1}{n}\right)_Z$$

или

$$n_t = \frac{n_{ZZ}}{n} - \frac{n_Z^2}{n^2} + n_Z = (\ln n)_{ZZ} + n_Z.$$

Т.к. исходная концентрация $n(x, t)$ тоже решение УБД, то приведенное выра-

жение является тождеством.

Приведем несколько примеров решений, полученных в результате автопреобразования:

Пример 1

$$T = \frac{a_1 e^{\gamma x} + a_2 e^{-\gamma x}}{b_1 e^{\gamma(x+2t)} + b_2 e^{-\gamma(x+2t)}}, \quad \tilde{T} = \left(\frac{b_1 e^{(2\gamma+1)t+x} - a_1}{a_2 e^{2\gamma t} - e b_2 e^{x+t}} \right)^{-\frac{1}{2*\gamma}};$$

$$n = -\frac{2\gamma(b_1 a_2 e^{2\gamma t} - b_2 a_1 e^{-2\gamma t})}{(a_1 e^{\gamma x} + a_2 e^{-\gamma x})(b_1 e^{\gamma(x+2t)} + b_2 e^{-\gamma(x+2t)})},$$

$$\tilde{n} = \frac{1}{2\gamma} \frac{a_2 b_1 e^{(4\gamma+1)t+x} - a_1 b_2 e^{x+t}}{(b_1 e^{(2\gamma+1)t+x} - a_1)(b_2 e^{x+t}) - a_2 e^{2\gamma t}}.$$

Пример 2

$$T = \exp \left[(a + bt) \operatorname{tg} \frac{b(x+t+c)}{2} \right], \quad \tilde{T} = \exp \left[-c + \frac{2}{b} \arctan \left(\frac{x+t}{a+bt} \right) \right];$$

$$n = b(bt+a) \left[2 \cos^2 \frac{b(x+t+c)}{2} \right]^{-1}, \quad \tilde{n} = \frac{1}{2a} \left[1 + C_1 e^{\frac{a-b}{a}((2a+1)t - (2b-1)x)} \right]^{-1}.$$

Пример 3

$$T = \frac{a - \operatorname{tg} x}{\cos 2t - \operatorname{tg} x \sin 2t}, \quad \tilde{T} = \exp \left[t + \arctan \left(\frac{e^{x+t} \cos 2t - a}{e^{x+t} \sin 2t} \right) \right];$$

$$n = \frac{\cos 2t - a \sin 2t}{\cos x [\sin(x+2t) - a \cos(x+2t)] - \sin 2t},$$

$$\tilde{n} = \frac{(a \sin 2t - \cos 2t) e^{x+t}}{e^{x+t} - 2(a \cos 2t + 2 \sin 2t) e^{x+t} + a^2 + 1}.$$

Здесь $a, b, c, a_1, a_2, \gamma, C_1$ — произвольные постоянные.

3.2.3 Взаимные коэффициенты диффузии

При моделировании диффузионных процессов используются коэффициенты диффузии с различными зависимостями от концентрации. Наиболее распространенным обобщением УБД, является уравнение с зависимостью вида $D(n) = D_0 n^\alpha$, где α — некоторое вещественное число.

Уравнения с такими коэффициентами диффузии в дальнейшем будем обозначать через УНД $[\alpha]$. В частности, в случае $\alpha = 3$ соответствующее уравнение УНД[3] описывает процесс переноса равновесного изотропного электромагнитного излучения в однородной среде, а в случае $k = 0$ это уравнение превращается в линейное уравнение диффузии.

Найденное выше автопреобразование решений УБД (УНД[-1]) является не единственным примером преобразований такого рода.

Случай преобразования решений уравнений с коэффициентами диффузии с $\alpha = -2$ и $\alpha = 0$ и связь соответствующих уравнений, с уравнениями с переменными коэффициентами и источниками подробно рассмотрены в работах [35, 64, 254].

С помощью НФП эти преобразования могут быть обобщены для взаимного преобразования решений [153] уравнений с произвольными α . Коэффициенты диффузии в такой паре уравнений будем называть взаимными.

В случае простого добавочного уравнения для некоторой функции $\xi(x, t)$:

$$\xi_t \left(\xi_x \right)^\alpha = \xi_{xx}, \quad \alpha \in R; \quad (131)$$

в переходе к УНД можно исключить базовые соотношения, определяя концен-

трацию как $n = \xi_x$:

$$n_t = \left(n^{-\alpha} n_x \right)_{xx}. \quad (132)$$

Будем искать решение уравнения (131) в виде неявной функции:

$$\Phi(\xi(x, t), t) = x. \quad (133)$$

Дифференцируя последнее соотношение по x и t , находим:

$$\xi_x = (\Phi_\xi)^{-1}, \quad \xi_t = -\frac{\Phi_t}{\Phi_\xi}, \quad \xi_{xx} = -\frac{\Phi_{\xi\xi}}{(\Phi_\xi)^3}. \quad (134)$$

Используя эти соотношения, приходим к следующему:

$$\xi_t (\xi_x)^\alpha - \xi_{xx} = -\frac{1}{(\Phi_\xi)^{\alpha+1}} \left(\Phi_t - \Phi_{\xi\xi} (\Phi_\xi)^{\alpha-2} \right).$$

Отсюда следует, что если функция $\Phi(\xi, t)$, как функция ξ и t удовлетворяет уравнению:

$$\Phi_t = \Phi_{\xi\xi} (\Phi_\xi)^{\alpha-2}, \quad (135)$$

то функция $\xi(x, t)$ будет удовлетворять уравнению (131). Используя подстановку $n = \xi_x$ для (131) и $N = \Phi_\xi$ для (135), после дифференцирования по x и, соответственно, ξ , получаем, что решения уравнений УНД $[-\alpha]$:

$$n_t - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{n_x}{n^\alpha} \right) = 0,$$

и УНД $[\alpha - 2]$:

$$N_t - \frac{\partial}{\partial \xi} (N_\xi N^{\alpha-2}) = 0,$$

связаны соотношением (133). Поэтому коэффициенты диффузии $D(n) = n^{-\alpha}$ и $D(N) = N^{\alpha-2}$ можно назвать "взаимными". Важно отметить, что отображение, заданное уравнением (133), взаимно. Действительно, если $N(\xi, t)$ есть решение уравнения УНД $[-\alpha]$, то n есть решение уравнения УНД $[\alpha - 2]$, и, наоборот, если $N(\xi, t)$ есть решение уравнения УНД $[\alpha - 2]$, то n есть решение УНД $[-\alpha]$.

Наиболее наглядно симметрии УНД представляются в случае целых α . При $\alpha = -1$ мы получаем автопреобразование УНД $[-1]$, рассмотренное выше, с учетом того, что в уравнении (132) нет члена n_x — т.е. сделана замена $x \rightarrow x + t$.

В случае же $\alpha = 2$ решения уравнения линейной диффузии (УНД $[0]$) связываются с решениями уравнения УНД $[-2]$. Действительно, если $n = \xi_x$ удовлетворяет линейному уравнению диффузии:

$$n_t = n_{xx}, \quad (136)$$

то функция $N = \Phi_\xi$, где ξ является решением уравнения (133), удовлетворяет уравнению УНД $[-2]$ (131) с $\alpha = 2$:

$$N_t = \frac{\partial}{\partial x} \left(N^{-2} N_x \right). \quad (137)$$

Это означает, что каждому уравнению УНД $[0]$ соответствует, как минимум одно решение уравнения УНД $[-2]$ (137). Однако большинство подобных решений УНД $[-2]$ нельзя записать в явном виде, поскольку уравнение (133) является алгебраическим или трансцендентным по ξ , допускающим множество корней при одной и той же функции $\Phi(\xi, t)$.

К явному решению приводит следующий выбор функций: $n = A + (Be^{kx} +$

$Ce^{-kx})e^{k^2t}$, где A, B, C и k — постоянные. В этом случае решение для УДН[-2] (137) имеет вид:

$$N = \frac{1}{k\sqrt{(A-x)^2 - 4BCe^{-2k^2t}}}$$

Это решение при $BC < 0$ представляет собой не сингулярное возмущение, стремящееся всюду к нулю при $t \rightarrow \infty$.

Дальнейшее обобщение связано с рассмотрением УНД с произвольно зависящими от концентрации коэффициентом диффузии и нелинейным источником.

Используя (134), с помощью прямых вычислений находим, что условием того, чтобы неявное решение алгебраического уравнения (133), удовлетворяло уравнению:

$$\xi_t F(\xi_x) - \xi_{xx} + H(\xi_x) = 0, \quad (138)$$

где $F(n)$ и $H(n)$ — некоторые дифференцируемые функции одного аргумента, достаточно, чтобы функция $\Phi(\xi, t)$ в (133) удовлетворяла уравнению:

$$\Phi_t - \frac{\Phi_{\xi\xi}}{(\Phi_\xi)^2 F(\Phi_\xi^{-1})} - \frac{\Phi_\xi H(\Phi_\xi^{-1})}{F(\Phi_\xi^{-1})} = 0. \quad (139)$$

В результате подстановки $N = \Phi_\xi$ и дифференцирования по ξ последнее уравнение принимает такой вид:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{N_\xi}{N^2 F(1/N)} + \frac{NH(1/N)}{F(1/N)} \right). \quad (140)$$

Если известно решение этого уравнения, то функция $n = \xi_x$, где ξ — решение (133), будет удовлетворять уравнению:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{n_x}{F(n)} - \frac{H(n)}{F(n)} \right). \quad (141)$$

Отсюда следует, что взаимными являются коэффициенты диффузии $D(n) = (n^2 F(1/n))^{-1}$ и $D(N) = F(N)^{-1}$, а также и нелинейные источники $J = NH(1/N)/F(1/N)$ и $j = Hn/F(n)$.

Наиболее интересным вариантом полученной связи между (140) и (141) является ситуация, когда уравнение для $\Phi(\xi, t)$ легко интегрируется. Например, при выборе $F(\xi) = \xi^2$ и $H(\xi) = \alpha\xi + \beta\xi^2 + \gamma\xi^3$, что соответствует уравнению для $\Phi(x, t)$ следующего вида:

$$\Phi_t - \Phi_{\xi\xi} - \alpha(\Phi_\xi)^2 - \beta\Phi_\xi - \gamma = 0, \quad (142)$$

которое после подстановки $n = \Phi_\xi$ и дифференцирования по ξ превращается в уравнение Бюргерса:

$$n_t - n_{\xi\xi} - \alpha n n_\xi - \beta n_\xi = 0. \quad (143)$$

В этом случае уравнение, которому будет удовлетворять $\xi(x, t)$ как решение (133), имеет такой вид:

$$\xi_t (\xi_x)^2 - \xi_{xx} + \alpha\xi_x + \beta\xi_x^2 + \gamma\xi_x^3 = 0. \quad (144)$$

Это уравнение эквивалентно уравнению нелинейной диффузии такого вида:

$$N_t - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{N_x}{N^2} - \frac{\alpha}{N} - \gamma N \right) = 0. \quad (145)$$

Учитывая, что уравнение Бюргерса (143) приводится с помощью подстановки:

$$n = \frac{2}{\alpha} \frac{\partial \ln \Psi}{\partial \xi},$$

к линейному уравнению теплопроводности относительно функции Ψ :

$$\Psi_t - \Psi_{\xi\xi} - \beta\Psi_\xi - \gamma\Psi = 0,$$

уравнение (133) примет такой вид: $\Psi(\xi, t) = C_0(t)e^{\alpha\xi}$, где $C_0(t)$ — произвольная функция t .

3.3 Метод функциональных подстановок для кинетических моделей кластеризации

3.3.1 Метод функциональных подстановок для сеточных производных

Как отмечалось в первой главе, один из подходов к описанию кластеризации точечных дефектов заключается в рассмотрении системы кинетических уравнений для концентраций n_k , кластеров заданного размера, состоящих из k структурных элементов (или образованных их отсутствием), без учета пространственного распределения кластеров:

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{J}(\mathbf{n}), \quad (146)$$

где $\mathbf{n} = \{\dots, n_{k-1}(t), n_k(t), n_{k+1}(t) \dots\}$ ($k \in \mathbb{Z}$) — вектор компонент динамической системы, а $\mathbf{J} = \{\dots, J_{k-1}(\mathbf{n}), J_k(\mathbf{n}), J_{k+1}(\mathbf{n}) \dots\}$ — вектор функций $J_k(\mathbf{n})$, описывающих взаимодействие между кластерами и источники.

Расширением МФП, полезным для анализа подобных систем, является его обобщение на случай сеточных производных. Такой подход позволяет получить точные решения и интегралы движения динамических систем типа (146) [251,

262].

Далее, покажем, что задачи типа (146), можно записать в форме базовых соотношений и добавочных уравнений, содержащих два типа операторов: производную по времени $\hat{D}_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$ и операторы \hat{D}_x , связанные со сдвигом в пространстве концентраций (s-производные):

$$\begin{aligned}\hat{D}_+ \Phi_k(t) &= \Phi_{k+1}(t), & \hat{D}_- \Phi_k(t) &= \Phi_{k-1}(t); \\ \hat{D}_L \Phi_k(t) &= \frac{1}{h_x} (\Phi_{k+1} - \Phi_k) = \frac{1}{h_x} (\hat{D}_+ - 1) \Phi_k, \\ \hat{D}_R \Phi_k(t) &= \frac{1}{h_x} (\Phi_k - \Phi_{k-1}) = -\frac{1}{h_x} (\hat{D}_- - 1) \Phi_k.\end{aligned}$$

Метод функциональных подстановок в данном случае основан на линейной системе базовых соотношений [262]:

$$\hat{D}_+ \Phi_k = A_k \Phi_k, \quad \hat{D}_- \Phi_k = B_k \Phi_k, \quad \hat{D}_t \Phi_k = C_k \Phi_k. \quad (147)$$

Заметим, что центральные разности не будут рассматриваться как отдельный тип производных. Причина этого состоит в том, что для центральной разности не выполняется правило Лейбница в подходящей для дальнейших построений форме.

При использовании сдвиговых производных обоих типов, к базовым соотношениям нужно добавить очевидное тождество:

$$\hat{D}_+ \hat{D}_- \Phi_k = \hat{D}_- \hat{D}_+ \Phi_k = \Phi_k \quad (148)$$

из которого следует, что базовые функции A_k , B_k должны быть связаны сле-

дующим образом:

$$B_{k+1}A_k = A_{k-1}B_k = 1,$$

Исходя из условий совместности (147), находим связи между базовыми функциями A_k , B_k и C_k :

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{D}}_+ \hat{\mathbf{D}}_t - \hat{\mathbf{D}}_t \hat{\mathbf{D}}_+) \Phi_k &= \hat{\mathbf{D}}_+(B_k \Phi_k) - \hat{\mathbf{D}}_t(A_k \Phi_k) = \\ &= B_{k+1} \Phi_{k+1} - \frac{\partial A_k}{\partial t} \Phi_k - A_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} = \left((C_{k+1} - C_k) A_k - \frac{\partial A_k}{\partial t} \right) \Phi_k = 0. \end{aligned}$$

Выполняя аналогичные выкладки для $\hat{\mathbf{D}}_-$ находим:

$$\frac{\partial A_k}{\partial t} = (C_{k+1} - C_k) A_k, \quad \frac{\partial B_k}{\partial t} = (C_{k-1} - C_k) B_k. \quad (149)$$

Для h -производных имеем соотношения следующего вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_k}{\partial t} &= \frac{1}{h_x} (C_{k+1} - C_k) (h_x A_k + 1), \\ \frac{\partial B_k}{\partial t} &= -\frac{1}{h_x} (C_k - C_{k-1}) (h_x B_k - 1). \end{aligned} \quad (150)$$

Добавочные к базовым соотношениям уравнения для функций Φ_k в общем случае могут содержать производные старшего порядка как по времени, так и по дискретной переменной k . Для вычисления действия операторов $\hat{\mathbf{D}}_t$, $\hat{\mathbf{D}}_x$ полезно воспользоваться рекуррентными формулами, вытекающими непосредственно из базовых соотношений. Введем обозначения:

$$\frac{\partial^m}{\partial t^m} \hat{\mathbf{D}}_x^k \Phi_i = A_i^{[k,m]}(t) \Phi_i, \quad k, m \in \mathbb{Z}. \quad (151)$$

Исходя из базовых соотношений $A_i^{[k,m]}(t)$ вычисляются с помощью рекуррент-

ных формул:

$$\begin{aligned} A_i^{[k+1,m]} &= A_{i+1}^{[k,m]} A_i, & A_i^{[k,m+1]} &= \frac{\partial}{\partial t} A_i^{[k,m]} + A_i^{[k,m]} B_i, \\ A_i^{[1,0]} &= A_i, & A_i^{[0,1]} &= B_i. \end{aligned} \quad (152)$$

Заметим, что первое рекуррентное соотношение приводит к следующему представлению для $A_i^{[k+1,0]}$:

$$A_i^{[k+1,0]} = \prod_{j=0}^k A_{i+j} = A_{i+k} A_{i+k-1} \cdots A_i. \quad (153)$$

В качестве вспомогательного уравнения для основной функции Φ_i рассмотрим линейное уравнение следующего вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_i = \sum_{k=0}^n M_k \hat{\mathbf{D}}_x^k \Phi_i, \quad (154)$$

где n — натуральное число, $M_k(t)$ — в общем случае функции времени, а под $\hat{\mathbf{D}}_x$ понимается производная одного типа — либо левая, либо правая.

Используя определение производной D_x , уравнения типа (154) можно записать в матричной форме:

$$\mathbf{U}_t = \mathbf{M}\mathbf{U},$$

где $\mathbf{U} = (\dots, \Phi_0, \Phi_1, \Phi_2, \dots)$ — бесконечный, в общем случае, вектор, а \mathbf{M} — бесконечная матрица, со строками содержащими одни и те же элементы M_i , но

сдвинутые на 1 вправо:

$$\hat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} \dots & \dots \\ \dots & M_0 & M_1 & M_2 & M_3 & \dots & M_k & \dots \\ \dots & 0 & M_0 & M_1 & M_2 & \dots & M_{k-1} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & M_0 & M_1 & \dots & M_{k-2} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & M_0 & \dots & M_{k-3} & \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

С помощью базовых соотношений (147) и (153) для левой и правой s-производных приведем уравнение (154) к вспомогательным уравнениям связи:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{D}}_+) : C_i &= M_0 + \sum_{k=1}^n M_k \prod_{p=0}^{k-1} A_{i+p}, \\ (\hat{\mathbf{D}}_-) : C_i &= M_0 + \sum_{k=1}^n M_k \prod_{p=0}^{k-1} B_{i-p}. \end{aligned} \quad (155)$$

Подставляя C_i из этих соотношения в уравнение связи (149), приходим к уравнению следующего вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln A_i = \sum_{k=1}^n M_k (A_{i+k} - A_i) \prod_{p=1}^{k-1} A_{i+p}. \quad (156)$$

В частности, для $n = 3$ имеем такое уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln A_i = M_1(A_{i+1} - A_i) + M_2(A_{i+2} - A_i)A_{i+1} + M_3(A_{i+3} - A_i)A_{i+2}A_{i+1}. \quad (157)$$

Уравнения типа (146) с источниками/стоками в правых частях, могут быть получены включением в правую часть (154) членов вида $L_i(t)\Phi_i$, где $L_i(t)$ —

некоторые заданные функции. В качестве примера рассмотрим вспомогательные уравнения такого вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_i = \sum_{k=1}^n M_k \hat{\mathbf{D}}_x^k \Phi_i + L_i \Phi_i. \quad (158)$$

Используя базовые соотношения для случая левой производной, получаем уравнения:

$$C_i = M_0 + \sum_{k=1}^n M_k \prod_{p=0}^{k-1} A_{i+p} + L_i. \quad (159)$$

3.3.2 Интегралы движения

Для качественного анализа свойств рассматриваемых динамических систем необходимо иметь возможность вычислять их интегралы движения, которые строятся с помощью интегралов движения системы (154).

Если найдены решения Φ_i некоторого вспомогательного уравнения, то функции $A_i(t)$, $B_i(t)$, $C_i(t)$ вычисляются следующим образом:

$$A_i = \frac{\Phi_{i+1}(t)}{\Phi_i(t)}, \quad B_i = \frac{\Phi_{i-1}(t)}{\Phi_i(t)}, \quad C_i = \frac{\Phi_{i,t}(t)}{\Phi_i(t)}. \quad (160)$$

Обозначим через $\mathbf{v}_k = (\dots, v_k^0, v_k^1, v_k^2, \dots)$, $k \in [-\infty, \infty]$ — левые собственные вектора матрицы $\hat{\mathbf{M}}$, соответствующие собственному числу λ_k . Тогда умножая (154) слева на \mathbf{v}_k , находим:

$$\dot{V}_k = \lambda_k V_k. \quad (161)$$

Предположим, что среди всех собственных чисел λ_k нет кратных. Пусть далее $\lambda_0 \neq 0$ — отличное от нуля собственное число системы (154). В этом случае имеем: $t = \frac{1}{\lambda_k} \ln V_k - H_k$. Здесь H_k — постоянные интегрирования. Тогда инте-

граммами системы (154) являются все возможные функции:

$$I_k = H_k - H_0 = \frac{1}{\mu_k} \ln V_k(\mathbf{U}) - \frac{1}{\mu_0} \ln V_0(\mathbf{U}), \quad k \neq 0, \quad (162)$$

где $V_k(\mathbf{U}) = (\mathbf{v}_k, \mathbf{U}) = \sum_{a=-\infty}^{\infty} v_k^a \Phi_a$.

Из (161) сразу следует, что для всех k , у которых $\lambda_k = 0$ интегралами являются сами функции $V_k(\mathbf{U})$.

Обращая соотношения (160), находим:

$$\Phi_i = \Phi_0 \prod_{j=0}^{i-1} A_j, \quad i > 0, \quad \Phi_i = \Phi_0 \prod_{j=1}^i A_j^{-1}, \quad i < 0.$$

Отсюда $V_k = \Phi_0 Q_k$, где:

$$Q_k = v_k^0 + \sum_{a=1}^{\infty} \left(v_k^{-a} \prod_{j=1}^a A_j^{-1} + v_k^a \prod_{j=1}^a A_j \right).$$

Подставляя эти соотношения в (162) и исключая из интегралов функцию $\ln \Phi_0(t)$, окончательно находим, что интегралами движения цепочек будут величины:

$$J_{km} = \frac{\ln(Q_k/Q_0)}{\lambda_0 - \lambda_k} - \frac{\ln(Q_m/Q_0)}{\lambda_0 - \lambda_m}, \quad k \neq m \neq 0. \quad (163)$$

Если среди собственных чисел имеются кратные собственные числа, то вычисление интегралов для этой группы проводится по несколько другой схеме. Пусть, как и раньше, $\lambda_0 \neq 0$ — некоторое не кратное собственное число и $\lambda_p = \lambda_{p+1} = \dots = \lambda_q$, где $q > p$. В этом случае часть уравнений (154) с соответствующими номерами после умножения слева на \mathbf{v}_k преобразуется к форме Жордана [246]. Исходя из этого, уравнения для функций $V_k, k = \overline{p, q}$ в общем

случае можно записать в такой форме:

$$\dot{V}_k = \lambda_p V_k + V_{k+1}, \quad k = p, \dots, q-1, \quad \dot{V}_q = \lambda_p V_q.$$

Заметим, что если матрица $\hat{\mathbf{M}}$ является верхнетреугольной или нижнетреугольной, то матрицу не обязательно приводить к форме Жордана, а уравнения для V_k можно получать непосредственно из решения самой исходной системы (154). В случае представления Жордана находим, что решения для функций V_k в соответствующем диапазоне номеров имеет такой вид:

$$V_{p+k} = \sum_{\alpha=0}^k \frac{C_{s-\alpha}}{(k-\alpha)!} t^{k-\alpha} e^{\lambda_p t}, \quad k = p, \dots, s.$$

где $s = q - p$, а C_α - постоянные интегрирования. Для функций $V_q = Q_q \Phi_0$ и $V_0 = Q_0 \Phi_0$ имеем два соотношения:

$$t = \frac{1}{\lambda_p} \left(\ln Q_q + \ln \Phi_0 - \ln C_s \right), \quad t = \frac{1}{\lambda_0} \left(\ln Q_0 + \ln \Phi_0 - H_0 \right),$$

Исключая из них Φ_0 , находим: $t = \frac{1}{\Delta} Z_p$, $Z_p = \ln(Q_p/Q_0) - H_{p0}$, где $H_{p0} = \ln C_s - H_0$ и $\Delta = \lambda_p - \lambda_0$. Используя последнее соотношение, находим интегралы движения в следующей форме:

$$J_{kp} = \ln \left(C_{s-k}/C_s \right) = \ln \left(Q_{p+k}/Q_q \right) - \sum_{\alpha=0}^k \frac{C_{s-\alpha}}{\Delta^{k-\alpha} (k-\alpha)!} Z_p^{k-\alpha},$$

$$k = \overline{1, s-1}. \quad (164)$$

Таким образом, интегралы с заданным k вычисляются рекуррентно через значения интегралов с $k-1$.

3.3.3 Примеры цепочек с ограниченным числом элементов

Как правило, в прикладных задачах мы имеем дело с системой, состоящей из конечного числа компонент (типов дефектов). Поэтому наибольший интерес представляют системы типа (146), в которых i принимает значения из некоторого конечного набора. Ограничения набора значений i можно добиться различными способами. Ниже приведены некоторые варианты ограничений, приводящие к различным динамическим системам.

3.3.4 Циклические цепочки

Отдельный класс цепочек, связанных со сдвигowymi производными возникает, если дополнительно потребовать, чтобы после конечного числа сдвигов базовые уравнения переходили сами в себя. Это условие можно записать в виде таких соотношений:

$$\hat{D}_+ \Phi_i = \Phi_{i+1}, \quad \hat{D}_+ \Phi_{i+1} = \Phi_{i+2}, \dots, \quad \hat{D}_+^q \Phi_i = \hat{D}_+ \Phi_{i+q-1} = \Phi_{i+q} = \Phi_i,$$

где q — некоторое натуральное число, большее 1. В этом случае на коэффициенты базовых соотношений накладываются дополнительные условия, сводящиеся к соотношениям:

$$\prod_{k=0}^{q-1} A_{i+k} = 1, \quad A_{i+q} = A_i, \quad C_{i+q} = C_i. \quad (165)$$

В результате подстановки $\phi_i = \ln A_i$ первое и второе из этих соотношений сводятся к формулам:

$$\sum_{k=0}^{q-1} \phi_{i+k} = 0, \quad \phi_q = \phi_0. \quad (166)$$

В силу цикличности цепочки, только $q - 2$ функций являются независимыми. Поэтому индекс i пробегает конечный интервал значений $i = \overline{0, q - 2}$.

В случае же $q = 3$ уравнение (166) имеет такой вид:

$$\phi_i + \phi_{i+1} + \phi_{i+2} = 0,$$

Система же (156) превращается в систему следующего вида:

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= (M_1 - M_2 n_1) n_1 n_2 - M_1 n_1^2 + M_2, \\ \dot{n}_2 &= (M_1 - M_2 n_2) n_1^{-1} - M_1 n_2^2 + M_2, \end{aligned} \quad (167)$$

где введены обозначения $A_i = n_i$.

Для циклических цепочек матрица коэффициентов $\hat{\mathbf{M}}$ размерности $q \times q$ представляет собой циклическую матрицу или циркулянт [246] и может быть записана в следующем общем виде:

$$\hat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} M_0 & M_1 & M_2 & \dots & M_q \\ M_q & M_0 & M_1 & \dots & M_{q-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ M_1 & M_2 & M_3 & \dots & M_0 \end{pmatrix}. \quad (168)$$

Собственные числа этой матрицы являются не кратными и имеют следующий вид: $\lambda_k = p(r_k)$, $k = \overline{1, q}$, где $p(x) = M_0 + M_1 x + \dots + M_q x^{q-1}$ и $r_k = e^{2\pi/k}$. Правые собственные вектора циклической матрицы имеют следующий вид: $\mathbf{u}_k = \text{column}\{1, r_k, r_k^2, \dots, r_k^{q-1}\}$.

Матрица левых собственных векторов вычисляется как обратная к матрице правых собственных векторов с теми же собственными числами.

В частности, для случая $q = 3$, соответствующему модели (167), необходимо решать систему из трех уравнений следующего вида:

$$\begin{aligned}\dot{\Phi}_0 &= M_0\Phi_0 + M_1\Phi_1 + M_2\Phi_2, \\ \dot{\Phi}_1 &= M_0\Phi_1 + M_1\Phi_2 + M_2\Phi_0, \\ \dot{\Phi}_2 &= M_0\Phi_2 + M_1\Phi_0 + M_2\Phi_1.\end{aligned}\tag{169}$$

Характеристическое уравнение для этой системы имеет такой вид:

$$(M_0 - \lambda)^3 - 3(M_0 - \lambda)M_1M_2 + M_1^3 + M_2^3 = 0,$$

а соответствующие его корни такой:

$$\lambda_1 = M_0 + M_1 + M_2, \quad \lambda_{2,3} = M_0 - (M_1 + M_2)/2 \pm i(M_1 - M_2)\sqrt{3}/2.$$

Правые собственные вектора циклической матрицы:

$$\hat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} M_0 & M_1 & M_2 \\ M_2 & M_0 & M_1 \\ M_1 & M_2 & M_0 \end{pmatrix},\tag{170}$$

соответствующей системе (169) имеют вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_1 &= \left(\frac{M_1 - M_2 - i\sqrt{3}(M_1 + M_2)}{M_1 + 2M_2 + i\sqrt{3}M_1}, 1, -\frac{2M_1 + M_2 - i\sqrt{3}M_2}{M_1 + 2M_2 + i\sqrt{3}M_1} \right), \\ \mathbf{v}_2 &= \left(-\frac{M_1 - M_2 + i\sqrt{3}(M_1 + M_2)}{2M_1 + 2M_2 + i\sqrt{3}M_2}, -\frac{M_1 + 2M_2 - i\sqrt{3}M_2}{2M_1 + M_2 + i\sqrt{3}M_1}, 1 \right), \\ \mathbf{v}_3 &= (1, 1, 1).\end{aligned}$$

Используя для модели (167) схему вычисления интегралов движения для случая некрatных собственных чисел, приходим к одному интегралу движения следующего вида:

$$J_{12} = \gamma \ln \left(F(x, y) \right) + 2 \operatorname{arctg} \left(H(x, y) \right),$$

где $\gamma = (M_1 - M_2)/(\sqrt{3}(M_1 + M_2))$,

$$F(x, y) = \frac{(y + x + 1)^2}{(y + x + 1)^2 - 3(yx + x + y)},$$

$$H(x, y) = \frac{\sqrt{3}\gamma(y - 1) - y + 2x - 1}{\sqrt{3}(y - 1) + \gamma(y - 2x + 1)}.$$

3.3.5 Ограниченные цепочки

Еще одним классом интегрируемых моделей рассмотренного типа являются ограниченные цепочки длина которых определяется условием обращения в ноль функций Φ_i , начиная с некоторого номера $q > 0$ для цепочек со сдвигом вперед (или $q < 0$ для цепочек со сдвигом назад). В качестве примера приведем цепочки типа (156). Потребуем, чтобы начиная с некоторого конечного номера $q \leq n$ выполнялись условия:

$$\Phi_{q+i} = \Phi_q, \quad i = 1, 2, \dots$$

Тогда все уравнения для функций Φ_{q+i} , $i > 1$ превращаются в одно и тоже уравнение вида:

$$\dot{\Phi}_q = \Phi_q \sum_{i=0}^n M_i.$$

Уравнения с номерами меньшими q будут отличаться от этого исходного уравнения. В результате все функции $A_{q+i} = \Phi_{i+q+1}/\Phi_{i+q} = 1$, $i > 0$ будут равны 1, а функции $\phi_{q+i} = \ln A_{q+i} = 0$, $i > 0$ — нулю. В результате совокупность уравнений для всех функций ϕ_i с номерами $-p < i < q$, где $p \leq 0$ — любое неотрицательное число, является замкнутой и описывает конечную цепочку уравнений вида (156). В качестве примера приведем уравнения следующей цепочки с $n = 2, q = 3, p = 0$: Если перейти к переменным $x = e^{\phi_0}$, $y = e^{\phi_1}$, $z = e^{\phi_2}$, то эти уравнения примут такой вид:

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= M_1(n_2 - n_1)n_1 + M_2(n_3 - n_1)n_1n_2, \\ \dot{n}_2 &= M_1(n_3 - n_2)n_2 + M_2n_2^2 - M_2n_3n_2^2, \\ \dot{n}_3 &= (M_1 + M_2)(1 - n_3)n_3. \end{aligned} \tag{171}$$

Интегралы движения для моделей конечной размерности вычисляются по общей схеме, изложенной выше. Для модели, имеющей размерность $n = 2$, имеется один интеграл движения, который в случае, когда все три собственных числа $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ матрицы $\hat{\mathbf{M}}$ различны, имеет такой вид:

$$J_{12} = \frac{\ln Q_1}{\lambda_0 - \lambda_1} - \frac{\ln Q_2}{\lambda_0 - \lambda_2} - \frac{(\lambda_1 - \lambda_2) \ln Q_0}{(\lambda_0 - \lambda_1)(\lambda_0 - \lambda_2)},$$

где $Q_k = v_k^0 + v_k^1x + v_k^2y$, $k = 0, 1, 2$, а \mathbf{v}_k — левые собственные векторы матрицы $\hat{\mathbf{M}}$ размерности 3.

3.3.6 Цепочки с условиями отражения

Рассмотренные способы ограничения длины цепочек с помощью условия цикличности и условия обрезания не применимы к цепочкам содержащим одновременно

менно и правые и левые производные. В этом случае для ограничения длины цепочек можно воспользоваться условием отражения. Условие отражения продемонстрируем на следующем примере. Рассмотрим цепочку вида:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = M(e^{\phi_{i+1}} - e^{\phi_i}) + N(e^{-\phi_i} - e^{-\phi_{i-1}}) \quad (172)$$

Потребуем, чтобы выполнялись следующие условия:

$$\phi_i = -\phi_{-i}. \quad (173)$$

Из этих условий следует, что $\phi_0 = 0$, что автоматически приводит к требованию $M = N$. Не трудно видеть, что в этом случае уравнения (172) для $i < 0$ переходят в уравнения для $i > 0$.

Условиям отражения (173) соответствует следующее условие для функций Φ_i : $\Phi_0 = \Phi_1$, $\Phi_i = \Phi_{-i}$.

Для того, чтобы получить конечную цепочку необходимо поставить условие отражения с другого конца цепочки на некотором шаге q , полагая:

$$\phi_{q-i} = -\phi_{q+1+i}, \quad i = \overline{0, q}. \quad (174)$$

При $i = q$ имеем соотношение $\phi_0 = \phi_{2q+1} = 0$. Не трудно увидеть, что в этом случае уравнения с номерами $q + 1 + i$ переходят в уравнения с номерами $q - i$ для указанных значений индекса i . В результате получаем замкнутую конечную цепочку уравнений с номерами $i = \overline{1, q}$. В частности, при $q = 3$, вновь переходя

к переменным n_i , имеем систему уравнений следующего вида:

$$\dot{n}_1 = M(n_2 - n_1)n_1 + M(1 - n_1),$$

$$\dot{n}_2 = M(n_3 - n_2)n_2 + M(1 - n_2/n_1),$$

$$\dot{n}_3 = M(2 - n_3^2 - n_3/n_2).$$

3.3.7 Построение решений вспомогательных уравнений и уравнений цепочек

Решения полученных уравнений строятся с помощью подстановок, связанных с базовыми соотношениями:

$$A_i(t) = \frac{\Phi_{i+1}(t)}{\Phi_i(t)}, \quad \hat{A}_i(t) = \hat{\Phi}_{i+1} \hat{\Phi}_i^{-1}.$$

Сами функции Φ_i являются решениями соответствующих вспомогательных уравнений.

Рассмотрим вначале скалярные уравнения (154). Будем искать частные решения этих уравнений с постоянными коэффициентами в следующей форме:

$$\Phi_i = P(z)z^i e^{\lambda t}.$$

В результате уравнения (154) приводятся к виду:

$$\lambda = \sum_{k=0}^n C_k z^k.$$

Это соотношение является характеристическим уравнением, из которого вычисляется параметр λ как функция комплексного параметра z . В результате

общее решение уравнения (154) можно представить в такой форме:

$$\Phi_i = \int_C P(z) z^i e^{\lambda(z)t} dz,$$

где C — контур в комплексной плоскости изменения параметра z .

Другой способ построения решений вспомогательных уравнений, пригодный для случая $L_i \neq 0$, строится на базе метода производящих функций. Рассмотрим построение решений уравнения (158) для случая:

$$L_i = \sum_{k=0}^m \Lambda_k i^k, \quad (175)$$

где m — фиксированное натуральное число. Умножая каждое из уравнений с номером i почленно на z^i и, затем суммируя результаты по i , приходим к следующему уравнению:

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} = M(z)F(z, t) + \sum_{k=0}^m \Lambda_k \frac{\partial^k F(z, t)}{\partial z^k}. \quad (176)$$

Здесь z — некоторое, вообще говоря, комплексное число, $F(z, t)$ — производящая функция:

$$F(z, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi_k z^k,$$

и $M(z)$ — полином по z^{-1} :

$$M(z) = \sum_{k=0}^m M_k z^{-k}.$$

Аналогичные решения будут иметь место и в случае уравнений с правой и левой

производными, с той разницей, что функция $M(z)$ будет иметь более общий вид:

$$M(z) = \sum_{k=0}^n (M_k z^{-k} + N_k z^k).$$

Пусть $F(z, t)$ — производящая функция, являющаяся решением уравнения (176). Тогда решения для функций $\phi_i(t)$ находятся с помощью соотношений:

$$\phi_k = \left. \frac{\partial^k F(z, t)}{\partial z^k} \right|_{z=0}.$$

3.4 Выводы

Нелинейные функциональные подстановки позволяют свести УНД к системе квазилинейных уравнений первого порядка, что значительно упрощает поиск частных решений. В некоторых случаях использование НФП позволяет отыскать преобразование Бэклунда.

Использование различных разложений функций $u(t, x, T)$ и $v(t, x, T)$ по линейно независимым функциям переменной T дает широкие возможности для поиска и анализа свойств локализованных решений уравнений нелинейной диффузии. В частности, для УБД найдено автопреобразование решений и показано наличие локализованных волновых структур, возникающих в такой среде, в том числе, при отсутствии генерации ТД. Получено уравнение, связывающее скорость генерации ТД с волновыми компонентами решения.

Для случая зависимости коэффициента диффузии ТД от их концентрации n вида: $\mathcal{D} \sim n^\alpha$, $\alpha \in \mathcal{R}$ обнаружена связь между решениями УНД с взаимными коэффициентами диффузии со степенями α и $-\alpha - 2$. В этом случае решения соответствующих уравнений могут быть связаны трансцендентным алгебраиче-

ским уравнением, задающим сложное отображение решений одного уравнения в другое.

Расширение же МФП на случай дискретных систем, позволило находить интегралы движения уравнений кинетики ТД и выявлять различные режимы в подобных системах.

Глава 4. Модель радиационно-стимулированного роста сверхрешеток в среде с нелинейной диффузией

В данной главе развивается подход к анализу условий роста упорядоченных структур в среде с нелинейной диффузией, подвергающейся лазерному, либо радиационному облучению, основанный на методе многомасштабных разложений. Вначале все основные результаты получаются для системы состоящей из одного типа точечных дефектов, генерируемых с постоянной скоростью. Далее рассматриваются обобщения на случай произвольного числа ТД слабо взаимодействующих между собой и отдельно рассматриваются случаи источников ТД, имеющих неоднородное пространственное распределение.

4.1 Уравнение нелинейной диффузии одного типа точечных дефектов

Простейшим случаем является система с одним типом ТД. Такое рассмотрение возможно, когда скорость диффузии других компонент значительно ниже, либо когда, наоборот, они уже вышли на стоки. Уравнение нелинейной диффузии одного типа ТД имеет следующий вид [244, 245]:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial z^{\alpha}} \left(\tilde{D}(n) \frac{\partial n}{\partial z^{\alpha}} \right) - \mu n + \gamma J(n) + G. \quad (177)$$

Слагаемые и коэффициенты в уравнении (177), как правило, имеют следующий смысл: $D(n)$ — нелинейный коэффициент диффузии, $-\mu n$ — описывает выход дефектов на стоки с постоянной концентрацией (границы зерен, поры,

вакансионные петли и проч.), $J(n)$ — нелинейный рекомбинационный член, G — источник дефектов (скорость объемной генерации). Отметим, что источник G связан с интенсивностью излучения в среде, но не тождественен внешнему источнику излучения, поскольку дефекты образуются в результате взаимодействия налетающих частиц с кристаллической решеткой. В дальнейшем полагаем что коэффициенты μ , γ и источник G положительны (нелинейный член может принимать различные значения).

Отметим, что в общем случае G является функцией координат и времени — $G(\mathbf{x}, t)$. Это может быть связано с учетом затухания излучения в среде, а в случае лазерного облучения с пространственной неоднородностью, вызванной образованием на поверхности материала периодического поля излучения [248].

Наличие нелинейной добавки $J(n)$ в случае одного типа ТД требует дополнительных объяснений т.к. классическая рекомбинация возможна только в случае минимум двух типов дефектов. При интерпретации коэффициентов уравнения, приведенной выше, рекомбинационный член, очевидно, описывает убыль ТД за счет рождения комплексов из двух и более дефектов, которые считаются неподвижными. Либо, слагаемые $-\mu n + \gamma J(n) + G$ с нелинейным "рекомбинационным" членом следует рассматривать как сумму различных вкладов. Например, в случае, когда n — концентрация вакансий, правую часть уравнения (177) можно представить в таком виде:

$$-\mu n + \gamma J(n) + G = \tilde{\mu}_1 n - \tilde{\mu}_2 n + \lambda(n) (N_0 - n) g_0, \quad (178)$$

где линейные члены с коэффициентами $\tilde{\mu}_{2,1}$ соответствуют выходу на стоки и рождению ТД от вторичного выбивания узлов решетки. Последний член в приведенном выражении соответствует генерации ТД при взаимодействии частиц

излучения с концентрацией g_0 с занятыми узлами решетки, а $\lambda(n)$ — интенсивность взаимодействия, зависит от концентрации дефектов в данной точке. В случае малых концентраций можно ограничиться первыми двумя членами в разложении: $\lambda(n) = \lambda_0 \pm \lambda_1 n + O(n^3)$. Знаки "+" и "-" соответствуют двум случаям — когда рост концентрации ТД снижает пороговую энергию необходимую для выбивания узла решетки и наоборот. В случае интерпретации $n(\mathbf{x}, t)$ как концентрации неравновесных носителей заряда в полупроводнике $J(n) \sim n^3$ описывает Оже-рекомбинацию.

Отметим, что в общем случае концентрация налетающих частиц, а следовательно и скорость генерации ТД изменяются как в пространстве, так и со временем. Случай постоянной скорости генерации, либо имеющей заданное распределение по координатам, соответствует следующим условиям: тонкий слой облучаемого материала, слабое поглощение частиц излучения, начальная стадия формирования сверхструктуры. Именно этот случай рассматривается в данном разделе.

Обезразмерим уравнение (177) для выяснения характерных временных и пространственных масштабов. Для этого введем следующие масштабные коэффициенты: N_0 — масштаб концентрации дефектов, a — масштаб длины, связанный с шагом кристаллической решетки, и τ_0 — масштаб времени. Соответствующие безразмерные переменные: $x^\alpha = z^\alpha/a$, $\xi = n/N_0$, $t = \tau/\tau_0$. Скорость генерации и коэффициент диффузии перепишем в виде, содержащем размерные коэффициенты: $\tilde{D} = D_0 \mathcal{D}(n)$, $G = G_0 g(\vec{x}, t)$. В результате приходим к уравнению:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \left[\frac{D_0 t_0}{x_0^2} \right] \Delta F(\xi) - [\mu \tau_0] \xi + \frac{\gamma \tau_0}{N_0} P(\xi) + \left[\frac{\tau_0 G_0}{N_0} \right] g(\vec{x}, t),$$

где Δ — оператор Лапласа в декартовой системе безразмерных координат x^α , $\alpha = \overline{1, 3}$ и введено обозначение: $P(\xi) = J(N_0\xi)$.

Масштабные коэффициенты вычисляются из условия равенства единице выражений в квадратных скобках:

$$t_0 = \frac{1}{\mu}, \quad a = \sqrt{\frac{D_0}{\mu}}, \quad N_0 = \frac{G_0}{\mu}. \quad (179)$$

Тогда уравнение диффузии принимает вид:

$$\xi_t = \Delta F(\xi) - \xi + \varepsilon P(\xi) + g(\vec{x}, t). \quad (180)$$

Функция $F(\zeta)$ имеет вид:

$$F(\zeta) = \frac{1}{N_0} \int^{\zeta N_0} \mathcal{D}(n) dn.$$

Безразмерный коэффициент ε , стоящий при нелинейном члене следующим образом выражается через размерные коэффициенты:

$$\varepsilon = \frac{\gamma}{G_0}. \quad (181)$$

Будем считать ε малым параметром, который определяет масштабы возникающих структур. Из (181) следует, что $\varepsilon \ll 1$ в случае, когда генерация дефектов существенно преобладает над процессом их рекомбинации, что соответствует приданным выше условиям задачи.

4.2 Метод многомасштабных разложений

Хорошо известно, что пространственный масштаб когерентных структур на порядки превышает постоянную кристаллической решетки, а рост структуры происходит за время, большее характерных времен генерации и рекомбинации ТД [210]. Подобное разделение масштабов на "малые/быстрые" и "большие/медленные" позволяет применить к анализу уравнений нелинейной диффузии ТД метод многомасштабных разложений [193, 194]. Кроме быстрых переменных x, t введем в рассмотрение "медленные" время и координату: $T = \varepsilon t$, $X = \sqrt{\varepsilon}x_1$, $Y = \sqrt{\varepsilon}x_2$, $Z = \sqrt{\varepsilon}x_3$. Будем считать, что концентрации зависят только от медленных координат, что соответствует крупномасштабной образующейся структуре: $\xi(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{X}, t, T, \varepsilon)$. Отметим, что зависимость концентраций от переменных $T_1 = \varepsilon^2 t$, $X_1 = \varepsilon x$, .. не рассматривается, т.к. все дальнейшие выкладки выполняются в первых двух порядках разложения по ε :

$$\xi(t, \mathbf{X}, T, \varepsilon) = \xi_0(t, \mathbf{X}, T) + \xi_1(t, \mathbf{X}, T)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (182)$$

В зависимости от постановки задачи уравнение (180) должно быть дополнено соответствующими начальными и граничными условиями, которые так же разлагаются в ряд по ε .

Одной из основных задач, рассматриваемых в данном разделе, является выяснение условий при которых будет расти некоторое начальное периодическое распределение концентрации ТД и определение периода соответствующей сверхрешетки.

Приведенная ниже схема вычислений является общей для различных вариантов уравнения (177) и сохраняется в случае нескольких типов ТД.

С помощью формул дифференцирования функции, зависящей как от быст-

рых, так и от медленных переменных: $u(\mathbf{x}, t) = U(\mathbf{X}, t, T)$: $u_t = U_t + \varepsilon U_T$, $u_x = \sqrt{\varepsilon} U_X$ приводим уравнение (180) к виду:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \xi - g = \varepsilon P(\xi) - \varepsilon \frac{\partial \xi}{\partial T} + \varepsilon \Delta_s F(\xi), \quad (183)$$

где Δ_s — оператор Лапласа по медленным координатам. Безразмерная скорость генерации g рассматривается далее как величина, зависящая от медленных координат и медленного времени:

$$g = g(\mathbf{X}, T),$$

т.е. пространственные и временные масштабы неоднородностей внешнего потока излучения значительно превосходят масштабы процессов релаксации в кристаллической решетке.

Введение в рассмотрение переменных с различными масштабами приводит к тому, что безразмерное уравнение нелинейной диффузии (183) распадается на систему уравнений соответствующих различным порядкам разложения по малому параметру ε . При этом уравнения в каждом порядке описывают процессы, происходящие с различными скоростями.

В нулевом порядке уравнение описывает "быстрое" изменение концентрации за счет генерации внешним излучением и выхода на стоки, т.е. процессы релаксации:

$$\xi_{0,t} = -\xi_0 + g. \quad (184)$$

В дальнейшем будем называть подобные уравнения "уравнения релаксации"

Для концентрации в первом порядке имеем следующее уравнение:

$$\xi_{1,t} = -\xi_1 - \frac{\partial \xi_0}{\partial T} + \Delta_s F(\xi_0) + P(\xi_0). \quad (185)$$

Решение уравнения релаксации содержит постоянную интегрирования $B(\mathbf{X}, T)$, зависящую от медленных переменных:

$$\xi_0 = A(\mathbf{X}, T)e^{-t} + g(\mathbf{X}, T). \quad (186)$$

Согласно методу многомасштабных разложений функция $A(\mathbf{X}, T)$ определяется из условия отсутствия секулярных (растущих со временем) слагаемых в первом порядке разложения концентрации. Поскольку уравнение (184) не содержит вкладов от диффузионного и рекомбинационного членов, отвечающих за образование сверхрешетки, то в нулевом порядке вся информация о сверхструктуре содержится в множителе $A(\mathbf{X}, T)$, уравнение для которого и представляет основной интерес. Будем называть эту функцию "амплитудный фактор" (АФ).

4.3 Уравнение для амплитудного фактора

Решение уравнения (185) записывается в следующем виде:

$$\xi_1 = A_1(\mathbf{X}, T)e^{-t} + e^{-t} \int_0^t e^{t'} \left[-\frac{\partial \xi_0}{\partial T} + \Delta_s F(\xi_0) + P(\xi_0) \right] dt'. \quad (187)$$

Здесь $A_1(\mathbf{X}, T)$ — соответствующая постоянная интегрирования.

Интеграл от первого слагаемого в правой части (187) вычисляется таким

образом:

$$-e^{-t} \int_0^t e^{t'} \frac{\partial \xi_0}{\partial T} dt' = -e^{-t} t \frac{\partial A}{\partial T} - (1 - e^{-t}) \frac{\partial g}{\partial T}.$$

Для вычисления второго интеграла необходимо разложить функцию $F(z)$ в ряд Маклорена и выполнить почленное интегрирование:

$$\begin{aligned} e^{-t} \int_0^t e^{t'} F(\xi_0) dt' &= e^{-t} \int_0^t e^{t'} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{[k]}(0)}{k!} \left(A(\mathbf{X}, T) e^{-t'} + g \right)^k dt' = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{[k]}(0)}{k!} g^k + t A(\mathbf{X}, T) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{[k]}(0)}{k!} k g^{k-1} + \\ &+ \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=2}^k \frac{F^{[k]}(0) A^j(\mathbf{X}, T)}{k!} C_k^j g^{k-j} \left[\frac{e^{(1-j)t}}{(1-j)} - 1 \right]. \end{aligned}$$

Здесь C_k^j — биномиальные коэффициенты.

Заменой $F(\xi_0)$ на $P(\xi_0)$, аналогично вычисляется и интеграл $e^{-t} \int_0^t e^{t'} P(\xi_0) dt'$.

Рассмотренные интегралы содержат в асимптотике при $t \rightarrow \infty$ растущие пропорционально t секулярные члены. Их возникновение связано с резонансным взаимодействием решений нулевого порядка с последующими, которое приводит к расходимости решений при $t \rightarrow \infty$. Согласно стандартной процедуре исключения резонансов необходимо потребовать, чтобы эти слагаемые обратились в ноль в решении для ξ_1 , а так же в последующих порядках, если они анализируются. Для первого порядка условие отсутствия секулярных членов можно записать в виде уравнения для амплитудного фактора $A(\mathbf{X}, T)$:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = \Delta_s \left[\mathcal{D}(G/\mu) A \right] + P'(G/\mu) A, \quad (188)$$

которое является линейным уравнением типа уравнения диффузии. При этом коэффициент диффузии и рекомбинационный член зависят от скорости генерации $g(\mathbf{X}, T)$, т.е. в общем случае являются переменными. Порядок этого уравнения совпадает с порядком исходного уравнения по всем производным, что позволяет в первом порядке теории возмущений строить решения краевой задачи с соответствующим образом преобразованными граничными условиями.

После получения уравнения для амплитудного фактора анализ условий роста когерентных структур сводится к выяснению условий существования у него периодических и локализованных решений.

4.4 Условие усиления сверхрешетки постоянным источником

Рассмотрим вначале случай постоянной скорости генерации $g = \text{const}$. Как отмечалось выше, при рассмотрении диффузии в тонком слое вещества, неоднородность скорости генерации связана с неоднородностью потока внешнего излучения. Таким образом, постоянная скорость генерации соответствует постоянному во времени и однородному потоку внешнего излучения.

В этом случае пространственно-периодические решения уравнения (195) являются суперпозицией решений такого вида:

$$A(\mathbf{X}, T) = e^{pT} \left(A_0 \cos(\mathbf{K}\mathbf{X}) + B_0 \sin(\mathbf{K}\mathbf{X}) \right),$$

где параметр роста p связан с волновым числом K по медленным координатам:

$$p = P'(G/\mu) - \mathbf{K}^2 \mathcal{D}(G/\mu). \quad (189)$$

После подстановки выражения для $A\Phi$ в решение (193):

$$\xi_0 = e^{[(P'(G/\mu) - \mathbf{K}^2 \mathcal{D}(G/\mu))\varepsilon - 1]t} \left(A_0 \cos(\mathbf{K}\mathbf{X}) + B_0 \sin(\mathbf{K}\mathbf{X}) \right) + g \quad (190)$$

находим условие роста периодических составляющих, т.е. возникновения антидиффузионной неустойчивости:

$$\left[\frac{G_0}{\mu} J(G/\mu) - \frac{a^2}{\varepsilon^2} k^2 \mathcal{D}(G/\mu) \right] \varepsilon \geq 1,$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{K}\sqrt{\varepsilon}/a$ — волновой вектор. Отсюда следует, что в случае $\mathcal{D}(g) \geq 0$ растущими Фурье-компонентами будут такие, которые удовлетворяют в размерном виде соотношению:

$$\frac{\gamma}{G_0} \frac{\gamma J'(G/\mu) - \mu}{D(G/\mu)} \geq \mathbf{k}^2. \quad (191)$$

Полученное выражение объясняет рост длиннопериодических составляющих в начальном распределении концентрации, амплитуды которых в начальный момент времени малы. При этом оно служит прежде всего для оценки минимальной длины волны, растущей со временем при заданном значении G . Этой длине волны (критическому волновому числу) соответствует равенство в (191).

При выполнении условия (191) концентрация в нулевом порядке (190) неограниченно растет со временем, что соответствует лишь начальной стадии облучения, вдали от динамического равновесия, при котором процессы релаксации уравновешены диффузией и нелинейной рекомбинацией.

Важной особенностью выражения (191) является то, что коэффициент диффузии и рекомбинационный член зависят не от концентрации, а от величины,

содержащей скорость генерации: G/μ — аргумента, который может принимать значения отличные от тех, в которых изменяется концентрация. В частности, эта величина может быть отрицательной в случае, когда правая часть уравнения (177) представляет из себя сумму различных вкладов и суммарный коэффициент $\mu < 0$. Это приводит к тому, что рекомбинационный член как функция переменной G/μ может быть положительным, а коэффициент диффузии может принимать отрицательные значения.

Отметим, что возможность для роста длиннопериодической структуры существует и в том случае, когда вклад нелинейного члена мал ($J' \simeq 0$):

$$-\gamma\mu \geq \mathbf{k}^2 G_0 D(G/\mu).$$

Поскольку γ , μ и \mathbf{k}^2 положительные величины, то из этого соотношения следует $D(G/\mu) < 0$. Как отмечалось выше, это условие может выполняться для коэффициента диффузии, поскольку его отрицательные значения должны достигаться не для допустимых значений концентрации дефектов n , а для величины G/μ .

4.5 Уравнения нелинейной диффузии нескольких типов дефектов

Обобщим приведенные в предыдущей главе соотношения на случай системы из произвольного числа ТД (вакансии, междоузлия, атомы примесей и т.д.).

Система уравнений диффузии для M типов ТД будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial n_i}{\partial \tau} = D_0 \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial z^\alpha} \left(\mathcal{D}_i(\mathbf{n}) \frac{\partial n_i}{\partial z^\alpha} \right) - \mu_0 \mu_i n_i + \gamma J_i(\mathbf{n}) + G_0 g_i(\mathbf{x}, t), \quad i = \overline{1, M}.$$

Здесь $D_i(\mathbf{n})$ — коэффициенты диффузии каждого компонента, $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_M)$ — вектор концентраций, $J_i(\mathbf{n})$ — нелинейные источники.

Все уравнения этой системы аналогичны рассмотренному выше уравнению для одного типа ТД, с той лишь разницей, что коэффициент диффузии и комбинационный член зависят от концентраций всех компонент.

В безразмерных переменных с коэффициентами (179) уравнения принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_i = \Delta_s F_i(\mathbf{u}) - \mu_i u_i + \varepsilon P_i(\mathbf{u}) + g_i, \quad (192)$$

где

$$F_i(\mathbf{n}) = \frac{1}{N_0} \int^{N_0 n_i} \mathcal{D}(n_1, \dots, n_{i-1}, \xi, n_{i+1}, \dots, n_M) d\xi.$$

Здесь и далее полагается, что индекс i принимает значения от 1 до M .

Далее снова рассмотрим случай малого параметра ε . Вводя медленные переменные X , T и раскладывая концентрации в ряд по ε : $u_i(t, \mathbf{X}, T, \varepsilon) = u_i^{(0)}(t, \mathbf{X}, T) + u_i^{(1)}(t, \mathbf{X}, T)\varepsilon + O(\varepsilon^2)$, получаем следующие уравнения в первых двух порядках разложения:

$$\begin{aligned} u_{i,t}^{(0)} + \mu_i u_i^{(0)} &= g_i, \\ u_{i,t}^{(1)} + \mu_i u_i^{(1)} &= P_i(\mathbf{u}^{(0)}) - \frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial T} + \Delta_s F_i(\mathbf{u}^{(0)}). \end{aligned}$$

Решения уравнений релаксации имеют вид:

$$u_i^{(0)} = A_i(\mathbf{X}, T) e^{-\mu_i t} + g_i, \quad (193)$$

где $A_i(\mathbf{X}, T)$ — амплитудные факторы соответствующих компонент.

В первом порядке решение так же содержит интегралы от нелинейных добавок, вычисление которых аналогично случаю с одним типом дефектов:

$$u_i^{(1)} = B_i(\mathbf{X}, T)e^{-\mu_i t} + e^{-\mu_i t} \int_0^t e^{\mu_i t'} \left[-\frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial T} + P_i(\mathbf{u}^{(0)}) + \frac{\partial}{\partial X^\alpha} \left(F_i(\mathbf{u}^{(0)}) \frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial X^\alpha} \right) \right] dt'. \quad (194)$$

Коэффициенты μ_i полагаются попарно не равными друг другу.

Условие исключения секулярных слагаемых приводит к такой системе уравнений для АФ:

$$\frac{\partial A_i}{\partial T} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial X^\alpha} \left(\mathcal{D}_i(\mathbf{G}/\mu_0) \frac{\partial A_i}{\partial X^\alpha} \right) + \mu_0 \frac{\partial P_i(\mathbf{G}/\mu_0)}{\partial G_i} A_i, \quad (195)$$

где $\mathbf{G} = G_0 \mathbf{g} = (G_0 g_1, G_0 g_2, \dots, G_0 g_M)$.

Как правило, вблизи границы материала концентрация имеет неоднородное затухающее в глубь материала распределение. При анализе условий роста сверхрешетки, в данном случае, рассмотрим концентрации, имеющие такое начальное распределение. В этом случае решения для АФ будут представлять собой суперпозицию таких функций:

$$A_i = C_i e^{p_i T - Q_i Z} \cos(\mathbf{KX} + \phi). \quad (196)$$

Критерием роста компоненты среды с номером i является условие:

$$\varepsilon p_i(\mathbf{g}) - \mu_i > 0,$$

где величина $p_i(\mathbf{g})$ вычисляется как решение дисперсионного уравнения систе-

мы (195).

Таким образом, условие роста компоненты с номером i принимает такой вид:

$$Q_i^2 - K_i^2 \geq \frac{G_0 \mu_i / \gamma - \mu_0 \frac{\partial}{\partial G_i} J_i (G_0 \mathbf{G} / \mu_0^2)}{\mathcal{D}_i(\mathbf{G} / \mu_0)}. \quad (197)$$

Т.к. вклад нелинейной рекомбинации на начальной стадии роста полагался малым, то соотношения (197) устроены таким образом, что рост отдельных компонент происходит независимо. Учет неравномерного распределения по глубине приводит к дополнительной возможности для выполнения условия роста. Соотношение (197) можно использовать для оценки характерной толщины слоя, в котором происходит рост длиннопериодических составляющих.

4.6 Неоднородное пространственное распределение источника точечных дефектов

Рассмотренные выше условия роста были получены в предположении, что скорость генерации ТД постоянна. Тогда решение для АФ легко находится в виде (196). Далее исследуем влияние неоднородного распределения источника на рост сверхрешетки.

4.6.1 Затухающий по глубине источник ТД

Поскольку генерация ТД в объеме материала вызвана падающим на его границу излучением, то затухание излучения по глубине приводит к неоднородному распределению скорости генерации и, как следствие, к характерному распределению концентрации дефектов с локализацией в приповерхностном слое.

В общем случае распределение скорости генерации не является заданной

величиной, но на начальной стадии облучения можно пренебречь влиянием ТД на процесс их рождения.

Традиционной зависимостью интенсивности излучения от глубины материала является экспоненциальная. Соответствующую скорость генерации запишем в таком виде: $g(Z) = g_0 e^{-\Gamma Z}$ (ось Z направлена от границы вглубь материала).

Уравнение для амплитудного фактора запишется в таком виде:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = \Delta_s (\mathcal{D}(Z)A) + R(Z)A. \quad (198)$$

Здесь $\mathcal{D}(Z) = \mathcal{D}(g(Z))$ и $R(Z) = P'(g(Z))$, $P(g)$ — слагаемое описывающее нелинейность в исходном уравнении.

Будем искать решение этого уравнения в комплексной форме:

$$A(\vec{X}, Z, T) = e^{pT} U(Z) e^{i(\vec{K}, \vec{X})},$$

где $\vec{X} = (X, Y)$.

Тогда уравнение для функции $U(Z)$ примет вид:

$$\frac{\partial^2}{\partial Z^2} (\mathcal{D}(Z)U) + (R(Z) - p - \mathcal{D}(Z)\vec{K}^2)U = 0. \quad (199)$$

После замены переменной: $W(Z) = \mathcal{D}(Z)U(Z)$:

$$\frac{d^2}{dZ^2} W + \left(\frac{R(Z) - p}{\mathcal{D}(Z)} - K^2 \right) W = 0. \quad (200)$$

Рассмотрим пример с линейным коэффициентом диффузии и кубической нели-

нейностью: $P(g) = p_0 + p_1g + p_2g^2 + p_3g^3$. В этом случае имеем:

$$\mathcal{D}(Z) = \mathcal{D}_0 = \text{const}, \quad R(Z) = 3p_3g_0^2e^{-2\Gamma Z} + 2p_2g_0e^{\Gamma Z} + p_1.$$

В случае $p_3 < 0$, после замены переменных $r = r_0e^{-\Gamma Z}$, $W = \sqrt{r}\psi(r)$, уравнение принимает вид:

$$\psi'' + \left(-a^2 + br^{-1} + cr^{-2} \right) \psi = 0, \quad (201)$$

где $a = \sqrt{3|p_3|g_0^2/D}$, $b = 2p_2g_0/D$, $D = \mathcal{D}_0r_0\Gamma^2$, $c = ((p_1-p) - \mathcal{D}_0\mathbb{K}^2)r_0/D + 1/4$.

Сделаем замену переменной $\rho = 2ar$, а коэффициенты представим в следующем виде: $b = 2ab_1$, $c = -c_1/4$, тогда уравнение примет вид:

$$\psi'' + \left(-1/4 + b_1r^{-1} - c_1/4r^{-2} \right) \psi = 0. \quad (202)$$

Покажем, что решения уравнения (202) выражаются через обобщенные полиномы Лагерра $y = L_n^s(r)$, удовлетворяющие уравнению:

$$ry'' + (s + 1 - r)y' + (\lambda - s/2 - 1/2)y = 0,$$

где $s > -1$, $\lambda = n + (s+1)/2$, $n \in \mathbb{Z}$. Чтобы привести это уравнение к нужному нам виду, сделаем замену $y = r^{-(s+1)/2}e^{r/2}V(r)$, после этого уравнение примет вид:

$$V'' + \left(-1/4 + \lambda r^{-1} - (s^2 - 1)/4r^{-2} \right) V = 0.$$

Сравнивая с уравнением (202), находим условия, при которых его решения вы-

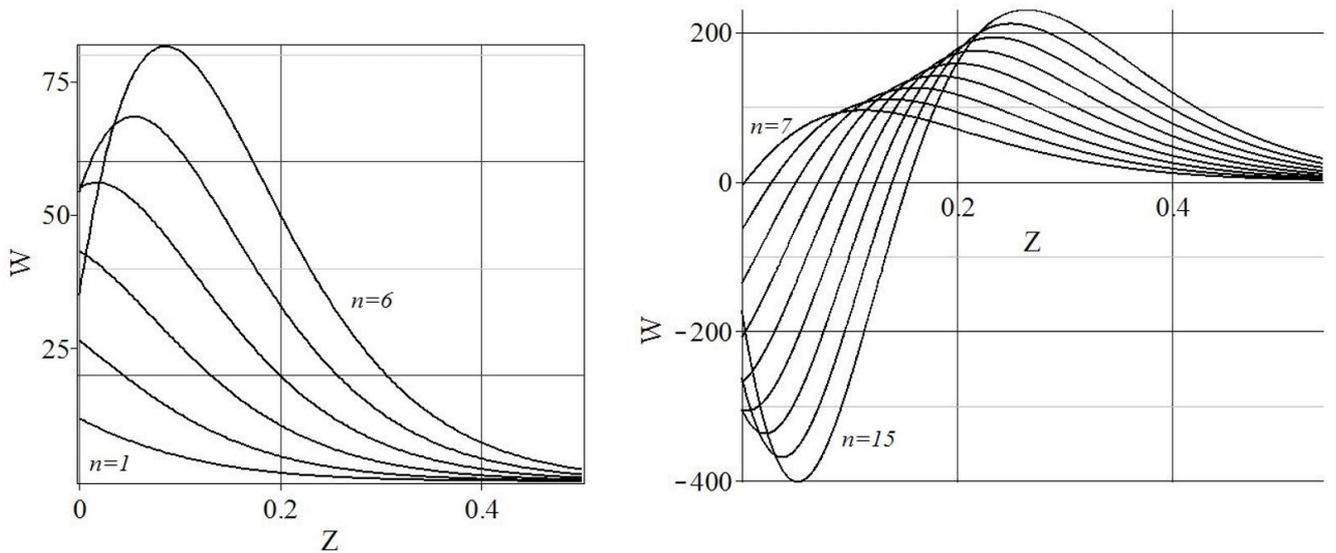


Рис. 14: Концентрационные профили (204), удовлетворяющие условию $W(Z, n) > 0, Z > 0$.

ражаются через обобщенные полиномы Лагерра: $b_1 = \lambda = n + (s + 1)/2, c_1 = s^2 - 1$.

На Рис.14 представлены графики решений для различных n при значениях параметров: $\Gamma = 4, a = 1, s = 5, r_0 = 1$. На Рис.15 показано поведение решений при $Z \rightarrow \infty$. Для выбранных параметров, только первые шесть решений $W(z, n), n = \overline{1, 6}$ (см. Рис.14) являются положительными в области $Z > 0$.

Возвращаясь к первоначальным переменным, получаем следующее решение уравнения (201):

$$\psi(r, n) = e^{-ar} (2ar)^{(s+1)/2} L_n^s(2ar), \quad s > -1, \quad n \in Z. \quad (203)$$

Функция $W(Z)$, определяющая концентрационный профиль, имеет вид:

$$W(Z, n) = (2ar_0)^{(s+1)/2} e^{-\frac{\Gamma}{2}Z - ar_0 e^{-\Gamma Z}} L_n^s(r_0 e^{-\Gamma Z}). \quad (204)$$

В случае положительного коэффициента p_3 решения могут быть получены по

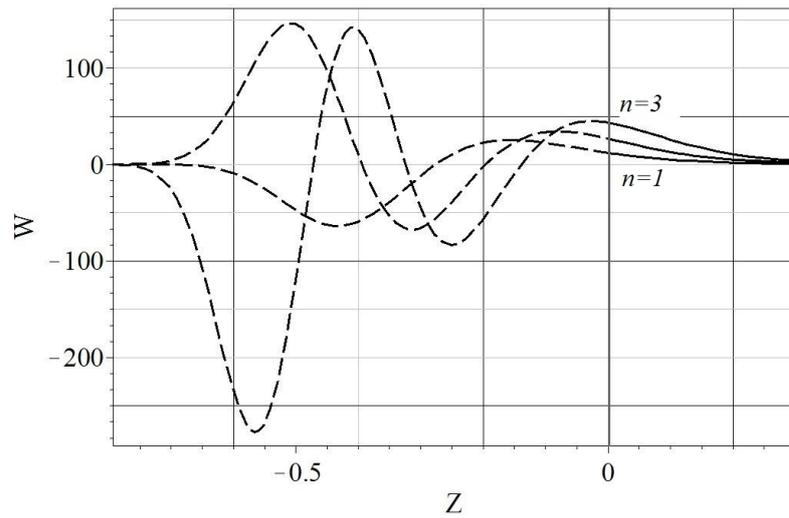


Рис. 15: Концентрационные профили (204).

формуле (204) с мнимой постоянной a . В этом случае решение комплексное и физический смысл имеют вещественная и мнимая части решения.

4.6.2 Параметрическое возбуждение периодической сверхструктуры

Один из режимов роста сверхрешетки заключается в создании в тонком приповерхностном слое материала периодического распределения интенсивности внешнего излучения. В случае лазерного облучения, это соответствует образованию периодического электромагнитного поля на поверхности материала в результате интерференции падающей волны излучения с излучением рассеянным микронеровностями поверхности.

Рассмотрим простейший вариант периодического возмущения внешнего источника вида:

$$g = g_0 + g_1 \cos(2K_1 X),$$

где g_0 , g_1 и K_1 — некоторые постоянные. Преобразуем уравнение (195) с помо-

щью подстановки $W = \mathcal{D}(g(X))A(X, T)$ к следующему виду:

$$\frac{1}{\mathcal{D}(g)} \frac{\partial W}{\partial T} = \Delta_s W + \frac{P'(g)}{\mathcal{D}(g)} W. \quad (205)$$

Поскольку g зависит только от X решение последнего уравнения можно искать с помощью разделения переменных:

$$W = e^{pT + iK_2 Y + iK_3 Z} w(X, p),$$

где функция $w(X, p)$ удовлетворяет обыкновенному дифференциальному линейному уравнению типа Шредингера:

$$\frac{d^2 w}{dX^2} + U(X, p)w = \mathbf{K}_0^2 w, \quad (206)$$

где $\mathbf{K}_0^2 = K_1^2 + K_2^2$, а периодическая по X функция $U(X)$ имеет вид

$$U(X, p) = \frac{P'(g(X)) - p}{\mathcal{D}(g(X))}. \quad (207)$$

Согласно общей теории уравнения Шредингера с периодическим потенциалом, решение его можно представить в виде:

$$w(X, p) = e^{iq(p)X} \Phi(X, p),$$

где $\Phi(X, p)$ — периодическая функция, а $q(p)$ — квазиимпульс, определяющий устойчивость решения. Квазиимпульс может быть вещественной величиной или чисто мнимой.

Рассмотрим для демонстрации общего эффекта коэффициент диффузии та-

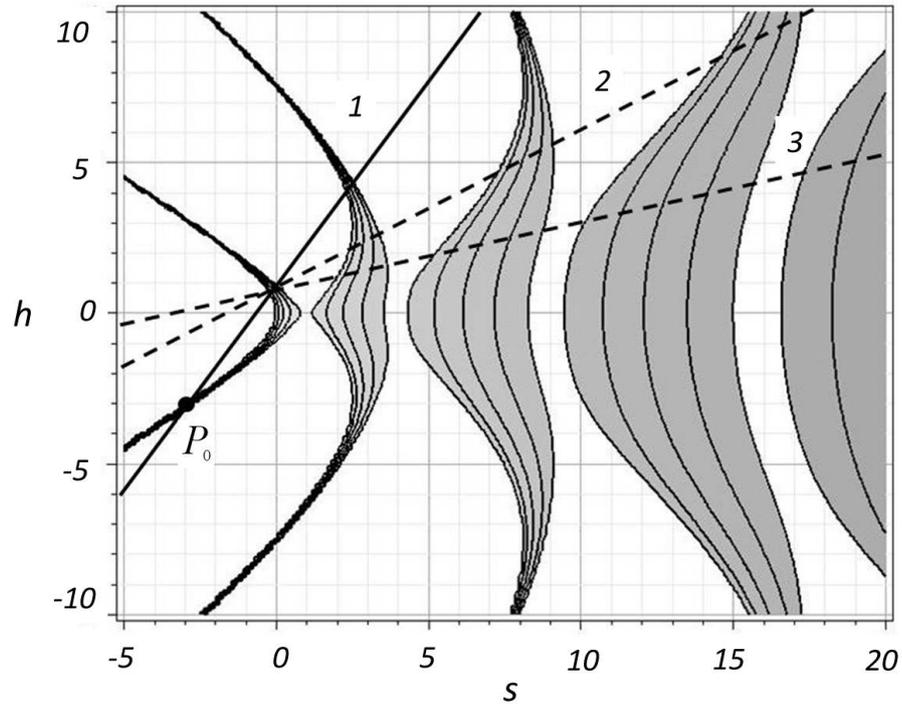


Рис. 16: Диаграмма устойчивости уравнения Маттье.

КОГО ВИДА:

$$\mathcal{D}(g) = D_0/(gN_0 + n_0),$$

и нулевой нелинейный источник: $J(n) = 0$. Тогда уравнение (205) примет вид:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial X^2} - \left(pg_0 + \mathbf{K}_0^2 + pg_1 \cos(2K_1 X) \right) w = 0.$$

Данное уравнение представляет собой уравнение Маттье, которое приводится к стандартной форме:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \zeta^2} + (s + 2h \cos(2\zeta))W = 0.$$

Здесь $\zeta = K_1 X/2$, $s = -4(pg_0 + \mathbf{K}_0^2)/K_1^2$, $h = -2pg_1/K_1^2$. На Рис.16 изобра-

жена диаграмма устойчивости решений уравнения Матье, т.е. областей значений s и q , в которых величина $q(p)$ вещественна (обозначены серым цветом), и в которых величина $q(p)$ — чисто мнимая. Кривые в заштрихованных областях — линии равного уровня функции $q(s, h)$.

Прямыми на Рис. 16 изображены допустимые значения $s(p), h(p)$, которые соответствуют различным вещественным значениям параметра p :

$$h = \frac{g_1}{g_0} \left(s + \frac{\mathbf{K}_0^2}{K_1^2} \right).$$

Эти прямые будем называть дисперсионными прямыми. Их наклон определяется отношением g_1 к g_0 . Для растущих со временем решений уравнения (205) параметр p должен быть положительным. Для $p > 0$ и $g_0 > 0, g_1 > 0$ параметры s и h — отрицательны. Значит растущие со временем решения, соответствующие устойчивым решениям уравнения Матье на диаграмме на Рис.16 лежат в третьей четверти координатной плоскости. В этой области существует единственная узкая область, соответствующая квазипериодическим решениям уравнения Матье. На рисунке сплошной прямой с номером 1 изображена дисперсионная прямая, соответствующая таким значениям g_0 и g_1 , при которых эта прямая пересекает область устойчивости. Две пунктирные прямые соответствуют значениям g_0 и g_1 , для которых пересечения нет. Поскольку области устойчивости зеркально-симметричны относительно горизонтальной оси, то аналогичные дисперсионные кривые возможны и при отрицательном значении их наклона, т.е. при $g_1/g_0 < 0$. Таким образом, в рассматриваемом простейшем случае выбора формы нелинейного источника и коэффициента диффузии, показано, что за счет параметрической неустойчивости в такой системе будет возбуждаться только одна квази-периодическая составляющая пространствен-

ного распределения, соответствующая точке пересечения P_0 на графике. При этом это возможно, только при определенных параметрах внешнего источника, содержащего пространственно-периодическую компоненту.

4.7 Оценки пространственных масштабов сверхрешеток

В работах [244, 245] на основе предложенной выше модели нелинейной диффузии был рассмотрен рост поверхностной сверхструктуры в случае взаимодействия поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), возбуждаемых на неравновесных электронах в полупроводнике, с падающим лазерным излучением. Показано, что усиление сверхрешетки носит резонансный характер и происходит в пико- и субпикосекундном масштабе. Для описания кластеризации дефектов (неравновесных носителей заряда в полупроводнике) была рассмотрена модель с коэффициентом диффузии

$$D(n) = \frac{D_p n_0}{n + n_0},$$

где n — концентрация дефектов, D_p — коэффициент диффузии неравновесных носителей, постоянная n_0 характеризует влияние неравновесных носителей на процесс их диффузии.

Характерное время образование ППП порядка субпикосекунд, а характерная глубина проникновения излучения менее $1 \mu m$. Т.к. характерные масштабы диффузии значительно превышают эти величины, то применение метода многомасштабных разложений можно считать оправданным.

Эффективный коэффициент диффузии в этом случае имеет вид: $D_{eff} = \frac{\mu}{G + \mu n_0}$.

Для полупроводниковых структур параметры модели могут быть выбраны следующим образом: $\gamma = (1 - 10) \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$, $\mu \simeq 10^8 \text{ s}^{-1}$, $\mathcal{D}_{eff} \simeq 10^2 \text{ cm}^2/\text{s}$. В этом случае используя (197) для одного типа ТД получаем такую оценку для критического волнового числа и длины волны сверхрешетки: $k_0^2 \simeq 10^6 \text{ cm}^{-2}$, $\lambda_0 \simeq 10^{-3} \text{ cm}$.

Полученное выше выражение для эффективного коэффициента диффузии, как функции скорости генерации, позволяет рассчитывать значение интенсивности, при которой наблюдается резкое усиление контрастности образующейся структуры. Скорость фотогенерации G таким образом связана с интенсивностью внешнего излучения: $G = \frac{\alpha I}{\hbar\omega}$, где α — линейный коэффициент поглощения полупроводника, а выражение для коэффициента μ имеет вид:

$$\mu \simeq \frac{1}{\tau_c} - \frac{\sigma_c I}{\hbar\omega}.$$

Используя приведенные выше выражение, получаем такую связь между эффективной скоростью генерации g_D и интенсивностью внешнего излучения I :

$$g_D \simeq - \left(\frac{1}{\tau_c} - \frac{\sigma_c I}{\hbar\omega} \right) \left(1 + \frac{\alpha^2 n_0 D_p}{\frac{\alpha I}{\hbar\omega} + n_0 \left(\frac{1}{\tau_c} - \frac{\sigma_c I}{\hbar\omega} \right)} \right)$$

При длине волны образующейся структуры $\lambda \sim 0.01 - 10 \mu\text{m}$ и толщине слоя $h \sim 6 \text{ nm} - 1 \text{ m}$ при следующих параметрах: $D_p = 10^{-2} - 10^2 \text{ cm}^2/\text{s}$, $n_0 \gg 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $G = 10^{25} - 10^{34} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$, $\sigma_c = 10^{16} - 10^{18} \text{ cm}^2$, $C \simeq 4 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$ для интенсивностей в пределах $I \sim 10^5 - 10^{10} \text{ W}/\text{cm}^2$ получаем, что эффективная скорость генерации вблизи резонансов может достигать гигантских значений $g_D = 10^{11} - 10^{14} \text{ s}^{-1}$, что соответствует быстрому росту концентрации — диффузионному "взрыву" .

4.8 Выводы

Построенная модель нелинейной диффузии точечных дефектов позволяет проводить анализ условий возникновения сверхрешеток при произвольной зависимости коэффициента диффузии от концентрации дефектов.

На начальном этапе формирования структуры, когда скорость генерации можно считать постоянной, взаимная рекомбинация приводит к подавлению роста сверхструктуры.

С помощью метода многомасштабных разложений, основанном на разделении процессов на "быстрые" и "медленные" получено уравнение для функции — амплитудного фактора, описывающее рост длиннопериодических составляющих. Данное уравнение относится к диффузионному типу, при этом, коэффициент диффузии является функцией эффективной скорости генерации и как функция этого аргумента может принимать отрицательные значения, что соответствует росту скоплений ТД. Для такой постановки задачи показано, что существует критическое значение волнового числа сверхрешетки, которое определяется интенсивностью внешнего излучения и начиная с которого наблюдается рост.

Полученные результаты обобщаются на случай системы с несколькими типами дефектов и слабой взаимной рекомбинацией.

Отдельно рассмотрены случаи неоднородного пространственного распределения внешнего излучения. В этих случаях получены диаграммы устойчивости решения и концентрационные профили по глубине, на которых максимум концентрации находится на некотором расстоянии от границы материала, что соответствует области, в которой устанавливается динамическое равновесие между генерацией и рекомбинацией точечных дефектов.

Из полученного выражения для эффективной скорости генерации как функции интенсивности внешнего излучения следует, что возникновение периодических макроструктур носит резонансный характер.

Глава 5. Модель "быстрая релаксация-медленная диффузия" с учетом эффекта насыщения

В данной главе анализ эволюции начального распределения точечных дефектов в кристалле проводится на всем интервале времени облучения. Для этого формулируется новая модель, главное отличие которой заключается во введении в уравнения источника дефектов, учитывающего процесс насыщения их генерации.

Как правило, в кинетических моделях рассматривается либо постоянный источник точечных дефектов, который отождествляется с внешним однородным источником излучения, либо, в более общем случае, задается зависимость источника от координаты, направленной вглубь материала и таким образом учитывается затухание излучения в среде.

Однако, в реальности, источником дефектов выступает сама кристаллическая решетка, следовательно количество дефектов, которое может быть сгенерировано, ограничено, а их присутствие в решетке влияет на скорость их генерации.

Таким образом, на основе предложенной ранее модели нелинейной диффузии должна быть разработана новая модель, в которой частицы излучения должны рассматриваться в качестве одной из компонент динамической системы, взаимодействующей с занятыми узлами решетки и ТД.

При этом учет влияния повреждения кристаллической решетки должен приводить к описанию насыщения концентрации, т.е. к ограниченному росту решений со временем и позволять получать условия образования когерентных структур в различных временных режимах облучения материала [253].

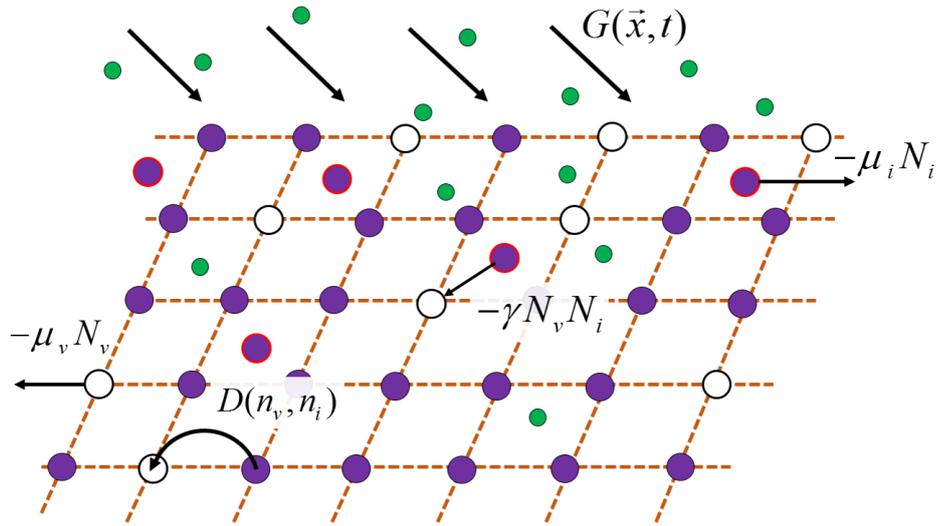


Рис. 17: Схема радиационного облучения кристаллической решетки.

5.1 Уравнение переноса радиационного излучения в кристаллической среде и нелинейная диффузия точечных дефектов

Рассмотрение поставленной задачи начнем с вывода уравнения для источника точечных дефектов в среде. Т.к. дефекты образуются при взаимодействии узлов решетки с налетающими частицами внешнего излучения, то, фактически, источником дефектов выступает сама решетка. Вероятность образования дефектов, при этом, зависит от числа занятых узлов решетки.

Рассмотрим модель с двумя типами ТД (Рис. 17) — вакансиями и междоузлиями, с соответствующими концентрациями n_v и n_i . Концентрацию занятых узлов решетки в необлученном материале обозначим N_c . Тогда концентрация занятых узлов решетки в любой момент времени равна $N_c - n_v$. Вероятность встречи налетающих частиц, с концентрацией g , с занятыми узлами решетки будет равна $(N_c - n_v)g$.

Источник для обоих типов дефектов в этом случае имеет вид $\tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g$,

где $\tilde{\lambda}_c$ — интенсивность взаимодействия налетающей частицы с узлом решетки с образованием пары вакансия-междоузлие.

Взаимодействие междоузлия с некоторой вероятностью $\tilde{\lambda}_r$ с налетающими частицами приводит к потере энергии частиц излучения и выбыванию их из процесса генерации.

Уравнение для концентрации частиц внешнего источника g представляет собой закон сохранения с учетом их взаимодействия с решеткой и дефектами:

$$g_\tau = -\frac{\partial I}{\partial z_3} - \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g - \tilde{\lambda}_r n_i g - \tilde{\kappa}g, \quad (208)$$

где $I(z_3, \tau)$ — интенсивность внешнего излучения в среде (предполагается, что излучение падает на границу $z_3 = 0$ в трехмерном пространстве с координатами в нем (z_1, z_2, z_3)), а слагаемое $\tilde{\kappa}g$ учитывает выбывание налетающих частиц за счет процессов не связанных с образованием дефектов. Для интенсивности налетающих частиц I используем стандартную формулу, связывающую ее с концентрацией g : $I = \sigma_r g$, где σ_r — скорость движения налетающих частиц.

Диффузия точечных дефектов описывается уравнениями, аналогичными предложенным в [244, 245] с той лишь разницей, что вместо постоянной скорости генерации используются введенные выше слагаемые:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_v}{\partial \tau} &= \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g + \tilde{\lambda}_i(N_c - n_v)n_i - \tilde{\gamma}n_v n_i - \tilde{\mu}_v n_v + \nabla [D_v(n_i, n_v)\nabla n_v], \\ \frac{\partial n_i}{\partial \tau} &= -\tilde{\sigma}_i \frac{\partial n_i}{\partial z_3} + \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g + \tilde{\lambda}_i(N_c - n_v)n_i - \tilde{\gamma}n_v n_i - \\ &- \tilde{\mu}_i n_i + \nabla [D_i(n_i, n_v)\nabla n_i]. \end{aligned}$$

Здесь $\tilde{\lambda}_i$ — интенсивность взаимодействия выбитых атомов с узлами решетки, приводящего к рождению пары дефектов, слагаемое $-\tilde{\sigma}_i \frac{\partial n_i}{\partial z}$ учитывает перенос

выбитых атомов за счет энергии, получаемой от налетающих частиц, $D_{v,i}$ — коэффициенты диффузии, слагаемые с коэффициентами $\tilde{\mu}_{v,i}$ учитывают выход дефектов на различные стоки с постоянной концентрацией, $\tilde{\gamma}$ — коэффициент взаимной рекомбинации, ∇ — градиент в декартовых переменных (z_1, z_2, z_3) .

Отметим, что добавки, пропорциональные $N_c - n_v$ обращаются в ноль в областях, где концентрация вакансий принимает максимально допустимое значение.

5.2 Разделение пространственных и временных масштабов

Выделим размерный коэффициент в коэффициентах диффузии: $D_{v,i}(n_v, n_i) = D_0 \mathcal{D}_{v,i}(n_v, n_i)$ и перейдем в уравнениях к безразмерным переменным: $\tau = t_0 t$, $(z_1, z_2, z_3) = x_0(x, y, z)$, $n_v = N_0 \tilde{v}$, $n_i = N_0 \tilde{u}$, $g = N_0 h$. Тогда рассматриваемая система уравнений примет следующий вид:

$$\begin{aligned} h_t &= -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - (1 - \tilde{v})h - \lambda_r \tilde{u}h - \varepsilon \kappa h, \\ \tilde{v}_t &= (1 - \tilde{v})\tilde{h} + \lambda_s(1 - \tilde{v})\tilde{u} - \gamma \tilde{u}\tilde{v} - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [\mathcal{D}_v(N_c \tilde{u}, N_c \tilde{v}) \nabla \tilde{v}], \\ \tilde{u}_t &= -\sqrt{\varepsilon} \sigma_i \frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + (1 - \tilde{v})\tilde{h} + \lambda_s(1 - \tilde{v})\tilde{u} - \gamma \tilde{u}\tilde{v} - \varepsilon \mu_i \tilde{u} + \nabla [\mathcal{D}_i(N_c \tilde{u}, N_c \tilde{v}) \nabla \tilde{u}], \end{aligned}$$

где \tilde{v} , \tilde{u} , h — безразмерные концентрации вакансий, междоузлий и налетающих частиц. Безразмерные коэффициенты в уравнении имеют вид: $\varepsilon = (D_0 \tilde{\lambda}_c N_c)^{1/4} / \sqrt{\sigma_r}$, $\lambda_{r,i} = \tilde{\lambda}_{r,i} / \tilde{\lambda}_c$, $\varepsilon \kappa = \tilde{\kappa} / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $\gamma = \tilde{\gamma} / \tilde{\lambda}_c$, $\varepsilon \mu_{v,i} = \tilde{\mu}_{v,i} / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $\sqrt{\varepsilon} \sigma_i = \tilde{\sigma}_i / \sqrt{D_0 \tilde{\lambda}_c N_c}$.

А параметры обезразмеривания связаны с размерными коэффициентами следующим образом: $N_0 = N_c$, $t_0 = 1 / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $x_0 = \sqrt{D_0 / (\tilde{\lambda}_c N_c)}$.

Безразмерный параметр ε будем считать малой положительной величиной,

определяющей масштаб когерентной структуры. Чтобы выяснить каким условиям отвечает $\varepsilon \ll 1$ представим его в таком виде:

$$\varepsilon^4 = \frac{D_0 \tilde{\lambda}_c N_c}{\sigma_r^2} = \frac{D_0}{\sigma_r} \frac{1}{\sigma_r \tau_d} \frac{\tau_d (\dot{g})_{abs}}{I/\sigma_r} = e_0 \frac{\langle v \rangle}{\sigma_r} \frac{\langle l \rangle}{\langle l_i \rangle} \frac{(\delta g)_{abs}}{g_{irr}} \ll 1.$$

Здесь τ_d — характерное время диффузии в необлученном кристалле, $\langle v \rangle$ — средняя "тепловая" скорость частиц вещества, e_0 — числовой коэффициент, зависящий от типа кристаллической решетки, $\langle l \rangle$ — длина свободного пробега частиц вещества в необлученном кристалле, $\langle l_i \rangle = \sigma_r \tau_d$ — расстояние, которое проходят без столкновения частицы излучения за то же время, $(\dot{g})_{abs} = \tilde{\lambda}_c (N_c - 0) g_0$ — вклад в изменение концентрации налетающих частиц, обусловленный только поглощением неповрежденной решеткой, $(\delta g)_{abs}$ — изменение концентрации налетающих частиц за время τ_d , обусловленное только поглощением, g_{irr} — концентрация частиц в падающем пучке.

Таким образом, малость параметра ε определяется малым соотношением длин пробегов частиц в решетке (высокой, относительно тепловой энергии частиц вещества, энергией налетающих частиц) и малым соотношением потоков излучения внутри среды и вне ее (слабое поглощение).

Условие $\varepsilon \ll 1$ является одним из главных критериев применимости предлагаемой модели для решения практических задач.

В качестве примера проведем оценку ε в случае облучения кристаллического материала частицами с энергией 0.1 МэВ.

Параметр ε можно записать в таком виде:

$$\varepsilon^4 = e_0 R \frac{\langle v \rangle^2}{\sigma_r^2} = e_0 R \left(\frac{\langle l \rangle \Gamma}{\sigma_r} \right)^2,$$

где $0 < R < 1$ — коэффициент поглощения падающего излучения, Γ — частота переходов атомов решетки между положениями равновесия.

Таким образом, для оценки ε можно использовать следующее выражение:

$$\varepsilon \lesssim \sqrt{\frac{\langle l \rangle \Gamma}{\sigma_r}}.$$

Частота Γ может быть вычислена по следующей формуле [20]:

$$\Gamma = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_m}{kT} + \frac{S_m}{k}\right),$$

где ν_0 — частота колебаний в направлении перевальной точки, S_m — энтропия миграции вакансий, E_m — энергия миграции вакансий.

Длина свободного пробега частиц вещества равна постоянной кристаллической решетки материала, т.е. принимает значения порядка 10^{-10} м.

Оставшиеся параметры имеют следующие значения [20, 210]: $E_m \sim 1$ эВ, $S_m/k \sim 1$, $T = 500$ К.

В этом случае получаем такую оценку малого параметра: $\varepsilon \lesssim 10^{-5} \ll 1$.

Для удобства дальнейших вычислений выполним такие замены переменных:

$$\tilde{v}(\mathbf{x}, t) = \alpha_0 + \alpha_1 v(\mathbf{x}, t), \quad \tilde{u}(\mathbf{x}, t) = \alpha_1 u(\mathbf{x}, t),$$

где $\alpha_0 = \lambda_i/(\lambda_i + \gamma)$, $\alpha_1 = \gamma/(\lambda_i + \gamma)$. Тогда уравнения примут вид:

$$\begin{aligned} h_t &= -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - \alpha_1(1-v)h - \alpha_1 \lambda_r u h - \varepsilon \kappa h, \\ v_t &= (1-v)h - \gamma uv - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [\mathcal{D}_v(N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla v] - \varepsilon \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}, \\ u_t &= -\sqrt{\varepsilon} \sigma_i \frac{\partial u}{\partial z} + (1-v)h - \gamma uv - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \\ &+ \nabla [\mathcal{D}_v(N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla u]. \end{aligned}$$

Следуя процедуре решения рассматриваемых уравнений, предложенной в предыдущей главе, вводим следующие медленные переменные : $T = \varepsilon t$, $X = \sqrt{\varepsilon} x$, $Y = \sqrt{\varepsilon} y$, $Z = \sqrt{\varepsilon} z$. Рассматриваемые функции будут иметь вид:

$$v(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{X}, t, T), \quad u(\mathbf{x}, t) = U(\mathbf{X}, t, T), \quad h(\mathbf{x}, t) = G(\mathbf{X}, t, T).$$

Система уравнений для функций $V(\mathbf{X}, t, T)$, $U(\mathbf{X}, t, T)$, $G(\mathbf{X}, t, T)$ получается приравниванием нулю коэффициентов при различных степенях ε :

$$\begin{aligned} G_t + \varepsilon G_T &= -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial G}{\partial Z} - \alpha_1(1-V)G - \alpha_1 \lambda_r UG - \varepsilon \kappa G, \\ V_t + \varepsilon V_T &= (1-V)G - \gamma UV - \varepsilon \mu_v V + \varepsilon \Delta_s F_v(U, V) - \varepsilon \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}, \\ U_t + \varepsilon U_T &= (1-V)G - \gamma UV - \varepsilon \mu_i U + \varepsilon \Delta_s F_i(U, V) - \varepsilon \sigma_i U_Z. \end{aligned}$$

Где для более компактной записи диффузионного члена введены такие вспомогательные функции:

$$\begin{aligned} F_v(U, V) &= \alpha_1 \int^V \mathcal{D}_v(N_c \alpha_1 U, N_c \alpha_1 \xi + N_c \alpha_0) d\xi, \\ F_i(U, V) &= \alpha_1 \int^U \mathcal{D}_i(N_c \alpha_1 \xi, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) d\xi, \end{aligned} \quad (209)$$

а Δ_s — оператор Лапласа в медленных координатах.

Отличием полученной модели от уравнений (183) и (192) является учет нелинейного рекомбинационного члена уже в нулевом порядке.

5.3 Уравнения релаксации

В нулевом порядке уравнения содержат только релаксационные члены и выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} G_{0,z} &= 0, \\ V_{0,t} &= (1 - V_0) G_0 - \gamma U_0 V_0, \\ U_{0,t} &= (1 - V_0) G_0 - \gamma U_0 V_0. \end{aligned} \tag{210}$$

Уравнения же в первом порядке, учитывающие процесс медленной диффузии, будут иметь такой вид:

$$\begin{aligned} G_{1,z} &= -G_{0,t} - \alpha_1 G_0 (1 - V_0 + \lambda_r U_0), \\ V_{1,t} + G_0 V_1 - (1 - V_0) G_1 + \gamma (U_0 V_1 + V_0 U_1) &= \\ &= -V_{0,T} + \Delta_s F_v(U_0, V_0) - \mu_v V_0 - \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}, \\ U_{1,t} + G_0 V_1 - (1 - V_0) G_1 + \gamma (U_0 V_1 + V_0 U_1) &= \\ &= -U_{0,T} + \Delta_s F_i(U_0, V_0) - \mu_i U_0 - \sigma_i U_{0,z}. \end{aligned} \tag{211}$$

Зависимость концентрации частиц излучения в нулевом порядке $G_0 = G_0(\mathbf{X}, t, T)$ от медленных переменных и времени определяется граничным условием для интенсивности при $z = 0$. В простейшем случае — это однородное и стационарное распределение налетающих частиц: $G_0 = g_0 = const$.

Предположим вначале, что параметр взаимной рекомбинации равен нулю. В этом случае решение для концентраций в нулевом порядке можно записать так:

$$V_0 = 1 - Be^{-G_0t}, \quad U_0 = A - Be^{-G_0t},$$

где $A = A(\mathbf{X}, T)$, $B = B(\mathbf{X}, T)$ — "постоянные" интегрирования, зависящие от медленных переменных. Из полученных решений видно, что при $t \rightarrow \infty$ концентрация вакансий стремится к максимально возможному значению $V_0 = 1$, а концентрация междоузлий к функции $A(\mathbf{X}, T)$. Т.е. в отсутствие рекомбинации, в нулевом порядке, кристаллическая решетка разрушается и образования периодической структуры не происходит.

Пусть теперь $\gamma \neq 0$. Тогда решения уравнений релаксации можно записать в таком виде:

$$V_0 = b + \frac{a}{1 - B(\mathbf{X}, T)e^{-a\gamma t}}, \quad U_0 = V_0 + \frac{\nu^2 - A^2(\mathbf{X}, T)}{A(\mathbf{X}, T)} - \nu^2, \quad (212)$$

где

$$\nu = \sqrt{\frac{g_0}{\gamma}}, \quad a = \frac{\nu^2 + A^2(\mathbf{X}, T)}{A(\mathbf{X}, T)}, \quad b = -\frac{\nu^2}{A(\mathbf{X}, T)}.$$

Следуя предложенной в [244] схеме решения, множитель $B(\mathbf{X}, T)$ будем называть "амплитудный фактор" (АФ). Эта функция, при определенных условиях, описывает усиление амплитуды начального распределения концентрации.

Из (212) видно, что при $t \rightarrow \infty$ в среде возникает крупномасштабная структура. Поведение соответствующего решения определяется знаком функции $A(\mathbf{X}, T)$, т.к. он определяет знак экспоненты в знаменателе V_0 .

В знаменателе (212) стоит разность двух слагаемых — это накладывает огра-

ничения на значения функции $B(\mathbf{X}, T)$, связанные с требованием, чтобы знаменатель не обращался в ноль ни в какой момент времени:

$$B(\mathbf{X}, T) \in \begin{cases} [-\infty, 1), & A(\mathbf{X}, T) > 0 \\ [-\infty, 0], (1, \infty], & A(\mathbf{X}, T) < 0 \end{cases}.$$

Таким образом получаем:

$$A > 0 : \quad \lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = A(\mathbf{X}, T), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = \frac{\nu^2}{A(\mathbf{X}, T)} - \nu^2; \quad (213)$$

$$A < 0 : \quad \lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = \frac{\nu^2}{|A(\mathbf{X}, T)|}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = |A(\mathbf{X}, T)| - \nu^2.$$

Концентрации в нулевом порядке должны принимать значения из интервала от нуля до единицы. Это накладывает следующие ограничения на значения функции $A(\mathbf{X}, T)$:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} A(\mathbf{X}, T) \in \left[-\frac{1}{\alpha_1} - \nu^2, -\nu^2 \right] \cup \left[\frac{\alpha_1 \nu^2}{1 + \alpha_1 \nu^2}, 1 \right], \quad (214)$$

откуда следует, что при больших временах $A(\mathbf{X}, T)$ не должна менять знак. Следовательно, реализуется только один из вариантов (213) асимптотики решения.

В [244, 245] рассматривалась начальная стадия облучения и было отмечено, что в этом случае рекомбинация приводит к подавлению роста макроструктуры. В рассматриваемой же модели рекомбинация является необходимым диссипативным фактором, который вместе с нелинейностью приводит к образованию когерентной структуры.

5.4 Режимы роста когерентных структур

Как следует из решений уравнений в нулевом порядке, асимптотика решения при $t \rightarrow \infty$ определяется функцией $A(\mathbf{X}, T)$, а амплитудный фактор $B(\mathbf{X}, T)$ определяет эволюцию начального распределения.

Поскольку целью анализа уравнений, в конечном счете, является получение локализованных или периодических решений для концентраций, то из вида решений (212) можно заключить, что существует две возможности для их получения.

Первый случай соответствует сколь угодно долгому облучению материала, когда в системе устанавливается динамическое равновесие. В этом случае решения определяются только функцией $A(\mathbf{X}, T)$, при этом $B(\mathbf{X}, T)$ в уравнение для нее не входит. Данный режим будем называть **асимптотическим**.

Во втором случае будем считать, что облучение происходит в течении некоторого конечного промежутка времени. Тогда вклад в решение дают обе функции и даже в случае, когда функция $A(\mathbf{X}, T)$ не приводит к локализованному или периодическому решению, то структура может возникнуть на конечном отрезке времени и описываться соответствующим решением для $B(\mathbf{X}, T)$. В этом случае нужно в начале задать некоторое решение для $A(\mathbf{X}, T)$, т.к. эта функция входит в уравнение для $A\Phi$, затем найти соответствующее решение для $B(\mathbf{X}, T)$ и определить характерное время, когда структура наиболее контрастна и можно прекратить облучение. Соответствующий режим назовем **релаксационным**.

5.5 Уравнение асимптотики концентрации

Для интегрирования системы уравнений (211) сначала вычтем уравнения друг из друга. В результате получается:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(U_1 - V_1) &= (V_0 - U_0)_T + \Delta_s [F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)] + \\ &+ \mu_v V_0 - \mu_i U_0 + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma} - \sigma_i U_{0,Z}. \end{aligned}$$

Откуда находим:

$$\begin{aligned} U_1 - V_1 &= \left[\left(A - \frac{\nu^2}{A} \right)_T - \mu_i \left(\frac{\nu^2}{A} - A - \nu^2 \right) + \sigma_i \left(A - \frac{\nu^2}{A} \right)_Z + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma} \right] t + \\ &+ (\mu_v - \mu_i) I_1 - \sigma_i \frac{\partial I_1}{\partial Z} + \Delta_s \int [F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)] dt + A_1(\mathbf{X}, T). \end{aligned}$$

С учетом выкладок, приведенных в Приложении 1, приравнивая нулю коэффициенты в линейных по t слагаемых, получаем такое уравнение для асимптотики концентрации вакансий:

$$\left(A - \frac{\nu^2}{A} \right)_T + \sigma_i \frac{\nu^2}{A^2} A_Z = -\Delta_s \delta F(q + A, A) - \mu_v A + \mu_i \frac{\nu^2}{A} - \mu_i \nu^2 - \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}. \quad (215)$$

А решение исходного уравнения имеет вид:

$$U_1 = V_1 + f(\mathbf{X}, t, T). \quad (216)$$

Здесь

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}, t, T) &= (\mu_v - \mu_i) R_1(\mathbf{X}, t, T) + \Delta_s \delta W(\mathbf{X}, t, T) - \\ &- \sigma_i \frac{\partial}{\partial Z} R_1(\mathbf{X}, t, T) + A_1(\mathbf{X}, T), \end{aligned}$$

где $A_1(\mathbf{X}, T)$ — постоянная интегрирования. Выражения для $R_1(\mathbf{X}, t, T)$ и $\delta W(\mathbf{X}, t, T)$ приведены в Приложении 1.

5.6 Уравнение для амплитудного фактора

С учетом выражения (216) уравнение для $V_1(\mathbf{X}, t, T)$ имеет следующий вид:

$$V_{1,t} + (g_0 + 2\gamma V_0 + \gamma q) V_1 = -\gamma V_0 f + (1 - V_0) G_1 - V_{0,T} + \Delta_s F_v - \mu_v V_0. \quad (217)$$

Далее выполним замену переменной $\zeta = e^{-\gamma at}$:

$$\zeta V_{1,\zeta} + \left(1 - \frac{2}{1 - B\zeta}\right) V_1 = -\frac{1}{\gamma a} F(\zeta), \quad (218)$$

где

$$F(\zeta) = -\gamma V_0(\zeta) f(\zeta) + (1 - V_0(\zeta)) G_1(\zeta) - V_{0,T}(\zeta) + \Delta_s F_v(U_0(\zeta), V_0(\zeta)) - \mu_v V_0(\zeta).$$

Здесь и далее зависимость функций от переменной \mathbf{X} опущена для простоты записи. Линейные по t слагаемые теперь соответствуют слагаемым с множителем $\ln \zeta$.

Общее решение однородного уравнения (218) стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$, решение же неоднородного уравнения может содержать растущие со временем члены:

$$V_1 = B_1(\mathbf{X}, T) \frac{\zeta}{(1 - B\zeta)^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{\zeta}{(1 - B\zeta)^2} \int_0^\zeta \frac{(1 - B\zeta')^2}{\zeta'^2} F(\zeta') d\zeta'. \quad (219)$$

Функция медленных переменных $B_1(\mathbf{X}, T)$ — постоянная интегрирования в первом порядке.

Окончательно получаем такое выражение для F :

$$F = K_0 + K_1 V_0 + \Delta_s F_v(U_0, V_0) - \frac{\partial V_0}{\partial T} + \sigma_i V_0 \frac{\partial}{\partial Z} \ln |V_0 - b| - \\ - K_2 V_0 \ln |V_0 - b| - V_0 \Delta_s \left[K_3 \ln |V_0 - b| \right] - \gamma V_0 \Delta_s \hat{S}_1 V_0^{s+1} + \\ + \gamma V_0 \Delta_s \hat{S}_0 V_0^{i+j+1+1} + r g_0 (1 - \lambda_r) (1 - V_0) \int_0^Z V_0(X, Y, Z', t, T) dZ',$$

где

$$K_1(\mathbf{X}, T) = -\mu_v - g_1 + r g_0 (1 + \lambda_r q(\mathbf{X}, T)) Z - \gamma \Delta_s (w_0 \ln B) + \\ + \frac{A}{a} (\mu_v - \mu_i) \ln B - \sigma_i \frac{A}{a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln B - \gamma A_1, \\ K_0(\mathbf{X}, T) = g_1 - r g_0 (1 + \lambda_r q(\mathbf{X}, T)) Z, \\ K_2 = \mu_v - \mu_i, \quad K_3(\mathbf{X}, T) = \gamma w_1(\mathbf{X}, T).$$

Вычисление интегралов в (219) приведено в Приложении 2 и Приложении 3 (в общих формулах для интегралов пределы и штрих у ζ опущены, также для краткости не пишется переменная T , неучаствующая в интегрировании). В итоге получается такое уравнение для АФ:

$$a B_T = \vec{D} \Delta_s (\vec{M} B) + (c_0 + c_1 Z) B + c_2 \int_0^Z a(\mathbf{X}', T) B(\mathbf{X}', T) dZ' + \\ + c_3 B \ln |B| + B \Delta_s (c_4 \ln |B|) + c_5 \frac{\partial}{\partial Z} B + c_6 B \frac{\partial}{\partial Z} \ln |B|.$$

Коэффициенты которого имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
\vec{D} &= (1, -A, -A, A), \\
\vec{M} &= \left(a \frac{\partial}{\partial A} F_v(q + A, A), \frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + b, b)}{a}, \right. \\
&\left. \frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + b, b)}{a} - \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} (A \delta F(q + A, A)), \right. \\
&\left. , (b^{-1} - A^{-1}) \delta F(q + A, A) \right), \\
c_0 &= -2g_1 - [\mu_v + g_1 + \gamma A_1] (a - 2A) - 2\Delta_s F_v(q + A, A) + (A + b)_T - \\
&- (\mu_v - \mu_i)A + (A + b) \left[(\mu_v - \mu_i) \ln a + \Delta_s (\gamma w_1 \ln a) \right] - \sigma_i (b + A) \frac{\partial}{\partial Z} \ln a + \\
&+ (b + A) \Delta_s \left[\frac{1}{a} \int \frac{\delta F(q + b, b) - \delta F(q + A, A)}{b - A} dA - \right. \\
&- \left. \int \frac{\delta F(q + A, A) - \delta F(q + A\xi, A\xi)}{a(1 - \xi)} d\xi \Big|_{\xi=1} \right] - \\
&- (b + A) \Delta_s \left[\frac{b^{-1} - A^{-1}}{a} \int \delta F(q + A, A) dA \right] + r g_0 (1 - \lambda_r) (A + b - 2) \int AdZ', \\
c_1 &= \alpha_1 g_0 (2 + a - 2A) (1 + \lambda_r q), \\
c_2 &= \alpha_1 g_0 (1 - \lambda_r) (1 - A), \quad c_3 = (a - 2A) \frac{\mu_v - \mu_i}{a} A, \\
c_4 &= (a - 2A) \frac{\gamma}{a} \delta F(q + A, A), \quad c_5 = \sigma_i A, \quad c_6 = 2\sigma_i \frac{A^2}{a}.
\end{aligned}$$

В общем случае, когда $A = A(\mathbf{X}, T)$, $g_1 = g_1(\mathbf{X}, T)$, $A_1 = A_1(\mathbf{X}, T)$ коэффициенты являются функциями \mathbf{X} , T .

5.7 Решение для концентрации частиц излучения в первом порядке

Уравнение для G_1 имеет вид:

$$G_{1,Z} = -G_{0,t} - \alpha_1 G_0 (1 - V_0 + \lambda_r U_0). \quad (220)$$

Или учитывая, что $G_0 = g_0 = const$, $U_0 = V_0 + q$:

$$G_{1,Z} = -\alpha_1 g_0 (1 + \lambda_r q) - \alpha_1 g_0 (\lambda_r - 1) V_0.$$

Откуда находим:

$$G_1 = g_1 - \alpha_1 g_0 (1 + \lambda_r q) Z + \alpha_1 g_0 (1 - \lambda_r) \int_0^Z V_0(X, Y, Z', t, T) dZ'. \quad (221)$$

Решение (221) удовлетворяет граничному условию: $G|_{Z=0} = g_1 = const$, т.к. интенсивность $I = \sigma_r g$ пропорциональна концентрации.

5.8 Вычисление функции $A_1(\mathbf{X}, T)$

Уравнение для АФ $B(\mathbf{X}, T)$, приведенное выше, содержит в коэффициенте c_0 функцию медленных переменных $A_1(\mathbf{X}, T)$, которая должна быть определена из условия отсутствия растущих лагаемых в решениях во втором порядке.

Для нахождения условия отсутствия секулярных членов во втором порядке, поступим как и при нахождении функции $A(\mathbf{X}, T)$ — вычтем из уравнения для $U(\mathbf{X}, t, T)$ уравнение для $V(\mathbf{X}, t, T)$ и приравняем нулю коэффициент при ε^2 в

разложении по малому параметру ε :

$$(U_2 - V_2)_t = -(U_1 - V_1)_T + \mu_v V_1 - \mu_i U_1 + \quad (222)$$

$$+ \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) U_1 + \delta F^{[0,1]}(U_0, V_0) V_1 \right] - \sigma_i \frac{\partial U_1}{\partial Z}.$$

При решении уравнений первого порядка было получено выражение: $U_1 = V_1 + f(\mathbf{X}, t, T)$. Тогда уравнение (222) можно записать в таком виде:

$$(U_2 - V_2)_t = -f_T - \mu_i f + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) f \right] - \sigma_i \frac{\partial f}{\partial Z} +$$

$$+ (\mu_v - \mu_i) V_1 + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) V_1 + \delta F^{[0,1]}(U_0, V_0) V_1 \right] - \sigma_i \frac{\partial V_1}{\partial Z}.$$

При вычислении интегралов в правой части этого уравнения достаточно найти только растущие со временем слагаемые.

Отметим, что при $t \rightarrow \infty$ решения в первом порядке стремятся к выражениям, зависящим от медленных переменных, при этом в них входит только функция $A_1(\mathbf{X}, t)$ и не входит $B_1(\mathbf{X}, T)$. Поэтому для получения уравнения для $A_1(\mathbf{X}, t)$ достаточно рассмотреть предел при $t \rightarrow \infty$ от приведенного выше выражения. Из (219) следует, что при $t \rightarrow \infty$ функция V_1 стремится к нулю. Таким образом, получаем следующее выражение:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (U_2 - V_2) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \left[-f_T - \mu_i f + \Delta_s \left[\delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) f \right] - \sigma_i \frac{\partial f}{\partial Z} \right] dt + A_2.$$

Функции U_0, V_0 были вычислены выше и уже известно, что они стремятся к постоянным при $t \rightarrow \infty$.

Для дальнейших выкладок достаточно рассмотреть случай $A = const$. Тогда

оставшийся предел $\lim_{t \rightarrow \infty} f(\mathbf{X}, t, T)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} f(\mathbf{X}, t, T) &= (\mu_v - \mu_i) \lim_{t \rightarrow \infty} R_1(\mathbf{X}, t, T) + \Delta_s \lim_{t \rightarrow \infty} \delta W(\mathbf{X}, t, T) - \\ &- \sigma_i \frac{\partial}{\partial Z} \lim_{t \rightarrow \infty} R_1(\mathbf{X}, t, T) + A_1(\mathbf{X}, T) = \\ &= (\mu_v - \mu_i) \left(-\frac{A}{\gamma a} \ln |B| + \frac{1}{\gamma} \ln |A - b| \right) + \\ &+ \frac{\sigma_i A}{\gamma a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln |B| + w_0 \Delta_s \ln |B| + A_1(\mathbf{X}, T), \end{aligned}$$

где были использованы результаты из Приложения 1.

Т.к. функция $A_1(\mathbf{X}, T)$ произвольна, то можно сделать такую замену переменной:

$$\tilde{A}_1 = A_1 + w_0 \Delta_s \ln |B| + \frac{\sigma_i A}{\gamma a} \frac{\partial}{\partial Z} \ln |B| + (\mu_v - \mu_i) \left(-\frac{A}{\gamma a} \ln |B| + \frac{1}{\gamma} \ln |A - b| \right).$$

Это приведет к пересчету коэффициентов в уравнении для АФ $B(\mathbf{X}, T)$, но не изменит его структуры. А f примет вид $f = A_1(\tilde{\mathbf{X}}, T)$. Тогда, рассмотренный выше предел, примет вид:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} (U_2 - V_2) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left[-A_1(\tilde{\mathbf{X}}, T)_T - \mu_i A_1(\tilde{\mathbf{X}}, T) + \right. \\ &\left. + \delta F^{[1,0]}(U_0, V_0) \Delta_s A_1(\tilde{\mathbf{X}}, T) - \sigma_i \frac{\partial A_1(\tilde{\mathbf{X}}, T)}{\partial Z} \right] t + A_2(\mathbf{X}, T). \end{aligned}$$

Откуда следует условие отсутствия секулярных слагаемых:

$$\frac{\partial \tilde{A}_1}{\partial T} + \sigma_i \frac{\partial \tilde{A}_1}{\partial Z} = D_1 \Delta_s \tilde{A}_1 - \mu_i \tilde{A}_1. \quad (223)$$

Для упрощения дальнейших выкладок выберем в качестве решения

$$\tilde{A}_1(\mathbf{X}, T) = 0.$$

Пересчет коэффициентов в уравнении для $B(\mathbf{X}, T)$ приводит к таким выражениям:

$$\begin{aligned}\tilde{c}_0 &= -2g_1 - [\mu_v + g_1 + (\mu_v - \mu_i) \ln |A - b|] (a - 2A) - \\ &\quad - (\mu_v - \mu_i)A + (A + b)(\mu_v - \mu_i) \ln a, \\ \tilde{c}_1 &= \alpha_1 g_0 (2 + a - 2A) (1 + \lambda_r q) + \alpha_1 g_0 (1 - \lambda_r) (A + b - 2) A, \\ \tilde{c}_2 &= ac_2, \quad \tilde{c}_3 = c_3, \\ \tilde{c}_4 &= c_4 + \gamma(A - 2a)w_0, \\ \tilde{c}_5 &= c_5, \\ \tilde{c}_6 &= c_6 - \sigma_i \frac{A}{a} (A - 2a).\end{aligned}$$

Еще раз отметим, что выкладки, приведенные выше, выполнены для случая $A(\mathbf{X}, T) = \text{const}$, т.е. для стационарного решения уравнения (215), соответствующего выходу концентрации на равномерное распределение. В этом случае образование когерентной структуры возможно только на конечном отрезке времени.

5.9 Асимптотический режим роста когерентной структуры

Рассмотрим более подробно уравнение (215):

$$\left(A - \frac{\nu^2}{A} \right)_T + \sigma_i \frac{\nu^2}{A^2} A_Z = -\Delta_s \delta F(q + A, A) - S(A),$$

где $S(A) = \mu_v A + \mu_i \nu^2 - \mu_i \frac{\nu^2}{A} + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}$.

Выпишем чему равно первое слагаемое в правой части:

$$\begin{aligned}
\Delta_s \delta F(q + A, A) &= \nabla [\mathcal{D}_i(N_c \alpha_1 q + N_c \alpha_1 A, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A) \nabla (q + A) - \\
&- \mathcal{D}_v(N_c \alpha_1 q + N_c \alpha_1 A, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A) \nabla A] = \\
&= \nabla \left[\mathcal{D}_i \left(N_c \alpha_1 \frac{\nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right) \nabla \frac{\nu^2}{A} - \right. \\
&\left. \mathcal{D}_v \left(N_c \alpha_1 \frac{\nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right) \nabla A \right] = -\nabla (\mathcal{D}_{as}(A) \nabla A),
\end{aligned}$$

где \mathcal{D}_{as} — эффективный коэффициент диффузии, имеет вид:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{as}(A) &= \frac{\nu^2}{A^2} \mathcal{D}_i \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right) + \\
&+ \mathcal{D}_v \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right)
\end{aligned} \tag{224}$$

и в общем случае может принимать отрицательные значения.

Тогда (215) примет вид, близкий к уравнению диффузии:

$$\left(1 + \frac{\nu^2}{A^2} \right) A_T + \sigma_i \frac{\nu^2}{A^2} A_Z = \nabla (\mathcal{D}_{as}(A) \nabla A) - S(A). \tag{225}$$

Для анализа локализованных решений, введем переменную $\zeta = \mathbf{KX} + \rho T$.

В стационарном случае $\rho = 0$, в нестационарном можно положить $\rho = \pm 1$.

Уравнение (225) сводится к автономному ОДУ второго порядка и может быть записано в виде динамической системы:

$$\begin{aligned}
\frac{dA}{d\zeta} &= W, \\
\frac{dW}{d\zeta} &= \frac{[\rho (1 + \nu^2/A^2) + \sigma_i \nu^2 K_3/A^2] W - K^2 \mathcal{D}'_{as}(A) W^2 + S(A)}{K^2 \mathcal{D}_{as}(A)}.
\end{aligned} \tag{226}$$

Данная система имеет две вещественные стационарные точки (A_0, W_0) :

$$(A_0^+, W_0) = (\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta, 0),$$

$$(-A_0^-, W_0) = (-\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta, 0),$$

где $\beta = \frac{\lambda_i}{2\gamma}$, $\delta = \frac{\nu^2 \mu_i}{2\mu_v}$.

Для выяснения типа стационарных точек запишем характеристическое уравнение, соответствующее линейной части системы (226):

$$\det \left\| \begin{array}{cc} -\Lambda & 1 \\ \frac{S'(A_0)}{K^2 \mathcal{D}_{as}(A_0)} & \frac{\rho(1+\nu^2/A_0^2) + \sigma_i \nu^2 K_3/A_0^2}{K^2 \mathcal{D}_{as}(A_0)} - \Lambda \end{array} \right\| = 0, \quad (227)$$

где $A_0 = \pm A_0^\pm$.

Собственные значения имеют вид:

$$\Lambda_{1,2} = \frac{\rho(1 + \nu^2/A_0^2) + \sigma_i \nu^2 K_3/A_0^2}{2K^2 \mathcal{D}_{as}(A_0)} \pm \frac{\sqrt{[\rho(1 + \nu^2/A_0^2) + \sigma_i \nu^2 K_3/A_0^2]^2 + 4K^2 \mathcal{D}_{as}(A_0) S'(A_0)}}{2K^2 \mathcal{D}_{as}(A_0)} \quad (228)$$

Из (228) видно, что условия существования стационарных точек типа фокус или центр записываются таким образом:

- 1) $\mathcal{D}_{as}(A_0) > 0$, $S'(A_0) < 0$;
- 2) $\mathcal{D}_{as}(A_0) < 0$, $S'(A_0) > 0$.

Вычислим $S'(A_0)$: $S'(A_0) = \mu_v + \mu_i \nu^2 / A_0^2$. Т.к. A_0 — вещественное число, то $S'(A_0) \geq 0$ независимо от типа стационарной точки, т.е. остается выяснить при

каких условиях $\mathcal{D}_{as}(A_0) < 0$ для обеих стационарных точек.

В начале рассмотрим положительную стационарную точку: $A_0 = A_0^+ = \sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta$.

В этом случае, аргументам в коэффициенте диффузии можно придать физический смысл и понять какие значения он принимает. Из (224) имеем:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{as}(A_0^+) &= \frac{\nu^2}{A_0^{+2}} \mathcal{D}_i \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A_0^+} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A_0^+ \right) + \\ &+ \mathcal{D}_v \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A_0^+} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A_0^+ \right). \end{aligned}$$

В случае $A > 0$ асимптотики концентраций имеют вид (213):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} V_0 = A(\mathbf{X}, T), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} U_0 = \frac{\nu^2}{A(\mathbf{X}, T)} - \nu^2.$$

Учтем эти формулы и введем такие обозначения: $n_{v\infty} = N_c \alpha_1 A_0^+$, $n_{i\infty} = N_c \alpha_1 \left(\frac{\nu^2}{A_0^+} - \nu^2 \right)$, тогда коэффициент диффузии \mathcal{D}_{as} запишется в таком виде:

$$\mathcal{D}_{as} = \frac{(N_c r \nu)^2}{n_{v\infty}^2} \mathcal{D}_i(n_{i\infty}, n_{v\infty}) + \mathcal{D}_v(n_{i\infty}, n_{v\infty}) \geq 0. \quad (229)$$

Поскольку значения n_v и n_i должны лежать в интервале от нуля до единицы, то $n_{v\infty}$ и $n_{i\infty}$ — нормальные аргументы коэффициентов диффузии и $\mathcal{D}_i(n_{i\infty}, n_{v\infty}) \geq 0$, $\mathcal{D}_v(n_{i\infty}, n_{v\infty}) \geq 0$

Таким образом, для стационарной точки A_0^+ : $\mathcal{D}_{as}(A_0^+) \geq 0$, т.е. условие периодичности решений не выполняется.

В случае отрицательного значения A : $A_0 = -A_0^- = -\sqrt{(\delta + \beta)^2 + 2\delta} - \delta - \beta$

и условие на коэффициент диффузии \mathcal{D}_{as} имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{as}(-A_0^-) &= \frac{\nu^2}{A_0^{-2}} \mathcal{D}_i \left(-\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A_0^-} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 - N_c \alpha_1 A_0^- \right) + \\ &+ \mathcal{D}_v \left(-\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A_0^-} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 - N_c \alpha_1 A_0^- \right) \leq 0. \end{aligned}$$

Поскольку аргументы функций $\mathcal{D}_{i,v}(u, v)$ в этом случае отрицательны, эти функции могут быть меньше нуля и эффективный коэффициент диффузии \mathcal{D}_{as} также может принимать отрицательные значения. Условие комплексности собственных значений имеет вид:

$$\left[\rho \left(1 + \nu^2 / A_0^2 \right) + \sigma_i \nu^2 K_3 / A_0^2 \right]^2 \leq 4K^2 \left| \mathcal{D}_{as}(-A_0^-) \right| S'(-A_0^-). \quad (230)$$

При ненулевой вещественной части в собственных значениях, решение неограниченно растет вблизи стационарной точки. Тем не менее, у системы могут существовать замкнутые траектории, но для выяснения данного вопроса нужно точно знать зависимость коэффициентов диффузии от концентраций. Далее ограничимся анализом только чисто периодических решений.

Случай, когда стационарная точка — центр, реализуется при условии:

$$K_3 = -\frac{\rho}{\sigma_i} \left(1 + \frac{(A_0^-)^2}{\nu^2} \right).$$

Тогда комплексные собственные значения имеют вид:

$$\Lambda_{1,2} = \pm i \sqrt{\frac{S'(-A_0^-)}{\left| \mathcal{D}_{as}(-A_0^-) \right|}} \frac{1}{K}$$

и решение вблизи стационарной точки выглядит таким образом:

$$A_s(\mathbf{X}, T) = -A_0^- + a_0 \cos \left[\sqrt{\frac{S'(-A_0^-)}{|\mathcal{D}_{as}(-A_0^-)|}} \mathbf{e}_K \mathbf{X} + b_0 \right].$$

Период структуры вблизи стационарной точки не зависит от начального распределения концентрации. Направление волнового вектора \mathbf{e}_K в плоскости XU задается начальным условием, а угол с осью O_Z — направлением падения излучения, определяется параметрами системы и, прежде всего, концентрацией налетающих частиц g_0 (интенсивностью падающего излучения).

Соответствующие асимптотики концентраций имеют вид:

$$n_v = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \left(\lambda_i + \frac{g_0}{|A_s(\mathbf{X}, T)|} \right), \quad n_i = \gamma \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} (|A_s(\mathbf{X}, T)| - \nu^2).$$

5.10 Релаксационный режим роста

Анализ нелинейного интегро-дифференциального уравнения для АФ значительно упрощается, если в качестве $A(\mathbf{X}, T)$ взять стационарное решение $A = A_0$. Тогда все коэффициенты в уравнении для $B(\mathbf{X}, T)$ постоянны и оно допускает разделение переменных.

Сначала отделим переменную Z , подставив АФ в виде $B(\mathbf{X}, T) = \Psi(X, Y, T)P(Z)$ в уравнение:

$$\begin{aligned} aB_T = & \tilde{D}\Delta_s B + (\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z)B + \tilde{c}_2 \int_0^Z B(\mathbf{X}', T) dZ' + B\tilde{c}_3 \ln |B| + \\ & + \tilde{c}_4 B\Delta_s \ln |B| + \tilde{c}_5 \frac{\partial}{\partial Z} B + \tilde{c}_6 B \frac{\partial}{\partial Z} \ln |B|. \end{aligned}$$

где $\tilde{D} = \vec{D}\vec{M}$.

Получается:

$$\begin{aligned} & \left[-a\Psi_T + \tilde{D}\Delta_s\Psi + \Psi\tilde{c}_3 \ln |\Psi| + \tilde{c}_4\Psi\Delta_s \ln |\Psi| \right] P + \\ & + \left[\tilde{D}P'' + (\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z) P + \tilde{c}_2 \int_0^Z P dZ' + \tilde{c}_3 P \ln |P| + \right. \\ & \left. + \tilde{c}_4 P (\ln P)'' + \tilde{c}_5 P' + \tilde{c}_6 P (\ln |P|)' \right] \Psi = 0. \end{aligned}$$

Откуда находим:

$$a\Psi_T = \tilde{D}\Delta_s\Psi + \tilde{c}_3\Psi \ln |\Psi| + \tilde{c}_4\Psi\Delta_s \ln |\Psi| + \Lambda_0\Psi,$$

$$\begin{aligned} & \tilde{D}P'' + (-\Lambda_0 + \tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z) P + \tilde{c}_2 \int_0^Z P dZ' + \tilde{c}_3 P \ln |P| + \\ & + \tilde{c}_4 P (\ln |P|)'' + \tilde{c}_5 P' + \tilde{c}_6 P (\ln |P|)' = 0. \end{aligned}$$

Рассмотрим в начале случай полного разделения переменных $\Psi(T, X, Y) = S(T)H_1(X)H_2(Y)$. Тогда

$$a\dot{S} = \tilde{c}_3 S \ln S + (\Lambda_0 + \Lambda_1) S,$$

$$\tilde{D}H_1'' + \tilde{c}_3 H_1 \ln H_1 + \tilde{c}_4 H_1 (\ln H_1)'' = (\Lambda_1 + \Lambda_2) H_1,$$

$$\tilde{D}H_2'' + H_2 \tilde{c}_3 \ln H_2 + \tilde{c}_4 H_2 (\ln H_2)'' + \Lambda_2 H_2 = 0.$$

Здесь $\Lambda_{0,1,2}$ — постоянные разделения переменных.

Временная зависимость концентраций определяется решением первого уравнения:

$$S(T) = e^{-\frac{\Lambda_0 + \Lambda_1}{\tilde{c}_3} T} \exp \left[p_1 e^{p_2 (T - T_0)} \right], \quad (231)$$

где T_0 постоянная интегрирования, которую для простоты можно записать как εt_0 .

Используя (231) выпишем решение в нулевом порядке, перейдя везде к быстрому времени:

$$V_0(\mathbf{X}, t) = b + \frac{a}{1 - C(\mathbf{X}) \exp [p_1 e^{\varepsilon p_2 (t-t_0)} + p_3 t]}, \quad (232)$$

где $C(\mathbf{X}) = e^{-\frac{\Lambda_0 + \Lambda_1}{\tilde{c}_3}} P(Z) H_1(X) H_2(Y)$ — пространственная часть решения $B(\mathbf{X}, T)$ и

$$p_1 = \frac{A^2 + \nu^2}{A(A^2 - \nu^2)(\mu_v - \mu_i)}, \quad p_2 = -\frac{A^2(A^2 - \nu^2)(\mu_v - \mu_i)}{(A^2 + \nu^2)^2}, \quad p_3 = -\gamma \frac{A^2 + \nu^2}{A}.$$

На самом деле, уравнения, приведенные выше, устроены таким образом, что решение не зависит от постоянных разделения переменных и их можно положить равными нулю.

Действительно, во всех уравнениях, слагаемое, содержащее постоянную разделения можно записать в таком виде (на примере уравнения для H_2):

$$\Lambda_2 H_2 = \tilde{c}_3 \frac{\Lambda_2}{\tilde{c}_3} H_2 = \tilde{c}_3 H_2 \ln m_2,$$

где $m_k = e^{\frac{\Lambda_k}{\tilde{c}_3}}$, $k = 0, 1, 2$.

Далее, переместим это слагаемое в скобку и объединим с $\ln H_2$, а также умножим все уравнение на m_2 :

$$\tilde{D} m_2 H_2'' + \left[\tilde{c}_3 \ln(m_2 H_2) + \tilde{c}_4 (\ln(m_2 H_2))'' \right] m_2 H_2 + \Lambda_2 m_2 H_2 = 0.$$

Введем новую функцию $\tilde{H}_2 = m_2 H_2$.

По аналогии получаем:

$$\tilde{H}_1 = \frac{1}{m_1 m_2} H_1, \quad \tilde{P} = \frac{1}{m_0} e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3}} P, \quad S = m_0 m_1 \exp \left[p_1 e^{p_2(T-T_0)} \right].$$

После подстановки этих функций, решение принимает вид:

$$B(\mathbf{X}, T) = e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3(a-2A)}} \exp \left(p_1 e^{\varepsilon p_2(t-t_0)} \right) \tilde{P}(Z) \tilde{H}_1(X) \tilde{H}_2(Y).$$

Введем такое обозначение в (232): $\tilde{s}(t) = \exp \left[p_1 e^{\varepsilon p_2(t-t_0)} + p_3 t \right]$.

Полученное выражение не содержит постоянных $\Lambda_{0,1,2}$, как и уравнения для неизвестных функций:

$$\tilde{D}\tilde{P}'' + \tilde{c}_5\tilde{P}' + \tilde{c}_1 Z\tilde{P} + \tilde{c}_3\tilde{P} \ln |\tilde{P}| + \tilde{c}_6 P(\ln |P|)' + \quad (233)$$

$$+ \tilde{c}_4\tilde{P}(\ln \tilde{P})'' + \tilde{c}_2 \int_0^Z \tilde{P} dZ' = 0,$$

$$\tilde{D}\tilde{H}_1'' + \tilde{H}_1\tilde{c}_3 \ln \tilde{H}_1 + \tilde{c}_4\tilde{H}_1(\ln \tilde{H}_1)'' = 0, \quad (234)$$

$$\tilde{D}\tilde{H}_2'' + \tilde{H}_2\tilde{c}_3 \ln \tilde{H}_2 + \tilde{c}_4\tilde{H}_2(\ln \tilde{H}_2)'' = 0.$$

В зависимости от знака постоянной $A = \pm A_0^\pm$ и коэффициентов p_1 , p_2 , p_3 имеются следующие варианты решений, у которых знаменатель не обращается в бесконечность:

Таблица 1									
$A > 0$					$A < 0$				
	p_1	p_2	p_3	$C(X)$		p_1	p_2	p_3	$C(X)$
1.1	+	-	-	$[-\infty, 0]$	3.1	+	+	+	$[-\infty, 0]$
1.2	+	-	-	$[0, 1/s(0))$	3.2	+	+	+	$[0, 1/s(0))$
					3.3	+	+	+	$(1/s(0), \infty]$
2.1	-	+	-	$[-\infty, 0]$	4.1	-	-	+	$[-\infty, 0]$
2.2	-	+	-	$[0, 1/s(0))$	4.2	-	-	+	$[0, 1/s(0))$
					4.3	-	-	+	$(1/s(0), \infty]$

Из вида решения (232) следует, что рост когерентной структуры происходит в случаях 1, 1, 3.1, 4.1. Условия, при которых реализуются соответствующие комбинации знаков p_1, p_2, p_3 являются условиями роста. Приведем их в следующей таблице:

Таблица 2		
1.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{01}, \quad \nu_{11} < \nu < \nu_{12}$
1.1	$\mu_v < \mu_i$	$\beta \leq \beta_{01}, \quad \nu < \nu_{11} \cup \nu_{12} < \nu$
1.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta > \beta_{01}, \quad \forall \nu$
3.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, \quad \nu_{21} < \nu < \nu_{22}$
3.1	$\mu_v < \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, \quad \nu < \nu_{21} \cup \nu_{22} < \nu$
3.1	$\mu_v < \mu_i$	$\beta > \beta_{02}, \quad \forall \nu$
4.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta \leq \beta_{02}, \quad \nu < \nu_{21} \cup \nu_{22} < \nu$
4.1	$\mu_v > \mu_i$	$\beta > \beta_{01}, \quad \forall \nu$
4.1	$\mu_v < \mu_i$	$\beta < \beta_{01}, \quad \nu_{21} < \nu < \nu_{22}$

Здесь

$$\begin{aligned}\beta_{01} &= \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{8\mu_1\mu_2}, & \beta_{02} &= \frac{(\mu_1 + \mu_2)^2}{8\mu_1\mu_2}, \\ \nu_{11} &= \frac{\mu_2 - \mu_1 - \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}, \\ \nu_{12} &= \frac{\mu_2 - \mu_1 + \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}, \\ \nu_{21} &= \frac{\mu_2 + \mu_1 - \sqrt{(\mu_1 + \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}, \\ \nu_{22} &= \frac{\mu_2 + \mu_1 + \sqrt{(\mu_1 + \mu_2)^2 - 8\mu_1\mu_2}}{2\mu_2}.\end{aligned}$$

Коэффициенты, для которых записаны условия, имеют вид: $\beta = \lambda_i/(2\gamma)$, $\nu = \sqrt{g_0/\gamma}$.

Далее проведем качественный анализ нелинейных уравнений, соответствующих пространственной части решения.

Рассмотрим более подробно уравнение для $\tilde{H}_1(x)$:

$$\tilde{D}\tilde{H}_1'' + \tilde{c}_4\tilde{H}_1(\ln \tilde{H}_1)'' + \tilde{c}_3\tilde{H}_1 \ln \tilde{H}_1 = 0.$$

Выполним в нем замену $\tilde{H}_1(X) = e^{\theta(X)}$:

$$\theta'' + \tau_2\theta'^2 + \tau_1\theta = 0, \quad (235)$$

где $\tau_2 = \frac{\tilde{D}}{\tilde{D} + \tilde{c}_4}$, $\tau_1 = \frac{\tilde{c}_3}{\tilde{D} + \tilde{c}_4}$.

Уравнение (235) может быть записано в виде динамической системы:

$$\begin{aligned}\theta' &= w, \\ w' &= -\tau_1\theta - \tau_2w^2,\end{aligned}$$

которая имеет стационарную точку: $(\theta_0, w_0) = (0, 0)$, а корни характеристического уравнения имеют вид:

$$\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\tau_1}. \quad (236)$$

Условие $\tau_1 > 0$ соответствует стационарной точке типа центр и является условием периодичности:

$$\frac{\tilde{c}_3}{\tilde{D} + \tilde{c}_4} > 0.$$

Решение вблизи стационарной точки имеет вид:

$$\theta = \theta_0 + C_1 \cos \sqrt{\tau_1} X + C_2 \sin \sqrt{\tau_1} X. \quad (237)$$

Постоянные $C_{1,2}$ определяются начальными (по X) условиями для θ и θ' .

Профиль концентрации по глубине определяется функцией $P(Z)$. Проанализируем первое уравнение системы (233).

В начале отметим, что из (233) следует, что если $P(Z)$ — решение данного уравнения, то $-P(Z)$ также является его решением.

Уравнение для функции $P(Z)$ — сложное нелинейное уравнение, требующее отдельного рассмотрения, поэтому, в данной статье, ограничимся приведением численного решения для конкретных параметров.

Чтобы перейти от интегро-дифференциального уравнения (233) к ОДУ, сделаем такие замены переменных:

$$\int_0^Z P(Z') dZ' = L(Z), \quad P(Z) = L'(Z), \quad P'(Z) = L''(Z), \quad P''(Z) = L'''(Z).$$

Тогда уравнение примет вид:

$$L''' + \tilde{c}_4 L' (\ln |L'|)'' + \tilde{c}_6 L' (\ln |L'|)' + \tilde{c}_5 L'' + \tilde{c}_3 L' \ln |L'| + \tilde{c}_1 Z L' + \tilde{c}_2 L = 0 \quad (238)$$

с соответствующими начальными условиями:

$$L(0) = 0, \quad L'(0) = P(0), \quad L''(0) = P'(0).$$

Окончательное выражение для концентраций дефектов в нулевом порядке имеет такой вид:

$$n_v = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \left[\lambda_i + \gamma b + \gamma a \left(1 - e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3(a-2A)}} L'(Z) \tilde{H}(X) S(t) \right)^{-1} \right], \quad (239)$$

$$n_i = \frac{N_c}{\lambda_i + \gamma} \gamma \left[-A - \nu^2 + a \left(1 - e^{\frac{\tilde{c}_0}{\tilde{c}_3(a-2A)}} L'(Z) \tilde{H}(X) S(t) \right)^{-1} \right]. \quad (240)$$

Из Таблицы 2 следует, что рост сверхрешетки регулируется соотношением между концентрацией налетающих частиц g_0 и безразмерным коэффициентом рекомбинации γ . Рост наблюдается только в некотором, определяющемся характеристиками облучаемого материала, диапазоне значений g_0 . При этом, критерием, указывающим на саму возможность существования растущих решений, является соотношение между интенсивностью взаимодействия λ_i междоузлий с кристаллической решеткой и γ , что указывает на важную роль каскадов атомных столкновений в росте макроструктуры, частным случаем которых является единичное выбивание узла решетки междоузлием.

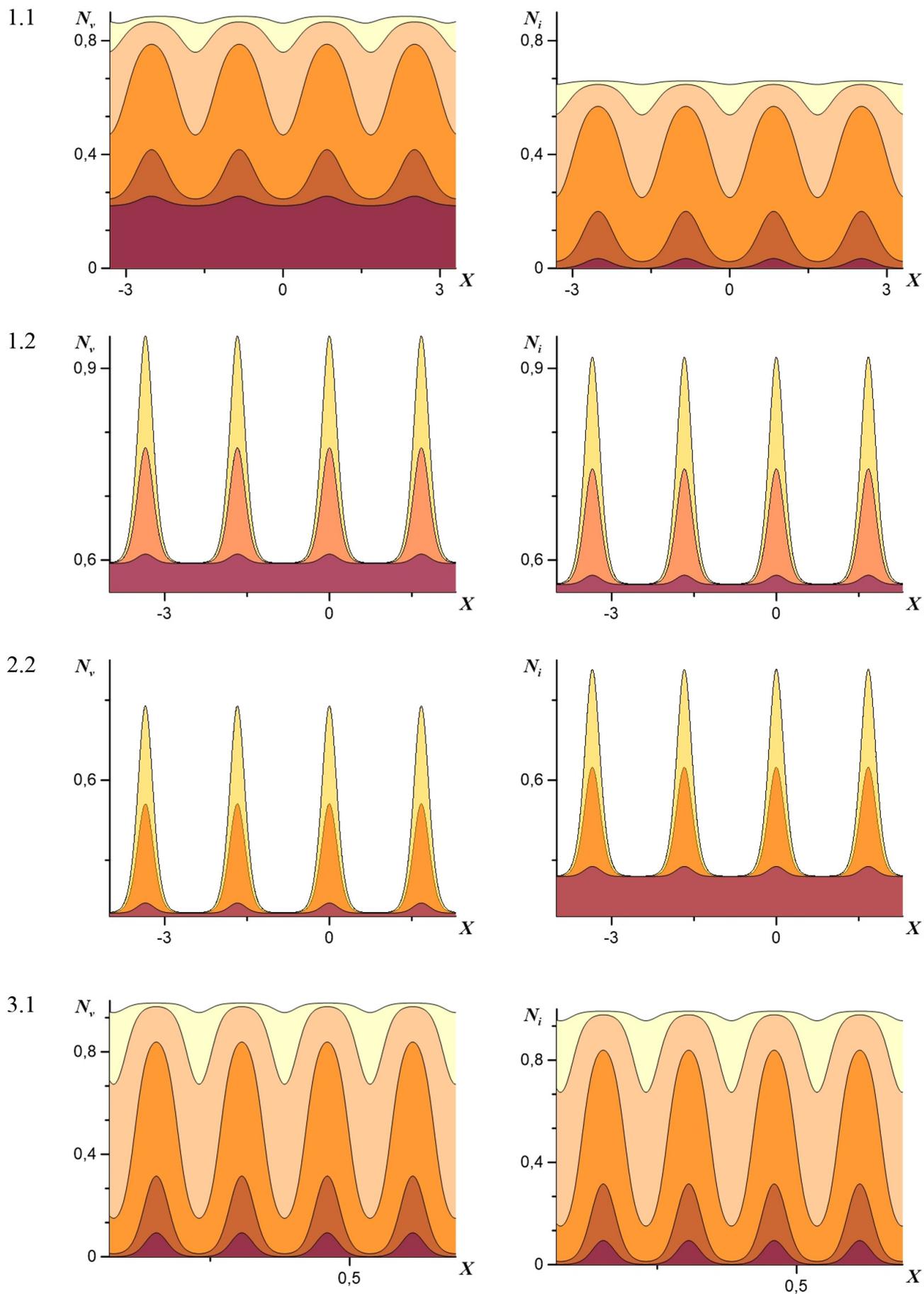


Рис. 18: Увеличение (1.1, 3.1) и уменьшение (1.2, 2.2) амплитуды начального распределения дефектов.

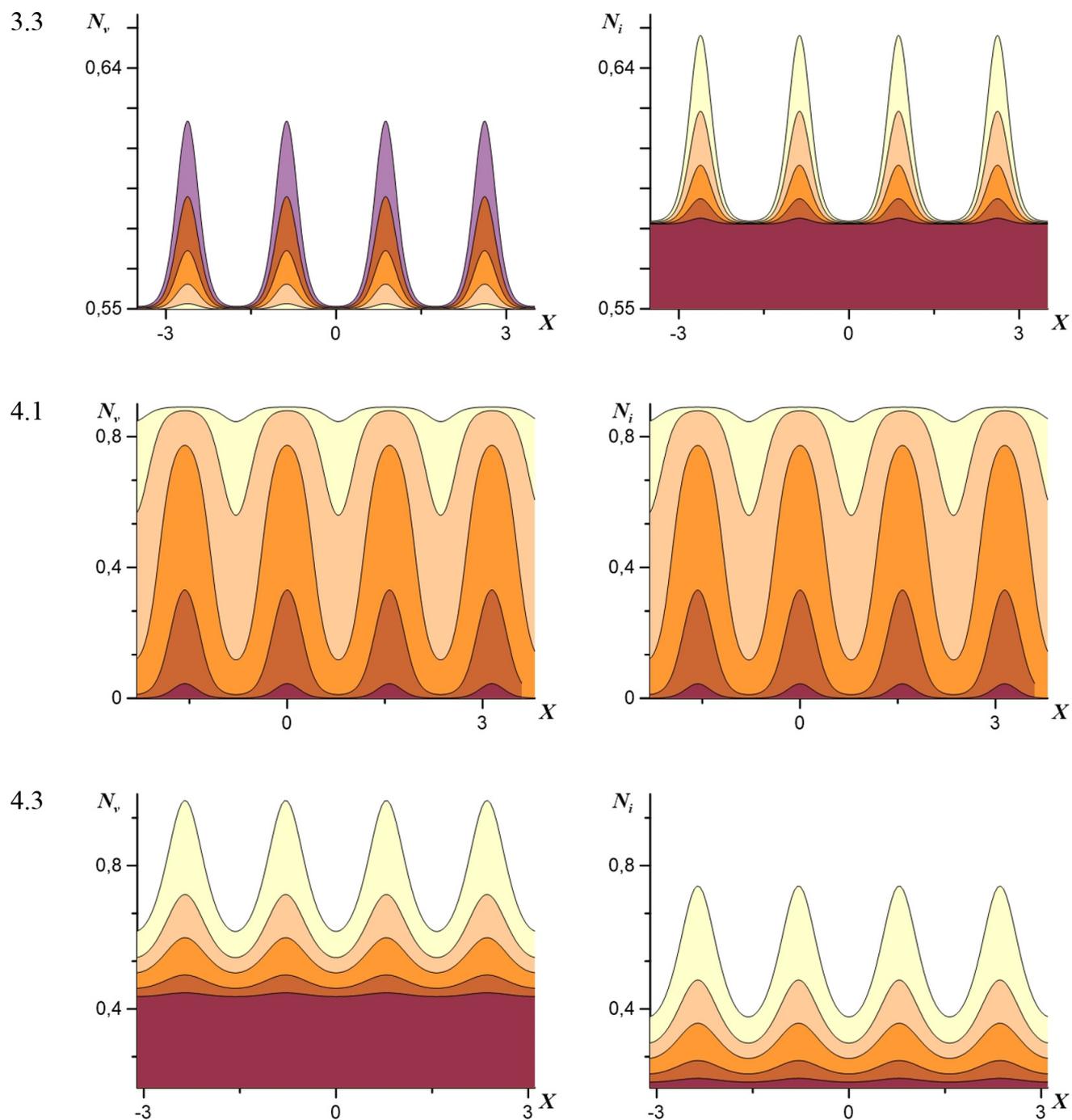


Рис. 19: Увеличение (4.1) и уменьшение (3.3, 4.3) амплитуды начального распределения дефектов.

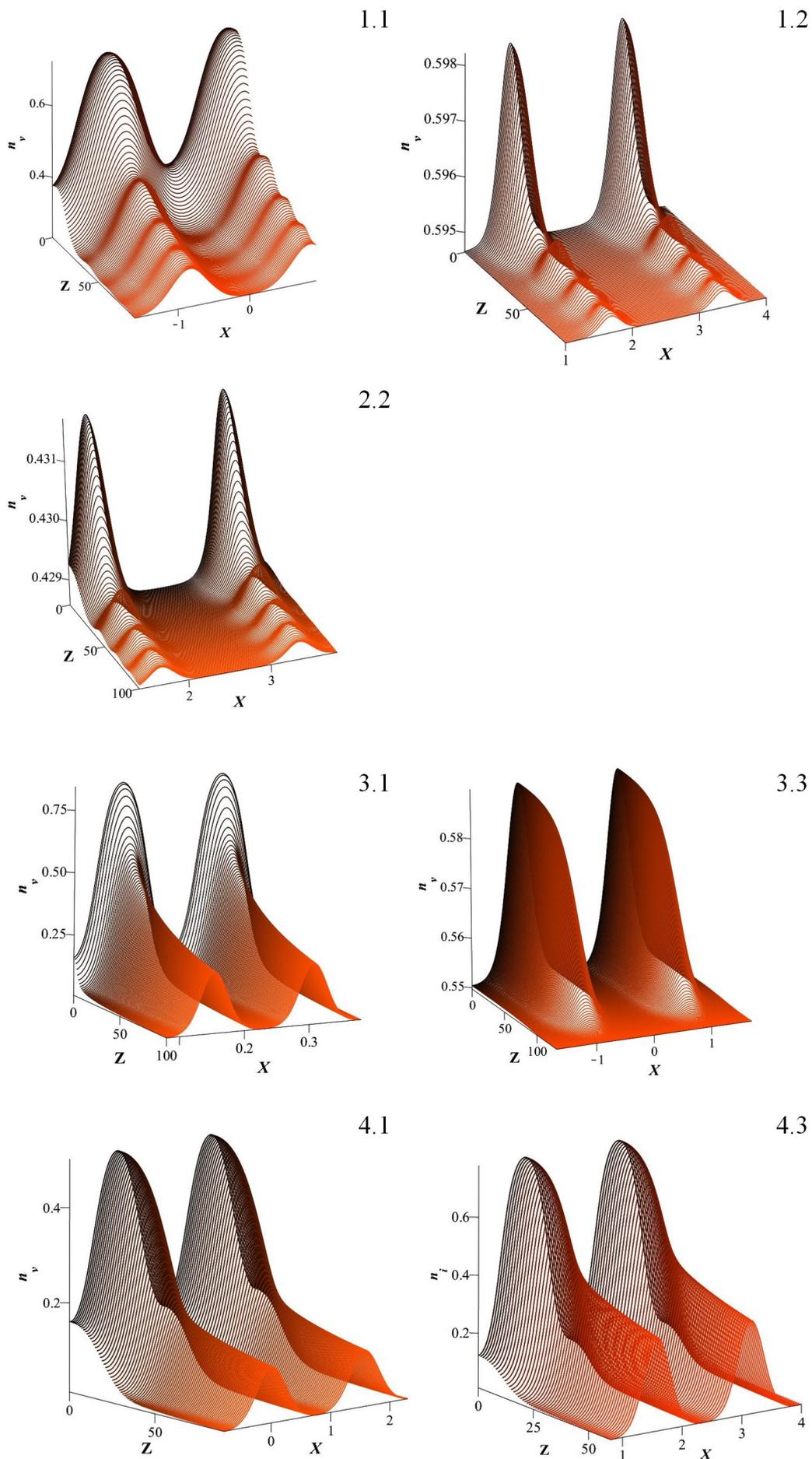


Рис. 20: Концентрации вакансий в нулевом порядке.

5.11 Получение высококонтрастной макроструктуры

Исследуем поведение полученных решений (239), (239) со временем. Основной интерес представляет получение условия, при котором будет увеличиваться контрастность (амплитуда концентрации) начального периодического распределения дефектов.

Для нахождения положения максимумов концентрации, вычислим производную по X от решения в нулевом порядке:

$$n_v = N_c \left(\alpha_0 + \alpha_1 b + \frac{\alpha_1 a}{1 - C(X)\tilde{s}(t)} \right) \quad (241)$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial X} = N_c \frac{\alpha_1 a \tilde{s}(t)}{(1 - C(X)\tilde{s}(t))^2} \frac{\partial C}{\partial X} \quad (242)$$

Отсюда видно, что положение экстремумов функции $n_v(X, t)$ совпадает с положением экстремумов $C(X)$, но при этом их тип может быть различен.

Вычисление второй производной в точке экстремума приводит к такому выражению:

$$\frac{\partial^2 n_v}{\partial X^2} = \frac{N_c \alpha_1 \tilde{s}(t)}{(1 - C(X_{ex})\tilde{s}(t))^2} \frac{\nu^2 + A^2}{A} C''(X_{ex}).$$

Откуда видно, что тип экстремума зависит от знака A . При $A > 0$ максимумы $C(X)$ и $n_v(X, t)$ совпадают. При $A < 0$ максимумы (минимумы) n_v соответствуют минимумам (максимумам) $C(X)$.

Для анализа роста концентрации введем вспомогательную функцию $\delta N(t)$

равную разности значений концентрации в максимуме и минимуме:

$$\begin{aligned}\delta N(t) &= n_v(X_2, t) - n_v(X_1, t) = \\ &= N_c \alpha_1 a \left(\frac{1}{1 - C(X_2) \tilde{s}(t)} - \frac{1}{1 - C(X_1) \tilde{s}(t)} \right).\end{aligned}$$

Условие усиления амплитуды начального распределения концентрации на некотором отрезке времени, соответствует условию наличия максимума функции $\delta N(t)$ в момент времени $t = t_{ex}$, соответствующий максимальной контрастности сверхрешетки.

Есть два варианта обращения в ноль производной по времени от $\delta N(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta N(t) = N_c \alpha_1 a \left[\frac{C(X_2)}{(1 - C(X_2) \tilde{s}(t))^2} - \frac{C(X_1)}{(1 - C(X_1) \tilde{s}(t))^2} \right] \frac{\partial \tilde{s}(t)}{\partial t} = 0.$$

В первом случае $\frac{\partial \tilde{s}(t)}{\partial t} = 0$, откуда находим $t_{ex} = t_0 + \frac{1}{\varepsilon p_2} \ln \left(-\frac{p_3}{\varepsilon p_1 p_2} \right)$. Выражение под логарифмом всегда отрицательно, т.к. $\frac{p_3}{p_1 p_2} = (\gamma A^2 + g_0)^2 / (\gamma A^2) > 0$, следовательно t_{ex} комплексное, т.е. не имеет физического смысла.

Во втором случае:

$$\frac{C(X_2)}{(1 - C(X_2) \tilde{s}(t))^2} - \frac{C(X_1)}{(1 - C(X_1) \tilde{s}(t))^2} = 0$$

или

$$\tilde{s}(t_{ex}) = \frac{\rho}{\sqrt{C(X_1)C(X_2)}}, \quad \rho = \pm 1, \quad (243)$$

что дает выражение для t_{ex} в неявном виде. Из (243) следует, что для вещественности t_{ex} функция $C(X)$ не должна нигде менять знак.

Для того, чтобы момент времени $t = t_{ex}$ соответствовал максимуму вторая

производная от $\delta N(t)$ в этой точке должна быть отрицательна:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta N(t_{ex}) &= 2N_c \alpha_1 \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t_{ex}} \right)^2 a \left[C_2^2 \left(1 - \rho \frac{C_2}{\sqrt{C_1 C_2}} \right)^{-3} - \right. \\ &\left. - C_1^2 \left(1 - \rho \frac{C_1}{\sqrt{C_1 C_2}} \right)^{-3} \right] = 2N_c \alpha_1 \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t_{ex}} \right)^2 |C_1|^{3/2} |C_2|^{3/2} a \times \\ &\times \left[\frac{\sqrt{|C_2|}}{\left(\sqrt{|C_1|} - \rho \operatorname{sign}(C_2) \sqrt{|C_2|} \right)^3} - \frac{\sqrt{|C_1|}}{\left(\sqrt{|C_2|} - \rho \operatorname{sign}(C_1) \sqrt{|C_1|} \right)^3} \right] \leq 0. \end{aligned}$$

В зависимости от знака A и соотношения между $|C_1|$ и $|C_2|$ возможны следующие варианты:

Таблица 3				
	$A > 0$		$A < 0$	
	$C(X) \geq 0$	$C(X) \leq 0$	$C(X) \geq 0$	$C(X) \leq 0$
$\tilde{s}(t_{ex})$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$	$\frac{1}{\sqrt{C_1 C_2}}$

На Рис.18,19 приведены графики эволюции начальных распределений концентраций (239), (240) со временем. Нумерация графиков соответствует случаям из Таблицы 1. При этом, приведены только те случаи, которые удовлетворяют условию изменения концентрации от нуля до единицы.

На графиках видно, что возможны два варианта поведения решений, при которых динамическое равновесие устанавливается за конечный промежуток времени: затухание до равновесного значения, либо рост амплитуды начального распределения до наступления насыщения генерации ТД, при котором происходит сглаживание профиля концентрации. Разность между концентрациями $N_v - N_i$ в нулевом порядке сохраняется постоянной и определяется начальным распределением, что объясняется тем, что выход на стоки с разными скоростями μ_i, μ_v учитывается только в первом порядке.

На Рис.20 приведены профили концентрации вакансий (239) по глубине материала. На них наблюдается либо монотонное затухание концентрации вглубь материала, либо наличие периодической по Z составляющей. В обоих случаях концентрация локализуется в приповерхностном слое, в котором устанавливается динамическое равновесие между генерацией и рекомбинацией ТД.

Пространственные координаты и время на графиках оставлены безразмерными. Значения расчетных параметров приведены в Приложении 4.

Таким образом, характерной особенностью релаксационного режима роста является усиление амплитуды начального распределения концентраций с достижением максимально контрастного распределения на конечном отрезке времени (см. случаи 1.1, 3.1, 4.1 на Рис.18,19). Знание момента времени t_{ex} , соответствующего максимуму амплитуды периодического распределения концентрации (239), позволяет на практике добиться максимального роста макроструктуры.

5.12 Оценка масштабов сверхрешеток

Оценим период сверхрешетки для случая образования слоя металлизации на поверхности полупроводника, получаемого в результате генерации неравновесных носителей заряда внешним излучением.

Эффективный коэффициент диффузии (224) в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{as}(A) = & \frac{\nu^2}{A^2} \mathcal{D}_p \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right) + \\ & + \mathcal{D}_n \left(\frac{N_c \alpha_1 \nu^2}{A} - N_c \alpha_1 \nu^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right), \end{aligned}$$

где \mathcal{D}_n , \mathcal{D}_p — коэффициенты диффузии электронов и дырок.

Используемые для расчета параметры приведены в Таблице 4 [9].

Таблица 4			
Параметр	Обозначение	Численное значение	Размерность
Постоянная решетки	d	5.4×10^{-10}	m
Скорость генерации ТД	P	6.35×10^{21}	$m^{-3} s^{-1}$
Концентрация частиц излучения	g	10^{21}	m^{-3}
Коэффициенты диссипации	μ_v, μ_i	$10^8, 6 \times 10^8$	s^{-1}
Размерный коэффициент диффузии	D_0	10^{-6}	$m^2 s^{-1}$
Параметр в коэффициенте диффузии	n_0	4×10^{17}	m^{-3}
Коэффициент взаимной рекомбинации	$\tilde{\gamma}$	10^{-20}	$m^3 s^{-1}$
Параметр модели	β	1.9	—

Для приведенных параметров величина $\frac{\nu^2}{A^2}$ имеет порядок 10^{-15} , т.е. вкладом коэффициента диффузии дырок в $\mathcal{D}_{as}(A)$ можно пренебречь.

В качестве коэффициента диффузии неравновесных электронов возьмём коэффициент, предложенный в предыдущей главе: $D_n(u, v) = D_0 n_0 / (v + n_0)$.

Для оценки концентрации атомов вещества в неповрежденной решетке пользуемся известной формулой: $N_c = 1/d^3 = 6.35 \times 10^{27} m^{-3}$. Интенсивность взаимодействия излучения с узлами решетки вычисляется по известной скорости генерации: $\lambda_c = P/(gN_c) = 10^{-27} m^3 s^{-1}$, а интенсивность взаимодействия междоузлий с узлами решетки выражается через параметр β : $\tilde{\lambda}_i = 2\beta\tilde{\gamma} = 3.8 \times 10^{-20} m^3 s^{-1}$.

В этом случае эффективный коэффициент диффузии в стационарной точке

принимает следующий вид:

$$\mathcal{D}_{as}(-A_0^-) = \frac{n_0}{n_0 + N_c \alpha_0 - \alpha_1 N_c |A_0^-|} = -2,5 \times 10^5.$$

Малый параметр для энергии налетающих частиц равной $E = 10^{-1}$ МэВ принимает следующее значение: $\varepsilon = \left(\frac{D_0 \lambda_c N_c}{\sigma_r^2}\right)^{1/4} = 5 \times 10^{-6}$, что на порядки больше соответствующего значения, рассчитанного в случае диффузии точечных дефектов. Это объясняется тем, что коэффициенты диффузии ТД на порядки меньше значений коэффициентов диффузии неравновесных носителей заряда в полупроводнике.

В результате, имеем следующую оценку для длины волны сверхрешетки (в обычных переменных):

$$\Lambda = 2\pi \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} \frac{D_0 |\mathcal{D}_{as}(-A_0^-)|}{S'(-A_0^-)} \frac{g}{P}} \sim 10^{-7} \text{ м.}$$

Далее рассмотрим случай релаксационного режима роста. В этом случае $A(\mathbf{X}, T) = -A_0^-$. Оценим период сверхрешетки для случая 4.1 из Таблицы 1 и Таблицы 2. Значения расчетных параметров приведены в Таблице 5.

В этом случае эффективный коэффициент диффузии принимает значение $\tilde{D} = \vec{D}\vec{M} = 6.48 \times 10^8$, а малый параметр $\varepsilon = 2.82 \times 10^{-6}$. Длина волны сверхрешетки (236), (237) равна следующему значению:

$$\Lambda = 2\pi \sqrt{\frac{\tau_1 D_0}{\varepsilon \tilde{\lambda}_c N_c}} = 6.18 \times 10^{-7} \text{ м.}$$

Максимальная контрастность достигается за $t_{ex} = 5.76 \times 10^7$ с с дозой облучения равной 144 *dpa*.

Таблица 5			
Параметр	Обозначение	Численное значение	Размерность
Постоянная решетки	d	5.4×10^{-10}	m
Скорость генерации ТД	P	6.35×10^{22}	$m^{-3} s^{-1}$
Концентрация частиц излучения	g	10^{20}	m^{-3}
Коэффициенты диссипации	μ_v, μ_i	$10^8, 0.4 \times 10^8$	s^{-1}
Размерный коэффициент диффузии	D_0	10^{-9}	$m^2 s^{-1}$
Параметр в коэффициенте диффузии	n_0	4×10^{17}	m^{-3}
Коэффициент взаимной рекомбинации	$\tilde{\gamma}$	10^{-20}	$m^3 s^{-1}$
Параметр модели	β	100	—

5.12 Выводы

Предложенная в данной главе модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур подходит для случая облучения кристаллического материала пучком с высокими, относительно характеристик материала, плотностью $((\delta g)_{abs} \ll g_{irr})$ и энергиями $(\langle v \rangle \ll \sigma_r)$ налетающих частиц. В данном случае происходит разделение процессов на быстрые — связанные с генерацией и рекомбинацией точечных дефектов и медленные — прежде всего, диффузия.

При этом показано, что взаимная рекомбинация дефектов играет важную роль в образовании макроструктуры в промежуточной между началом облучения и установлением динамического равновесия стадии.

Отличительной особенностью новой модели является рассмотрение частиц излучения как части динамической системы, что приводит к новому выраже-

нию для ограниченного источника точечных дефектов. Это позволило проанализировать рост сверхрешетки на всем интервале времени облучения — от начальной стадии, до установления динамического равновесия. Наличие ограниченного источника приводит к явлению насыщения концентраций, что в случае релаксационного режима позволяет получить высококонтрастную сверхрешетку за некоторый отрезок времени t_{ex} с последующим прекращением облучения. Другим режимом роста является асимптотический рост сверхрешетки, когда периодичность сохраняется при установлении динамического равновесия. В этом случае анализ условий роста приводит к результатам, аналогичным начальной стадии облучения, т.е. когда критерием роста является условие отрицательности коэффициента диффузии, как функции аргумента, зависящего от скорости генерации.

Заключение

Сформулируем основные результаты проведенного исследования:

1. Диффузия точечных дефектов в неоднородной, в общем случае, среде с распределенными источниками/стоками со степенью неоднородности не выше 2 может приводить к возникновению и перемещению сингулярных структур. Впервые получен класс квазилинейных многолистных решений уравнения линейной диффузии, описывающих такие структуры. В случае размерности больше 2 найденные решения связаны с особым классом решений квазилинейных уравнений — ривертонами.

2. С помощью введенных в данной работе нелинейных функциональных подстановок показано, что уравнение быстрой диффузии описывает перемещение локализованных волновых структур, в том числе, при отсутствии генерации точечных дефектов внешним источником. Впервые найдено преобразование симметрии, связывающее пары решений уравнений нелинейной диффузии со взаимными коэффициентами диффузии, что позволяет расширить класс известных точных решений.

3. Обобщение метода функциональных подстановок на случай дискретных динамических систем позволило разработать метод получения моделей кластеризации, для которых выписываются точные решения и интегралы движения.

4. В новой модели "быстрая релаксация-медленная диффузия" с помощью метода многомасштабных разложений система уравнений динамики точечных дефектов разбивается на уравнения, описывающие "быстрые" процессы релаксации и уравнения, описывающие рост упорядоченной структуры. Показано, что на начальной стадии формирования структуры, когда генерация дефектов не подавляется рекомбинацией, наблюдается неограниченное усиление на-

чального распределения концентрации дефектов с волновыми числами меньше критического.

5. Впервые получено уравнение для функции медленных переменных, описывающей рост сверхрешетки — амплитудного фактора. В данном уравнении коэффициент диффузии зависит от скорости генерации дефектов. Таким образом, скорость генерации (интенсивность внешнего излучения) является управляющим параметром, определяющим критическое значение волнового числа сверхрешетки, начиная с которого наблюдается ее рост.

6. Впервые рассмотрена модель нелинейной диффузии с ограниченным источником ТД. Показано, что учет замедления генерации, связанного с деградацией материала, приводит к двум режимам образования упорядоченных структур — релаксационному, когда максимальная контрастность структуры достигается за конечное время и асимптотическому, соответствующему установлению динамического равновесия.

Рассмотренные в работе модели объединяет идея, что в основе роста когерентных структур в кристаллических средах лежит нелинейная диффузия точечных дефектов. При определенном соотношении между скоростями рекомбинации и генерации (интенсивностью внешнего излучения) устанавливается динамическое равновесие, в котором, при наличии нелинейной диффузии, происходит развитие диффузионных неустойчивостей, в виде растущих периодических структур, связанных с Фурье-компонентами поля излучения на поверхности материала или перемещающихся в объеме квазиволновых локализованных структур. Зависимость коэффициента диффузии от концентрации приводит к замедлению диффузии в областях с повышенной концентрацией, а в некоторых случаях происходит процесс обратный диффузии — сегрегация точечных

дефектов, что приводит к возникновению локализованных структур даже при отсутствии внешнего источника излучения.

Используемые сокращения

ДУЧП — дифференциальное уравнение в частных производных

МОЗ — метод обратной задачи

МФП — метод функциональных подстановок

НФП — нелинейные функциональные подстановки

ОДУ — обыкновенное дифференциальное уравнение

ППП — поверхностный плазмон-поляритон

ТД — точечные дефекты

УБД — уравнение быстрой диффузии

УНД — уравнение нелинейной диффузии

Список литературы

- [1] Hoeffgen S.K. Investigating the effects of cosmic rays on space electronics [Текст] / S.K. Hoeffgen, S. Metzger, M. Steffens // *Frontiers in Physics*. - 2020. - Т. 8 - С. 318.
- [2] Nwankwo V.U. The impact of space radiation environment on satellites operation in near-earth space [Текст] / V.U. Nwankwo, N. Nnamdi Jibiri, T. Michael Kio // *Satellites missions and technologies for geosciences*. - 2020. - С. 73-90.
- [3] Космическое пространство и его влияние на элементы конструкций космических аппаратов [Электронный ресурс]: электрон. метод. пособие к практ. работам / М-во образования и науки РФ, Самар. гос. аэрокосм. ун-т им С.П. Королева (нац. исслед. ун-т); авт.-сост.: Н.Д.Семкин, А.М. Телегин, М.П. Калаев. - Электрон. текстовые и граф. дан. (1,06 Мбайт). - Самара, 2013. - 1. эл. опт. диск (CD-ROM).
- [4] Новиков Л.С. Космическое материаловедение [Текст] / Л.С. Новиков. - М.: Макс Пресс, 2014. - 448 с.
- [5] Peruani F. A kinetic model and scaling properties of non-equilibrium clustering of self-propelled particles [Текст] / F. Peruani, M. Baer // *New Journal of Physics*. - 2013. - Т. 15. - №6. - С. 15 - 30.
- [6] Xu K. Grouping Methods of Cluster Dynamics Model for Precipitation Kinetics [Текст] / K. Xu, B.G. Thomas, Y. Wu, H. Wang, H. Kong, Z. Wu // *Metals*. - 2020. - Т. 10. - №12. - С. 1685 - 1702.

- [7] Emel'yanov V.I. Defect—deformation theory of the formation of a nanoparticle ensemble with a bimodal size distribution on solids under cw laser irradiation [Текст] / V.I. Emel'yanov // Quantum Electronics. – 2011. – Т. 41.– №8. – С. 738–741.
- [8] Emel'yanov V.I. Formation of microand nanostructures on the surface of laser-created molten layer with inverted normal temperature gradient [Текст] / V.I. Emel'yanov // Computational nanotechnology. – 2014. – №2. - С. 28-39.
- [9] Ghoniem N.M. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials [Текст] / N.M. Ghoniem, D. Walgraef, S.J. Zinkle // Journal of computer-aided materials design. – 2001. – Т. 8. – №1. – С. 1-38.
- [10] Gusev M.N. Correlation of yield stress and microhardness in 08Cr16Ni11Mo3 stainless steel irradiated to high dose in the BN-350 fast reactor [Текст] / M.N. Gusev, O.P. Maksimkin, O.V. Tivanova // Journal of nuclear materials. – 2006. – Т. 359. – №3. – С. 258-262.
- [11] Alsabbagh A. Microstructure and mechanical behavior of neutron irradiated ultrafine grained ferritic steel [Текст] / A. Alsabbagh, A. Sarkar, B. Miller, J. Burns, L. Squires, D. Porter, J.I. Cole, K.L. Murty // Materials Science and Engineering: A. – 2014. – Т. 615. – С. 128-138.
- [12] Ertugrul R., Effects of gamma irradiation on electrical parameters of metal–insulator–semiconductor structure with silicon nitride interfacial insulator layer [Текст] / R. Ertugrul, A. Tataroglu // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2014. – Т. 169. – №9. – С. 791-799.

- [13] Ryu W.S. Effects of irradiation on thermal conductivity of alloy 690 at low neutron fluence [Текст] / W.S. Ryu, D.G. Park, U.S. Song, J.S. Park, S.B. Ahn // Nuclear Engineering and Technology. – 2013. – Т. 45. – №2. – С. 219-222.
- [14] Peleshchak R.M. Formation of periodic structures under the influence of an acoustic wave in semiconductors with a two-component defect subsystem [Текст] / R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv // Ukrainian Journal of Physics. – 2016. – Т. 61. – №8. – С. 741-741.
- [15] Chou K.S. Symmetry groups and separation of variables of a class of nonlinear diffusion-convection equations [Текст] / K.S. Chou, C. Qu // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1999. – Т. 32. – №35. – С. 6271-6286.
- [16] Polyanin A.D. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems [Текст] / A.D. Polyanin, V.F. Zaitsev. – Chapman and Hall/CRC, 2003.-840с.
- [17] Taller S. Predicting structural material degradation in advanced nuclear reactors with ion irradiation [Текст] / S. Taller, G. VanCoevering, B.D. Wirth, G.S. Was // Scientific reports. – 2021. – Т. 11. – №1. – С. 1-14.
- [18] Verma A. Analytic and numerical solutions of nonlinear diffusion equations via symmetry reductions [Текст] / A. Verma, R. Jiwari, M.E. Koksal // Advances in Difference Equations. – 2014. – Т. 2014. – №1. – С. 1-13.

- [19] Abd-el-Malek M. B. Group method solution for solving nonlinear heat diffusion problems [Текст] / М.В. Abd-el-Malek, М.М. Helal // Applied mathematical modelling. – 2006. – Т. 30. – №9. – С. 930-940.
- [20] Новиков И.И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки: учебник для вузов [Текст] /И.И. Новиков, К.М. Розин. - Металлургия, 1990. 336 с.
- [21] Журавлев В.М. О многозначных решениях двумерных линейных параболических уравнений [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://conf.svmo.ru/archive/article?id=46> (дата обращения: 07.06.2022).
- [22] Журавлев В.М. Многозначные решения уравнений диффузии и гидродинамика [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2018. – №3. – С. 87–110.
- [23] Фистуль В.И. Распад пересыщенных полупроводниковых твердых растворов [Текст] /В.И. Фистуль. - Металлургия, 1977. - 240 с.
- [24] Устиновщиков Ю.И. Выделение второй фазы в твердых растворах [Текст]/ Ю.И. Устиновщиков. - Наука, 1988. - 171 с.
- [25] Слезов В.В. Диффузионный распад твердых растворов [Текст] / В.В. Слезов, В.В. Сагалович // Успехи физических наук. - 1987. - №1. - С. 37-50.
- [26] Zener C. Kinetics of the decomposition of austenite [Текст] / С. Zener // Trans. Aime. - 1946. - Т. 167 - С. 550-595.

- [27] Лифшиц И.М. О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов [Текст] / И.М. Лифшиц, В.В. Слезов // ЖЭТФ. – 1958. – №2. – Т. 35. – С. 479-492.
- [28] Слезов В.В. Диффузионный распад твердых растворов [Текст] / В.В. Слезов, В.В. Сагалович // Успехи физических наук. - 1987. – Т.151. - №1. - С. 67-104.
- [29] Кампен Н.Г.В. Стохастические процессы в физике и химии [Текст] / Н.Г.В. Кампен // М.: Высшая школа, 1990. – 224 с.
- [30] Ham F.S. Theory of diffusion-limited precipitation [Текст] / F.S. Ham // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1958. – Т. 6. – №. 4. – С. 335-351.
- [31] Jourdan T. An accurate scheme to solve cluster dynamics equations using a Fokker–Planck approach [Текст] / T. Jourdan, G. Stoltz, F. Legoll, L. Monasse // Computer Physics Communications. – 2016. – Т. 207. – С. 170-178.
- [32] Ovcharenko A.M. Master-equation for cascade damage modeling [Текст] / A.M. Ovcharenko, C.H. Woo, A.A. Semenov // Journal of nuclear materials. – 2005. – Т. 341. – №2-3. – С. 201-208.
- [33] Булярский С.В. Моделирование неоднородной по объему преципитации кислорода в кремнии [Текст] / С.В. Булярский, В.В. Светухин, О.В. Приходько // Физика и техника полупроводников. – 1999. – Т. 33. – №11. – С. 1281-1286.
- [34] Светухин В.В. Кинетика распада пересыщенного твердого раствора [Текст] / В.В. Светухин. - Ульяновск: УлГУ, 2006. 208 с.

- [35] Kumei S. When nonlinear differential equations are equivalent to linear differential equations [Текст] / S. Kumei, G.W. Bluman // SIAM Journal on Applied Mathematics. – 1982. – Т. 42. – №5. – С. 1157-1173.
- [36] Chbihi A. Atomic scale investigation of Cr precipitation in copper [Текст] / A. Chbihi, X. Sauvage, D. Blavette // Acta Materialia. – 2012. – Т. 60. – №11. – С. 4575-4585.
- [37] Novy S. Atomic scale analysis and phase separation understanding in a thermally aged Fe–20 at. Cr alloy [Текст] / S. Novy, P. Pareige, C. Pareige // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – Т. 384. – №2. – С. 96-102.
- [38] Cahn J.W. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems [Текст] / J.W. Cahn // The Journal of Chemical Physics. – 1965. – Т. 42. – №1. – С. 93-99.
- [39] Umantsev A. Field theoretic method in phase transformations [Текст] / A. Umantsev. – Springer, 2012. – 840с.
- [40] Львов П.Е. Моделирование процесса неклассической нуклеации в бинарных сплавах [Текст] / П.Е. Львов, В.В. Светухин // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57. – №6. – С. 1192-1200.
- [41] Львов П.Е. Термодинамика образования наноразмерных выделений вторых фаз с протяженной межфазной границей [Текст] / П.Е. Львов, В.В. Светухин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – №9. – С. 1825-1833.
- [42] Селищев П.А. Автоколебания температуры и плотности дефектов в тонких пластинках под облучением [Текст] / П.А. Селищев, В.И. Сугаков // Физика твердого тела. – 1988. – Т. 30. – №9. – С. 2611-2615.

- [43] McKay R. Interface oscillations in reaction-diffusion systems above the hopf bifurcation [Текст] / R. McKay, T. Kolokolnikov P. Muir // Discrete and Continuous Dynamical Systems-B. – 2012. – Т. 17. – №7. – С. 2523-2543.
- [44] Zemskov E.P. Traveling waves in a piecewise-linear reaction-diffusion model of excitable medium [Текст] / E.P. Zemskov, A.Y. Loskutov // Biophysics. – 2009. – Т. 54. – №5. – С. 631-636.
- [45] Ghosh S. Parametric spatiotemporal oscillation in reaction-diffusion systems [Текст] / S. Ghosh, D.S. Ray // Physical Review E. – 2016. – Т. 93. – №3. – С. 1-10.
- [46] Kuwamura M. Oscillations and bifurcation structure of reaction–diffusion model for cell polarity formation [Текст] / M. Kiwamura, H. Izuhara, S. Ei // Journal of Mathematical Biology. – 2022. – Т. 84. – №4. – С. 1-26.
- [47] Казарников А.В. Возникновение автоколебаний в системе Рэлея с диффузией [Текст] / А.В. Казарников, С.В. Ревина // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2016. – Т. 9. – №2. – С. 16-28.
- [48] Слепнев А.В. Два вида автоколебаний в активной среде с периодическими граничными условиями [Текст] / А.В. Слепнев, Т.Е. Вадивасова // Russian Journal of Nonlinear Dynamics. – 2012. – Т. 8. – №3. – С. 497-505.
- [49] Емельянов В.И. Теория образования поверхностных решеток при действии лазерного излучения на поверхность металлов, полупроводников и диэлектриков [Текст] / В.И. Емельянов, Е.М. Земсков, В.Н. Семиногов // Квантовая электроника. – 1983. – Т. 10. – №12. – С. 2389-2398.

- [50] Антипов А.А. Образование кольцевых периодических структур рельефа поверхности при непрерывном лазерном облучении тонких пленок PbSe [Текст] / А.А. Антипов, С.М. Аракелян, В.И. Емельянов, С.П. Зимин, С.В. Кутровская, А.О. Кучерик, В.Г. Прокошев // Квантовая электроника. – 2011. – Т. 41. – №5. – С. 441-446.
- [51] Емельянов В.И. Образование периодических структур дефектов на поверхности полупроводников при импульсном лазерном облучении [Текст] / В.И. Емельянов, П.К. Кашкаров, Н.Г. Чеченин, Т. Дитрих // Физика твердого тела. – 1988. – Т. 30. – №8. – С. 2259-2263.
- [52] Емельянов В.И. Волна генерации точечных дефектов, сверхбыстрая нуклеация кластеров и лазерное повреждение прозрачных диэлектриков [Текст] / В.И. Емельянов // Квантовая электроника. – 1995. – Т. 22. – №2. – С. 99-100.
- [53] Емельянов В.И. Дефектно-деформационная теория образования ансамбля наночастиц с бимодальным распределением по размерам при непрерывном лазерном облучении твердых тел [Текст] / В.И. Емельянов // Квантовая электроника. – 2011. – Т. 41. – №8. – С. 738-741.
- [54] Emel'yanov V.I. Two-stage mechanism of formation of ordered surface nanostructures under atomic deposition [Текст] / V.I.Emel'yanov, A.E. Tarkhov // Computational nanotechnology. – 2015. – №4. – С. 37-50.
- [55] Баграташвили В.Н. Образование периодических кольцевых структур рельефа при лазерном осаждении металлических пленок [Текст] / В.Н. Баграташвили, А.Ф. Банишев, С.А. Гнедой, В.И. Емельянов, В.Н. Семиногов,

- К.С. Мерзляков, В.Л. Панченко, А.Н. Жерихин // Препринт НИЦТЛ АН СССР. - 1987. - №32.
- [56] Мирзоев Ф.Х. Распространение фронта волны генерации дефектов в твердом теле при лазерном воздействии [Текст] / Ф.Х. Мирзоев, Л.А. Шелепин // Письма в ЖТФ. - 1996. - Т. 22. - №13. - С. 28-32.
- [57] Mirzoev F.H Localized states in a system of defects in crystals under laser exposure [Текст] / F.H. Mirzoev, L.A. Shelepin // Journal of Russian Laser Research. - 1999. - Т. 20. - №5. - С. 404-420.
- [58] Li Y. Travelling wave solutions in a negative nonlinear diffusion–reaction model [Текст] / Y. Li, P. Heijster, R. Marangell, M.J. Simpson // Journal of Mathematical Biology. - 2020. - Т. 81. - №6. - С. 1495-1522.
- [59] Wang B. Traveling wave solutions for a class of reaction-diffusion system [Текст] / B. Wang, Y.T. Zhang // Boundary Value Problems. - 2021. - Т. 2021. - №1. - С. 1-15.
- [60] Cohen D.S. Rotating spiral wave solutions of reaction-diffusion equations [Текст] / D.S. Cohen, J.C. Neu, R.R. Rosales // SIAM journal on applied mathematics. - 1978. - Т. 35. - №3. - С. 536-547.
- [61] Harko T. Exact travelling wave solutions of non-linear reaction-convection-diffusion equations—An Abel equation based approach [Текст] / Т. Harko, Н.К. Мак // Journal of Mathematical Physics. - 2015. - Т. 56. - №11. - С. 1-35.

- [62] Polyanin A.D. Methods for solving nonlinear equations of mathematical physics and mechanics [Текст] / A.D. Polyanin, V.F. Zaitsev, A.I. Zhurov. - Phyzmathlit, Moscow, 2005. - 256 с.
- [63] Clarkson P.A. Hodograph transformations of linearizable partial differential equations [Текст] / P.A. Clarkson, A.S. Fokas, M.J. Ablowitz // SIAM Journal on Applied Mathematics. - 1989. - Т. 49. - №4. - С. 1188-1209.
- [64] Tychnin V. New nonlocal symmetries of diffusion-convection equations and their connection with generalized hodograph transformation [Текст] / V. Tychnin // Symmetry. - 2015. - Т. 7. - №4. - С. 1751-1767.
- [65] Fushchych W.I. Hodograph transformations and generating of solutions for nonlinear differential equations [Текст] / W.I. Fushchych, V.A. Tychnin // Rep. NAS of Ukraine. - 1993. - №10. - С. 52-58.
- [66] Qu C. Hodograph transformations and Cauchy problem to systems of nonlinear parabolic equations [Текст] / C. Qu, J. Kang // Studies in Applied Mathematics. - 2014. - Т. 132. - №2. - С. 81-111.
- [67] Tychnin V.A. Nonlocal symmetries and formulae for generation of solutions for a class of diffusion-convection equations [Текст] / V.A. Tychnin, O.V. Petrova // Journal of mathematical analysis and applications. - 2011. - Т. 382. - №1. - С. 20-33.
- [68] Semenov E. I. New exact solutions to the nonautonomous Liouville equation [Текст] / E.I. Semenov // Siberian Mathematical Journal. - 2008. - Т. 49. - №1. - С. 166-174.

- [69] Semenov E. I. Multidimensional exact solutions to a quasilinear parabolic equation with anisotropic heat conductivity [Текст] / E.I. Semenov // Siberian Mathematical Journal. – 2006. – Т. 47. – №2. – С. 376-382.
- [70] Li Y. Travelling wave solutions in a negative nonlinear diffusion–reaction model [Текст] / Y. Li, // Journal of Mathematical Biology. – 2020. – Т. 81. – №. 6. – С. 1495-1522.
- [71] Murray J.D. Mathematical biology: I. An introduction. Interdisciplinary applied mathematics [Текст] / J.D. Murray . - Mathematical Biology, Springer. – 2002. - 577 с.
- [72] Mack R.N. Biotic invasions: causes, epidemiology, global consequences, and control [Текст] / R.N. Mack, D. Simberloff, W. Mark Lonsdale, H. Evans, M. Clout, F.A. Bazzaz // Ecological applications. – 2000. – Т. 10. – №. 3. – С. 689-710.
- [73] Davis P.N. Traveling wave solutions in a model for tumor invasion with the acid-mediation hypothesis [Текст] / P.N. Davis, P. van Heijester, R. Marangell, M.R. Rodrigo // Journal of Dynamics and Differential Equations. – 2022. – С. 1325-1347.
- [74] Gatenby R.A. A reaction-diffusion model of cancer invasion [Текст] / R.A. Gatenby, E.T. Gawlinski // Cancer research. – 1996. – Т. 56. – №24. – С. 5745 - 5753.
- [75] Holder A.B. A model for acid-mediated tumour growth with nonlinear acid production term [Текст] / A.B. Holder, M.R. Rodrigo, M.A. Herrero // Applied Mathematics and Computation. – 2014. – Т. 227. – С. 176-198.

- [76] Simpson M.J. Cell invasion with proliferation mechanisms motivated by time-lapse data [Текст] / M.J. Simpson, K.A. Landman, B.D. Hughes // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2010. – Т. 389. – №18. – С. 3779-3790.
- [77] McCue S.W. Hole-closing model reveals exponents for nonlinear degenerate diffusivity functions in cell biology [Текст] / S.W. McCue, W. Jin, T.J. Moroney, K.Y. Lo, S.E. Chou, M.J. Simpson // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2019. – Т. 398. – С. 130-140.
- [78] Simpson M.J. A model for mesoscale patterns in motile populations [Текст] / M.J. Simpson, K.A. Landman, B.D. Hughes, A.E. Fernando // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2010. – Т. 389. – №. 7. – С. 1412-1424.
- [79] Morrison J.A. Bounds on the nonlinear diffusion controlled growth rate of spherical precipitates [Текст] / J.A. Morrison // *Journal of Applied Physics*. – 1960. – Т. 31. – №9. – С. 1621-1627.
- [80] Еленин Г. Г. Нелинейные коэффициенты диффузии в неидеальном слое адсорбата на поверхности монокристалла [Текст] / Г.Г. Еленин // *Математическое моделирование*. – 1995. – Т. 7. – №3. – С. 51-65.
- [81] Люксютов И.Ф. Двумерные кристаллы [Текст] / И.Ф. Люксютов, А.Г. Наумовец, В.Л. Покровский. - *Наукова думка*, 1988 - 218 с.
- [82] Janavicius A.J. Nonlinear diffusion equation with diffusion coefficient directly proportional to concentration of impurities [Текст] / A.J. Janavicius, A. Poskus // *Acta Phys. Pol. A*. – 2005. – Т. 107. – С. 519-521.

- [83] Pattle R. E. Diffusion from an instantaneous point source with a concentration-dependent coefficient [Текст] / R.E. Pattle // The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics. – 1959. – Т. 12. – №4. – С. 407-409.
- [84] Janavicius A.J. Analytical solution of nonlinear diffusion equation in two-dimensional surface [Текст] / A.J. Janavicius, S. Turskiene // ACTA PHYSICA POLONICA SERIES A. – 2006. – Т. 108. – №6. – С. 979.
- [85] Janavicius A.J. Nonlinear diffusion in excited Si crystals [Текст] / A.J. Janavicius, Z. Norgela, R. Purlys // The European Physical Journal Applied Physics. – 2005. – Т. 29. – №2. – С. 127-131.
- [86] Giacomelli L. Nonlinear diffusion in transparent media: the resolvent equation [Текст] / L. Giacomelli, S. Moll, F. Petitta // Advances in calculus of variations. - 2018. - Т. 11. - №4. - С. 405-432.
- [87] Janavicius A.J. Equations for nonlinear diffusion [Текст] / A.J. Janavicius // Lietuvos matematikos rinkinys. – 2010. – Т. 51. – С. 9–15.
- [88] Hayek M.A family of analytical solutions of a nonlinear diffusion–convection equation [Текст] / M.A. Hayek // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2018. – Т. 490. – С. 1434-1445.
- [89] Seitz F. On the disordering of solids by action of fast massive particles [Текст] / F. Seitz // Discussions of the Faraday Society. – 1949. – Т. 5. – С. 271-282.
- [90] Siegel S. Effect of neutron bombardment on order in the alloy Cu₃Au [Текст] / S. Siegel // Physical Review. – 1949. – Т. 75. – №12. – С. 1823.

- [91] Blewitt T.H. The effect of neutron irradiation on metallic diffusion [Текст] / T.H. Blewitt, R.R. Coltman // Physical Review. – 1952. – Т. 85. – №. 2. – С. 384.
- [92] Martin A.B. The effect of cyclotron bombardment of the physical properties of metals [Текст] / A.B. Martin, S.B. Austerman, R.P. Eggleston, J.F. McGee, M. Tarpinian // Physical Review. – ONE PHYSICS ELLIPSE, COLLEGE PK, MD 20740-3844 USA : AMERICAN PHYSICAL SOC, 1951. – Т. 81. – №. 4. – С. 664-664.
- [93] Wruck D.A. Crystal structure as a factor in irradiation damage [Текст] / D.A. Wruck, C. Wert // Physical Review. – 1954. - С. 20740-3844.
- [94] Wruck D. The role of crystal structure on irradiation effects in metals [Текст] / D. Wruck, C. Wert // Acta Metallurgica. – 1955. – Т. 3. – №2. – С. 115-120.
- [95] Murray G.T. Neutron Bombardment of a Copper-Beryllium Alloy [Текст] / G.T. Murray, W.E. Taylor // Physical review. – one physics ellipse, college PK, MD 20740-3844 USA : AMERICAN PHYSICAL SOC, 1952. – Т. 86. – №4. – С. 642-642.
- [96] Lintner K. Bedeutung von Korpuskularbestrahlung für die Eigenschaften von Festkörpern [Текст] / K. Lintner, E. Schmid // Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften. – Springer, Berlin, Heidelberg, 1954. – С. 302-406.
- [97] Murray G.T. Effect of neutron irradiation on a supersaturated solid solution of beryllium in copper [Текст] / G.T. Murray, W.E. Taylor // Acta Metallurgica. – 1954. – Т. 2. – №1. – С. 52-62.

- [98] Kinchin G.H. The displacement of atoms in solids by radiation [Текст] / G.H. Kinchin, R.S. Pease // Reports on progress in physics. – 1955. – Т. 18. – №1. – С. 1-51.
- [99] Kinchin G.H. The mechanism of the irradiation disordering of alloys [Текст] / G.H. Kinchin, R.S. Pease // Journal of Nuclear Energy (1954). – 1955. – Т. 1. – №3-4. – С. 200-202.
- [100] Blewitt T.H. The effect of pile irradiation on the stress-strain curve of copper [Текст] / T.H. Blewitt, R.R. Coltman // Physical review. - 1951. - Т. 82. - №5. - С. 20740-3844
- [101] Holden A.N. [Текст] / A.N. Holden, F.W. Kunz // U. S. Report AECD-3616, 1954. - 24 с.
- [102] Kunz F.W. The effect of short-time moderate flux neutron irradiations on the mechanical properties of some metals [Текст] / F.W. Kunz, A.N. Holden // Acta Metallurgica. – 1954. – Т. 2. – №6. – С. 816-822.
- [103] Callendine G.W. Diffusion effects of cobalt when bombarded with neutrons [Текст] / G.W. Celledine, V.C. Ridolfo, M.L. Pool // Physical review. – 1952. – Т. 86. – №4. – С. 642-642.
- [104] Wan H. Study of irradiation induced surface pattern and structural changes in Inconel 718 alloy [Текст] / H.Wan, N.Si, Z. Zhao, J. Wang, Y. Zhang // Materials research express. – 2018. – Т. 5. – №. 5. – С. 1-8.
- [105] Komsa H.P. From point to extended defects in two-dimensional MoS₂: Evolution of atomic structure under electron irradiation [Текст] / H.P. Komsa,

- S. Kurasch, O. Lehtinen, U. Kaiser, A.V. Krasheninnikov // Physical Review B. – 2013. – T. 88. – №. 3. – C. 353-357.
- [106] Schneider S. Proton irradiation of germanium isotope multilayer structures at elevated temperatures [Текст] / S. Schneider, H. Bracht, M.C. Petersen, J.L. Hansen, A.N. Larsen // Journal of Applied Physics. – 2008. – T. 103. – №. 3. – C. 335-342.
- [107] Bracht H. Interstitial-mediated diffusion in germanium under proton irradiation [Текст] / H. Bracht, S. Schneider, J.N. Klug, C.Y. Liao, J.L. Hansen, E.E. Haller, C. Wundisch // Physical Review Letters. – 2009. – T. 103. – №. 25. – C. 26-29.
- [108] Ipatova I. Thermal evolution of the proton irradiated structure in tungsten–5 wt tantalum [Текст] / I. Ipatova, R.W. Harrison, D. Terentyev, S.E. Donnelly, E. Jimenez-Melero // Journal of Fusion Energy. – 2017. – T. 36. – №. 6. – C. 234-239.
- [109] Nitta N. Void formation and structure change induced by heavy ion irradiation in GaSb and InSb [Текст] / N. Nitta, T. Hasegawa, H. Yasuda, Y. Hayashi, T. Yoshiie, M. Taniwaki, H. Mori // Materials transactions. – 2010. – C. 1059-1063.
- [110] Mazey D.J. Observation of a partially-ordered void lattice in aluminium irradiated with 400 keV Al⁺ ions [Текст] / D.J. Mazey, S. Francis, J.A. Hudson // Journal of Nuclear Materials. – 1973. – T. 47. – №2. – C. 137-142.

- [111] Harrison R.W. Engineering self-organising helium bubble lattices in tungsten [Текст] / R.W. Harrison, G. Greaves, J.A. Hinks, S.E. Donnelly // Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-8.
- [112] Abe K. Neutron irradiation damage and void lattice formation in a molybdenum alloy TZM [Текст] / K. Abe, T. Masuyama, M. Satou, M.L. Hamilton, // Materials Transactions, JIM. – 1993. – Т. 34. – №. 11. – С. 1137-1142.
- [113] Harrison R.W. On the use of ion beams to emulate the neutron irradiation behaviour of tungsten [Текст] / R.W. Harrison // Vacuum. – 2019. – Т. 160. – С. 355-370.
- [114] Harrison R.W. On the use of ion beams to emulate the neutron irradiation behaviour of tungsten [Текст] / R.W. Harrison // Vacuum. – 2019. – Т. 160. – С. 355-370.
- [115] Lidiard A. B. The growth of interstitial clusters in graphite under irradiation [Текст] / A.B. Lidiard, R. Perrin //Philosophical Magazine. – 1966. – Т. 14. – №129. – С. 433-453.
- [116] Harrison R.W. On the use of ion beams to emulate the neutron irradiation behaviour of tungsten [Текст] / R.W. Harrison // Vacuum. – 2019. – Т. 160. – С. 355-370.
- [117] Rayaprolu R. Indentation testing on 3 MeV proton irradiated tungsten [Текст] / R. Rayaprolu, S. Moller, R. Abernethy, M. Rasinski, J.C. Haley, C. Linsmeier // Nuclear Materials and Energy. – 2020. – Т. 25. – С. 1-14.

- [118] Hollingsworth A. Comparative study of deuterium retention and vacancy content of self-ion irradiated tungsten [Текст] / A. Hollingsworth, M.F. Barthe, M.Y. Lavrantiev, P.M. Derlet, S.L. Dudarev, D.R. Mason, A. Morellec // Journal of Nuclear Materials. – 2022. – Т. 558. – С. 1-13.
- [119] Бугаев Л.А. Термокапиллярные явления и образование рельефа поверхности под воздействием пикосекундных лазерных импульсов [Текст] / Л.А. Бугаев, В.А. Лукошкин // Журнал технической физики. – 1988. – Т. 58. – №5. – С. 908-914.
- [120] Ly S. Resonance excitation of surface capillary waves to enhance material removal for laser material processing [Текст] / S. Ly, G. Guss, A.M. Rubenchik, W.J. Keller, N. Shen, R.A. Negres, J. Bude // Scientific Reports. – 2019. – Т. 9. – №. 1. – С. 1-9.
- [121] Tsibidis G.D. Dynamics of ripple formation on silicon surfaces by ultrashort laser pulses in subablation conditions [Текст] / G.D. Tsibidis, M. Barberoglou, P.A. Loukakos, E. Stratakis, C. Fotakis // Physical Review B. – 2012. – Т. 86. – №. 11. – С. 1-14.
- [122] Кузьмин Е.В. Микроструктурирование поверхности кремния при однократном облучении сдвоенным фемтосекундным лазерным импульсом [Текст] / Е.В. Кузьмин, Д.С.Поляков, А,А. Самохвалов, Г.Д. Шандыбина // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2019. – Т. 19. – №. 3. – С. 417-425.
- [123] Zheleznov V.Y. Modification of a germanium surface exposed to radiation of a nanosecond ultraviolet laser [Текст] / V.Y. Zheleznov, T.V. Malinsky, S.I.

- Mikolutsky, V.E. Rogalin, S.A. Filin, Y.V. Khomich, A.I. Ivanova // Russian Microelectronics. – 2021. – T. 50. – №. 8. – С. 649-656.
- [124] Liu X. Black silicon: fabrication methods, properties and solar energy applications [Текст] / X. Liu, P.R.Coxon, M. Peters, B. Hoex, J.M. Cole, D.J. Fray // Energy & Environmental Science. – 2014. – Т. 7. – №. 10. – С. 3223-3263.
- [125] Philip J.R. General method of exact solution of the concentration-dependent diffusion equation [Текст] / J.R. Phillip // Australian Journal of Physics. – 1960. – Т. 13. – С. 1-10.
- [126] Crank J. The mathematics of diffusion [Текст] / J. Crank // Clarendon Press, Oxford. – 1956. – Т. 624. – С. 48-56.
- [127] Fujita H. The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium, part I [Текст] / H. Fujita // Textile Research Journal. – 1952. – Т. 22. – №11. – С. 757-760.
- [128] Fujita H. The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium, part II [Текст] / H. Fujita // Textile Research Journal. – 1952. – Т. 22. – №12. – С. 823-827.
- [129] Sedov L.I. Similarity and dimensionality methods in mechanics [Текст] / L.I. Sedov // Boca Raton. – 1993. - 496 с.
- [130] Knight J.H. Solutions of the nonlinear diffusion equation: existence, uniqueness, and estimation [Текст] / J.H. Knight // Bulletin of the Australian Mathematical Society. - 1973. - Т. 9. - №3. - С. 477-478.

- [131] Ribeiro S.S. Analytical solution of the one dimensional nonlinear transient heat conduction problem using Green's functions [Текст] / S.S. Ribeiro, G.C. Oliveira, J.R.F. Oliveira, G. Guimaraes // Revista de Engenharia Termica. – 2021. – Т. 20. – №. 2. – С. 55-59.
- [132] Galaktionov V.A. On new exact blow-up solutions for nonlinear heat conduction equations with source and applications [Текст] / V.A. Galaktionov // Differential and Integral Equations. – 1990. – Т. 3. – №5. – С. 863-874.
- [133] Казаков А.Л. Точные решения в нелинейной модели теплопередачи [Текст] / А.Л. Казаков, П.А. Кузнецов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2020. – Т. 13. – №4. – С. 33-47.
- [134] Barannyk A.F. A Method for the Construction of Exact Solutions to the Nonlinear Heat Equation $Ut = (F(U)Ux)X + G(U)Ux + H(U)$ [Текст] / A.F. Barannyk, T.A. Barannyk, I.I. Yuryk // Ukrainian Mathematical Journal. – 2020. – Т. 71. – №11. – С. 1651-1663.
- [135] Polyanin A.D. Exact solutions of nonlinear heat-and mass-transfer equations [Текст] / A.D. Polyanin, A.I. Zhurov, A.V. Vyaz'min // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2000. – Т. 34. – №5. – С. 403-415.
- [136] Якимов А.С. Один метод решения нелинейного уравнения переноса [Текст] / А.С. Якимов // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2003. – Т. 6. – №. 1. – С. 154-162.
- [137] Галактионов В.А. О новых точных решениях параболических уравнений с квадратичными нелинейностями [Текст] / В.А. Галактионов, С.А. Посаш-

- ков // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1989. – Т. 29. – №4. – С. 497-506.
- [138] Галактионов В.А. Точные решения и инвариантные пространства для нелинейных уравнений градиентной диффузии [Текст] / В.А. Галактионов, С.А. Посашков // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1994. – Т. 34. – №3. – С. 373-383.
- [139] Галактионов В.А. Обобщенное разделение переменных для дифференциальных уравнений с полиномиальными нелинейностями [Текст] / В.А. Галактионов, С.А. Посашков, С.Р. Свирщевский // Дифференциальные уравнения. – 1995. – Т. 31. – №2. – С. 253-261.
- [140] Polyanin A.D. Methods of generalized and functional separation of variables in hydrodynamic and heat-and mass-transfer equations [Текст] / A.D. Polyanin, A.I. Zhurov // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2002. – Т. 36. – №3. – С. 201-213.
- [141] Polyanin A.D. Functional separation of variables in nonlinear PDEs: General approach, new solutions of diffusion-type equations [Текст] / A.D. Polyanin // Mathematics. – 2020. – Т. 8. – №1. – С. 90-128.
- [142] Parikh A.K. Generalized Separable Method to solve second order non-linear Partial Differential Equations [Текст] / A.K. Parikh // Indian Journal of Applied Research. – 2015. – Т. 5. – №3. – С. 263-269.
- [143] Ji F.Y. New variable separation solutions for the generalized nonlinear diffusion equations [Текст] / F.Y. Ji, S.L. Zhang // Chinese Physics B. – 2016. – Т. 25. – №3. – С. 1-7.

- [144] Barannyk A. Generalized separation of variables and exact solutions of nonlinear equations [Текст] / A. Barannyk, T. Barannyk, I. Yuryk // Ukrainian Mathematical Journal. – 2011. – Т. 62. – №. 12. - С 1852-1865.
- [145] Kazakov A.L. On exact solutions to a heat wave propagation boundary-value problem for a nonlinear heat equation [Текст] / A.L. Kazakov // Sibirskie Elektronnye Matematicheskie Izvestiya [Siberian Electronic Mathematical Reports]. – 2019. – Т. 16. – С. 1057-1068.
- [146] Hood S. On direct, implicit reductions of a nonlinear diffusion equation with an arbitrary function-generalizations of Clarkson's and Kruskal's method [Текст] / S. Hood // IMA journal of applied mathematics. – 2000. – Т. 64. – №3. – С. 223-244.
- [147] Qian S. Modification of the Clarkson–Kruskal direct method for a coupled system [Текст] / S. Qian, L. Tian // Chinese Physics Letters. – 2007. – Т. 24. – №10. – С. 2720-2723.
- [148] Barannyk A.F. A Method for the Construction of Exact Solutions to the Nonlinear Heat Equation $U_t = (F(U)U_x)_x + G(U)U_x + H(U)$ [Текст] / A.F. Barannyk, T.A. Barannyk, I.I. Yuryk // Ukrainian Mathematical Journal. – 2020. – Т. 71. – №.11. - С. 1651-1663.
- [149] Galaktionov V.A. Quasilinear heat conduction equation with source: blow-up, localization, symmetry, exact solutions, asymptotics, structures [Текст] / V.A. Galaktionov, V.A. Dorodnitsyn, G.G. Yelenin, S.P. Kurdyumov, A.A. Samarskii // Modern Mathematical Problems. New Achievements. – 1988. – Т. 28. – С. 95-206.

- [150] Polyanin A.D. Methods for solving nonlinear equations of mathematical physics and mechanics [Текст] / A.D. Polyanin, A.I. Zhurov, V.F. Zaitsev. - Phyzmathlit, Moscow, 2005. - 256 с.
- [151] Bluman G. $(\partial/\partial x) [a(u + b) - 2(\partial u/\partial x)] - (\partial u/\partial t) = 0$ [Текст] / G. Bluman, S. Kumei // J. Math. Phys. - 1980. - Т. 21. - С. 1019-1023.
- [152] Storm M.L. Heat conduction in simple metals [Текст] / M.L. Storm // Journal of Applied Physics. - 1951. - Т. 22. - №7. - С. 940-951.
- [153] King J.R. Some non-local transformations between nonlinear diffusion equations [Текст] / J.R. King // Journal of Physics A: Mathematical and General. - 1990. - Т. 23. - №23. - С. 321-349.
- [154] Fushchich W.I. On nonlocal symmetries of the nonlinear heat equation [Текст] / W.I. Fushchich, N.I. Serov, W.A. Tychynin, Т.К. Amerov // Proc. Acad. of Sci. Ukraine. - 1992. - №11. - С. 27-33.
- [155] Cherniha R. Symmetries, ansatze and exact solutions of nonlinear second-order evolution equations with convection terms, II [Текст] / R. Cherniha, M. Serov // European Journal of Applied Mathematics. - 2006. - Т. 17. - №5. - С. 597-605.
- [156] Tychynin V. New nonlocal symmetries of diffusion-convection equations and their connection with generalized hodograph transformation [Текст] / V. Tychynin // Symmetry. - 2015. - Т. 7. - №4. - С. 1751-1767.
- [157] Дородницын В.А. Об инвариантных решениях уравнения нелинейной теплопроводности с источником [Текст] / В.А. Дородницын // Журнал вы-

- числительной математики и математической физики. – 1982. – Т. 22. – №6.
– С. 1393-1400.
- [158] Dienes G.J. An estimate of the effect of radiation on the thermal conductivity of beryllium [Текст] / G.J. Dienes, A.C. Damask // Journal of Nuclear Materials. – 1961. – Т. 3. – №. 1. – С. 16-20.
- [159] Kh. B. Investigation of aluminum cladding of spent fuel elements off the ITR-200 reactor [Текст] / B. Kh, A.G. Krast, A.V. Laivinsh, Byalovzheskii, E.Yu. Tiliks // At. Energ. - 1969. - Т. 27. - №4. - С. 286–289.
- [160] Глен Д.В. Радиационные эффекты в твёрдых телах (в основном в металлах) [Текст] / Д.В. Глен // Успехи физических наук. – 1956. – Т. 60. – №11. – С. 445-563.
- [161] Broom T. Lattice defects and the electrical resistivity of metals [Текст] / T. Broom // Advances in Physics. – 1954. – Т. 3. – №9. – С. 26-83.
- [162] Braunstein R. Radiative transitions in semiconductors [Текст] / R. Braunstein // Physical Review. – 1955. – Т. 99. – №6. – С. 176-189.
- [163] Billington D.S. Effect of Nuclear Reactor Radiation on Metals [Текст] / D.S. Billington, S.Siegel // US Atomic Energy Commission, Technical Information Division.- 1950. – Т.58. - С. 847-852.
- [164] Geib I.G. Hardness of deuteron irradiated molybdenum [Текст] / I.G. Geib, R.E. Grace // Physical review.- one physics ellipsw, college PK, MD 20740-3844 USA: AMERICAN PHYSICAL SOC.- 1952. – Т. 86. – №4. – С. 643-643.
- [165] Xu C. The studies of irradiation hardening of stainless steel reactor internals under proton and xenon irradiation [Текст] / C. Xu, L. Zhang, W. Qian, J.

- Mei, X. Liu // Nuclear Engineering and Technology. – 2016. – Т. 48. – №3. – С. 758-764.
- [166] Xu C. Microstructural and Mechanical Properties of Nitrogen Ion Irradiated 316 Stainless Steel [Текст] / C. Xu, J. Liu, G. Luan, C. Dong // Nuclear Technology. – 2022. – С. 1-6.
- [167] Kapoor G. Microstructure-informed prediction and measurement of nanoindentation hardness of an Fe-9Cr alloy irradiated with Fe-ions of 1 and 5 MeV energy [Текст] / G. Kapoor, P. Chekhonin, C. Kaden, K. Vogel, F. Bergner // Nuclear Materials and Energy. – 2022. – Т. 30. – С. 1-9.
- [168] Oka H. Evaluation of multi-layered hardness in ion-irradiated stainless steel by nano-indentation technique [Текст] / H. Oka, Y. Sato, N. Hashimoto, S. Ohnuki // Journal of Nuclear Materials. – 2015. – Т. 462. – С. 470-474.
- [169] Jiang B. Proton irradiation effects on hardness and the volta potential of welding 308L duplex stainless steel [Текст] / B. Jiang, Q. Peng, Z. Jiao, A.A. Volinsky, L. Qiao // Micromachines. – 2018. – Т. 10. – №1. – С. 1-11.
- [170] Brabaender A.V. Registering hardness measurement of neutron-irradiated low-activation steels at high temperatures [Текст] / A.V. Brabaender, J. Bredl, H.C. Schneider, M. Kamlah // Fusion Engineering and Design. – 2019. – Т. 146. – С. 2734-2737.
- [171] Петкова А.П. Закономерности и структурно-физические механизмы низкотемпературного радиационного охрупчивания коррозионно-стойких конструкционных материалов [Текст]: дис..... докт. тех. наук: 05.02.01: за-

- щищена 23.01.04: утв. 8.10.04 / Петкова Ани Петрова. - Санкт-Петербург, 2003. - 396 с.
- [172] Николаенко В.А. Вклад γ -излучения в радиационное охрупчивание корпусной стали [Текст] / В.А. Николаенко, Е.А. Красиков, Д.Ю. Ерак, И.В. Бачучин // Атомная энергия. – 2009. – Т. 106. – №1. – С. 22-28.
- [173] Kotrechko S. Embrittlement of RPV metal under long-term irradiation: state-of-the-art and challenges [Текст] / S. Kotrechko // Procedia Structural Integrity. – 2018. – Т. 13. – С. 11-21.
- [174] Brumovsky M. Prediction of irradiation embrittlement in WWER-440 reactor pressure vessel materials [Текст] / M. Brumovsky, M. Kytka, L. Debarberis, F. Gillemot, A. Kryukov, M. Valo // Вопросы атомной науки и техники. - №6. – 2007.- С. 72-77.
- [175] Liu Y.C. Machine learning predictions of irradiation embrittlement in reactor pressure vessel steels [Текст] / Y.C. Liu, H. Wu, T. Mayeshiba, B. Afflerbach, R. Jacobs, J. Perry, G.R. Odette // npj Computational Materials. – 2022. – Т. 8. – №1. – С. 1-11.
- [176] Xiao X. Theoretical models for irradiation hardening and embrittlement in nuclear structural materials: a review and perspective [Текст] / X. Xiao, D. Terentyev, H. Chu, H. Duan // Acta Mechanica Sinica. – 2020. – Т. 36. – №2. – С. 397-411.
- [177] Fukuya K. Current understanding of radiation-induced degradation in light water reactor structural materials [Текст] / K. Fukuya // Journal of Nuclear Science and Technology. – 2013. – Т. 50. – №3. – С. 213-254.

- [178] Snead L.L. Limits on irradiation-induced thermal conductivity and electrical resistivity in silicon carbide materials [Текст] / L.L. Snead // Journal of Nuclear Materials. – 2004. – Т. 329. – С. 524-529.
- [179] Lebedev I.G. The electrical resistance of carbon graphite materials after neutron irradiation [Текст] / I.G. Lebedev // Atomic Energy. – 1997. – Т. 83. – №2. – С. 600-604.
- [180] Chejara N. Effect of neutron irradiation on the electric resistance of ADS related materials [Текст] / N. Chejara, S.K. Gupta, H.S. Palsania, N. Jakhar, D. Meena, N. Taghav, V. Kumar // Proceedings of the international conference on high energy radiation and applications: abstracts and souvenir. – 2017. – С. 57-58.
- [181] Patrick C. Studying thermal conductivity after irradiation [Текст] / C. Patrick // Scilight. – 2020. – Т. 2020. – №4. – С. 610-614.
- [182] Kazachkovskii O.D. Radiation swelling of materials [Текст] / O.D. Kazachkovskii // Atomic Energy. – 1996. – Т. 81. – №2. – С. 605-610.
- [183] Taller S. Predicting structural material degradation in advanced nuclear reactors with ion irradiation [Текст] / S. Taller, G. VanCoevering, B.D. Wirth, G.S. Was // Scientific reports. – 2021. – Т. 11. – №1. – С. 1-14.
- [184] Sojak S. Bubble Swelling in Ferritic/Martensitic Steels Exposed to Radiation Environment with High Production Rate of Helium [Текст] / S. Sojak, J. Degmovz, P. Noga, V. Krsjak, V. Slugan, T. Shen // Materials. – 2021. – Т. 14. – №11. – С. 1-7.

- [185] Vilenskij O.Y. Mathematical models of radiation-induced swelling and creep of casing steel EP-450 of fast sodium reactors active zone assembly [Текст] / O.Y. Vilenskij, A.V. Ryabtsov // Voprosy Atomnoj Nauki i Tekhniki. Seriya: Yaderno-Reaktornye Konstanty. – 2017. – С. 199-209.
- [186] Popovych R.O. New results on group classification of nonlinear diffusion–convection equations [Текст] / R.O. Popovych, N.M. Ivanova // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2004. – Т. 37. – №30. – С. 1-20.
- [187] Moitsheki R.J. Classical Lie point symmetry analysis of nonlinear diffusion equations describing thermal energy storage [Текст] / R.J. Moitsheki, O.D. Makinde // Applied mathematics and computation. – 2010. – Т. 216. – №1. – С. 251-260.
- [188] Boostani M. Application of Homotopy Perturbation Method (HPM) for Nonlinear Heat Conduction Equation in Cylindrical Coordinates [Текст] / M. Boostani, S.A.H. Karimi. // 3rd International Conference on Recent Innovations in Chemistry and Chemical Engineering. - 2016. - С. 1-7.
- [189] Yaparova N. Method for solving the problem of nonlinear heating a cylindrical body with unknown initial temperature [Текст] / N. Yaparova // AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2017. – Т. 1895. – №1. – С. 110-111.
- [190] Ali S.M. A lie symmetry classification of a nonlinear fin equation in cylindrical coordinates [Текст] / S.M. Ali, A.H. Bokhari, F.D. Zaman // Abstract and Applied Analysis. – Hindawi, 2014. – Т. 2014. - С. 1-10

- [191] Gheitaghy A.M. Solving the Nonlinear Heat Conduction in a Spherical Coordinate with Electrical Simulation [Текст] / A.M. Gheitaghy, H. Saffari, G.Q. Zhang // International Journal of Mechanical and Mechatronics Engineering. – 2016. – Т. 10. – №3. – С. 584-589.
- [192] Kevorkian J. Multiple-scale expansions for partial differential equations [Текст] / J. Kevorkian, J.D. Cole // Multiple Scale and Singular Perturbation Methods. – Springer, New York. - 1996. – С. 522-620.
- [193] Найфэ А. Методы возмущений [Текст] / А. Найфэ. - М.: Мир, 1976. – Т.456. - 456 с.
- [194] Эрдейи А. Асимптотические разложения [Текст] / А. Эрдейи // Физматгиз, 1962. - 128 с.
- [195] Федорюк М В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений [Текст] / М.В. Федорюк. – Москва, 1983. – 354 с.
- [196] Ахметов Р.Г. Асимптотическое разложение решения задачи конвективной диффузии в следе за сферической частицей [Текст] / Р.Г. Ахметов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006. – Т. 46. – №10. – С. 1822-1837.
- [197] Su F. A multi-scale analysis for advection-diffusion equation with rapidly oscillatory coefficients [Текст] / F. Su, Z. Xu // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing. - 2018. – Т. 423. – №1. – С. 1-7.

- [198] Konate A. A multiscale method for a Convection-Diffusion equation [Текст] / A. Konate // HAL . - 2018. - С. 1-12.
- [199] Жиков В.В. Асимптотика фундаментального решения для уравнения диффузии в периодической среде на больших временах и ее применение к оценкам теории усреднения [Текст] / В.В. Жиков, С.Е. Пастухова // Современная математика. Фундаментальные направления. – 2017. – Т. 63. – №2. – С. 223-246.
- [200] Liu T. A wavelet multiscale method for the inverse problem of a nonlinear convection–diffusion equation [Текст] / T. Liu // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2018. – Т. 330. – С. 165-176.
- [201] Vasilev A.O. Multiscale model reduction for neutron diffusion equation [Текст] / A.O. Vasilev, D.A. Spiridonov, A.V. Avvakumov // Математические заметки СВФУ. – 2021. – Т. 28. – №2. – С. 111-120.
- [202] Zhuravlev V.M. Superposition principle and exact solutions of a nonlinear diffusion equation [Текст] / V.M. Zhuravlev // Theoretical and Mathematical Physics. – 2015. – Т. 183. – №1. – С. 478-490.
- [203] Khare A. Linear superposition in nonlinear equations [Текст] / A. Khare, U. Sukhatme // Physical review letters. – 2002. – Т. 88. – №24. – С. 1-8.
- [204] Liu Y. Linear superposition solutions to nonlinear wave equations [Текст] / Y. Liu // Chinese Physics B. – 2012. – Т. 21. – №11. – С. 1-6.
- [205] Журавлев В.М. Многомерные квазилинейные уравнения первого порядка и многозначные решения уравнений гиперболического и эллиптического

- типов [Текст] / В.М. Журавлев // Теоретическая и математическая физика. – 2016. – Т. 186. – №3. – С. 371-385.
- [206] Журавлев В.М. Многомерные нелинейные уравнения Клейна–Гордона и ривертоны [Текст] / В.М. Журавлев // Теоретическая и математическая физика. – 2018. – Т. 197. – №3. – С. 356-370.
- [207] Журавлев В.М. Многомерные нелинейные волновые уравнения и комплексные квазилинейные уравнения первого порядка [Текст] / В.М. Журавлев // Пространство, время и фундаментальные взаимодействия. – 2013. – №4. – С. 56-67.
- [208] Журавлев В.М. Многомерные нелинейные волновые уравнения с многозначными решениями [Текст] / В.М. Журавлев // Теоретическая и математическая физика. – 2013. – Т. 174. – №2. – С. 272-284.
- [209] Журавлев В.М. Точные решения уравнения нелинейной диффузии $u_t = \Delta \ln u + \lambda u$ в двумерном координатном пространстве [Текст] / В.М. Журавлев // Теоретическая и математическая физика. – 2000. – Т. 124. – №2. – С. 265-278.
- [210] Ghoniem N.M. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials [Текст] / N.M. Ghoniem, D. Walgraef, S.J. Zinkle // Journal of computer-aided materials design. – 2001. – Т. 8. – №1. – С. 1-38.
- [211] Doyle P.J. Modeling the impact of radiation-enhanced diffusion on implanted ion profiles [Текст] / P.J. Doyle, K.M. Benensky, S.J. Zinkle // Journal of Nuclear Materials. – 2018. – Т. 509. – С. 168-180.

- [212] Edmondson P.D. Helium bubble distributions in a nanostructured ferritic alloy [Текст] / P.D. Edmondson, C.M. Parish, Y. Zhang, A. Hallen, M.K. Miller // Journal of Nuclear Materials. – 2013. – Т. 434. – №1-3. – С. 210-216.
- [213] Naundorf V. Diffusion in metals and alloys under irradiation [Текст] / V. Naundorf // International Journal of Modern Physics B. – 1992. – Т. 6. – №18. – С. 2925-2986.
- [214] Barbu A. Cluster dynamics modeling of materials: Advantages and limitations [Текст] / A. Barbu, E. Clouet // Solid State Phenomena. – Trans Tech Publications Ltd, 2007. – Т. 129. – С. 51-58.
- [215] Nastar M. Thermodynamic model for lattice point defect-mediated semi-coherent precipitation in alloys [Текст] / M. Nastar, L.T. Belkacemi, E. Meslin, M. Loyer-Prost // Communications Materials. – 2021. – Т. 2. – №1. – С. 1-11.
- [216] Martinez E. Point defect evolution under irradiation: finite size effects and spatio-temporal correlations [Текст] / E. Martinez, F. Soisson, M. Nastar // Journal of Nuclear Materials. – 2020. – Т. 539. – С. 1-13.
- [217] Ozturk A. Surface and size effects on the behaviors of point defects in irradiated crystalline solids [Текст] / A. Ozturk, M. Gencturk, K. Ahmed // Frontiers in Materials. – 2021. – С. 313-336.
- [218] Davis S. A model for defect formation in materials exposed to radiation [Текст] / S. Davis, F. Gonzales-Cataldo, G. Gutierrez, G. Avaria, B. Bora, J. Jain, L. Soto // Matter and Radiation at Extremes. – 2021. – Т. 6. – №1. – С. 1-9.

- [219] Aripov M. An asymptotic analysis of a self-similar solution for the double nonlinear reaction-diffusion system [Текст] / M. Aripov, S. Sh // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2015. – Т. 6. – №6. – С. 793-802.
- [220] Polyanin A.D. Functional separable solutions of nonlinear convection–diffusion equations with variable coefficients [Текст] / A.D. Polyanin // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2019. – Т. 73. – С. 379-390.
- [221] Gordon P.V. Self-similarity and long-time behavior of solutions of the diffusion equation with nonlinear absorption and a boundary source [Текст] / P.V. Gordon, C.B. Muratov // Networks and heterogeneous media. - 2012. - Т. 7. - №4ю - С. 767-780.
- [222] Barna I.F. Advanced analytic self-similar solutions of regular and irregular diffusion equations [Текст] / I.F. Barna, L. Matyas // Mathematics. – 2022. – Т. 10. – №18. – С. 1-17.
- [223] Rzeszut W. Linearizability and nonlocal superposition for nonlinear transport equation with memory [Текст] / W. Rzeszut, O. Tertyshnyk, V. Tychynin, V. Vladimirov // Reports on Mathematical Physics. – 2013. – Т. 72. – №2. – С. 235-252.
- [224] Polyanin A.D. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems [Текст] / A.D. Polyanin, V.F Zaitsev. – Chapman and Hall/CRC, 2012. - 1912 с.
- [225] Tychynin V.A. Nonlocal symmetries and formulae for generation of solutions for a class of diffusion–convection equations [Текст] / V.A. Tychynin, O.V.

- Petrova // Journal of mathematical analysis and applications. – 2011. – Т. 382. – №1. – С. 20-33.
- [226] Costantini G. Periodic structures induced by normal-incidence sputtering on Ag (110) and Ag (001): Flux and temperature dependence [Текст] / G. Costantini, S. Rusponi, F.B. de Mongeot, C. Borango, U. Valbusa // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2001. – Т. 13. – №26. – С. 5875-5891.
- [227] Мирзоев Ф.Х. Деформационная неустойчивость и генерация поверхностных упорядоченных структур при лазерном воздействии [Текст] / Ф.Х. Мирзоев // Квантовая электроника. – 1996. – Т. 23. – №9. – С. 827-830.
- [228] Винценц С.В. Самоорганизация лазерноиндуцированных точечных дефектов на начальных стадиях неупругих фотодеформаций германия [Текст] / С.В. Винценц, А.В. Зайцева, Г.С. Плотников // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37. – №2. – С. 134-141.
- [229] Yang Z. Dislocation loop formation under various irradiations of laser and/or electron beams [Текст] / Z. Yang, S. Watanabe // Acta materialia. – 2013. – Т. 61. – №8. – С. 2966-2972.
- [230] Dudarev S.L. Spatial ordering of nano-dislocation loops in ion-irradiated materials [Текст] / S.L. Dudarev, K. Arakawa, X. Yi, Z. Yao, M.L. Jenkins, M.R. Gilbert, P.M. Derlet // Journal of Nuclear Materials. – 2014. – Т. 455. – №1-3. – С. 16-20.
- [231] Brimbal D. Cluster dynamics modeling of the effect of high dose irradiation and helium on the microstructure of austenitic stainless steels [Текст] / D.

- Brimbal, L. Fournier, A. Barbu // Journal of Nuclear Materials. – 2016. – Т. 468. – С. 124-139.
- [232] Callisti M. Bubbles formation in helium ion irradiated Cu/W multilayer nanocomposites: Effects on structure and mechanical properties [Текст] / М. Callisti, М. Karlik, Т. Polcar // Journal of nuclear materials. – 2016. – Т. 473. – С. 18-27.
- [233] Журавлев В.М. Многозначные решения многомерных линейных уравнений теплопроводности и ривертоны [Текст] / В.М. Журавлев, В.М Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2021. - №2. - С. 90-104.
- [234] Матвеев А.Н. Молекулярная физика [Текст] / А.Н. Матвеев / М.: Высшая школа, 1981. - 400 с.
- [235] Скотт Э. Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур [Текст] / Э. Скотт / Физматлит, 2007. - 560 с.
- [236] Абловиц М. [Текст] / Солитоны и метод обратной задачи / М. Абловиц / М.:Мир, 1987. - 479 с.
- [237] Бхатнагар П. Нелинейные волны в одномерных диспергирующих системах [Текст] / П. Бхатнагар / М.: Мир, 1983. - 136 с.
- [238] Уизем Д. Линейные и нелинейные волны [Текст] / Д. Уизем / М.: Мир, 1977. - 624 с.
- [239] Дородницын В.А. Групповые свойства уравнения теплопроводности в двумерном и трехмерном случаях [Текст] / В.А. Дородницын, И.В. Князева,

- С.Р. Свирцевский // Дифференциальные уравнения. - 1983. - Т. 19. - №7. - С. 1215–1223.
- [240] Журавлев В.М. Метод обобщенных подстановок Коула-Хопфа и новые примеры линеаризуемых нелинейных эволюционных уравнений [Текст] / В.М.Журавлев // ТМФ. - 2009. - Т. 158. - №1. - С. 58-71.
- [241] Журавлев В.М. Метод обобщенных подстановок Коула-Хопфа в размерности $1+2$ и интегрируемые модели двумерных течений сжимаемой жидкости [Текст] / В.М. Журавлев, Д.А. Зиновьев // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т. 88. - №3. - С. 194-197.
- [242] Zhuravlev V.M. The Application of Generalized Cole-Hopf Substitutions in Compressible-Fluid Hydrodynamics [Текст] / V.M. Zhuravlev, D.A. Zinov'ev // Physics of Wave Phenomena. - 2010. - Т. 18. - №4. - С. 245–250.
- [243] Журавлев В.М Многофункциональные подстановки и солитонные решения интегрируемых нелинейных уравнений [Текст] / В.М. Журавлев // Известия вузов. Поволжский регион. Серия физико-математическая. - 2019. - №3.- С. 93-119.
- [244] Журавлев В. М. Об условиях возникновения регулярных структур в конденсированных средах под действием внешнего излучения [Текст] / В. М. Журавлев, И.О.Золотовский, В. М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – №3. – С. 144–162.
- [245] Журавлев В.М. Лазерно-индуцированная генерация поверхностных периодических структур в средах с нелинейной диффузией [Текст] / В.М. Жу-

- равлев, И.О. Золотовский, Д.А. Коробко, В.М. Морозов, В.В. Светухин, И.О. Явтушенко, М.С. Явтушенко // ФТТ. - 2017. - №12. - С. 2291-2998.
- [246] Беллман Р. Введение в теорию матриц [Текст] / Р. Беллман. - Москва : Мир, 1969.-367 с.
- [247] Zhuravlev V.M. Multivalued solutions of multidimensional linear equations of heat conduction and rivertons [Текст] / V.M. Zhuravler, V.M. Morozov // Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki. - 2021. - №2. - С. 90–104.
- [248] Коротеев Н.И. Физика мощного лазерного излучения [Текст] / Н.И. Коротеев, И.Л. Шумай. - Наука, 1991. - 309 с.
- [249] Журавлев В.М. Нелинейные волны в многокомпонентных системах с дисперсией и диффузией [Текст] / В.М. Журавлев. - Изд. УлГУ, 2001. - 252 с.
- [250] Захарьев Б.Н. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи [Текст] / Б.Н. Захарьев, А.А, Сузько. - М.: Энергоатомиздат, 1985. - 224 с.
- [251] Журавлев В.М. Нелинейные интегрируемые модели физических процессов. Метод Функциональных подстановок [Текст] / В.М. Журавлев. - Изд. УлГУ, 2020. - 182 с.
- [252] Журавлев В.М. Нелинейные волновые уравнения и условия совместности полиномиальных дифференциальных соотношений [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2023. - №2. - С. 1-15.

- [253] Морозов В.М. Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией [Текст] / В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2022. - №2. - С. 99-133.
- [254] Галактионов В.А. Квазилинейное уравнение теплопроводности с источником: обострение, локализация, симметрия, точные решения, асимптотики, структуры [Текст] / В.А. Галактионов, В.А. Дородницын, Г.Г. Еленин, С.П. Курдюмов, А.А. Самарский // Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. ма. Нов. достиж. - 1986. - Т. 28. - С. 95-205.
- [255] Wang M. N-dimensional auto-Backlund transformation and exact solutions to n-dimensional Burgers system [Текст] / M. Wang, J. Zhang, X. Li // Applied Mathematics Letters. - 2017. - №63. - С. 46-52.
- [256] Rodriguez A. Non-uniqueness of solutions of nonlinear heat equations of fast diffusion type [Текст] / A. Rodriguez, J.L. Vazquez // Annales de L'I. H. P., section C. - 1995. - Т. 12. - №.2 - С. 173-200.
- [257] Bluman G. On the remarkable nonlinear diffusion equation $\partial/\partial x[a(u + b)^{-2}(\partial u/\partial x)] - (\partial u/\partial t) = 0$ [Текст] / G. Bluman, S. Kumei // J. Math. Phys. - 1980. - №.21 - С. 1019-1023.
- [258] Herrero M.A. A limit case in nonlinear diffusion [Текст] / M.A. Herrero // Nonlinear Analysis - №13. - С. 611-628.
- [259] Rosen G. Nonlinear heat conduction in solid H_2 [Текст] / G. Rosen // Phys. Rev. B. - 1979. - №.19 - С. 2398-2399.

- [260] Savateev E.G. Inverse problem for the nonlinear heat equation with the final overdetermination [Текст] / E.G. Savateev, R. Riganti // Mathematical and computer modeling. - 1995. - Т. 22. - №.1 - С. 29-43.
- [261] Журавлев В.М. Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2022. - №2. - С. 81-98.
- [262] Журавлев В.М. Интегрируемые динамические цепочки и метод функциональных подстановок [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2019. - №1. - С. 78-104.
- [263] Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях [Текст] / В.П. Маслов. - Наука, 1977. - 584 с.
- [264] Маслов В.П. Метод комплексного роста в задаче многих частиц и квантовой теории поля [Текст] / В.П. Маслов, О.Ю. Шведов. - URSS, 2000. - 360 с.
- [265] Журавлев В.М. Многозначные решения уравнений диффузии и гидродинамика [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2018. - №3. - С. 87-110.
- [266] Журавлев В.М. Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений [Текст] /

В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений.
Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2022. - №2. - С. 81-
98.

Список опубликованных работ по теме диссертации

Статьи:

1. Журавлев В. М. Об условиях возникновения регулярных структур в конденсированных средах под действием внешнего излучения [Текст] / В. М. Журавлев, И.О.Золотовский, В. М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – №3. – С. 144–162.

2. Журавлев В.М. Лазерно-индуцированная генерация поверхностных периодических структур в средах с нелинейной диффузией [Текст] / В.М. Журавлев, И.О. Золотовский, Д.А. Коробко, В.М. Морозов, В.В. Светухин, И.О. Явтушенко, М.С. Явтушенко // ФТТ. - 2017. - №12. - С. 2291-2998.

3. Журавлев В.М. Многозначные решения уравнений диффузии и гидродинамика [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2018. – №3. – С. 87–110.

4. Журавлев В.М. Интегрируемые динамические цепочки и метод функциональных подстановок [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2019. – №1. – С. 78–104.

5. Журавлев В.М. Многозначные решения многомерных линейных уравнений теплопроводности и ривертонны [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Моро-

зов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2021. - №2. - С. 90-104.

6. Журавлев В.М. Представление Лакса с операторами первого порядка для новых нелинейных уравнений типа КдВ [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2021. - №4. - С. 178-191.

7. Журавлев В.М. Нелинейные функциональные подстановки и преобразования для нелинейных диффузионных и волновых уравнений [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2022. - №2. - С. 81-98.

8. Морозов В.М. Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией [Текст] / В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2022. - №2. - С. 99-133.

9. Журавлев В.М. Нелинейные волновые уравнения и условия совместности полиномиальных дифференциальных соотношений [Текст] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. - 2023. - №2. - С. 91-107.

Материалы конференций:

1. Морозов В.М. Моделирование процессов образования периодических структур в конденсированных средах с нелинейной диффузией [Текст] / В.М. Морозов, В.М. Журавлев. - Всероссийская конференция по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники: тезисы докладов, 2015.

- 261 с.

2. Журавлев В.М. О многозначных решениях двумерных линейных параболических уравнений [Электронный ресурс] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании: материалы XIII Международной научной конференции. - Режим доступа: <https://conf.svmo.ru/files/deamm2017/papers/paper46.pdf> (дата обращения: 06.07.2023).

3. Морозов В.М. Многозначные решения многомерных параболических уравнений [Электронный ресурс] / В.М. Морозов, В.М. Журавлев // Материалы XXIV международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов". - Режим доступа: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2017/data/section_31_10996.htm (дата обращения 09.10.2023).

4. Морозов В.М. Нелинейные функциональные подстановки и автоволны в среде с быстрой диффузией [Текст] / В.М. Морозов, В.М. Журавлев. - Международный научный семинар "Нелинейные модели в механике, статистике, теории поля и космологии" GRACOS-18. Сборник материалов, 2018. - 176 с.

5. Морозов В.М. Автоволны в среде с быстрой диффузией и метод функциональных подстановок [Электронный ресурс] / В.М. Морозов // Материалы XXV международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов". - Режим доступа: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2018/data/section_34_13550.htm (дата обращения 09.10.2023).

6. Морозов В.М. Об условиях возникновения периодических структур в конденсированных средах под облучением [Электронный ресурс] / В.М. Морозов

// Материалы XXVI международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов". - Режим доступа: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2019/data/section_33_16300.htm (дата обращения 09.10.2023).

7. Журавлев В.М. Условия роста периодических структур под облучением в модели «Быстрая релаксация-медленная диффузия» [Электронный ресурс] / В.М. Журавлев, В.М. Морозов // Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании: сборник материалов XV Международной научной конференции. (Саранск, 15-18 июля 2021 г.). - Режим доступа: <https://conf.svmo.ru/files/2021/papers/paper19.pdf> (дата обращения 28.11.2023).

8. Морозов В.М. . Метод нелинейных функциональных подстановок для уравнений нелинейной диффузии и волновых уравнений [Электронный ресурс] / В.М. Морозов, В.М. Журавлев // Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании: сборник материалов XVI Международной научной конференции. (Саранск, 17-20 августа 2023 г.). – Режим доступа: <https://conf.svmo.ru/files/2023/papers/paper26.pdf> (дата обращения 28.11.2023).

9. Морозов В.М. Модель роста когерентных структур в среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией [Электронный ресурс] / В.М. Морозов, В.М. Журавлев // Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании: сборник материалов XVI Международной научной конференции. (Саранск, 17-20 августа 2023 г.). – Режим доступа: <https://conf.svmo.ru/files/2023/papers/paper27.pdf> (дата обращения 28.11.2023).

Приложения

Приложение 1

Для вычисления интегралов в правой части решения для $U_1 - V_1$ найдем чему равен вспомогательный интеграл:

$$I_n = \int V_0^n dt, \quad n \geq 1. \quad (244)$$

Выполним замену переменной $b + a/(1 - Be^{-a\gamma t}) = y$, тогда интеграл примет вид:

$$I_n = \int \left(b + \frac{a}{1 - Be^{-a\gamma t}} \right)^n dt = -\frac{1}{\gamma} \int y^n \frac{dy}{(y-b)(y-c)}, \quad (245)$$

где $c = b + a$. Преобразуем его следующим образом:

$$I_n = -\frac{1}{\gamma} \int y^n \frac{dy}{(y-b)(y-c)} = \frac{1}{\gamma a} \int \frac{y^n dy}{y-b} - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{y^n dy}{y-c}.$$

Рассмотрим отдельно первое слагаемое, в котором сделаем замену $\xi = y/b$:

$$\begin{aligned} \int \frac{y^n dy}{y-b} &= b^n \int \frac{\xi^n - 1}{\xi - 1} d\xi + b^n \int \frac{dy}{y-b} = \\ &= b^n \ln |y-b| + b^n \int \sum_{s=1}^n \xi^{s-1} d\xi = b^n \ln |y-b| + \sum_{s=1}^n \frac{b^{n-s} y^s}{s}, \end{aligned}$$

где использовано выражение для суммы геометрической прогрессии.

Аналогично вычисляется и второй интеграл в (245):

$$\int \frac{y^n dy}{y-c} = c^n \ln |y-c| + \sum_{s=1}^n \frac{c^{n-s} y^s}{s}.$$

В результате имеем:

$$I_n = \frac{b^n}{\gamma a} \ln |y - b| - \frac{c^n}{\gamma a} \ln |y - c| + \frac{1}{\gamma a} \sum_{s=1}^n (b^{n-s} - c^{n-s}) \frac{y^s}{s}.$$

Первое слагаемое не содержит растущих при $t \rightarrow \infty$ слагаемых:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \ln |y - b| = \lim_{t \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{a}{1 - Be^{-\gamma at}} \right| = \ln |a|.$$

Второе же принимает вид:

$$-\frac{c^n}{\gamma a} \ln |y - c| = -\frac{c^n}{\gamma a} \ln \left| \frac{aBe^{-\gamma at}}{1 - Be^{-\gamma at}} \right| = c^n t - \frac{c^n}{\gamma a} \ln \left| \frac{aB}{1 - Be^{-\gamma at}} \right|,$$

откуда видно, что оно содержит линейно растущий член.

Окончательно получаем следующее выражение для I_n :

$$I_n = A^n t + R_n, \quad (246)$$

где учтено, что $c = a + b = A(\mathbf{X}, T)$, а остаточный член $R_n(\mathbf{X}, t, T)$ не содержит растущих по t слагаемых:

$$R_n = -\frac{A^n}{\gamma a} \ln B + \frac{c^n - b^n}{\gamma a} \ln |V_0 - b| + \sum_{s=1}^n \frac{b^{n-s} - c^{n-s}}{\gamma a s} V_0^s, \quad n \geq 1;$$

$$R_0 = 0.$$

Для дальнейших вычислений удобнее записать остаточный член в такой

форме:

$$R_n = -\frac{A^n}{\gamma a} \ln B + \frac{c^n - b^n}{\gamma a} \ln |V_0 - b| + \\ + \sum_{s=0}^n \frac{b^{n-1-s} - c^{n-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1} - \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a(n+1)} V_0^{n+1}.$$

Полученная формула в частном случае $n = 0$ дает $R_0 = -\frac{1}{\gamma a} \ln B$, однако правильный результат $R_0 = 0$. Тем не менее формулу для R_n можно использовать в том числе и при $n = 0$, т.к. выражения, содержащие интегралы, определены с точностью до функции медленных переменных.

Для вычисления первого интеграла в правой части (??) разложим функцию $F_v(u, v)$ в ряд Тейлора по обеим переменным и используем выражение (246) для I_n :

$$\int F_v(U_0, V_0) dt = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \int V_0^i U_0^k dt = \\ = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} I_{i+j} = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} \times \\ \times (A^{i+j} t + R_{i+j}) = F_v \left(\frac{\nu^2}{A} - \nu^2, A \right) t + W_v(\mathbf{X}, t, T),$$

где

$$W_v(\mathbf{X}, t, T) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} R_{i+j}$$

и учтено, что $U_0 = V_0 + q$, $q = \frac{\nu^2 - A^2}{A} - \nu^2$.

Аналогично вычисляется интеграл от $F_i(u, v)$.

Введем обозначение $\delta F(x, y) = F_i(x, y) - F_v(x, y)$.

В решениях в первом порядке функции F_i , F_v входят в интегралы в виде разности $F_i(U_0, V_0) - F_v(U_0, V_0)$, поэтому удобнее вычислить чему равна величина $\delta W = W_i - W_v$:

$$\begin{aligned} \delta W = & \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[-\frac{A^{i+j}}{\gamma a} \ln B + \right. \\ & + \frac{c^{i+j} - b^{i+j}}{\gamma a} \ln |V_0 - b| + \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1} - \\ & \left. - \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1} \right] = w_0 \ln B + w_1 \ln |V_0 - b| + \hat{S}_1 V_0^{s+1} - \hat{S}_0 V_0^{i+j+1}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} w_0(\mathbf{X}, T) &= -\frac{\delta F(q+A, A)}{\gamma a}, \quad w_1(\mathbf{X}, T) = \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+b, b)}{\gamma a}, \\ \hat{S}_1 V_0^{s+1} &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \times \\ & \times \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1}, \\ \hat{S}_0 V_0^{i+j+1} &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_i^{[k,i]}(0,0) - F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1} - c^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1}. \end{aligned}$$

Приложение 2

Далее во всех выкладках полагается $n \geq 1$.

Рассмотрим вычисление интеграла следующего типа:

$$Q_1(n) = \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s [C(\mathbf{X})V_0^n(\mathbf{X}, \zeta)] d\zeta. \quad (247)$$

В (247) оператор Лапласа нельзя напрямую вынести за знак интеграла. Чтобы

этого добиться выполним замену переменной $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}'$ в функциях на которые действует оператор Лапласа:

$$\begin{aligned} & \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s [C(\mathbf{X})V_0^n(\mathbf{X}, \zeta)] d\zeta = \\ & = \Delta'_s [C(\mathbf{X}') \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0^n(\mathbf{X}', \zeta) d\zeta] \Big|_{\mathbf{X}'=\mathbf{X}}. \end{aligned}$$

После раскрытия скобок под интегралом вынесем коэффициенты, не зависящие от ζ :

$$\begin{aligned} Q_1(n) = & \Delta_s [C(\mathbf{X})J_2(n, \mathbf{X}, \zeta)] - 2B(\mathbf{X})\Delta_s [C(\mathbf{X})J_1(n, \mathbf{X}, \zeta)] + \\ & + B^2(\mathbf{X})\Delta_s [C(\mathbf{X})J_0(n, \mathbf{X}, \zeta)], \end{aligned}$$

где

$$J_k(n) = \int \frac{V_0^n}{\zeta^k} d\zeta.$$

Для получения условия отсутствия секулярных членов в уравнении (217) во всех интегралах достаточно вычислить только линейные по t ($\ln \zeta$) члены. Поэтому во всех результатах ниже после знака равно будут стоять выражения с точностью до остаточного члена, не растущего по t .

Выпишем чему равны интегралы $J_k(n)$ с точностью до членов, не растущих по t :

$$J_0(n) = 0,$$

$$J_1(n) = A^n(\mathbf{X}) \ln \zeta,$$

$$J_2(n) = na(\mathbf{X})A^{n-1}(\mathbf{X})B(\mathbf{X}) \ln \zeta.$$

В итоге получаем такое выражение:

$$Q_1(n) = \Delta_s [nC(\mathbf{X})a(\mathbf{X})A^{n-1}(\mathbf{X})B(\mathbf{X})] \ln \zeta - 2B(\mathbf{X})\Delta_s [C(\mathbf{X})A^n(\mathbf{X})] \ln \zeta.$$

Вычисление интегралов $Q_2(n)$ и Q_3 аналогично приведенному выше:

$$\begin{aligned} Q_6(n) &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0^n(\mathbf{X}, \zeta) d\zeta = J_2 - 2B(\mathbf{X})J_1 = \\ &= na(\mathbf{X})A^{n-1}(\mathbf{X})B(\mathbf{X}) - 2B(\mathbf{X})A^n(\mathbf{X}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_2(n) &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\mathbf{X}, \zeta) \Delta_s [C(\mathbf{X})V_0^n(\mathbf{X}, \zeta)] d\zeta = \\ &= \Delta'_s [C(\mathbf{X}') \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} \left(b(\mathbf{X}) - \frac{a(\mathbf{X})}{1 - B(\mathbf{X})\zeta} \right) V_0^n(\mathbf{X}', \zeta) d\zeta] \Bigg|_{\mathbf{X}'=\mathbf{X}} = \\ &= A(\mathbf{X})\Delta_s [C(\mathbf{x})na(\mathbf{X})A^{n-1}(\mathbf{X})B(\mathbf{X})] - B(\mathbf{X}) [b(\mathbf{X}) + A(\mathbf{X})] \Delta_s [C(\mathbf{x})A^n]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_3 &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\mathbf{X}, \zeta) \Delta_s [C(\mathbf{X}) \ln |V_0(\mathbf{X}, \zeta) - b(\mathbf{X})|] d\zeta = \\ &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\mathbf{X}, \zeta) \Delta_s [C(\mathbf{X}) \ln a(\mathbf{X}) - C(\mathbf{X}) \ln |1 - B(\mathbf{X})\zeta|] d\zeta = \\ &= \Delta_s [C(\mathbf{X}) \ln a(\mathbf{X})] (J_2 - 2BJ_1) - \Delta_s C(\mathbf{X}) \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\mathbf{X}, \zeta) \times \\ &\times \ln |1 - B(\mathbf{X})\zeta| d\zeta + [C(\mathbf{X})\Delta_s B(\mathbf{X}) + 2\nabla C(\mathbf{X})\nabla B(\mathbf{X})] J_1 = \\ &= A(\mathbf{X})\Delta_s [C(\mathbf{X})B(\mathbf{X})] - [A(\mathbf{X}) + b(\mathbf{X})] \Delta_s [C(\mathbf{x}) \ln a(\mathbf{X})] B(\mathbf{X}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_4 &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} (1 - V_0(\mathbf{X}, \zeta)) \int V_0(X, Y, Z', \zeta) dZ' d\zeta = \\ &= \int \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} \left(1 - b(\mathbf{X}) - \frac{a(\mathbf{X})}{1 - B(\mathbf{X})\zeta} \right) V_0(X, Y, Z', \zeta) d\zeta dZ' = \\ &= [1 - A(\mathbf{X})] \int a(\mathbf{X}')B(\mathbf{X}')dZ' + [A(\mathbf{X}) + b(\mathbf{X}) - 2] \int A(\mathbf{X}')dZ' B(\mathbf{X}). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q_5 &= \int V_0^n(\mathbf{X}, \zeta) d\zeta = 0. \\
Q_7 &= \int \frac{(1 - B(\mathbf{X})\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\mathbf{X}, \zeta) \ln |V_0(\mathbf{X}, \zeta) - b(\mathbf{X})| d\zeta = \\
&= A(\mathbf{X}) - (A(\mathbf{X}) + b(\mathbf{X})) \ln a(\mathbf{X})
\end{aligned}$$

Приложение 3

Найдем чему равны интегралы от сумм \hat{S}_1 , \hat{S}_0 и разложения $F_v(U_0, V_0)$ в ряд Тейлора.

Вычислим сначала интеграл от \hat{S}_1 (пределы и штрих у переменной интегрирования опущены):

$$\begin{aligned}
&\int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \hat{S}_1 V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta = \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \times \\
&\times \Delta_s \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - c^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0 \Delta_s \left[C_{ikjs} V_0^{s+1}(\zeta) \right] d\zeta = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} Q_2(s+1) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \sum_{s=0}^{i+j} \left[A \Delta_s \left(C_{ijk s} (s+1) a A^s B \right) - \right. \\
&\left. - (b + A) \Delta_s \left(C_{ijk s} A^{s+1} \right) \right] = A \Delta_s \left(a B \Sigma_1 \right) - B(b + A) \Delta_s \Sigma_2,
\end{aligned}$$

где $C_{ijk s}$ — промежуточное обозначение всех коэффициентов внутри сумм.

Выражения для сумм Σ_1 , Σ_2 имеют вид:

$$\begin{aligned}
\Sigma_1 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - A^{i+j-1-s}}{\gamma a} A^s = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{b^{i+j+1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} \left(\frac{A}{b}\right)^s - \frac{A^{i+j+1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} 1 \right] = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{A^{i+j} - b^{i+j}}{\gamma a^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} A^{i+j+1} \right] = \\
&= \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+b, b)}{\gamma a^2} - \frac{1}{\gamma a} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial A} [A \delta F(q+A, A)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_2 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \frac{b^{i+j-1-s} - A^{i+j-1-s}}{\gamma a(s+1)} A^{s+1} = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \sum_{s=0}^{i+j} \left[\frac{b^{i+j-1-s}}{\gamma a} \frac{A^{s+1}}{s+1} - \frac{A^{i+j}}{\gamma a} \frac{1}{s+1} \right] = \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \left[\frac{b^{i+j-1}}{\gamma a} \sum_{s=0}^{i+j} b^{-s} \int A^s dA - \right. \\
&\quad \left. - \frac{A^{i+j}}{\gamma a} \int \sum_{s=0}^{i+j} \xi^s d\xi \Big|_{\xi=1} \right] = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \times \\
&\quad \times \left[\frac{1}{\gamma a} \int \frac{b^{i+j} - A^{i+j}}{b-A} dA - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{A^{i+j} - (A\xi)^{i+j}}{1-\xi} d\xi \Big|_{\xi=1} \right] = \\
&= \frac{1}{\gamma a} \int \frac{\delta F(q+b, b) - \delta F(q+A, A)}{b-A} dA - \\
&\quad - \frac{1}{\gamma a} \int \frac{\delta F(q+A, A) - \delta F(q+A\xi, A\xi)}{1-\xi} d\xi \Big|_{\xi=1}.
\end{aligned}$$

Аналогично вычисляются интегралы от \hat{S}_0 :

$$\begin{aligned}
& \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \hat{S}_0 V_0^{s+1}(\zeta) d\zeta = \\
& = \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} V_0(\zeta) \Delta_s \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \times \\
& \times \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1} - A^{-1}}{\gamma a(i+j+1)} V_0^{i+j+1}(\zeta) d\zeta = \\
& = A \Delta_s \left[\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1} - A^{-1}}{\gamma} A^{i+j} B \right] - \\
& - B(b+A) \Delta_s \left[\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{\delta F^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} \frac{b^{-1} - A^{-1}}{\gamma(i+j+1)} A^{i+j+1} \right] = \\
& = A \Delta_s \left[\frac{b^{-1} - A^{-1}}{\gamma} \delta F(q+A, A) B \right] - \\
& - B(b+A) \Delta_s \left[\frac{b^{-1} - A^{-1}}{\gamma a} \int \delta F(q+A, A) dA \right]
\end{aligned}$$

и от $F_v(U_0, V_0)$:

$$\begin{aligned}
& \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s F_v(U_0(\zeta), V_0(\zeta)) d\zeta = \\
& = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \int \frac{(1 - B\zeta)^2}{\zeta^2} \Delta_s \left[\frac{F_v^{[k,i]}(0,0)}{k!i!} \binom{k}{j} q^{k-j} V_0^{i+j}(\zeta) \right] d\zeta = \\
& = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k Q_1(i+j) = \Delta_s \left[a \frac{\partial}{\partial A} F_v(q+A, A) B \right] - 2B \Delta_s F_v(q+A, A).
\end{aligned}$$

Приложение 4

Численные значения параметров, которые использовались для построения графиков на Рис.18,19,20.

Таблица 6										
№	μ_1	μ_2	g_0	γ	t_0	λ_i	N_c	c_0	K_0	ω_0
1.1	0.6	0.8	0.0165	0.6	5	4.3856	1	5.487	1.0782	3.75
1.2	1.7	1.8	1	2.1	5	1.3	1	1.139	1.7627	3.75
2.1	1.2	0.8	0.03	1.6	-5	0.22	1	0.250	1.0197	4
3.1	1.1	1.4	1.372	4	-5	489.0061	1	17854.042	1.3041	41
3.3	2.9	3.1	0.12	0.3	-5	0.16	1	0.239	1.4308	3.6
4.1	4.1	2.9	0.0179	1.95	0.3	16.0037	1	-13.825	1.3713	4
4.3	6.1	2.7	1.3	11.2	-5	1.25	1	-380.770	0.5887	4

Благодарности

Выражаю искреннюю благодарность своему научному руководителю, доктору физико-математических наук, профессору Журавлеву Виктору Михайловичу за руководство и поддержку в работе над диссертацией.

Признателен доктору технических наук, профессору, заведующему межвузовской кафедрой космических исследований Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева Белоконову Игорю Витальевичу и кандидату технических наук Крамлиху Андрею Васильевичу за поддержку во время подготовки работы.

Приношу свою благодарность коллективу лаборатории нелинейной и микроволновой фотоники Научно-исследовательского технологического института им. С.П. Капицы за помощь в проведении расчетов и написании научных статей.

Благодарен начальнику расчетно-теоретического отдела АО УКБП, кандидату физико-математических наук Моисееву Константину Юрьевичу за возможность совмещать работу с подготовкой диссертации.