

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

Автореферат диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2024

Работа выполнена в научно-исследовательской лаборатории «Перспективные фундаментальные и прикладные космические исследования на базе наноспутников» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Научный руководитель: **Журавлев Виктор Михайлович,**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Макин Владимир Сергеевич,**
доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра «Проектирование и эксплуатация АЭС»
Институт ядерной энергетики,
Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого (СПбПУ), филиал в г. Сосновый Бор.

Рогожкин Сергей Васильевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры физики
экстремальных состояний вещества,
Национальный исследовательский ядерный
университет «МИФИ».

Ланеев Евгений Борисович,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор Математического института
имени С.М. Никольского,
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов
имени Патриса Лумумбы».

Защита состоится 27 июня 2024 г. в 15 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета ПДС 0200.007 при Российском университете дружбы народов имени Патриса Лумумбы по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д.6, зал заседаний Ученого Совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке РУДН.

Автореферат разослан ” ____ ” _____ 2024 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета ПДС 0200.007
доктор физико-математических наук

С.А. Будочкина

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследований

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.

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 [1, 2]; модели, учитывающие влияние температуры и упругих деформаций на поверхностную диффузию дефектов [3-5]. Также существует широкий класс моделей, основанных на уравнениях диффузии. Известно, что радиационно-стимулированная диффузия вакансий и междоузлий в отдельных случаях приводит не к деградации материала, а к образованию в нем упорядоченных структур [6], которые улучшают механические [7, 8], электрические [9] и другие свойства материала [10].

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 [6, 11] 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 [12], 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 [13]. Наиболее часто [6] применяется анализ динамической системы вблизи стационарной точки, т.е. в асимптотике $t \rightarrow \infty$, однако, хорошо известно, что длительное облучение приводит к деградации материала [14] 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 [6]:

- a) использование постоянных коэффициентов диффузии дефектов, т.е. усредненных параметров (вычисленных для необлученного кристалла) в точечной 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 [15, 16];

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 помощью 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: «Всероссийская 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. 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.

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.

Основное содержание работы

Введение содержит актуальность выбранной темы исследования, формулировку цели и задач, аргументацию научной новизны результатов. Представлены выносимые на защиту положения и приведена их практическая значимость.

Первая глава посвящена обзору современных экспериментальных и теоретических данных по росту когерентных структур в кристаллах под облучением и разбору математических моделей радиационно-стимулированной диффузии. Рассматриваются различные варианты пространственно-периодических и локализованных структур и обсуждаются процессы, приводящие к их возникновению. Рассматриваются аналитические методы анализа нелинейных моделей: метод групповых преобразований, дифференциальные подстановки, преобразования Бэклунда, качественная теория дифференциальных уравнений, метод функциональных подстановок. На основе характерных особенностей сверхрешеток обосновывается применение метода многомасштабных разложений. После рассмотрения недостатков существующих моделей и методов их анализа формулируется оригинальная модель нелинейной диффузии и обсуждаются задачи ее исследования.

Во второй главе рассматривается линейная, в общем случае неоднородная (со специальным распределением источников и стоков дефектов), среда с постоянным коэффициентом диффузии. На основе подхода, развитого в работе [17], и применяемого ранее к уравнению диффузии с нелинейностью в правой части, показано, что в двумерном случае линейное уравнение диффузии имеет особый класс многолистных решений, описывающих распространение сингулярных структур.

Частные решения двумерного $(\vec{x} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y)$ линейного уравнения диффузии с "потенциалом" $u(\vec{x}, t)$ (распределение источников/стоков с рече):

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_0(N_{xx} + N_{yy}) + u(\vec{x}, t)N \quad (1)$$

ищутся в следующем виде:

$$N(\vec{r}, \tau) = \frac{\partial S(z, \tau)}{\partial z} \exp[\bar{z}v(z, \tau) + \Theta(z, \tau)]. \quad (2)$$

Здесь $\tau(t) = 4D_0t$ и $S(z, \tau)$, $v(z, \tau)$ и $\Theta(z, \tau)$ — вспомогательные аналитические функции. Решения (2) являются комплексными, однако, вещественные и мнимые части решения также удовлетворяют уравнению (1) в случае вещественного потенциала.

Подстановка (2) в уравнение (1), записанное в комплексных координатах, приводит к эквивалентной ему системе квазилинейных уравнений:

$$\begin{aligned} v_\tau - vv_z &= m(z, \tau), \quad \Theta_\tau - v\Theta_z = n(z, \tau), \\ S_\tau - vS_z &= 0, \quad u = m(z, \tau)\bar{z} + n(z, \tau), \end{aligned}$$

где $m(z, \tau), n(z, \tau)$ произвольные функции, с помощью которых задается неоднородность среды.

Уравнение характеристик приведенной выше системы в замкнутой относительно z форме имеет вид:

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} = -m(z, \tau). \quad (3)$$

Пусть $I_1(v, z, \tau)$ и $I_2(v, z, \tau)$ — два интеграла движения уравнения (3). Тогда общее решение приведенной системы уравнений находится интегрированием вдоль характеристик, а функция $v(z, \tau)$ находится из алгебраического уравнения:

$$H(I_1(v, z, \tau), I_2(v, z, \tau)) = 0, \quad (4)$$

где $H(I_1, I_2)$ — произвольная функция.

В результате для потенциала вида $u = m(z, \tau)\bar{z} + n(z, \tau)$ общее решение (1) можно записать в виде:

$$N(z, \bar{z}, \tau|H) = \frac{\partial S(I_1)}{\partial z} \exp(\bar{z}v(z, \tau) + \int_c n(z, \tau) d\tau). \quad (5)$$

Функция $S = S(I_1)$ определяется начальными и граничными условиями.

Для рассматриваемых задач диффузии необходимо, чтобы $u(z, \bar{z}, \tau)$ была вещественной функцией, что возможно при линейной зависимости $m(z, \tau)$ и $n(z, \tau)$ от z . Наиболее общий вариант допустимого вещественного потенциала — квадратичный. Уравнение диффузии (1) для такого потенциала имеет вид:

$$N_\tau = N_{xx} + N_{yy} - \Xi(x^2 + y^2)N.$$

Пусть $J_{1,2}$ — вещественные интегралы уравнения (3). Один из простейших случаев выбора функции H , приводящий к многолистному решению для $N(x, y, \tau)$, имеет вид:

$$H(J_1, J_2) = k_2 J_2^2 + k_1 J_1^2 + k_0.$$

Вычисления дают два листа решения для функции $v(z, \tau)$:

$$v_{1,2}(z, \tau) = \Xi[-h(2\tau)z \pm 2\sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2}]/s(2\tau) \quad (6)$$

и, соответствующие решения уравнения диффузии:

$$N_{1,2} = \frac{B(J_\mp)}{s(2\tau)} \left(k_2 e^{\Xi\tau} \pm \frac{k_1 k_2 z}{\sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2}} e^{-\Xi\tau} \right) e^{v_{1,2}(z, \tau)\bar{z}}, \quad (7)$$

где интегралы J_\mp имеют вид:

$$J_\pm = (k_2 e^{\Xi\tau} z \pm e^{-\Xi\tau} \sqrt{-k_0 s(2\tau) - k_1 k_2 z^2})/s(2\tau), \quad s(\tau) = k_2 e^{\Xi\tau} + k_1 e^{-\Xi\tau}. \quad (8)$$

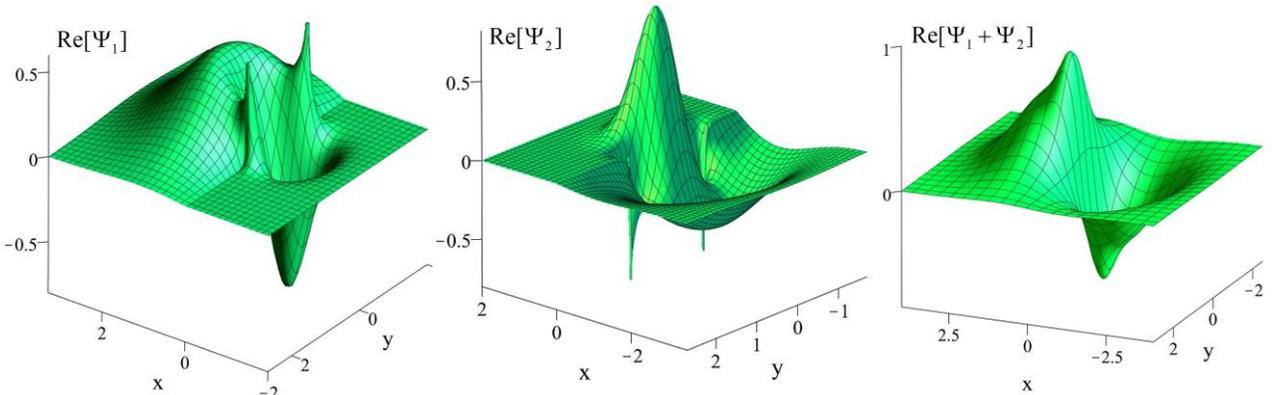


Рис. 1: Вещественная часть решения (7) при значениях параметров: $B(J) = 1, \Xi = 0.3, k_0 = -1, k_1 = -1, k_2 = 5$.

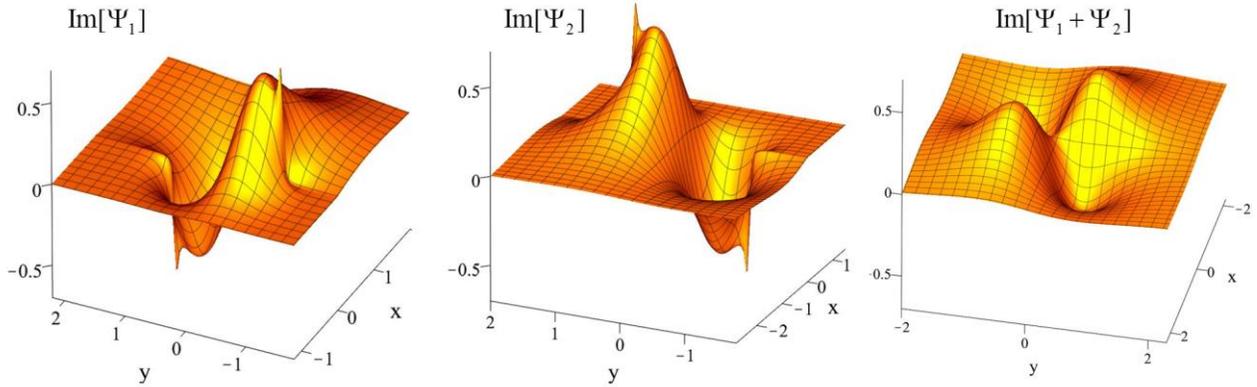


Рис. 2: Мнимая часть решения (7) при значениях параметров: $B(J) = 1, \Xi = 0.3, k_0 = -1, k_1 = -1, k_2 = 5$.

Решения (7) 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. Траектории, по которым движутся точки, описываются уравнением $k_0 s(2\tau) + k_1 k_2 (x + iy)^2 = 0$, являющимся параметрическим уравнением гиперболы. Как видно из (6) 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 (8). На Рис.1-2 представлены графики вещественной и мнимой частей двулистного решения (7). В общем случае для получения гладкого решения необходимо брать склейку, состоящую из отдельных частей каждой из ветвей многолистного решения.

В **третьей главе** развивается подход, основанный на расширении метода функциональных подстановок (МФП) [18, 19] — нелинейных функциональных подстановках (НФП) для анализа и поиска точных решений нелинейных уравнений диффузии. С помощью НФП строятся волновые решения УБД для различных функций источника точечных дефектов, а также рассматривается автоволновой режим возникновения упорядоченных структур в среде с быстрой диффузией. На основе метода МФП решается задача о кластеризации точечных дефектов.

В случае радиационно-стимулированной диффузии, концентрации дефектов на порядки превышают равновесные, что изменяет сам диффузионный процесс и приводит к зависимости коэффициента диффузии от концентрации. Распространенным случаем является зависимость вида $D(n) \sim 1/n$ — "быстрая диффузия" которая, в частности, может быть получена в модели газа точечных дефектов с учетом саморассеяния.

В рамках метода НФП решения $T(x, t)$ уравнения общего вида:

$$F(T, T_x, T_t, T_{xx}, T_{xt}, T_{tt}, x, t) = 0 \quad (9)$$

ищутся среди функций, удовлетворяющих двум базовым соотношениям:

$$T_x = u(T, x, t) = A(x, t)T, \quad T_t = v(T, x, t) = B(x, t)T. \quad (10)$$

Функции $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ и $T(x, t)$ находятся из уравнения:

$$F(T, u, v, u_x + uu_T, v_t + vv_T, u_t + vu_T, x, t) = 0, \quad (11)$$

которое является следствием исходного уравнения и условия совместности уравнений (10):

$$u_t + vu_T = v_x + uv_T. \quad (12)$$

Поиск решений системы (11) - (12), эквивалентной исходному уравнению, в ряде случаев оказывается более простой задачей. В некоторых случаях удастся получить общее решение исходного уравнения, в других удастся найти частные решения.

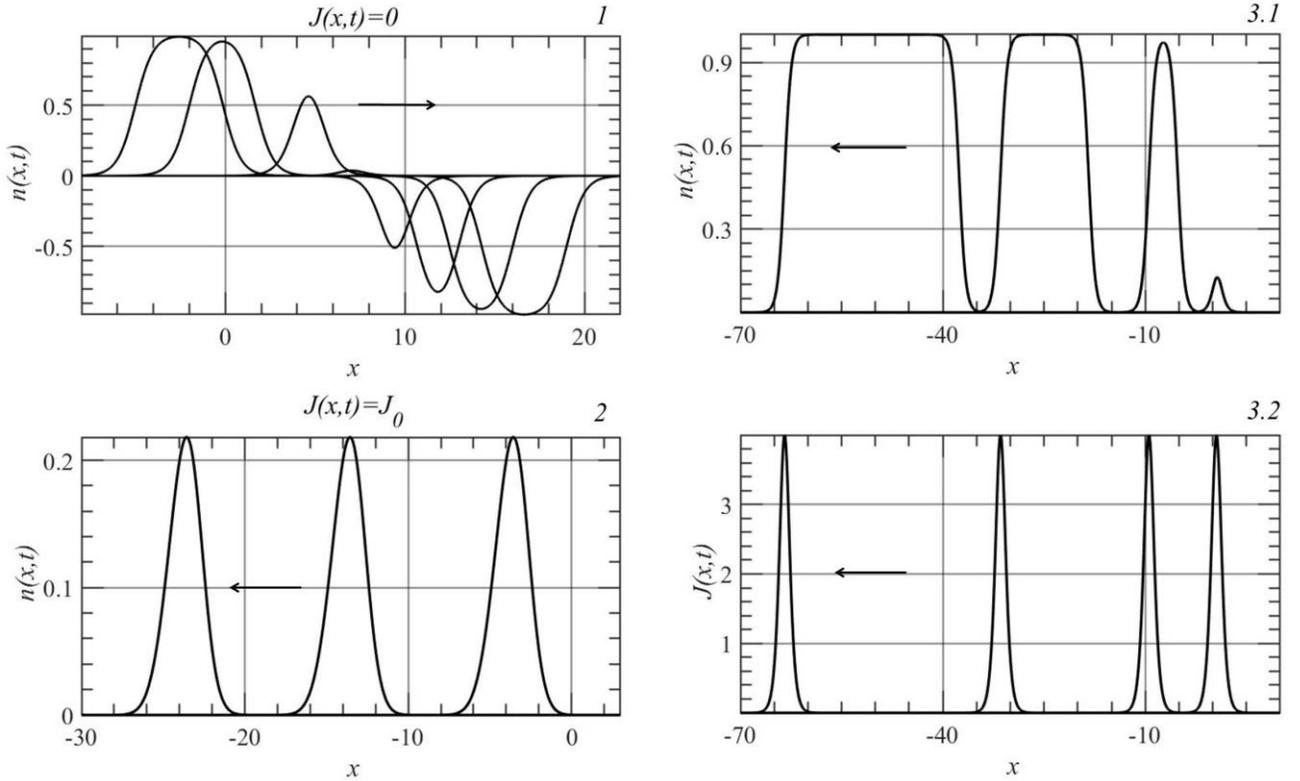


Рис. 3: Распределения концентраций при разных значениях источника $J(x, t)$. 1— $t = 0.3 k, k = \overline{0,8}, m = 2, \lambda = 1, C = -9, a = -5, C_1 = 0, C_2 = 1, \beta_0 = -12$; 2— $t = 0, 2, 4, 6$; $m = 4, J_0 = 1, H_1 = 2 H_2 = 1, \sigma = 1, \beta_0 = 10, F_0 = 1, H_1 = -2, H_2 = 1, \beta_0 = 4.6$; 3— $t = 0, 1, 3.2, 6.4, m = 2, f(t) = f_1 e^{k_0 t}, \beta_0 = -5, f_1 = 1, H_1 = 0.5, k_0 = -20$

Решения уравнений (12) и (11) ищется в виде полиномов по T :

$$u = T^{\mu_1} \sum_{k=0}^{N_1} U_k(x, t) T^k, \quad v = T^{\mu_2} \sum_{k=0}^{N_2} V_k(x, t) T^k,$$

где $\mu_{1,2} \in \mathbb{R}, N_{1,2} \in \mathbb{Z}$. Общая схема построения решений состоит в решении системы уравнений для функций $U_k(x, t), V_k(x, t)$, которые получаются в результате подстановки полиномов $u(T, x, t)$ и $v(T, x, t)$ в уравнение (12) и приравнивания нулю выражений при степенях T . После вычисления решений для $U_k(x, t), V_k(x, t)$, решаются уравнения первого порядка (10) для $T(x, t)$.

Одномерное уравнение быстрой диффузии (УБД) получается из уравнения следующего вида:

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

применением базовых соотношений (10) с полиномами:

$$u = U_1(x, t)T + U_N(x, t)T^N, \quad v = V_1(x, t)T + V_N(x, t)T^N,$$

где N — натуральное число большее 1.

Общее решение для концентрации $n = \frac{\partial}{\partial x} \ln T + q(x, t)$ будет иметь следующий вид:

$$n(x, t) = \frac{-1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \ln[\beta_0 - m \int e^{2(N-1)H(x+(N+C)t)} dx] + \quad (13)$$

$$+ F(\sigma t + x) + H'(x + (N + C)t) - \frac{1}{\sigma} G(x, t),$$

где $m = N - 1, \sigma = C - N + 2, J(x, t) = \sigma G_x - G_t$.

Функции $G(x, t), F(\sigma t + x), H((2M + \sigma)t + x)$ связаны соотношением:

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

функция $n(x, t)$ удовлетворяет уравнению:

$$n_t = \frac{\partial^2 \ln n}{\partial x^2} + (\sigma + m) \frac{\partial n}{\partial x} + J(x, t).$$

Полученное решение, описывает две волны распространяющиеся с различными скоростями $-\sigma$ и $-2m - \sigma$. На Рис. 2 представлены графики волновых решений (13) для различных вариантов выбора источника $J(x, t)$.

Развитый подход позволяет не только находить частные решения, но и устанавливать связь между решениями разных уравнений. В случае УНД мы получаем преобразование, связывающее решения уравнений с произвольными степенями концентрации в коэффициенте диффузии: $D(n) \sim n^p$. Будем называть такие уравнения — УНД[p].

В частности, пара УНД[p]-УНД[p-2] следующего вида:

$$n_t = \frac{\partial}{\partial x} (n^{-p} n_x), \quad N_t = \frac{\partial}{\partial \xi} (N_\xi N^{p-2}), \quad p \in \mathbb{R};$$

обладают взаимными коэффициентами диффузии, т.к. их решения связаны преобразованием на основе МФП, позволяющим пересчитывать решения одного уравнения, в решения другого.

В данной главе также рассматривается применение МФП к дискретным системам (цепочкам), которые играют важную роль в сосредоточенных моделях кластеризации. Такой подход позволяет получить точные решения и интегралы движения динамических систем, описывающих кинетику точечных дефектов, без учета их пространственного распределения.

Данный подход заключается в рассмотрении системы кинетических уравнений для концентраций n_k кластеров заданного размера, состоящих из k структурных элементов или образованных их отсутствием:

$$\frac{dn}{dt} = J(n), \quad (14)$$

где $n = \{\dots, n_{k-1}(t), n_k(t), n_{k+1}(t) \dots\}$ ($k \in \mathbb{Z}$) — вектор координат динамической системы, а $J = \{\dots, J_{k-1}(n), J_k(n), J_{k+1}(n) \dots\}$ — вектор функций $J_k(n)$, описывающих взаимодействие между кластерами. Задачи типа (14), можно записать в форме уравнений, содержащих два типа операторов: производную по времени $\widehat{D}_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$ и оператор \widehat{D}_x , связанный со сдвигом в пространстве концентраций (s-производная), например:

$$\widehat{D}_+ \Phi_k(t) = \Phi_{k+1}(t), \quad \widehat{D}_- \Phi_k(t) = \Phi_{k-1}(t),$$

Следуя схеме МФП, в данном случае используются базовые соотношения:

$$\widehat{D}_x \Phi_k = A_k(t) \Phi_k, \quad \widehat{D}_t \Phi_k = B_k(t) \Phi_k. \quad (15)$$

В качестве уравнения для основной функции Φ_k вводится линейное уравнение вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_k = \sum_{j=0}^m M_j(t) \widehat{D}_x^j \Phi_k, \quad (16)$$

где $m \in \mathbb{N}$, а под \widehat{D}_x понимается производная одного типа — либо левая, либо правая. Используя базовые соотношения добавочное уравнение (16) приводится к виду типа (14) для переменных $n_k = A_k$.

Развитый подход позволяет не только находить точные решения системы (14), но и вычислять соответствующие интегралы движения. В работе рассматриваются примеры цепочек со следующими ограничениями:

$$\widehat{D}_+ \Phi_k = \Phi_{k+1}, \quad \widehat{D}_+ \Phi_{k+1} = \Phi_{k+2}, \dots, \quad \widehat{D}_+^q \Phi_k = \widehat{D}_+ \Phi_{k+q-1} = \Phi_{k+q} = \Phi_k,$$

где q - некоторое натуральное число, большее 1. В этом случае цепочки называются циклическими. Случай: $\Phi_{q+k} = \Phi_q$, ($k = 1, 2, \dots$) приводит к цепочкам ограниченной длины и соответствует обращению в нуль функций ϕ_k при $k > q$. В работе вычисляются интегралы движения и решения для каждого типа цепочек, а также рассмотрено обобщение на случай

матричных уравнений.

В **четвертой главе** рассматривается начальная стадия формирования структуры и выводятся условия ее усиления пространственно-однородным излучением. Отдельно рассмотрена модель БРМД с пространственно-периодическим по поверхности материала распределением внешнего излучения. Для каждого варианта найдены растущие периодические решения и получена зависимость периода структуры от интенсивности падающего излучения.

Основная идея, лежащая основе модели БРМД заключается в разделении процессов на "быстрые" — релаксация (генерация/рекомбинация) и "медленные" — диффузия. Для начальной стадии роста важно получить оценку периода сверхрешетки, начиная с которого происходит усиление. Для системы, содержащей M сортов дефектов безразмерные уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_i = \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (D_i(u) \frac{\partial u_i}{\partial x^\alpha}) - \mu_i u_i - \varepsilon j_i(u) + \gamma_i, \quad i = \overline{1, M}. \quad (17)$$

Здесь u_i — безразмерные концентрации, а D_i — коэффициенты диффузии, слагаемое с μ_i описывает выход дефектов на стоки, а j_i — нелинейный член, описывающий взаимную рекомбинацию. Малая постоянная $0 < \varepsilon \ll 1$ характеризует вклад рекомбинации по сравнению с эффектами диффузии и диссипации. Для анализа системы уравнений (17) использован метод многомасштабных разложений. Концентрации $u_i = u_i(t, X, T, \varepsilon)$ являются функциями быстрого времени t и медленных переменных $X = (X^1, X^2, X^3)$, $X^\alpha = \sqrt{\varepsilon} x^\alpha$, $T = \varepsilon t$. Решения ищутся в виде рядов по малому параметру ε :

$$u_i(t, X, T, \varepsilon) = u_i^{(0)}(t, X, T) + u_i^{(1)}(t, X, T)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (18)$$

Решение в нулевом порядке имеет следующий вид:

$$u_i^{(0)} = A_i(X, T)e^{-\mu_i t} + g_i, \quad g_i = \gamma_i/\mu_i. \quad (19)$$

Функции $A_i(X, T)$, описывающие изменение крупномасштабной структуры, названы "амплитудные факторы" (АФ).

Уравнения для АФ вычисляются исходя из условия отсутствия секулярных слагаемых в первом порядке по ε :

$$\frac{\partial A_i}{\partial T} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial X^\alpha} (D_i(g) \frac{\partial A_i}{\partial X^\alpha}) - \frac{\partial j_i(g)}{\partial g_i} A_i, \quad (20)$$

где $g = (g_1, g_2, \dots, g_M)$ и $D_i(g)$ — эффективные коэффициенты диффузии. В простейшем случае одного типа дефектов решение (19) имеет вид:

$$u^{(0)} = e^{\delta t - qZ} (A_0 \cos KX + B_0 \sin KX) + g, \quad (21)$$

Здесь $\delta = p\varepsilon - 1$ — безразмерный инкремент усиления, $K = \frac{x_0}{\sqrt{\varepsilon}} (k_x e_x + k_y e_y)$.

Условие роста пространственно-периодического начального распределения с волновым числом k имеет вид:

$$k^2 \leq [\gamma]'(G/\mu) - \mu]/D(G/\mu) + q^2 = k_{cr}^2,$$

k_{cr} — это критическое волновое число, которое определяет минимальную длину волны, растущую со временем при заданном значении источника G .

Пятая глава содержит БРМД модель, включающую ограниченный источник точечных дефектов. Получены условия роста контрастной упорядоченной структуры, исследован асимптотический режим роста, а также описано явление насыщения концентрации

Источник дефектов можно считать постоянным лишь на относительно коротком отрезке времени. В общем случае частицы излучения являются компонентой динамической системы. Уравнение переноса налетающих вдоль O_{z_3} частиц излучения имеет вид:

$$g_t = -\frac{\partial g}{\partial z_3} - \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g - \tilde{\lambda}_r n_i g - \tilde{\kappa}g.$$

Здесь g — концентрация частиц излучения, σ_r — их скорость, N_c — концентрация узлов решетки, n_v — концентрация вакансий, $\tilde{\lambda}_c$ — интенсивность взаимодействия излучения с узлами решетки, $\tilde{\kappa}$ — описывает выбывание частиц за счет прочих процессов.

Модель с двумя типами дефектов (вакансии и междоузлия) запишется в таком виде:

$$\begin{aligned} h_t &= -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - \alpha_1(1-v)h - \alpha_1 \lambda_r u h - \varepsilon \kappa h, \\ v_t &= (1-v)h - \gamma u v - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [D_v(N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla v] - \varepsilon \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}, \\ u_t &= -\sqrt{\varepsilon} \sigma_i \frac{\partial u}{\partial z} + (1-v)h - \gamma u v - \varepsilon \mu_v \tilde{v} + \nabla [D_v(N_c \alpha_1 u, N_c \alpha_1 v + N_c \alpha_0) \nabla u]. \end{aligned}$$

Безразмерные функции u, v так связаны с концентрациями: $n_v = N_c(\alpha_0 + \alpha_1 v(x, t))$, $n_i = N_c \alpha_1 u(x, t)$. h — безразмерная концентрация налетающих частиц. Коэффициенты в уравнении имеют вид: $\varepsilon = (D_0 \tilde{\lambda}_c N_c)^{1/4} / \sqrt{\sigma_r}$, $\lambda_{r,i} = \tilde{\lambda}_{r,i} / \tilde{\lambda}_c$, $\varepsilon \kappa = \tilde{\kappa} / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $\gamma = \tilde{\gamma} / \tilde{\lambda}_c$, $\varepsilon \mu_{v,i} = \tilde{\mu}_{v,i} / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $\sqrt{\varepsilon} \sigma_i = \tilde{\sigma}_i / \sqrt{D_0 \tilde{\lambda}_c N_c}$, $\alpha_0 = \lambda_i / (\lambda_i + \gamma)$, $\alpha_1 = \gamma / (\lambda_i + \gamma)$. Параметры обезразмеривания имеют вид: $N_0 = N_c$, $t_0 = 1 / (\tilde{\lambda}_c N_c)$, $x_0 = \sqrt{D_0 / (\tilde{\lambda}_c N_c)}$. Малый безразмерный параметр ε характеризует малый вклад процессов диссипации.

Решения в нулевом порядке, описывающие процессы релаксации, имеют вид:

$$V_0 = b + \frac{a}{1 - B e^{-a \gamma t}}, \quad U_0 = V_0 + \frac{v^2 - A^2(X, T)}{A(X, T)} - v^2, \quad (22)$$

где $v = \sqrt{\frac{g_0}{\gamma}}$, $a = \frac{v^2 + A^2(X, T)}{A(X, T)}$, $b = -\frac{v^2}{A(X, T)}$. При $t \rightarrow \infty$ в среде возникает структура, связанная с функцией $A(X, T)$, которая удовлетворяет такому уравнению:

$$\left(1 + \frac{v^2}{A^2}\right) A_T + \sigma_i \frac{v^2}{A^2} A_Z = \nabla (D_{as}(A) \nabla A) - S(A). \quad (23)$$

Здесь $S(A) = \mu_v A + \mu_i v^2 - \mu_i \frac{v^2}{A} + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}$, D_{as} — эффективный коэффициент диффузии:

$$D_{as}(A) = \frac{v^2}{A^2} D_i \left(\frac{N_c \alpha_1 v^2}{A} - N_c \alpha_1 v^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right) + D_v \left(\frac{N_c \alpha_1 v^2}{A} - N_c \alpha_1 v^2, N_c \alpha_0 + N_c \alpha_1 A \right).$$

При $T \rightarrow \infty$ (23) имеет пространственно-периодические решения:

$$A(X, T) = A_0 + a_0 \cos[\sqrt{S'(A_0)} |D_{as}(A_0)|^{-1} e_k X + b_0],$$

которые возможны при условиях: $D_{as}(A_0) < 0$, $K_3 = -\frac{\rho}{\sigma_i} (1 + (A_0 v)^{-2} + 1)$, где A_0 — стационарное решение (23), (K_1, K_2, K_3) — компоненты волнового вектора.

Режим роста структуры, связанный с усилением начального распределения, описывается АФ. Уравнение для АФ в данном варианте модели имеет более сложный вид:

$$\begin{aligned} a B_T &= \tilde{D} \Delta_s B + (\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 Z) B + \tilde{c}_2 \int_0^Z B(X', T) dZ' + B \tilde{c}_3 \ln|B| + \\ &+ \tilde{c}_4 B \Delta_s \ln|B| + \tilde{c}_5 \frac{\partial}{\partial Z} B + \tilde{c}_6 B \frac{\partial}{\partial Z} \ln|B|. \end{aligned}$$

Данное уравнение допускает разделение переменных. Соответствующее решение дает такое распределение концентрации:

$$V_0(X, t) = b + a \cdot [1 - C(X) \exp(p_1 e^{\varepsilon p_2 (t-t_0)} + p_3 t)]^{-1}, \quad (24)$$

где $C(X) = C_0 P(Z) H_1(X) H_2(Y)$ — пространственная часть решения $B(X, T)$ и $p_1 = \frac{A^2 + v^2}{A(A^2 - v^2)(\mu_v - \mu_i)}$, $p_2 = -\frac{A^2(A^2 - v^2)(\mu_v - \mu_i)}{(A^2 + v^2)^2}$, $p_3 = -\gamma \frac{A^2 + v^2}{A}$. Решение (24) описывает локальный рост периодического распределения концентрации с последующим выходом на насыщение. На Рис.3. приведен пример временной динамики и пространственного распределения концентрации вакансий.

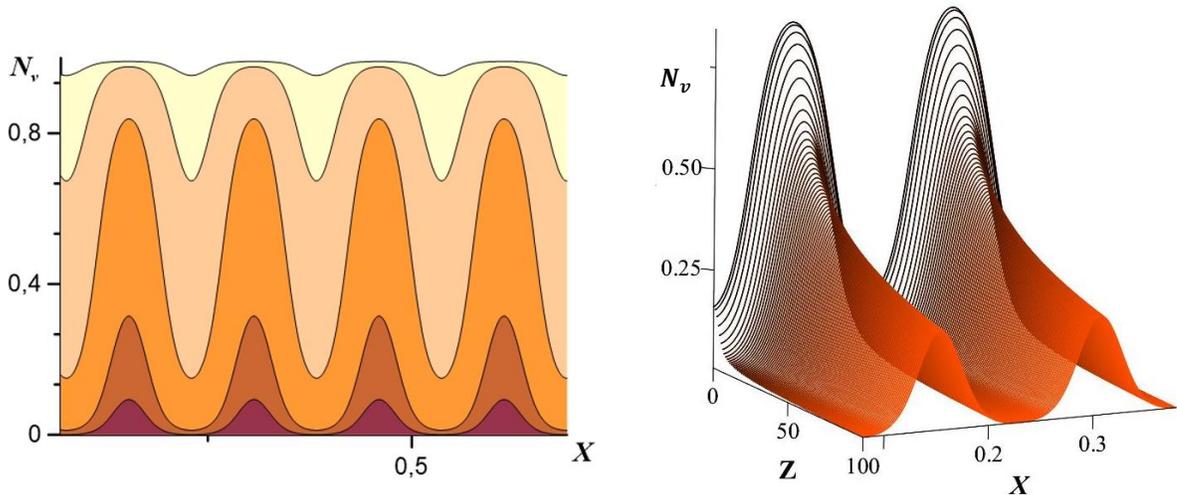


Рис. 4: Рост распределения вакансий со временем и пространственное распределение концентрации в нулевом порядке для параметров: $C_0 = 0.019, p_1 = 0.027, p_2 = 0.300, p_3 = 490.778, a = -122.694, b = 0.003, \varepsilon = 0.01, t_0 = 1.372, H(X) = \exp(1.7\cos(41X))$.

В **заключении** формулируются результаты проделанной работы и обсуждаются направления дальнейших исследований.

Список основных результатов:

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 развить 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 начального 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.

References

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.

- [15] Verma A. Analytic and numerical solutions of nonlinear diffusion equations via symmetry reductions [Текст] / A. Verma, R. Jiwari, M.E. Koxsal // *Advances in Difference Equations*. – 2014. – Т. 2014. – №1. – С. 1 - 13.
- [16] Abd-el-Malek M. B. Group method solution for solving nonlinear heat diffusion problems [Текст] / M.B. Abd-el-Malek, M.M. Helal // *Applied mathematical modelling*. – 2006. – Т. 30. – №9. – С. 930 - 940.
- [17] 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.
- [18] Zhuravlev V.M. The method of generalized Cole-Hopf substitutions and new examples of linearizable nonlinear evolution equations [Текст] / V.M. Zhuravlev // *Theoretical and Mathematical Physics*. – 2009. – Т. 158. – №1. – С. 48 - 60.
- [19] Zhuravlev V.M. Matrix functional substitutions for integrable dynamical systems and the Landau–Lifshitz equations [Текст] / V.M. Zhuravlev // *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*. – 2014. – Т. 10. – №1. – С. 35 - 48.

Основные публикации по теме диссертации:

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. 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. 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.
4. 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.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. 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.

9. 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.

10. 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.

Свидетельства на программы ЭВМ:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017615565 Российская федерация, Вычисление поверхностного распределения интенсивности электромагнитного излучения, возникающего за счет френелевского отражения вертикально падающего пучка: № 2017612363: заявл. 22.03.2017: опубл. 18.03.17/Журавлев, В.М., Морозов, В.М. ; заявитель УлГУ.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018611269 Российская федерация, Численное моделирование образования рельефа поверхности под действием лазерного излучения: № 2017662479: заявл. 01.12.2017: опубл. 29.01.18/Журавлев, В.М., Морозов, В.М. ; заявитель УлГУ.