

## КИНЕТИКА ЗАРОЖДЕНИЯ НАНОПОРИСТОСТИ\*

Г. И. Змиевская

**Аннотация:** Зарождение нанопор в материалах исследуется как начальная стадия фазового перехода, который вызывает аморфизацию микроструктуры тонкого слоя поверхности твердого тела при воздействии импульсных потоков ионов инертных газов. Компьютерные эксперименты основаны на решении уравнений кинетической теории Фоккера–Планка–Колмогорова и стохастических уравнений Ито с нелинейными коэффициентами. Структуры пористости в образцах зависят от типов кристаллических решеток материалов и размера слоев, температуры образца, значений энергии ионов и интенсивности их потока. Неравновесность флуктуационно неустойчивых процессов, а также функций распределения по размерам пор и декартовым координатам указывает на отклонение пористости от монодисперсности, что может изменить оценку газопроницаемости в модели фильтрационного горения.

**Ключевые слова:** пористость; вакансионно-газовые дефекты; стохастические уравнения Ито; зародыши фазового перехода; кластеризация; стохастическая диффузия; кинетическая теория; имплантация ионов; дисперсность; газонаполнение пор

DOI: 10.30826/CE26190107

EDN: SZIWFX

## Литература

1. Фролов С. М. Наука о горении и проблемы современной энергетики // Росс. хим. ж., 2008. Т. LII. № 6. С. 129–133.
2. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L., Levchenko V. D., Levchenko T. V. A kinetic stochastic model of blistering and nanofilm islands deposition: Self-organization problem // J. Phys. D Appl. Phys., 2007. No. 40. P. 4842–4849. doi: 10.1088/0022-3727/40/16/013.
3. Bondareva A. L., Zmievskaia G. I., Levchenko V. D. Stochastic model applied to plasma-surface interaction's simulation // Eur. Phys. J. D, 2006. Vol. 38. P. 143–149. doi: 10.1140/epjd/e2006-00044-0.
4. Zmievskaia G. I., Averina T. A., Bondareva A. L. Numerical solution of stochastic differential equations in the sense of Stratonovich in an amorphization crystal lattice model // Appl. Numer. Math., 2015. Vol. 93. P. 15–29. doi: 10.1016/j.apnum.2014.05.006.
5. Змиевская Г. И. Неравновесная кинетика начальной стадии фазового перехода // Физика твердого тела, 2020. Т. 62. № 1. С. 40–45. doi: 10.21883/FIT.2020.01.48730.58ks.
6. Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. — М.: Наука, 1983. 416 с.
7. Скорород А. В. Стохастические уравнения для сложных систем. — М.: Наука, 1983. 192 с.
8. Arnold L. Random dynamic systems. — Springer monographs in mathematics ser. — Springer, 1998. 586 p.
9. Сигов Ю. С. Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды / Сост. Г. И. Змиевская, В. Д. Левченко. — М.: Физматлит, 2001. 288 с.
10. Змиевская Г. И. Численные стохастические модели неравновесных процессов // Математическое моделирование, 1996. Т. 8. № 11. С. 3–40. <https://www.mathnet.ru/rus/mm/v8/i11/p3>.
11. Артемьев С. С. Устойчивость численных методов решения стохастических дифференциальных уравнений // Сибирский математический ж., 1994. Т. 35. № 6. С. 1210–1214. doi: 10.1007/BF02104707.
12. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L. Crystalline islands of semiconductor films // Plasma Physics Reports, 2011. Vol. 37. P. 87–95. doi: 10.1134/S1063780X10121098.
13. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L., Savchenko V. V., Levchenko T. V. Computer simulation of the origination porosity // Numerical analysis of heat and mass transfer in porous media / Eds. J. M. P. Q. Delgado, A. G. B. Lima, M. Vázquez Silva. — Advanced structured materials book ser. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2012. Vol. 27. P. 253–274.
14. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L., Savchenko V. V. Radiation damaging of 3C–SiC lattice: Computer simulation of Brownian motion of non-point defects // Defect Diffus. Forum, 2014. Vol. 353. P. 148–152. doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.353.148.

\*Редакция считает целесообразным сопроводить публикацию данной статьи выдержкой из отзыва одного из рецензентов: «Мы имеем дело с интересным и полезным обзором, и его следует опубликовать, предложив автору учесть в удобной для нее форме следующие соображения. Дело в том, что уравнение (4) не является квазилинейным из-за формулы для коэффициента  $F$ . Другими словами, уравнение (4) не является кинетическим. Замена указанного коэффициента на правильный сделает уравнение (4) кинетическим и позволит написать СДУ и кинетическое уравнение. Эта замена аналогична замене, сделанной Власовым для бесстолкновительной плазмы. Автор пишет, что источник  $S = const$ , но ведь СДУ от источника не зависит и непонятно, как его учитывают в численном счете».

<sup>1</sup>Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук, zmig@mail.ru

15. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L., Levchenko T. V., Maino G. Computational stochastic model of ions implantation // AIP Conf. Proc., 2015. Vol. 1648. P. 230003. doi: 10.1063/1.4912495.
16. Zmievskaia G. I., Bondareva A. L. Kinetics of the formation of pores and a change in the properties of materials in numerical models // J. Surf. Invest. — X-Ray, 2016. Vol. 10. No. 4. P. 802–808. doi: 10.1134/S102745101604039X.
17. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы. Гомогенная нуклеация. Кавитация // ЖЭТФ, 1942. Т. 12. № 11–12. С. 525–538.
18. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — Сер. Теоретическая физика. — М.: Наука, 1979. Т. X. 528 с.
19. Головань Л. А., Тимошенко В. Ю., Кашкаров П. К. Оптические свойства нанокompозитов на основе пористых систем // УФН, 2007. Т. 177. С. 619–638.
20. Андриевский Р. А. Основы наноструктурного материаловедения. Возможности и проблемы. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 252 с.
21. Дмитриев А. С. Введение в нанотеплофизику. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2021. 790 с.
22. Maldovan M. Sound and heat revolutions in phononics // Nature, 2013. Vol. 503. P. 209–217.
23. Жмакин А. И. Теплопроводность за пределами закона Фурье // Ж. технической физики, 2021. Т. 91. Вып. 1. С. 5.
24. Морозов А. И., Сигов А. С. Кинетические явления в металлах с квантовыми дефектами // УФН, 1994. Т. 164. № 3. С. 2432–2461. doi: 10.3367/UFNr.0164.199403a.0243.
25. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. — Синергетика: от прошлого к будущему сер. — 2-е изд. — Ленанд, 2019. Т. 1. 624 с.
26. Зубарев Д. Н., Морозов В. Г., Рёнке Г. Статистическая механика неравновесных процессов / Пер. с англ. А. Г. Башкирова, И. В. Морозова; под ред. В. Г. Морозова. — М.: Физматлит, 2002. Т. 1. 431 с. (Zubarev D., Morozov V., Röpke G. Statistical mechanics of nonequilibrium processes. Vol. 1: Basic concepts, kinetic theory. — Physical research ser. — Berlin: Akademie Verlag, 1996. Vol. 21. 375 p.)
27. Леонтович М. А. Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения случайных процессов // ЖЭТФ, 1935. Т. 5. Вып. 3–4. С. 211–231.
28. Колмогоров А. Н. Об аналитических методах, используемых в расчете вероятности. — УМН, 1938. Вып. 5. С. 5–41.
29. Плевшицев Н. В., Бажин А. И. Вспучивание и шелушение поверхности (блистеринг и флекинг). — М.: Вузовская книга, 1998. 392 с.
30. Кукушкин С. А. Начальные стадии хрупкого разрушения твердых тел // Успехи механики, 2003. Т. 2. № 2. С. 21–43.
31. Bondareva A., Zmievskaia G., Levchenko T. Radiation damage thin coating of silicon carbide // J. Phys. Conf. Ser., 2014. Vol. 510. P. 012010. doi: 10.1088/1742-6596/510/1/012010.
32. Аверина Т. А., Артемьев С. С. Новое семейство численных методов решения стохастических дифференциальных уравнений // Докл. Акад. наук СССР, 1986. Т. 288. № 4. С. 777–780. <https://www.mathnet.ru/rus/dan/v288/i4/p777>.
33. Скороход А. В. Исследования по теории случайных процессов. — Киев: Изд-во КГУ, 1961. 215 с.
34. Крылов Н. В. Об одной оценке из теории стохастических интегралов // Теория вероятностей и ее применения, 1971. Т. 16. № 3. С. 446–457.
35. Крылов Н. В. Управляемые процессы диффузионного типа. — М.: Наука, 1977. 398 с.
36. Змиевская Г. И., Бондарева А. Л. Численное моделирование кинетики возникновения пористости в многослойных средах // Физические и математические модели плазмы и плазмоподобных сред / Под ред. Д. Майно, Г. Змиевской. — М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2012. С. 16–27. <https://keldysh.ru/papers/2012/article/ZmiMaino-label.pdf>.
37. Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Метод классической молекулярной динамики: замысел и реальность // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2011. Т. 4. № 1. С. 31–58.
38. Змиевская Г. И. Стохастическая модель зарождения пор при облучении образца ионами инертного газа // Известия РАН. Механика твердого тела, 2020. № 1. С. 140–151. doi: 10.31857/S0572329920010250.
39. Zmievskaia G. I. Computer simulation of phase transition nonequilibrium processes // Nonequilibrium processes / Eds. S. M. Frolov, A. I. Lanshin. — Moscow: TORUS PRESS, 2019. Vol. 1. P. 118–126.
40. Бондарева А. Л., Змиевская Г. И. Моделирование блистеринга в слоистых зеркалах, применяемых в литографии // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2010. № 6. С. 26–33.

Поступила в редакцию 29.12.2022

После доработки 10.11.2025

Принята к публикации 24.11.2025