



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 280 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Змиевская Г.И., Аверина Т.А.

Флуктуации заряда на
каплях расплава карбида
кремния в процессе
конденсации

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Змиевская Г.И., Аверина Т.А. Флуктуации заряда на каплях расплава карбида кремния в процессе конденсации // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 280. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2018-280](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-280)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-280>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

Г.И. Змиевская, Т.А.Аверина

**Флуктуации заряда на каплях
расплава карбида кремния
в процессе конденсации**

Москва — 2018

¹Змиевская Г.И., ²Аверина Т.А.
e-mail: ¹zmig@mail.ru, ²ata@osmf.sccc.ru

Флуктуации заряда на каплях расплава карбида кремния в процессе конденсации

Компьютерное моделирование зародышей фазового перехода на основе решения кинетических уравнений в частных производных Фоккера–Планка позволяет определить их неравновесное распределение по размерам, возникающее при кластеризации пара в плазме и учете критерия неустойчивости Рэлея, ограничивающего рост заряженных капель из-за накопления напряжений в них, которое приводит к диспергированию. Кластеризация представлена диффузионным процессом, заданным стохастическим дифференциальным уравнением в смысле Стратоновича, моменты диспергирования кластеров задаются скачкообразным процессом. Алгоритмы обобщенного метода Розенброка стохастической молекулярной динамики для непрерывных траекторий были дополнены статистическими алгоритмами потоков Пуассона. Плотность вероятности распределения кластеров по размерам и дисперсия связаны с флуктуациями заряда на кластерах, что важно при получении наноразмерных аморфных порошков и нанесении тонких пленок.

Ключевые слова: кинетическая теория, уравнение Колмогорова, стохастические дифференциальные уравнения, пылевая плазма, диспергирование, флуктуации, карбид кремния, кластеры

¹Galina Ivanovna Zmievskaya, ²Tatyana Aleksandrovna Averina
e-mail: ¹zmig@mail.ru, ²ata@osmf.sccc.ru

¹KIAM RAS, ²ICM MG SB RAS

Fluctuations of a charge on melted drops of silicon carbide during condensation

Computer simulation on the base of solution the kinetic equations in partial derivatives of Fokker - Planck equation for nucleation of phase transition gives us a nonequilibrium distribution of sizes clusters arising at during unstable clustering of vapores in plasma and taking into account the criterion of Rayleigh instability which is limiting growth of drops due to accumulation of strains into them which leads to disperstion. The clustering is represented by a diffusion process given by a stochastic differential equation in the sense of Stratonovich, the instant moments of clusters dispergation are presented by random jumps. Algorithms of the generalized Rozenbrok method of stochastic molecular dynamics for continuous trajectories had been supplemented by statistical algorithms of flows of Poisson. Probability density distribution from the sizes and dispersion are related with a charge fluctuations on clusters. Such estimations for silicon carbide are important for the receiving of both: nanodimensional amorphous powders and thin cover.

Keywords: Kinetic theory, Kolmogorov equation, Stochastic differential equations, Dusty plasma, Dispergation, Fluctuations, Silicon carbide, Clusters

Содержание

1	Введение	3
2	Кинетические уравнения и стохастические модели	6
2.1	Связь уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова и диффузионного марковского процесса	6
2.2	Стохастические уравнения с пуассоновской компонентой	7
3	Модель кластеризации зародышей и используемые приближения	8
4	Моделирование кластеризации зародышей фазового перехода	11
4.1	Сравнение конденсации карбида кремния: нейтральная среда и плазма разряда	11
4.2	Сравнение численной модели кластеризации зародышей конденсации и эксперимента в плазме разряда	13
4.3	Дисперсия размеров (зарядов) кластеров аморфного порошка и кристаллических политипов карбида кремния.	13
5	Кинетическая модель комплексной плазмы	16
6	Заключение	20
7	Благодарности	20
	Список литературы	20

1. Введение

Вычислительные эксперименты, под которыми обычно понимают решение уравнений аналога изучаемого физического процесса, позволяют получить результаты, принципиальные для понимания механизмов неустойчивостей неравновесных процессов, происходящих в высокотемпературной плазме [1] в плазмподобных средах типа комплексной плазмы [2], в плазме разряда [3] и в неравновесных фазовых переходах [4, 5] и др. Процессы конденсации тонких пленок расплава металла (карбида, оксида) и получения порошков в плазме изучаются теоретически и численно, поскольку использование этих результатов актуально не только в известных технологических процессах, но и может служить раскрытию механизмов процессов в неравновесных средах. В [6, 7] были получены результаты распределения кластеров зародышей фазового перехода по размерам при конденсации паров карбида кремния, был учтен заряд на каплях расплава. В присутствии заряда на кластерах зародышей (капель конденсации) при увеличении размера капель зародышей развивается Рэлеевская неустойчивость ([8]) в результате которой капли, достигнув определенного размера, разрушаются, формируется бимодальное распределение капель по размерам, причем меньшие кластеры относятся к нанометровому диапазону. Неравновесные процессы столкновений, формирующие зародыши, приводят к флуктуационной неустойчивости, следствием которой является различная скорость кластеризации зародышей в зависимости от начальных условий и др. следствия [9].

Стохастическая модель флуктуационной стадии фазового перехода 1-го рода описывает кластеризацию пара как диффузию в фазовом пространстве размеров, неравновесный процесс зародышеобразования длительностью $\sim 10^{-4}$ сек формирует распределение по размерам заряженных капель. Нанесение тонких пленок и производство порошков происходит с помощью RF разряда плазмы, параметры которой определяют величину заряда капель Z_d конденсирующейся фазы, в первом приближении

$$Z_d \sim -\frac{k_B T_e r_d}{e},$$

где k_B , T_e , e – постоянная Больцмана, температура электронов и заряд электрона, соответственно, r_d обозначен размер пылинки, $Z_d = Ze$. Если конденсация пара происходит в плазме, то её рассматривают как плазмopodobную среду или комплексную плазму. Наличие в пылевой плазме большого числа конкурирующих процессов делает её чрезвычайно трудной для аналитического изучения. Свойства пылевой плазмы в теоретических моделях изучают исходя из предположения о монодисперсности распределения по размерам, и используют в расчетах средний размер, без учета величины возможной дисперсии размера и заряда [2], в работе [10] сравниваются величины заряда на пылинке в тлеющем разряде, оцененном по качественной формуле и модели ”ограниченных орбит”(OML) результат различался в 3 раза, это связано с тем, что между пылью и плазмой постоянно происходит обмен энергией и веществом. Поток плазменных частиц (ионов и электронов) на пылевую частицу не прекращается даже тогда, когда заряд последней установился. В типичных лабораторных экспериментах частица размером 10 мкм может накопить на себе заряд $Z_d \sim (10^4 \div 10^5)e$, при плотности свободных электронов $n_e \sim 10^9$ при плотности пыли $n_d \sim 10^4$ можно считать, что влияние заряженной пыли на плазму мало.

Разработанные ранее 3D3V плазменные коды [1, 11] были модифицированы для пылевой плазмы. ”PIC (particle-in-cell)” метод позволил существенно увеличить эффективность вычисления сил в объеме плазмы вблизи пылинки за счет использования разных шагов по времени и по пространству вблизи пылинки и на большом расстоянии от неё [12]. Трехмерный объектно-ориентированный кинетический плазменно-пылевой код ”SUR-Dust” был создан для исследований коллективных и диссипативных процессов в пылевой плазме. Неравновесные функции распределения ионов и электронов по скоростям, самосогласованные электрические поля, создаваемые пылью и частицами плазмы, а также ослабление потоков плазмы пылевым слоем в плазме дивертора получены в предположении неупругого прилипания частиц плазмы к поверхности пыли [12, 13]. Самоорганизацию частиц комплексной плазмы можно обнаружить в численных моделях, образование структур зависит от точности описания взаимодействий и вычисления сил, учитываемых в расчетах [13, 14]. Однако при моделировании

комплексной плазмы важны плазмохимические превращения на поверхности пылинок, фазовый переход [9], изменяющий размеры пылинок, упругое и неупругое отражение плазмы от пыли, распыление, внедрение частиц в материал пылинок, а также пористость и термоэмиссия [15].

Кинетическая модель фазового перехода конденсации пара в плазме разряда [16] и неравновесное распределение заряженных пылинок по размерам согласуются с полным кинетическим $3D3V$ кодом пылевой плазмы [1, 11], в котором заряд рассчитывается самосогласованно с электромагнитными полями плазмы. Для простоты расчеты были проведены для монодисперсной покоящейся пыли, хотя предусмотрено как движение пылинок, так и учет неравновесного распределения пыли, в нашем случае капле расплава карбида кремния.

Образование (*плазменно-пылевых структур*) и (*кластеров зародышей*) можно анализировать как “структуры” самоорганизации, или долгоживущие пространственно-временные образования в многомерных фазовых пространствах.

Эффективные численные методы решения кинетических уравнений [17, 18] делают возможным изучение флуктуационной стадии фазового перехода, когда образование ядер конденсации (этот процесс также называют нуклеацией) приводит к неравновесности функции распределения /ФР/ зародышей по размерам. Используются стохастические свойства модели, а именно винеровские случайные процессы, а также СДУ Ито в форме Стратоновича. Стохастические свойства уравнений математической физики /УМФ/ позволяют при моделировании опереться на строгие доказательства существования и единственности решений систем стохастических уравнений /СДУ/ Ито, как эквивалентного метода описания стохастических процессов, причем численное решение СДУ осуществляется эффективными методами [17], модифицированными для решения задачи Коши квазилинейных УМФ и использования подхода в вычислительных моделях начальной стадии фазовых переходов в различных приложениях [4, 18].

Метод стохастического аналога неравновесных физико-химических процессов использован для расчета распределения по размерам кластеров, что и сделало возможными оценки флуктуаций заряда на каплях, неравновесно распределенных по размерам пылевой плазмы. Установление заряда на пыли в плазме происходит аналогично формированию кластера (в результате неупругих столкновений потоков мономеров и их испарения с поверхности зародышей), но в результате действия потоков ионов и электронов. Другим механизмом зарядки пылинок может быть термоэмиссия. Оба процесса имеют стохастическую природу, результаты расчетов кинетических моделей этих процессов согласованы с кинетическим кодом пылевой плазмы, ранее разработанным для моделирования рассеяния плазмы на заряженной пыли в пристеночной области дивертора токамака.

Кинетические стохастические модели фазового перехода и изучение свойств пылевой компоненты комплексной плазмы с немонодисперсными частицами

могут быть учтены при решении задач:

- формирование наноматериалов с заданными размерами или с уникальными свойствами
- напыление тонких пленок на подложку и создание новых типов покрытий – многослойных, пористых, композитных
- создание установок очистки воздуха от промышленных и радиационных выбросов и при плазменном травлении микросхем
- оптимизация процессов плазменной стерилизации
- расширение возможностей интерпретации экспериментов в пылевой плазме.

Методом стохастической молекулярной динамики получены функции распределения размеров кластеров, изменяющиеся в течение флуктуационной стадии конденсации и, как следствие, оценивается дисперсия заряда на кластерах в единице объема плазмы разряда, приведены корреляционные функции, найденные из численного моделирования кластеризации при развитии неустойчивостей фазового перехода. В пятой части обсуждается метод расчета модели комплексной плазмы, параметры которой требуют повышенной точности расчета самосогласованного электрического поля, для расширения возможностей кода разработана численная модель неравновесной конденсации.

2. Кинетические уравнения и стохастические модели

В работах [16,18] рассмотрена связь уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова /ФПК/ и диффузионного марковского процесса. Решение стохастических уравнений Ито–Стратоновича дополнено учетом скачкообразных процессов. Модель кластеризации зародышей фазового перехода диффузионным процессом и рассмотрение флуктуационной неустойчивости процесса была расширена рассмотрением диспергирования кластеров, если выполнен для кластеров зародышей (заряженных капель расплава материала) критерий неустойчивости Рэлея и происходит деление капель и в распределении кластеров по размерам появляются капли меньших размеров: оно становится неравновесным бимодальным. Модель кинетики начальной стадии фазового перехода продолжает традиции вычислительного эксперимента в физике плазмы и неравновесных процессов.

2.1. Связь уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова и диффузионного марковского процесса. Для одномерной плотности вероятности марковского диффузионного процесса справедливо уравнение Фоккера–Планка–Колмогорова

$$\frac{\partial p(y, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\partial}{\partial y_i} [a_i(y, t)p(y, t)] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} [B_{ij}(y, t)p(y, t)], \quad (1)$$

$$p(y, t_0) = p_0(y).$$

Здесь $y(\cdot)$, $y(0) = y_0$, диффузионный стохастический процесс. Чтобы найти решение уравнения ФПК (1), в дополнение к начальным условиям, мы должны также определить физически значащие граничные условия. Траектории диффузионного процесса с одномерной плотностью вероятности, удовлетворяющей уравнению (1), могут быть найдены как решение следующего уравнения в смысле Ито:

$$y(t) = y_0 + \int_0^t a(y(\tau), \tau) d\tau + \sum_{j=1}^{n_w} \int_0^t \sigma_{.j}(y(\tau), \tau) dw_j(\tau), \quad y(0) = y_0, \quad t \in [0, T],$$

(2)

где $\sigma_{.j}$ обозначает j й столбец матрицы σ , которая определяется через коэффициент диффузии $B(y, t)$ следующим образом:

$$B(y, t) = \sigma(y, t)\sigma^T(y, t).$$

Траектории винеровского процесса непрерывны с вероятностью единица, но не дифференцируемы. Поэтому стохастический интеграл в (2) нельзя рассматривать как обычный интеграл Коши–Риманна или Лебега–Стилтьеса. Стохастический интеграл в (2) определен как среднеквадратичный предел [17, 19].

2.2. Стохастические уравнения с пуассоновской компонентой. Решение задачи Коши для системы СДУ с пуассоновской компонентой сформулировано следующим образом: требуется найти вероятностный процесс $\mathbf{Y}(\cdot)$, $\mathbf{Y}(0) = \mathbf{Y}_0$, который непрерывен справа, с конечными пределами слева для всех $t \in [0, T]$ и для которого с вероятностью 1 для всех $t \in [0, T]$ одновременно устанавливается

$$d\mathbf{Y}(t) = \mathbf{a}(\mathbf{Y}, t)dt + \sum_{j=1}^{n_w} \sigma_{.j}(\mathbf{Y}, t)dw_j(t) + \int_{\Gamma} c(\mathbf{Y}(t^-), t, \theta)\nu(d\theta \times dt), \quad t \in [0, T]$$

(3)

или в интегральной форме

$$\mathbf{Y}(t) = \mathbf{Y}(0) + \int_0^t \mathbf{a}(\mathbf{Y}, \tau)d\tau + \sum_{j=1}^{n_w} \int_0^t \sigma_{.j}(\mathbf{Y}, \tau)dw_j(\tau) +$$

(4)

$$\int_0^t \int_{\Gamma} c(\mathbf{Y}(\tau^-), \tau, \theta)\nu(d\theta \times d\tau), \quad t \in [0, T],$$

где $\mathbf{Y}(t)$ – n_Y -мерный случайный процесс; $\mathbf{W}(t)$ суть n_W -мерный стандартный винеровский процесс; ν – пуассоновская мера на $\Gamma \times [0, T]$ с характеристической

мерой Π , которая выбирается неотрицательной функцией $\pi(\theta, t, \mathbf{Y})$; $a(\mathbf{Y}, t)$ и $c(\mathbf{Y}, t, \theta)$ являются n_Y -мерными векторными функциями; $\sigma(\mathbf{Y}, t)$ – матричная функция $n_W \times n_Y$ -размерности; $\sigma_{.j}(\mathbf{Y}, t)$ – j -й столбец матрицы σ ; \mathbf{Y}_0 – начальное состояние системы; $\mathbf{Y}(t^-)$ – решение в точке $t - 0$.

Характеристическая мера Π определена как:

$$\Pi(B, t, \mathbf{Y}(t^-)) = \int_B \pi(\theta, t, \mathbf{Y}(t^-)) d\theta, \quad B \in \Gamma.$$

Стохастический интеграл относительно пуассоновской меры ν определен как сумма абсолютно сходящегося ряда

$$\int_0^t \int_{\Gamma} c(\mathbf{Y}(\tau^-), \tau, \theta) \nu(d\theta \times d\tau) = \sum_{\tau_k < t} c(\mathbf{Y}(\tau_k^-), \tau_k, \theta_k).$$

Скачкообразный процесс определяет моменты времени $t_1, t_2, \dots, t_k \dots$ на случайных величинах, когда происходят скачки $c(\mathbf{Y}(t_1^-), t_1, \theta_1), \dots, c(\mathbf{Y}(t_k^-), t_k, \theta_k) \dots$. Распределение времен t_k скачков и величины скачков θ_k определяются характеристической мерой Π .

3. Модель кластеризации зародышей и используемые приближения

Моделирование флуктуационной стадии фазового перехода (ФП) первого рода для процесса формирования кластеров осуществляется в условиях «открытой» физической системы. Неравновесные процессы, формирующие кластеры, вызывают флуктуационную неустойчивость ФП. Согласно идеям, рассмотренным ранее, кластеры образуются в результате того, что к зародышу новой фазы прилипает частиц больше, чем испаряется в единицу времени. Результирующий рост кластера размера g описывается случайным диффузионным процессом в фазовом пространстве размеров кластеров $\{G\}$. Кинетическое уравнение Колмогорова–Феллера (типа Фоккера–Планка) для плотности распределения зародышей по размерам $p(g, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial p_r(g, t)}{\partial t} = \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) p_r(g, t) \frac{\partial \Delta \Phi(g, r, t)}{\partial g} \right] + \frac{\partial}{\partial g} \left[D_g(g, t) \frac{\partial p_r(g, t)}{\partial g} \right] + S_\alpha - Q, \quad (5)$$

$$p_r(g, 0) = p_{0g}, \quad \left. \frac{dp_r(g, t)}{dg} \right|_{g=2} = 0, \quad p_r(g, t)|_{g < 2} = 0.$$

Здесь g – размер сферического кластера, измеряемый в числе несжимаемых объемов атомов жидкой фазы, $S_\alpha = S_\alpha(p_\alpha)$ и Q – операторы источника и стока частиц, формирующих кластеры зародышей, т.е. S – источник «мономеров»

пара, объединяющихся в кластер жидкости (расплава), p_α – плотность вероятности частиц источника, $p_r(g, t)$ – ФР зародышей по размеру в единице объема с координатой r плазмы разряда, T – температура; D_g – функционал-коэффициент диффузии в фазовом пространстве $\{G\}$, зависит от температуры T и давления паров p_v , определен в модели как

$$D(g) = g^{2/3} n_l \beta_k (4\pi)^{1/3} (3V_l)^{2/3} (kT)^{1/2} (2\pi m)^{-1/2},$$

где V_l – объем, приходящийся на одну частицу жидкой фазы, $\beta_k = \beta_k(T)$ – коэффициент аккомодации частиц на поверхности кластера–капли, m – масса молекул пара, n_l – плотность частиц жидкой фазы. Используя химические потенциалы жидкости и пара, а также условие равновесия между жидкостью и паром, в пренебрежении скачком давления на границе жидкость–пар, а также оценку заряда на кластере, запишем выражение для свободной энергии Гиббса $\Delta\Phi(g, \vec{r}, t)$ – или термодинамического потенциала образования зародыша, $\Delta\Phi$ измерен в $k_B T$.

Полная свободная энергия формирования кластера $\Delta\Phi$ для случая конденсации может состоять из слагаемых [7]:

$$\Delta\Phi(g, \vec{r}, t) = \Delta\Phi_I + \Delta\Phi_K + \Delta\Phi_Z,$$

где $\Delta\Phi_I = -\varphi(\xi_\beta - \xi_\alpha)g$. Здесь $(\xi_\beta - \xi_\alpha) = \log n_l/n_\infty$ – разность химических потенциалов фаз (пара и капля расплава), φ – форм-фактор.

Для сферических капель энергия межфазного поверхностного взаимодействия

$$\Delta\Phi_K = (4\pi)^{1/3} (V_l^{2/3} \sigma_\infty (1 - 1/3g^{-1/3}) g^{2/3},$$

σ_∞ – поверхностное натяжение плоской границы между паром и каплями.

$$\Delta\Phi_Z = -\frac{Ze^2}{\varepsilon} (1 - 1/\varepsilon_0) g^{-1/3} \log(1 + \frac{K_e}{K_i}),$$

$\Delta\Phi_Z$ – часть свободной энергии, появляющаяся в плазме разряда в результате присоединения или испускания электрона, Ze – зарядовое число капли, e – заряд электрона, K_e, K_i – подвижности ионов и электронов в плазме, ε_0 – диэлектрическая постоянная жидкой фазы.

Величина $p_r(g, t)dg$ определяет число кластеров в интервале размеров $[g, g + \delta g]$ (в единице объема плазмы, где происходит кластеризация с координатой объема r . Область изменения переменных: $g \in [2, g_{max}]$, $t \in [0, t_\infty]$. Функция $p_r(g, t)$ нормирована так, чтобы в единице объема находился хотя бы один кластер, состоящий не менее чем из двух частиц. Макроскопические характеристики газопаровой смеси (такие как число кластеров в единице объема и др.) могут быть вычислены с учетом функции $p_r(g, t)$. Вычислительная реализация математической модели кластеризации (уравнения Колмогорова) требует решения

квазилинейного интегро-дифференциального уравнения в частных производных второго порядка.

Запишем стохастическое дифференциальное уравнение для марковского случайного процесса $g(t)$, плотность распределения которого является решением соответствующего кинетического уравнения (5).

Рассмотрим случай $S = Q = 0$. Уравнению (5) соответствует СДУ в смысле Стратоновича

$$dg(t) = f_1(g, t)dt + \sigma(g, t) \circ dw(t), \quad g(t_0) = g_0,$$

где

$$f_1(g, t) = \left(\frac{D(g, t)}{kT} \frac{\partial \Delta \Phi(g, t)}{\partial g} - \frac{1}{2} \frac{\partial D(g, t)}{\partial g} \right); \quad \sigma(g, t) = \sqrt{2D(g, t)}.$$

Дополнительным фактором неравновесности процесса конденсации является неустойчивость крупных капель, которая связана либо с тем, что пар движется с некоторой скоростью (Вебера), либо – что капли конденсата попадают в условия, когда появляется заряд на поверхности капли. Если учитывать заряд капли, который согласно критерию Рэлея приводит к возникновению явления неустойчивости и к развалу капли, то в уравнении Колмогорова – Феллера (5) следует положить

$$S - Q = \int_G \int_{\Gamma} f(\xi, t) [\delta(g - \xi - c(\xi, t, \theta)) - \delta(g - \xi)] \pi(\theta, \xi, t) d\theta d\xi,$$

где δ – дельта-функция Дирака, а функции c , π и множество $\Gamma \in R$ определяются свойствами среды. Функция π – скалярная неотрицательная функция, которая задает вероятности дробления капель на две или на большее количество мелких частей и также определяет интенсивность распада. Тогда уравнениям для $g(t)$ и $S - Q$ соответствует СДУ в смысле Стратоновича, объединяющее непрерывную и пуассоновскую составляющие:

$$dg(t) = f_1(g, t)dt + \sigma(g, t) \circ dw(t) + \int_{\Gamma} z(g(t^-), t^-, \theta) \nu(d\theta \times dt), \quad t \in [0, T], \quad (6)$$

где функция z определяется типом распада капли, ν – пуассоновская случайная мера на $\Gamma \times [0, T_{finish}]$ с характеристической мерой

$$\Pi(A) = \int_A \pi(\theta) d\theta, \quad A \in \Gamma, \quad \Pi(\Gamma) \leq \infty,$$

$g(t^-)$ – значение функции в точке t слева. Введение зависимости функции $\pi(\theta, g, t)$ от g и t делает пуассоновскую меру неоднородной, но это позволяет формировать более широкий класс марковских процессов, чем в случае, если

$\pi(\theta)$ не зависит от g и t . Таким образом, в стохастическое уравнение для $g(t)$ вводится пуассоновская составляющая, которая позволяет учесть распад капель, и получается СДУ (6). Для численного решения использовался численный метод решения СДУ, рассмотренный, например, в работе [18]. Отметим, что при численном моделировании решения СДУ (6) требуется моделирование не только винеровской составляющей w , но и неоднородной пуассоновской меры ν .

Дополнительное слагаемое в модельном СДУ (6) позволяет учесть распад заряженной капли. При достижении размеров капель, нарушающих условия устойчивости Рэлея, происходит распад капли и дополнительные безразмерные параметры модели, задающие пуассоновскую меру в (6), равны

$$\Gamma = (0, 1), \quad \pi = 0.1, \quad \Pi(\Gamma) = \int_{\Gamma} \pi(\theta) d\theta = 0.1.$$

4. Моделирование кластеризации зародышей фазового перехода

4.1. Сравнение конденсации карбида кремния: нейтральная среда и плазма разряда. Для оценки флуктуаций заряда на кластерах карбида кремния SiC приведем сравнение функций распределения кластеров зародышей по размерам в течение флуктуационной стадии фазового перехода процесса конденсации нейтрального пара (без учета заряда в модели) и с зарядом, приобретенном парами (или кластерами) в плазме разряда с K_e, K_i (подвижность электронов и ионов при соответствующих параметрах для плазмы разряда, обеспечивающего температуру каплей расплава в модельной плазме $T = 1700K$, при давлении паров $p_v = 444$ Па и степени пересыщения $S = 2.0$, с зарядовым числом пыли $Ze = 150$ (в тысячах единиц заряда), с учетом рэлеевской неустойчивости каплей. В этом случае для рассматриваемых коэффициентов диффузии и свободной энергии Гиббса безразмерные параметры модели имеют вид: $a = 4.28$, $b = 27$, $c = 150$. Размер кластера g_{crit} находится из условия минимума производной $\Delta\Phi$ по размеру. Для рассматриваемых физических параметров область флуктуационной неустойчивости образования кластеров находится около точки перегиба производной $g_{crit} = 55$. Учет заряда каплей привел к появлению ”ямы” $\Delta\Phi(g)$ для малых размеров кластера [16]. Согласно критерию Рэлея для заряженной капли радиуса r_d с постоянным зарядовым числом Ze , с поверхностным натяжением на каплях $\sigma = \sigma_{\infty}(1 - 1/3g^{-1/3})$, условие неустойчивости в безразмерной форме имеет вид:

$$W = \frac{Z^2}{16\pi\sigma r_d^3} \geq 1.$$

При достаточно больших размерах заряженная капля будет деформироваться и при достижении определенного размера $\sim r_d$ либо разорвется на две сравнимых по размеру и по величине заряда капли, либо капля ”сбросит” избыточный заряд

путем эмиссии электронов с высокодисперсных сильно заряженных мелких дочерних капель. На Рис.1 сравнивается конденсация паров и то же в плазме разряда с учетом диспергирования капель расплава. Характер диспергирования зависит от свойств материала капли расплава – вязкости и электропроводности. На флуктуационной стадии фазового перехода конденсации пара с учетом

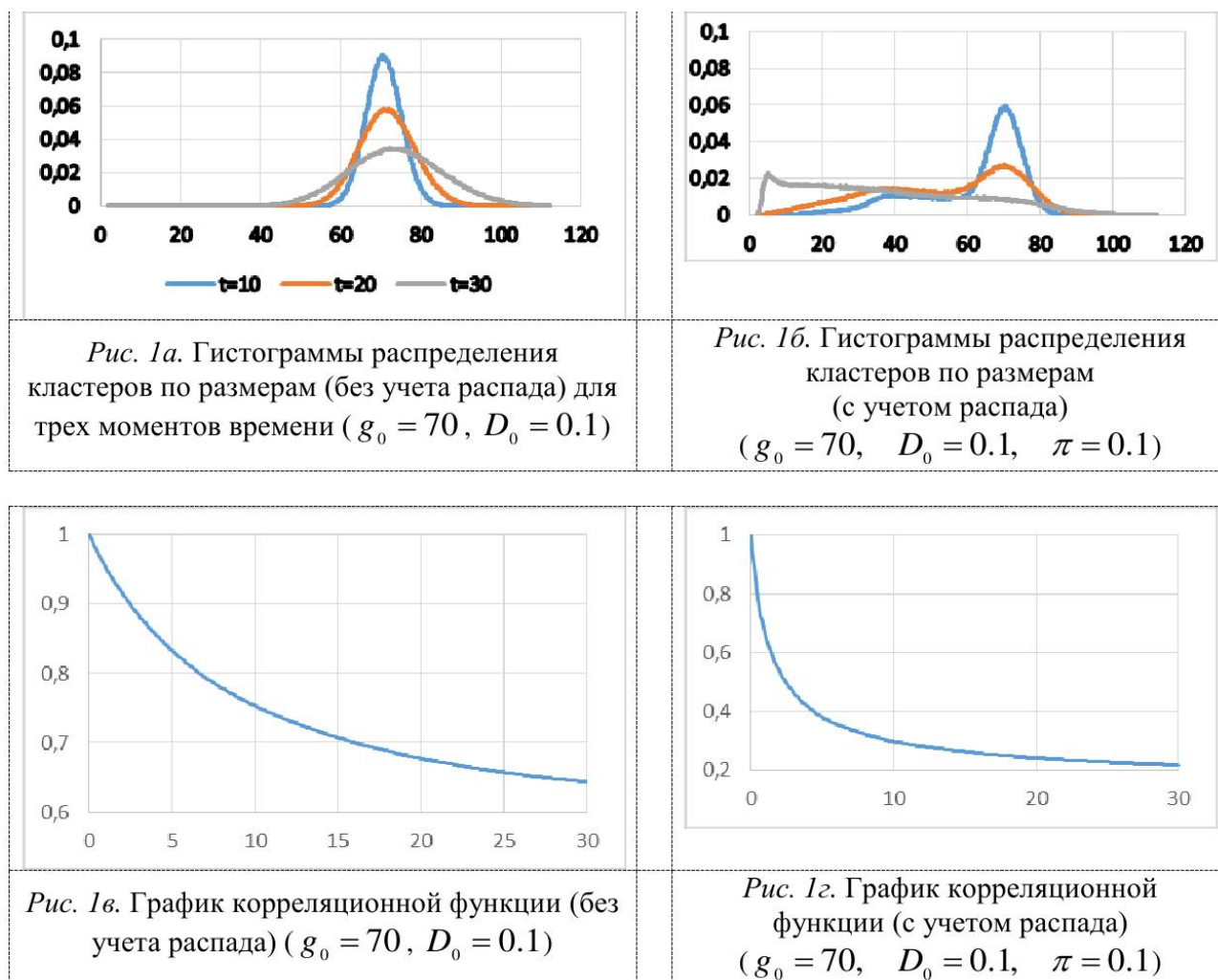


Рис. 1. Сравнение эволюции распределения по размерам зародышей (а,б) и корреляционных функций процессов(в,г): газо–паровой конденсации *SiC* (слева) и то же с учетом заряда на каплях расплава (справа)

Рэлеевской неустойчивости формируется сильнонеравновесное распределение капель по размерам, соответственно растет дисперсия заряда на них в единице объема, корреляция с начальным состоянием убывает с большей скоростью при диспергировании. Для численного моделирования применялся построенный алгоритм моделирования СДУ с пуассоновской составляющей (6), использующий устойчивый численный метод типа Розенброка для решения систем СДУ. Моделировалось 10^6 траекторий с шагом $h = 0.05$ на интервале $[0, 30]$. Отметим, что характерное время образования кластеров – $10^{-6} - 10^{-5}$ сек, а шаг по времени $h = 0.01$ является величиной порядка 10^{-9} сек. Гистограммы плот-

ности распределения кластеров по размерам в разные моменты времени для начального значения $g_0 = 70$ при $D_0 = 0.1$ приведены на Рис.1 : слева сверху (без учета развала капли) справа (с учетом деления капли), когда пуассоновская мера задана параметрами, определяющими интенсивность распада, она равна 0.1. Вид корреляционных функций сравниваемых моделей кластеризации

$$R(t, 0) = \mathbf{E}(g(t) - \mathbf{E}g(t))(g(0) - \mathbf{E}g(0))$$

приведены на рисунке 1 внизу.

4.2. Сравнение численной модели кластеризации зародышей конденсации и эксперимента в плазме разряда. Особое значение для осаждения карбида кремния на поверхность кремния имеет заряд на частицах зародышей конденсации SiC в плазме высокочастотного разряда. В пленарном докладе на 7th ICRP and 63rd GEC, October 4-8, 2010, Paris, France S. L. Girshick, A. M. Boies, P. Agarwal, J. Berndt, E. Kovacevic, L. Boufendi “The Spatiotemporal Evolution of an RF Dusty Plasma: Comparison of Numerical Simulations and Experimental Measurements” были приведены результаты сравнения измерений размеров кластеров и расчетов (позднее опубликованных [20]) при следующих параметрах разряда: давление 13.3 Па, температура газовой смеси при входе в зону реакции 300 К, частота 13.56 МГц и состав газовой смеси 30 долей аргона и 1 доля силана, наблюдается образование в центре установки через 1 сек двух характерных размеров получаемых зародышей Si , что соответствует двум максимумам на функции распределения зародышей Si по размерам в наших численных моделях. Таким образом, наиболее вероятные размеры (диаметры) сферических зародышей карбида кремния в этом эксперименте следующие: 1 нм и 13-20 нм. Нами проведены численные эксперименты получения зародышей карбида кремния при параметрах: : давление – 0.35 Па, температура паров в зоне реакции – 1500 К, которые также показывают качественное сходство с лабораторным экспериментом ([20]) результаты. А именно в момент окончания флуктуационной стадии (10^{-4} с) наблюдается образование зародышей SiC двух характерных размеров r_d : 0.4 нм и 7.5 нм, условно для центра установки, что соответствует положению 1.3 см в [20].

4.3. Дисперсия размеров (зарядов) кластеров аморфного порошка и кристаллических политипов карбида кремния.. Модели гетерогенного зародышеобразования, играющего важную роль в нанесении тонких пленок карбида кремния, это модели начальной неравновесной стадии фазового перехода 1-го рода (“пар-расплав” “расплав-кристалл/аморфное состояние”), особый интерес представляют расчеты островков-зародышей бездефектных тонких пленок карбида кремния SiC , являющегося термостойким материалом электроники и/или упрочняющим покрытием или наноразмерным порошком.

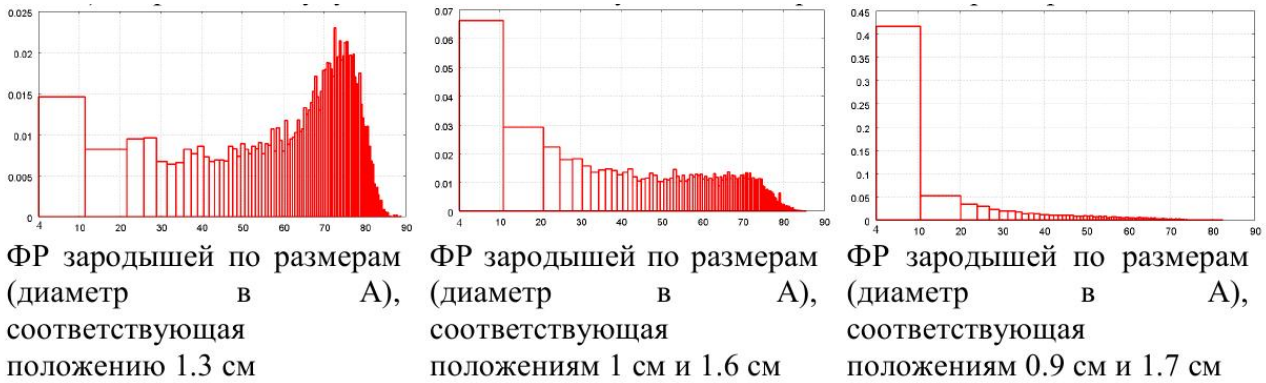


Рис. 2. Моделирование зародышей конденсации SiC в плазме высокочастотного разряда низкого давления, размеры кластеров анализируются по 10^6 траекториям, дисперсия заряда на каплях в единице объема оценивается как $Z_d \sim r_d$, предполагая плазму равновесной, а время зарядки пылинок $\ll 10^{-4}$ сек.

Флуктуации заряда на зародышах карбида кремния и др. материалов, предназначенных для нанесения тонких пленок, предполагается, что возникают вместе с неравновесным распределением зародышей по размерам. Время зарядки капель оценивается как $\tau \sim 0.4 \cdot 10^{-6}$.

Температура паров в зоне реакции 1500 К, давление паров 0,35 Па, температура подложки $Si(100) - 1200K$. для моделей кристаллической сруктуры и аморфных капель карбида кремния при их зарождении в ед. объема плазмы разряда. По оси абсцисс отложен линейный размер основания в Å, для политипа $6H - SiC$ это диаметр окружности, в которую вписан шестиугольник-основание. По оси ординат отложена функция распределения зародышей $f(g, T_{fin})/f_0$ в момент окончания расчета (10^{-4} с). Гистограммы ФР построены с точностью $\sim 1,7 \text{ \AA}$ от линейных размеров в Å для моделей кристаллической сруктуры и аморфных частиц, образующихся из капель карбида кремния при их зарождении в ед. объема. Заряд на кластере пропорционален величине линейного размера r_d :

$$Ze = C \frac{1}{e} r_d 4\pi\epsilon_0 k_B T_e \ln \frac{n_i}{n_e} \sqrt{\frac{m_e}{m_i}},$$

обозначения величин см. (5) в выражении для модели свободной энергии Гиббса, по результатам, приведенным на рисунке 3, где на оси абсцисс отложены линейные размеры зародышей $3C - SiC$, $6H - SiC$ и построены гистограммы распределения по размерам кластеров. По дисперсии можно оценить флуктуации заряда, возникающие при конденсации на начальной стадии процесса фазового перехода. Флуктуации размера кластеров оцениваем по ФР SiC методом стохастической молекулярной динамики, решались следующие задачи:

- модель конденсации паров Si и в плазме разряда с образованием заряженных капель и порошков $3 - SiC$;
- полученные кластеры SiC с заданным содержанием C (углерода газовой

фазы) и значением Ze в $\Delta\Phi_Z$ участвуют в формировании размеров капель зародышей расплава SiC в единице объема или на субстрате $Si(100)$,

- понижение температуры капель приводит к фазовому переходу кристаллизации на стадии образования зародышей кристаллических политипов карбида кремния ($3 - SiC, 6H - SiC$) и аморфных частиц.

Учет заряда и состава кластеров зародышей карбида кремния и алгоритмическая реализация модели требуют решения систем квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка или стохастического аналога столкновительных и флуктуационно-обусловленных процессов. Сначала моделируется конденсация паров, содержащих Si в плазме, затем капли расплава взаимодействуют с углеродосодержащим газом, а затем происходит кристаллизация SiC в объеме или на поверхности субстрата. Проведено сравнение функций распределения сферических зародышей расплава SiC в плазме радиочастотного разряда в зависимости от диаметра капли (в Å) в момент окончания расчета (10^{-4} с) для двух моделей:

- без изменения химического состава капель, когда предполагается, что в плазме радиочастотного разряда из паров образуются сразу зародыши карбида кремния, которые потом растут/деградируют;
- в модели с учетом химических реакций и изменения состава.

Начальные размеры капель Si выбираются из области флуктуационной неустойчивости фазового перехода, определяемого окрестностью критического размера кластера при заданных термодинамических параметрах. Температура зародыша в плазме 1500 К, давление паров 0,86 Па, плотность заряда 94 ед. заряда/ Å^2 , плотность кластеров в плазме разряда $3 \cdot 10^5$, число траекторий решения СДУ 10^6 , шаг алгоритма по времени 10^{-8} сек, число временных шагов 10^4 . Формирование ФР зародышей расплава Si (процесс карбидизации) представляет самостоятельную задачу, результаты которой используются в качестве начальных процентных содержаний углерода в карбиде кремния и начальных условий распределения зародышей SiC по числу атомов в них g . На рисунке 3 приведены зависимости ФР $f(g, T_{fin})/f_0$ зародышей $3C, 6H$ политипов и аморфных кластеров от линейного размера основания (в Å) при заданном содержании углерода в карбиде кремния. Содержание углерода приведено в долях относительно полного, соответствующее стандартному химическому составу, содержания с C_{nucl} углерода в карбиде кремния, т.е. здесь в $3C - SiC$ концентрация углерода в карбиде кремния, соответствующая стандартному химическому составу, с C_{nucl} концентрация углерода в зародыше карбида кремния. При этом стандартное содержание C в SiC составляет 0.98. График представлен для момента окончания флуктуационной стадии фазового перехода длительностью 10^{-4} сек. Сумма ФР зародышей всех политипов с одним химическим составом (одинаковое относительно стандартного, содержание углерода в карбиде кремния) нормирована на 1. Число траекторий, используемых в каждом расчете, 10^6 . Температура паров в зоне реакции 1500 К,

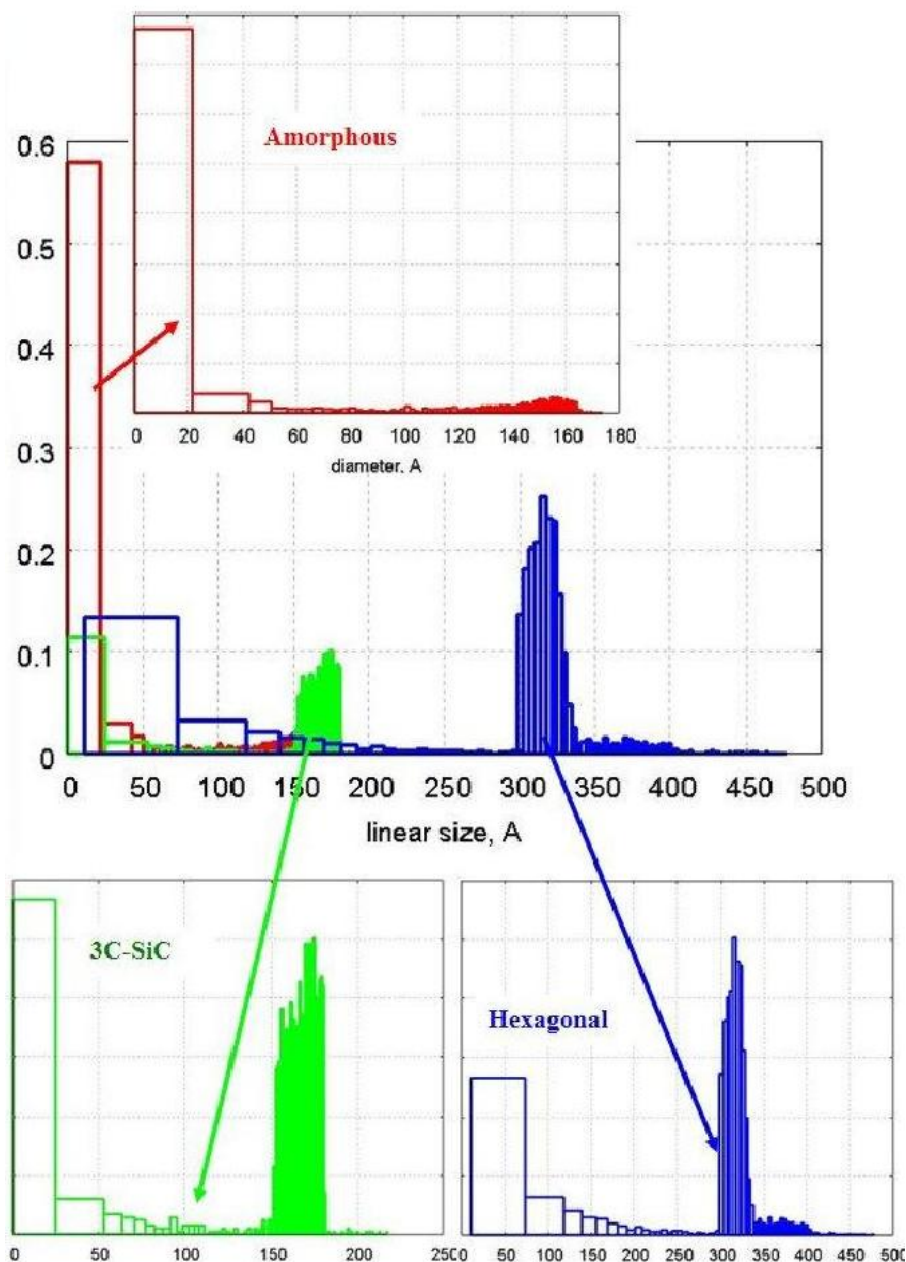


Рис. 3. ФР зародышей кристаллизации SiC разных политипов и аморфного порошка по размерам r_d .

давление паров 0,35 Па, температура подложки $Si(100)$ –1200 К.

5. Кинетическая модель комплексной плазмы

Математическая модель начальной стадии конденсации капель расплава в плазме разработана для включения в многомерный код пылевой плазмы, расчеты которым направлены на детальный анализ сильно неравновесной плазмы, процессов зарядки пыли и расчет влияния полей, создаваемых заряженными пылинками, на плазму, важное при рассеянии плазмы на пыли, что не рассматривается при интерпретации экспериментов в плазме с пылевыми частицами в рамках модели ”ограниченных орбит установившей пропорциональность заряда

на пыли и размера пыли.

Модель комплексной плазмы представлена уравнениями Власова–Пуассона для кинетических функций распределения $f_{i,e}(\vec{r}, \vec{v}, t)$ ионов и электронов (где \vec{r} – координаты и \vec{v} – скорости частицы, t – время), интегрированием которых рассчитывается поток плазмы на пыль, причем в 3D кинетической модели комплексной плазмы учитываются влияние флуктуации заряда пылинок на параметры течения плазмы и процесс неупругого столкновения ионов и электронов с пылью, изменяющие заряд на пыли.

В работе [12] была решена численно система уравнений Власова–Пуассона:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \left(\vec{v}_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} \right) + (F_{ext}(\vec{r}) + e_\alpha \vec{E}(\vec{r})) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} = I_\alpha + C_\alpha,$$

$$F_{ext}(\vec{r}) = -\nabla\varphi, \Delta\varphi = -4\pi \left(\rho_d + \sum_\alpha \rho_\alpha \right), \rho_\alpha = e_\alpha \int f_\alpha d\vec{v},$$

где индексы $\alpha = e, i$ относятся к сорту частиц плазмы, а индекс d – к частицам пыли, $f_\alpha = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ – функция распределения частиц сорта α в 3D3V фазовом пространстве координат \vec{r} и скоростей \vec{v} , I_α – объемные источники частиц плазмы, отражающие процесс ионизации; C_α обозначены стоки (источники) частиц плазмы на поверхности пыли, e_α, m_α – заряд и масса частицы плазмы, а ρ_α – их вклад в плотность заряда. Для решения этой системы используется метод частиц в ячейке PIC (particle-in-cell). При этом частицы плазмы агрегируются в крупные (модельные) частицы с тем же соотношением $\frac{e_\alpha}{m_\alpha}$, что и у реальных частиц, уравнение движение модельных частиц совпадает с уравнением движения реальных частиц:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_\alpha^j}{dt} &= \vec{v}_\alpha^j, \\ \frac{d\vec{v}_\alpha^j}{dt} &= \frac{1}{m_\alpha} (F_{ext}(\vec{r}_\alpha^j) + e_\alpha \vec{E}(\vec{r}_\alpha^j)), \\ &\alpha = e, i, \end{aligned}$$

где F_{ext} – внешняя (гравитационная, магнитная), $e_\alpha \vec{E}(\vec{r}_\alpha^j)$ – самосогласованная сила, действующая на частицы плазмы.

Чтобы рассчитать самосогласованное поле $\vec{E}(\vec{r})$, был разработан численный метод PPPM (particle-particle particle-mesh) [12], значительно повышающий точность расчёта сил взаимодействия, действующих в пылевой плазме. При расчёте поля происходит разбиение процедуры его вычисления на две части: одна должна быть локализована на расстоянии нескольких длин Дебая, а другая часть должна допускать аппроксимацию на пространственной сетке с шагом порядка длины Дебая. Это достигается добавлением к обеим частям вспомогательной

функции ψ , которая выбирается так, чтобы скомпенсировать плотность заряда облака экранировки каждой пылевой частицы.

$$\vec{E}(\vec{r}_\alpha^j) = -\nabla \sum_k \left(\frac{Q_d^k}{r_{jk}} + \psi(Q_d^k, \vec{r}_{jk}) \right) - \tilde{\nabla} \tilde{\varphi},$$

$$\tilde{\Delta} \tilde{\varphi} = -4\pi \tilde{\rho},$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}_j) = \sum_{\alpha=e,i} e_\alpha \sum_k \Lambda((\vec{r}_j), \vec{r}_k) + \sum_k \Delta \psi(Q_d^k, \vec{r}_{jk}),$$

Q_d^k – заряд на k -ой пылинке, λ – формфактор. В случае низкой плотности пыли в качестве такой функции естественно взять функцию потенциала, создаваемого облаком, экранирующим точечный заряд, равный заряду пылинки. Тогда

$$\frac{Q_d^k}{r_{jk}} + \Psi(Q_d^k, \vec{r}_{jk}) = \frac{Q_d^k}{r} \left(1 + \frac{a_d^k}{\lambda_D} \right)^{-1} \exp \left(-\frac{r - a_d^k}{\lambda_D} \right).$$

В уравнениях, описывающих движение пылинок, учитывается то, что их заряд, импульс и температура изменяются согласованно с параметрами плазмы:

$$\frac{d\vec{r}_d}{dt} = \vec{v}_d,$$

$$\frac{m_d d\vec{v}_d}{dt} = F_{ext} + Q_d \vec{E}(\vec{r}_d) + \sum_{\alpha=e,i} \oint m_\alpha \vec{v}_\alpha \vec{v}_d d\vec{S},$$

а заряд и температура пылинок связаны с потоками заряда и энергии электронов и ионов плазмы на поверхности пылинок:

$$\frac{dQ_d}{dt} = \sum_{\alpha=e,i} \oint e_\alpha f_\alpha \vec{v}_d d\vec{S},$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \sum_{\alpha=e,i} \oint \frac{m_\alpha v^2}{2} f_\alpha \vec{v}_d d\vec{S}.$$

Кинетический объектно-ориентированный код ”*SUR – Dust*” позволяет моделировать кинетические явления в $3D3V$ фазовом пространстве. Параметры вычислительного эксперимента: число узлов пространственной сетки составляло 10^5 , число макрочастиц 10^7 и число пылинок в расчетной области порядка 10^2 .

Параметры плазмы и пылевого слоя: размер области расчета $L \sim (100 - 1000)\lambda_D$, характерное пролетное время ионов $\sim (1000 - 10000)(1/\omega_p)$. Здесь λ_D , V_T и ω_p – длина Дебая, тепловая скорость и плазменная частота электронов

соответственно. Начальная концентрация плазмы $n_0 = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, начальная температура плазмы $T_0 = 1 \text{ эВ}$, размеры пылевых частиц R_g варьируются от 0,3 до 3 мкм, концентрация пыли n_d варьируется в диапазоне $(1—8)10^6 \text{ см}^{-3}$, т.е. среднее расстояние R_g между пылинками составляет около 100 мкм. Из этих параметров вытекает важное для классификации модели соотношение $r_d \leq \lambda_D \leq R_g$.

Сравнение сечений рассеяния плазмы на монодисперсных пылинках, σ_{exp} , полученных в численном эксперименте и рассчитанных при тех же параметрах плазмы σ_{00} (в приближении OML–модели), указывает на их заметное различие. В кинетических расчетах были учтены такие процессы, как

- длинномасштабное отталкивание пылинок в потоке плазмы,
- притяжение, возникающее из-за асимметрии потока плазмы на частицу при взаимной экранировке пылинками друг друга,
- притяжение вследствие кулоновского рассеяния плазмы при взаимном затенении пылинок и
- неупругие столкновения с поверхностью пыли.

В численном эксперименте исследовались процесс зарядки пылинки, а также зависимость параметров зарядки пыли от радиуса пылинок и крупности модельных частиц. Равновесный заряд на пыли слабо(логарифмически) зависит от ”крупности” модельных частиц, поэтому сильные столкновения ”частица–пылинка” в PIC модели хорошо отражает поведение комплексной плазмы и равновесный заряд пылинок практически линейно зависит от их радиуса, а дисперсия распределения кластеров по размерам и вид ФР отражает флуктуации заряда на каплях.

В таблице из [13] было приведено сравнение расчетов сечений рассеяния плазмы на пыли в численном эксперименте (σ_{exp}) и по модели ”ограниченных орбит”(σ_{00}). При $r_d = const = 0,5\lambda_D$ варьировалась плотность пыли (расстояние между пылинками, R_g), с уменьшением концентрации пыли сравнение сечений указывает на заметные различия в сравниваемых величинах сечений, что подчеркивает роль расчета полей. При варьировании размера пыли r_d (в единицах λ_D) при плотности $n_d = const$ в экспериментах получены сечения рассеяния плазмы на пылинках. Сравнение σ_{exp} и σ_{00} для монодисперсной покоящейся пыли с размерами $r_d = 0.5 \cdot \lambda_D$, а также с $r_d = 0.3 \cdot \lambda_D$, $r_d = 0.2 \cdot \lambda_D$ и $r_d = 0.1 \cdot \lambda_D$ показывают, что различие соответственно составляет 0.33, 0.84, 1.89 и 0.96. Расчеты неравновесных распределений по размерам пылинок в плазме расширяют изучение фундаментальных свойств комплексной плазмы, а стохастические флуктуации заряда из-за различных размеров пылинок можно рассмотреть как основу механизма ускорения Ферми в пылевой плазме.

6. Заключение

Для решения задач наноструктурного материаловедения следует учитывать самосогласованные модели *плазмподобных сред*, к которым можно отнести комплексную плазму с ионами различной кратности заряда и заряженной пылью, плазму твердого тела, дефекты кристаллической решетки, магнитные домены и т.д. Термин “*открытость*” моделируемых систем означает переменность числа частиц в расчетной области и/или несохранением полной энергии в системе за счет объемных источников и потоков через ее границы. Приведенные примеры показывают, что численная модель конденсации на флуктуационной стадии фазового перехода в плазме с учетом заряда и Рэлееской неустойчивости позволяет оценить дисперсию заряда в единице объема плазмы, корреляционная функция распределения пылинок по размерам быстро убывает при диспергировании капель, в разряде неравновесность функции распределения по размеру (заряду) различна в зависимости от места конденсации в разрядной трубке, и дисперсия размера пылинок велика при образовании аморфных порошков. Наиболее эффективный подход к зарядке возможен в полном кинетическом коде комплексной плазмы.

7. Благодарности

Работа частично поддержана грантом РФФИ 18-01-00436.

Список литературы

- [1] Сигов Ю.С. Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избр. труды. // Сост. Змиевская Г.И., Левченко В.Д. — М.: Физматлит, НАУКА, (rus) 288 стр., 2001.
- [2] «Elementary Physics of Complex Plasmas» / V.N. Tsytovich, G. Morfill, S.V. Vladimirov, H.M. Thomas. — Springer Berlin/ Heidelberg, 2008.
- [3] Norman G.Ed., Stegailov V.V. Method classical molecular dynamics: idea and reality // Nanostructures. Mathematical physics and modelling. — 2011. — Vol. 4, no. 1. — P. 31–58.
- [4] A kinetic stochastic model of blistering and nanofilm islands deposition: self-organization problem / G. I. Zmievskaia, A. L. Bondareva, V. D. Levchenko, T. V. Levchenko // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2007. — Vol. 40. — P. 4842–4849.
- [5] Zmievskaia G. I., Bondareva A. L., Levchenko T. V. Computer Simulation Model for First-Order Phase Transition Fluctuation Stage // Defect and Diffusion Forum. — 2010. — Vol. 297–301: Diffusion in Solids and Liquids V. — P. 502–507.
- [6] Zmievskaia G. I., Bondareva A. L. Crystalline islands of semiconductor films // Plasma Physics Reports. — 2011. — Vol. 37, no. 1. — P. 87–95.
- [7] Averina T.A., Zmievskaia G.I. Numerical modeling of the initial fluctuation condensation stage with charge drops // IOP Conf.Series: Mater. Science and Eng. — 2016. — Vol. 158, no. 1. — P. 58–83.

- [8] Аверина Т.А., Змиевская Г.И. Диспергирование кластеров расплава карбида кремния // Nonequilibrium processes. Vol. 1. Kinetics and plasma / Ed. by S. M. Frolov, A. I. Lanshin. — Torus Press, 2018. — P. 232–242.
- [9] Змиевская Г.И. Флуктуационная стадия фазового перехода // «Энциклопедия низкотемпературной плазмы» (Сер. Б). Ред. В.Е. Фортов. — 2009. — Vol. VII, Матем. моделирование в низкотемпературной плазме, no. кн.3, Ред. Ю.П. Попов. — P. 58–83.
- [10] Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Учет процесса зарядки твердых частиц при моделировании эволюции пылевой компоненты плазмы в нормальном тлеющем разряде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, Изд.: НИИ механики МГУ им. М. В. Ломоносова. — 2011. — Vol. 11, no. 1. — P. 9.
- [11] Иньков Л.В., Левченко В.Д., Сигов Ю.С. Численное кинетическое моделирование динамических процессов в пылевой плазме // Прикладная Физика. — 2000. — no. 3. — P. 38–145.
- [12] Иньков Л.В. Методы расчета самосогласованного электрического поля в задачах кинетического моделирования пылевой плазмы // Математическое моделирование. — 2003. — Vol. 15, no. 7. — P. 46–54.
- [13] Рассеяние плазмы на зародышах металлических капель вблизи поверхности / Г.И. Змиевская, Л.В. Иньков, Т.В. Левченко, В.Д. Левченко // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2004. — no. 5. — P. 106–112.
- [14] Левченко В.Д. Асинхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений // «Будущее прикладной математики. Лекции для молодых исследователей». Под ред. Г.Г. Малинецкого. — 2005. — no. — М.: Едиторал УРСС. — P. 213–243.
- [15] Змиевская Г.И. Стохастическое моделирование неравновесных процессов // В кн. "Будущее прикладной математики. Лекции для молодых ученых: от идей к технологиям" / Под ред. Г. Г. Малинецкого. — 2008. — Vol. М.: КомКнига/URSS. — P. 255–330.
- [16] Аверина Т.А., Змиевская Г.И. Неравновесная стадия фазового перехода первого рода: стохастические модели и алгоритмы решения // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2017. — no. 115. — P. 32.
- [17] Аверина Т.А. Численные методы. Алгоритмы моделирования систем со случайной структурой // учебное пособие для вузов. — М: Изд. Юрайт <http://www.urait.ru/catalog/422680>, 2018.
- [18] 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 // Applied Numerical Mathematics. — 2015. — Vol. International Conference «Difference Schemes and Applications» in Honor of the 90-th Birthday of Professor V.S. Ryaben'kii. — P. 15–29.
- [19] Averina T. A. Statistical Simulation Methods for a Nonhomogeneous Poisson Ensemble // Numerical Analysis and Applications. — 2009. — Vol. 2, no. 4. — P. 289–301.
- [20] Romain Le Picard, Girshick Steven L. The effect of single-particle charge limits on charge distributions in dusty plasmas // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2016. — Vol. 49. — P. 095201.