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

Препринты ИПМ • Препринт № 149 за 2019 г.

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

Змиевская Г.И.

Структуры самоорганизации
пористости в твердом теле

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Змиевская Г.И. Структуры самоорганизации пористости в твердом теле // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 149. 15 с. <http://doi.org/10.20948/prepr-2019-149>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-149>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

Г.И. Змиевская

**Структуры самоорганизации пористости
в твердом теле**

Москва — 2019

Змиевская Г.И.

e-mail: zmig@mail.ru

Структуры самоорганизации пористости в твердом теле

Компьютерное моделирование зарождения пористости при имплантации ионов инертного газа проведено на основе уравнений кинетической теории начальной стадии фазового перехода - флуктуационной нуклеации. Стохастическая молекулярная динамика, использующая систему уравнений Ито в смысле Стратоновича, позволяет анализировать образование кластеров вакансионно-газовых пор в зависимости от их неравновесных функций распределения как по размерам, так и по декартовым координатам объема слоев. Самоорганизация в фазовом пространстве стохастических динамических переменных возникает вследствие дальнедействующего коллективного упругого взаимодействия пор в решетке при условии «открытой» физической системы имплантации ионов в решетку за короткое время нуклеации (менее 100 микросекунд). Примеры структур представлены для условий флуктуационной неустойчивости фазового перехода в тонком слое карбида кремния при облучении Xe^{++} с энергией ионов 5 -10 кэВ.

Ключевые слова: кинетическая теория, стохастическое моделирование, пористость, карбид кремния, кластеры пор, структуры самоорганизации.

Galina Ivanovna Zmievskaya

e-mail: zmig@mail.ru

Structures Self - Organization of Porosity in Solid

Computer simulations of porosity nucleation under implantation inert gas ions carried out on the basis of equations kinetic theory of initial stage of phase transition - fluctuation nucleation. Stochastic molecular dynamics which use set of Ito equation in Stratonovich sense allows to analyze the formation of structures vacancy - gas pore clusters in dependence on their non-equilibrium distribution functions from both: size and Cartesian coordinates of the volume of the layers. The self - organization in phase space stochastic dynamical variables appears due to long - range collective elastic interaction of pores in lattice under condition "open" physical system of ions implantation in the lattice at short time of nucleation (less to 100 microsecond). The examples of structures are presented for conditions of fluctuation instability of the phase transition in a thin layer of silicon carbide upon irradiation with Xe^{++} with an ion energy of 5 -10keV.

Key words: kinetic theory, stochastic simulation, porosity, silicon carbide, pore clusters, self-organization structures.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 18-01-00436

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Численное моделирование зарождения пористости в образце.....	4
Стохастическая молекулярная динамика: описание	6
Кинетические и стохастические уравнения модели	6
Результаты и обсуждение.....	9
Благодарности.....	14
Список литературы.....	14

ВВЕДЕНИЕ

Модель фазового перехода рассмотрена в численном эксперименте, основанном на теории стохастических динамических переменных [1]. Среди процессов, изменяющих функциональные свойства поверхностей, важную роль играют фазовые переходы 1-го рода [2], такие как конденсация пара в объеме плазмы разряда на поверхности подложки [3], образование вакансионно-газовых пор в кристаллической решетке материала [4,5], кристаллизация, плавление и многие другие явления взаимодействия плазмы с поверхностями [6], устройствами, установками и т. д. На начальной стадии фазовых переходов с характерным временем ~ 100 мксек зародышами новой фазы являются капли расплава при конденсации пара или вакансионно-газовые поры при растворении газа в кристаллической решетке.

Имплантация ионов в твердое тело сопровождается фазовым переходом 1-го рода, который проявляется как пористость в решетке. Изучение механизмов образования зародышей неточечных радиационно-индуцированных дефектов (или "блистеров") предполагает использование нестационарного кинетического уравнения (Колмогорова-Феллера и Эйнштейна-Смолуховского) с нелинейными коэффициентами, описывающими процессы нуклеации как кластеризацию зародышей и их броуновское движение в фазовом пространстве размеров кластеров и декартовых координат в решетке. Устойчивый метод решения стохастических дифференциальных уравнений Ито в форме Стратоновича, который используется при анализе динамики нуклеации, был разработан ранее. Стохастические динамические переменные задачи анализируются как плотность вероятности случайных процессов или как функция распределения кинетических уравнений в частных производных молекулярно-кинетической теории. Дальнейшее взаимодействие зародышей вакансионно-газовых пор в единице объема возникает за счет косвенных сил упругости в решетке коллективной природы, что приводит к созданию структур кластеров пор

(«предтрещин» в образцах). Компьютерное моделирование может быть использовано для прогнозирования неточечных дефектов решетки.

Молекулярная динамика / MD / - это численный метод для моделирования на атомном уровне движения имплантированных частиц. Современные представления о механизмах повреждений кристаллической решетки каскадами имплантированных атомов и образования точечных дефектов основаны на моделировании методами Монте-Карло и МД. В результате интегрирования классических уравнений Ньютона анализируется динамическое развитие системы состояния атомов.

Численный метод стохастической молекулярной динамики [3–6] семейства методов Монте-Карло [7] был разработан для решения задач кинетической теории (в частности, для модели неравновесной стадии фазового перехода), которая отличается от МД, поскольку в ней используются стохастические дифференциальные уравнения / СДУ / как характеристики движения, при выводе которых использовано точное соотношение коэффициентов стохастической задачи (дрейфа и стохастической диффузии в СДУ) с коэффициентами уравнений в частных производных кинетической теории, вытекающих из рассмотренных задач и моделей их аппроксимации.

Выбор алгоритмов для решения SDE также важен. Изучение свойств карбида кремния является актуальным [8] при конструировании автомобильной, аэрокосмической и ракетной техники как с точки зрения получения наноразмерных порошков при конденсации пара для композитов, так и при исследовании радиационных повреждений защитных покрытий, где появление структур пор приводит к развитию микротрещин.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАРОДЫШЕЙ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА И ПОРИСТОСТИ В ОБРАЗЦЕ

Механизм образования пористости, рассматривается как результат фазового перехода на его начальной неравновесной стадии и связан с генерацией вакансий при облучении ионами инертного газа, т. е. возникают дефекты в кристаллической решетке.

Модель процесса представлена суперпозицией двух случайных процессов: (1) диффузией в фазовом пространстве $\{G\}$ размеров зародышей [2], или кластеризацией дефектов, и (2) броуновской диффузией их центров масс в образце, состоящем из двух слоев (карбида кремния и металла).

Вычислительная область показана на рис. 1. Первоначально поры в слоях распределены равномерно, и рассматриваются несколько начальных

распределений по размерам (дельта-функция, равновесное распределение и др.). Дефекты в кристаллической решетке описываются неравновесной функцией распределения по размерам, их движение происходит под действием суммы потенциалов, учитывающих взаимодействие дефектов друг с другом, с границами слоев и ряд других взаимодействий, зависимость потенциала от расстояния между дефектами и упругих свойств решетки выводится методом диаграмм Фейнмана с учетом свойств акустических фононов решетки и Фриделевских осцилляций электронной плотности.

Каждая пора испытывает влияние всех соседей через изменение колебаний акустических фононов при появлении дефектов, что определяет коллективный характер процессов в твердом теле. Таким образом, потенциал пересчитывается при изменении положения дефектов. Расстояние между пора́ми, необходимое для их слияния или остановки их движения, определяет пространственные структуры дефектов. Условия «открытой физической системы», используемой в модели, определяются с помощью термодинамических параметров решетки и имплантированных частиц: энергии ионов ($\sim 5\text{-}10$ кэВ), дозы ионного потока и температуры поверхности образца в каждом расчете модели. При каждом расчете образования пористости эти величины поддерживаются постоянными [4,5].

Рис. 1. Размеры образца (SiC/Mo) и направление потока Xe^{++} относительно тонкопленочных слоёв

Рис. 2. Поверхности равных значений потенциала $U(x,y,z)$ (произв. ед.) косвенного упругого взаимодействия пор в решетке слоя SiC, $T/T_{\text{melt}}=0,53$, T_{melt}

Процесс нуклеации описывается кинетическими уравнениями Фоккера-Планка-Колмогорова и их стохастическим аналогом – уравнениями Ито-Стратоновича. Оцениваются степень дисперсии включений газовых кластеров и их структуры в слоях тонких пленок при воздействии потоков излучения ионов,

которые нейтрализуются на границе образца и образуют кластеры вакансионно-газовых зародышей.

ОПИСАНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Численный эксперимент для метода стохастической молекулярной динамики имеет следующие особенности:

1. СДУ сформулированы, соответствующие коэффициенты связаны с коэффициентами кинетических уравнений; эти коэффициенты должны быть гладкими и дважды непрерывно дифференцируемыми, что обеспечивает условия существования и единственности решения СДУ;

2. дискретная модель среды включает стохастические динамические переменные [1], описывающие кластеризацию частиц (вакансий и газа); эта модель определяет энергию Гиббса образования зародышей, соответствующее броуновское движение этих ядер определяется потенциалами взаимодействия неподвижной поры с другими порами в решетках слоев образца и законами сохранения;

3. выбор формы Стратоновича для СДУ Ито позволяет упростить представление стохастических интегралов при решении систем СДУ, решение которых заменяет решение уравнения в частных производных;

4. траектории случайного процесса должны быть проанализированы в терминах плотности переходных вероятностей марковских процессов для уравнений Колмогорова и нахождения кинетических функций распределения кластеров по размерам в единичном объеме и распределения дефектов в образце по глубине для данных моментов времени.

КИНЕТИЧЕСКИЕ И СТОХАСТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим модель флуктуационной стадии формирования пористости. Процессы кластеризации представлены диффузией в фазовом пространстве размеров кластеров $\{G\}$. Идея использовать случайный марковский процесс позволяет сформулировать задачу в виде уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова (ФПК) для плотности вероятности распределения $f(g, t)$ кластеров по размерам, в уравнении (1), где источник «мономеров» (вакансий и имплантированного газа) обозначен S_α [3-5]:

$$\frac{\partial f(g, t)}{\partial t} = \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial g} \left[D(g, t) f(g, t) \frac{\partial \Delta \Phi(g, t)}{\partial g} \right] + \frac{\partial}{\partial g} \left[D(g, t) \frac{\partial f(g, t)}{\partial g} \right] + S_\alpha, \quad (1)$$

с начальными условиями

$$f(g, 0) = f_0(g, 0), \quad \left. \frac{df(g, t)}{dg} \right|_{g=2} = 2, \quad f(g, t) \Big|_{g=2} = 0.$$

Здесь g – размер кластера или число несжимаемых объемов “мономеров” имплантированного газа объеме поры, $D(g, t)$ – коэффициент диффузии в пространстве размеров кластера $\{G\}$, который зависит от температуры образца T и давления газа, $D(g, t) \sim g^{2/3}$, $\Delta\Phi$ – свободная энергия образования зародышей (или энергия Гиббса), которая зависит от разности химических потенциалов фаз, от поверхностного натяжения поры, от упругих свойств слоев и от расстояния от границы между слоями.

Значение $f(g, t) dg$ определяет количество зародышей в диапазоне размеров $[g, g + \Delta g]$ (на единицу объема среды). Диапазон изменения переменных составляет $g \in [2, G]$, $t \in [0, \infty]$.

Уравнение Эйнштейна-Смолуховского для броуновского движения центров масс кластеров дефектов имеет вид

$$\frac{\partial f_g(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[D_r(\vec{r}, t) \frac{\partial f_g(\vec{r}, t)}{\partial r} \right]}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial \left[\frac{\vec{F}(\vec{r}, t)}{M_g \gamma} f_g(\vec{r}, t) \right]}{\partial \vec{r}} - Q, \quad (2)$$

граничные условия (периодические по x и y) и по оси z выбираются аналогично [5], Q – сток кластеров. Распределение $f(g, t)$ из (1) позволяет найти M_g (массы кластеров) для (2). Проекция силы $F(r, t)$ на направление потока z равна $F_z = -\partial U(x, y, z) / \partial z$, где $U(x, y, z)$ – суперпозиция потенциалов косвенного упругого взаимодействия дефектов (пор) в слоях друг с другом и с границами расчетной области; $U(x, y, z)$ отражает косвенные самосогласованные взаимодействия, приводящие к упругим силам, связанным с возмущением дефектами колебаний акустических фононов в решетке; расстояние $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x, y, z)$ между дефектами измеряется в единицах межатомных расстояний, в формуле для $U(x, y)$ – где x, y, z являются проекциями расстояния $\mathbf{r}$ на оси координат (см. ниже). Знак потенциала зависит от комбинации модулей упругости.

Стационарная модель (1) для начальной стадии фазового перехода была предложена Я.Б. Зельдовичем [2], идеи которого были развиты в [3-6]. Устойчивые алгоритмы, предложенные в [3] (см. также ссылки в [3]) решения СДУ стали инструментом вычислительных экспериментов для задач кинетики неравновесных быстропротекающих процессов. Здесь мы рассмотрим постановку задачи, опуская описание алгоритмов.

Задача Коши для стохастического дифференциального уравнения в смысле Ито, соответствующего уравнению ФПК (1), имеет вид:

$$X(t) = X(t_0) + \int_{t_0}^t H(\tau, X(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t \sigma(\tau, X(\tau)) dW(\tau).$$

Здесь $H(\tau, X(\tau))$ и $\sigma(\tau, X(\tau))$ являются функционал-коэффициентами сноса и диффузии, W – винеровские случайные процессы. Переменная X может быть представлена стохастическими динамическими переменными: размер кластеров g или/и декартовы координаты $\mathbf{r} = \mathbf{r} \{x, y, z\}$. Чтобы написать СДУ Ито в смысле Стратоновича, заменим уравнение (1) его стохастическим аналогом, используя форму коэффициентов:

$$H_g = -\frac{1}{kT} D_g(g, t) \frac{\partial \Delta \Phi(g, x, y, t)}{\partial g} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_g(g, t)}{\partial g},$$

$$\sigma_g = \frac{1}{q} \sqrt{2D_g(g, t)}, \quad D_g = D_{g0} g^{2/3}$$

СДУ Ито в смысле Стратоновича имеет вид,

$$dg(t) = \left(-\frac{D(g, t)}{kt} \frac{\partial \Delta \Phi(g, t)}{\partial g} + \frac{1}{2} \frac{\partial D(g, t)}{\partial g} \right) dt + \sqrt{2D(g, t)} dw(t), \quad (3)$$

$$t \in [t_0, T_k]; \quad g(t_0) = g_0, \quad g(t) \geq 2.$$

Приращение случайного процесса $dw(t)$ в (3) – модель, соответствующая (1). Аналогично можно представить снос и диффузию в СДУ, чтобы определить координаты $\mathbf{r}$ броуновских частиц (пор) в решетке:

$$H_r = -\frac{1}{\gamma M_g} D_r \frac{\partial U(r)}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{2} \frac{\partial D_r}{\partial \mathbf{r}}, \quad \sigma = \frac{1}{q} \sqrt{2D_r}.$$

СДУ, соответствующее уравнению (2), может быть представлено как

$$d\mathbf{r}(t) = \left(-\frac{F(\mathbf{r}, t)}{M_g \gamma} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_r(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \right) dt + \sqrt{2D_r(\mathbf{r}, t)} dw(t), \quad (4)$$

где потенциал взаимодействия пор в решетке $U_{ij} = U_{ij}(x, y, z)$ имеет вид

$$U_{ij} = \sum_{i \neq j}^N \left(\frac{b_r \left[3/5 - \frac{(x_i - x_j)^4 + (y_i - y_j)^4 + (z_i - z_j)^4}{(r_i - r_j)^4} \right]}{(r_i - r_j)^3} + \frac{a_r \cos(c_r |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{(r_i - r_j)^3} \right),$$

здесь i, j – номера взаимодействующих пор в соответствующем объеме, пронумерованные от 1 до N . Пример проекции поверхности равных значений потенциала $U_{ij}(x, y, z_0)$ в некотором сечении образца (z_0) при концентрации дефектов 10^6 см^{-3} представлен на рис. 2, коэффициенты b_r, a_r, c_r – параметры модели соответствующих слоев решетки. Распределение потенциала в решетке

согласованно определяет расчеты пористости материалов образца с учетом D_r , то есть коэффициента диффузии в фазовом пространстве декартовых координат кристаллической решетки $D_r = D_r(r, t)$; коэффициент D_{r0} связан с физическими параметрами задачи:

$$D_r = D_{r0} \left(1 + \alpha \left(\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \right) \right).$$

Корреляция между концентрациями вакансионно-газовых дефектов в слоях образца и значениями потенциалов устанавливается соответствующей нормировкой [5].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Расчет $f(g, x, y, z, t)$ позволяет найти зависимость распределения пор в слоях образца *SiC/Mo* (рис. 1) от их размеров в слоях перпендикулярных оси в зависимости от Z (расстояния от облучаемой поверхности). На рис. 3а представлены две гистограммы для двух моментов времени: ось абсцисс представляет размеры структур пор (в параметрах решетки), ось ординат представляет количество пор в структуре для потока ионов Xe^{++} 4keV и дозы, составляющей 10^{16} см^{-2} при температуре образца 1532 К. Структура, состоящая из двух пор, учитывается в гистограмме, если расстояние между центрами масс газовых дефектов меньше или равно сумме их радиусов плюс параметр решетки материала. Пористость используется для оценки напряжений в слоях.

a

b

Рис. 3а. Гистограммы зависимости по оси ординат количества пор в структурах вдоль направления облучения образца на единицу объема слоя карбида кремния от их размера по оси абсцисс (в параметрах решетки).

Рис. 3б. Зависимость максимальной длины структур пористости (по оси ординат), связанных с направлением, перпендикулярным потоку Xe^{++} к образцу карбида кремния, от температуры T / T_{melt} по оси абсцисс.

Рис. 3с. Зависимость максимальной длины структур пористости в направлении, перпендикулярном направлению потока Xe^{++} к образцу карбида кремния от T/T_{melt} . По оси ординат длины структур, отнесенные к размеру образца по оси X

Рис. 4. Зависимость наиболее вероятного количества блистеров в протяженных структурах пор (количество дефектов в протяженных структурах отнесено к общему количеству вакансионно-газовых пор в образце) от температуры, приведенной в долях температуры плавления наименее тугоплавкого материала из $3C-SiC-Mo$.

Моделирование имплантации ионов Xe^{++} показало, что во время фазового перехода распределение размеров пор развивается через неравновесные стадии. Рассмотрение броуновского движения дефектов позволяет выявить структуру дефектов, возникающих под действием $U(x,y,z)$. На рис. 3б показано количество структурных дефектов на единицу объема SiC вдоль направления потока газа в зависимости от температуры. Сферические поры разных диаметров образуют цепочки пор и структуры во время броуновской диффузии. Общая длина структур составляет менее 30 параметров решетки $3C-SiC$, который

используется при оценке степени дисперсности среды с включениями пористости и аморфизации. Нестационарное кинетическое уравнение, являющееся уравнением в частных производных второго порядка с нелинейными коэффициентами, решается численно в рамках метода стохастической молекулярной динамики. Получены неравновесные распределения по размерам и координатам структур пор, возникшие на начальной стадии фазового перехода первого рода в объеме. Как при конденсации паров карбида кремния в плазме разряда, так и при имплантации образование структур пор газа в кристаллической решетке поверхности, облучаемой ионами инертного газа, процессы описываются квазилинейными стохастическими уравнениями Ито в смысле Стратоновича. Функции распределения по размерам пор рассчитываются аналогично [6] для капель расплава (нанопорошков). Структуры пористости в тонких пленках рассчитаны с использованием 10^6 траекторий случайных процессов модели.

Рис. 5. Проекция (произвольные плоскости) распределения пористости (поры обозначены белым цветом) в двухслойном образце (см. схему на рис. 1).

Рис. 6а. Поверхность равных значений ФР блистеров по оси ординат (в решетке слоя 3С-SiC, начальное состояние) от расстояний между блистерами (абсцисса y) и расстояния от облучаемой поверхности (абсцисса x) при концентрации ВГД 10^2 см^{-3}

б

Рис. 6б. Поверхность равных значений ФР блистеров в зависимости от расстояний между блистерами и расстояния от облучаемой поверхности в конечный момент времени расчета при концентрации ВГД 10^2 см^{-3} . Обозначение осей, как на Рис. 6а

Рис. 6с. Поверхность равных значений ФР блистеров в конечный момент времени расчета, при концентрации ВГД 10^2 cm^{-3} . Обозначение осей, как на Рис. 6а

Рис. 6d. Поверхность равных значений ФР блистеров в конечный момент времени расчета, при концентрации ВГД 10^4 cm^{-3} . Обозначение осей, как на Рис. 6а

Моделирование неравновесной стадии фазового перехода на начальной неравновесной стадии, представленное в работе, продолжает анализ повреждений в кристаллической решетке, которые анализируются с точки зрения возникновения структур пористости. Сближение блистеров при их движении под действием потенциала упругих сил происходит на временах менее 100 микросекунд, потенциал косвенного упругого взаимодействия является коллективным, поскольку рассчитывается самосогласованным образом. Акустические фононы решетки при образовании дефектов меняют характер колебаний, что было учтено при выводе расчетных формул, изменение координат пор меняет величину потенциала, что заметно влияет на движение неточечных дефектов, и концентрация дефектов также меняет протяженность структур пористости. Проведя расчеты образования повреждений при различных температурах, выяснили, что протяженность структур различна в направлении вдоль направления внедрения ионов инертного газа и перпендикулярно ему, максимум длины достигается при разных температурах, нелинейно зависит от нее.

Образование пространственно-временных структур в фазовом пространстве стохастических динамических переменных представляет новую информацию о поведении модели в открытой физической системе и расширяет представления о кинетике фазовых переходов на флуктуационно неустойчивой стадии и дополняет модели повреждений кристаллической решетки численным анализом образования неточечных дефектов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность Л.И. Михайловой за оформление русской версии препринта, А.Л. Бондаревой и Т.А. Авериной за сотрудничество в модификации численного алгоритма и в визуализации результатов, а также Юрию Горбачеву, руководителю Пятого мини-симпозиума «Физико-химическая газодинамика: модели и моделирование неравновесных процессов» международной конференции по численному анализу и прикладной математике (ICNAAM 2019, Родос, Греция, 23-28 сентября 2019) за полезные обсуждения ее презентации на этом симпозиуме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Arnold L. Random dynamic system.* Springer Monographs in Mathematics, Springer, - 586 p. 1998.
- [2] *Зельдович Я.Б.* К теории образования новой фазы кавитация // ЖЭТФ. Т. 12. No 11–12. - С. 525. 1942.

- [3] Змиевская Г.И. Модель флуктуационной стадии фазового перехода // Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Сер. Б). Т. VII. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. Кн. 3. М.: ЯНУС-К. - С. 101-125. 2009.
- [4] Zmievskaya 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. International Conference "Difference Schemes and Applications" in Honor of the 90-th Birthday of Professor V. S. Ryaben'kii. Vol. 93. July 2015. - pp. 15–29. 2015.
- [5] Змиевская Г.И., Бондарева А.Л. Кинетика образования пор и изменение свойств материалов в численных моделях. "Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования" 10, вып. 4, - С. 802-808, 2016.
- [6] Змиевская Г.И., Аверина Т.А. Флуктуации заряда на каплях расплава карбида кремния в процессе конденсации // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. №280. - 21 с. (doi:10/20948/prepr-2018-280).
- [7] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. Учебное пособие для вузов. Изд.: Academia серия: Прикладная математика, М. , 2006. - 368 р.
- [8] Андриевский Р.А. Основы наноструктурного материаловедения. Возможности и проблемы. Москва БИНОМ. Лаборатория знаний. - 252 с. 2012.
- [9] Zmievskaya G.I., Bondareva A.L., Savchenko V.V. Radiation Damaging of 3C - SiC Lattice: Computer Simulation of Brownian Motion of Non-point Defects// Defect and Diffusion Forum. V. 353. pp. 148-152, 2014.