ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РОСТА ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

© 2016 г. А.Е. КИТАЕВ, А.А. ПОТАПОВ, А.Э. РАССАДИН

ОАО "СКБ РИАП", г. Нижний Новгород,
Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва,
Нижегородское региональное отделение РНТОРЭС им. А.С. Попова
e-mail: kitaev_a_e@mail.ru, potapov@cplire.ru, brat_ras@list.ru

Изучение роста фрактальных структур на поверхности твёрдых тел в настоящее время является актуальной задачей нанотехнологии [1-3].

В данном докладе эволюция такой структуры исследуется в рамках задачи Коши для уравнения Кардара-Паризи-Цванга (КПЦ) [4]:

$$\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{c}{2}\cdot\left[\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial h}{\partial y}\right)^2\right],\quad h(x,y,0)=h_0(x,y)\,, \tag{1}$$

где $h(x,y,t)$ — высота растущей поверхности, c — скорость роста этой поверхности по локальной нормали к ней.

Зададим начальное условие к уравнению КПЦ в виде:

$$h_0(x,y)=H_0(x,y)+\mu\cdot u_0(x,y)\,. \tag{2}$$

В формуле (2) $0<\mu<<1$ — малый параметр, $H_0(x,y)$ — гладкий профиль, $u_0(x,y)$ — регуляризованный фрактальный профиль. В этом случае вместо применения метода характеристик [5, 6] для решения уравнения (1) удобно распространить идеологию доклада [7] на двумерный случай, а именно, на временах $t<t_c^{(0)}$, где $t_c^{(0)}$ — время наступления градиентной катастрофы при $\mu=0$, будем искать высоту поверхности в виде асимптотического ряда по степеням малого параметра μ:

$$h(x,y,t)=H(x,y,t)+\mu\cdot u(x,y,t)+\ldots, \tag{3}$$

тогда её нулевое приближение $H(x,y,t)$ будет удовлетворять уравнению КПЦ, а первое приближение — линейному уравнению в частных производных с переменными коэффициентами:

$$\frac{\partial u}{\partial t}-c\cdot\frac{\partial H(x,y,t)}{\partial x}\cdot\frac{\partial u}{\partial x}-c\cdot\frac{\partial H(x,y,t)}{\partial y}\cdot\frac{\partial u}{\partial y}=0\,. \tag{4}$$

Далее, будем считать, что рост фрактала происходит на поверхности кристалла кубической симметрии в направлении одного из рёбер кристаллической ячейки, поэтому выберем гладкий начальный профиль в следующем виде:

$$H_0(x,y)=A_0\cdot\cos(k_0\cdot x)+A_0\cdot\cos(k_0\cdot y)\,, \tag{5}$$

где $k_0=2\cdot\pi/a$, a — постоянная решётки кристалла, A_0 — характерная амплитуда.

Для этих начальных условий вследствие справедливости для уравнения КПЦ специфического варианта метода разделения переменных нулевое приближение $H(x,y,t)$ представимо как:

$$H(x,y,t)=w(x,t)+w(y,t)\,, \tag{6}$$

где функция $w(x,t)$ удовлетворяет одномерному аналогу задачи Коши (1):

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{c}{2}\cdot\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^2, \quad w(x,0)=A_0\cdot\cos(k_0\cdot x). \tag{7}$$

С другой стороны, хорошо известно, что функция:

$$v(x,t)=-c\cdot\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}, \tag{8}$$

построенная из решения задачи Коши (7), есть разложение Бесселя-Фубини для уравнения Римана [5]:

$$v(x,t)=2\cdot c\cdot k_0\cdot A_0\cdot\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\cdot\frac{J_n(n\cdot k_0^2\cdot A_0\cdot c\cdot t)}{n\cdot k_0^2\cdot A_0\cdot c\cdot t}\cdot\sin(n\cdot k_0\cdot x), \tag{9}$$

где $J_n(\ldots)$ — функция Бесселя $n-$го порядка.

Интегрируя функциональный ряд (9) почленно, найдём [7], что:

$$w(x,t)=2\cdot A_0\cdot\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\cdot\frac{J_n(n\cdot k_0^2\cdot A_0\cdot c\cdot t)}{n^2\cdot k_0^2\cdot A_0\cdot c\cdot t}\cdot\cos(n\cdot k_0\cdot x), \tag{10}$$

то есть нулевое приближение в разложении (3) по формулам (6) и (10) находится аналитически.

Таким образом, задача свелась к решению уравнения (4) с известными переменными коэффициентами (9):

$$\frac{\partial u}{\partial t}+v(x,t)\cdot\frac{\partial u}{\partial x}+v(y,t)\cdot\frac{\partial u}{\partial y}=0, \quad u(x,y,0)=u_0(x,y). \tag{11}$$

Из формулы (9) видно, что $v(\pm L\cdot a,t)=0$ при любом натуральном L, поэтому численное решение задачи Коши (11) удобно искать на прямоугольнике $\overline{\Pi}=[-L\cdot a,L\cdot a]\times[-L\cdot a,L\cdot a]$.

Зададим в этой области сетку с шагом Δ: $x_k=k\cdot\Delta$, $y_m=m\cdot\Delta$, введём разбиение по времени $t_j=j\cdot\tau$ с шагом τ и определим сеточные функции $u_{km}^j\equiv u(x_k,y_m,t_j)$ и $v_k^j\equiv v(x_k,t_j)$, тогда решение уравнения (11) может быть найдено с помощью специфического метода дробных шагов:

$$\frac{u_{km}^{j+\frac{1}{2}}-u_{km}^j}{\tau/2}+\hat{\Lambda}_x u_{km}^{j+\frac{1}{2}}+\hat{\Lambda}_y u_{km}^j=0, \qquad \frac{u_{km}^{j+1}-u_{km}^{j+\frac{1}{2}}}{\tau/2}+\hat{\Lambda}_x u_{km}^{j+\frac{1}{2}}+\hat{\Lambda}_y u_{km}^{j+1}=0, \tag{12}$$

где разностные операторы $\hat{\Lambda}_x$ и $\hat{\Lambda}_y$ есть:

$$\hat{\Lambda}_x u_{km}^j\equiv v_k^j\cdot\frac{u_{k+1,m}^j-u_{k-1,m}^j}{2\cdot\Delta}, \qquad \hat{\Lambda}_y u_{km}^j\equiv v_m^j\cdot\frac{u_{k,m+1}^j-u_{k,m-1}^j}{2\cdot\Delta}. \tag{13}$$

Системы линейных уравнений в (12) решаются методом прогонки. Сеточная функция v_k^j вычисляется по оборванному на $N-$м члене функциональному ряду (9). Оценка точности такого приближения дана в работе [8]. Из этой же оценки легко может быть получено и соотношение между шагом по пространству Δ и шагом по времени τ (при заданном N), гарантирующее устойчивое функционирование метода прогонки.

Граничное условие $u(x,y,t)\big|_{\partial\Pi}$ к разностной схеме (12) - (13) определяется решением четырёх вспомогательных дифференциальных уравнений. Так, на границе $y=L\cdot a$, $x\in[-L\cdot a,L\cdot a]$ для функции $U(x,t)=u(x,L\cdot a,t)$ надо решить задачу:

$$\frac{\partial U}{\partial t}+v(x,t)\cdot\frac{\partial U}{\partial x}=0, \quad U(x,0)=u_0(x,L\cdot a), \quad U(\pm L\cdot a,t)=u_0(\pm L\cdot a,L\cdot a). \tag{14}$$

Устойчивая разностная схема для её решения приведена в докладе [7].

В качестве начального условия к задаче Коши (4) можно выбрать, например, аксиально симметричную функцию Вейерштрасса с центром в точке $(x_*, y_*) \in \Pi$:

$$u_0(x, y) = W_P(\sqrt{(x - x_*)^2 + (y - y_*)^2}), \tag{15}$$

где

$$W_P(\xi) = \sum_{n=1}^{P} a^n \cdot \cos(\pi \cdot b^n \cdot \xi), \quad 0 < a < 1,\ b > 1,\ a \cdot b > 1 \tag{16}$$

— усечённая функция Вейерштрасса [9].

Выводы

Следуя развитой в данном докладе методологии, можно не только получить зависимость высоты растущей поверхности твёрдого тела от времени в каждой точке плоскости (x, y), но также определить известными методами [9] её фрактальную размерность и сравнить эту последнюю с её оценками по данным сканирующей зондовой микроскопии [9]. Причём на каждом шаге по времени также численно можно оценить и энтропию растущей поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бахмацкая А.И., Плуготаренко Н.К.* Моделирование роста фрактальных структур нанокомпозитных материалов для сенсоров газов // Известия ЮФУ. Технические науки. 2014. № 9 (158). С. 118-124.
2. *Федосеев В.Б.* Использование фрактальной геометрии при термодинамическом описании трёхмерных элементов кристаллической структуры // Письма о материалах. 2012. № 2. С. 78–83.
3. *Будаев В.П., Химченко Л.Н.* Фрактальная нано- и микроструктура осаждённых плёнок в термоядерных установках // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Термоядерный синтез. 2008. № 3. С. 34-61.
4. *Kardar M., Parisi G., Zhang Y.C.* Dynamical scaling of growing interfaces // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 889 - 892.
5. *Гурбатов С.Н., Руденко О.В., Саичев А.И.* Волны и структуры в нелинейных средах без дисперсии. Приложения к нелинейной акустике. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 496 с.: ил.
6. *Китаев А.Е., Потапов А.А. Рассадин А.Э.* Временная эволюция фрактального начального условия при росте поверхности // Труды II российско-белорусской научно-технической конференции «Элементная база отечественной радиоэлектроники: импортозамещение и применение» им. О.В. Лосева / Под ред. А.Э Рассадина. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2015. С. 294-297.
7. *Китаев А.Е., Потапов А.А., Рассадин А.Э.* Численно-аналитическая теория возмущений для моделирования роста фрактальной поверхности // IX Всероссийская научная конференция «Математическое моделирование развивающейся экономики, экологии и технологий», ЭКОМОД-2016, [Электронный ресурс]: г. Киров, 4-9 июля 2016 / Сборник материалов конференции. // Под ред. И.Г. Поспелова и А.В. Шатрова. – Киров: изд-во ВятГУ, 2016. С. 262-271.
8. *Китаев А.Е., Потапов А.А., Рассадин А.Э.* Оценка точности сходимости разложения Бесселя-Фубини // Труды XX научной конференции по радиофизике, посвящённой 110-летию со дня рождения Г.С. Горелика (Нижний Новгород, 12–20 мая 2016 г.) / Под ред. С.М. Грача, В.В. Матросова. Нижний Новгород: ННГУ, 2016. С. 284-285.
9. *Потапов А.А., Гуляев Ю.В., Никитов С.А., Пахомов А.А., Герман В.А.* Новейшие методы обработки изображений / Под ред. А.А. Потапова. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 496 с.: ил.