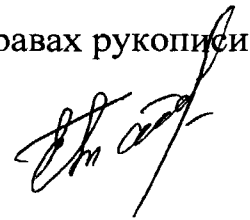


**ГОУ ВПО «СТАВРОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»**

На правах рукописи

04200952512



**Тарасенко Елена Олеговна**

**Математическое моделирование процесса образования  
пленочных структур на подложках**

05.13.18 – «Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание  
ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-  
математических наук,  
профессор **Семенчин Е.А.**

Ставрополь – 2008

## ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК ОСНОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ .....	4
ВВЕДЕНИЕ .....	7
ГЛАВА 1. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК.....	17
1.1. Обзор экспериментальных данных по диффузии в твердых телах .....	17
1.2. Полуэмпирическое уравнение диффузии .....	24
1.3. Корректная постановка задач и методы их решения .....	30
Выводы по первой главе.....	37
ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИОННОГО РОСТА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ПОДЛОЖКАХ.....	38
2.1. Построение математической модели диффузионного роста тонкой пленки на подложке .....	39
2.2. Разрешимость математической модели диффузии в процессе роста тонкой пленки .....	49
2.3. Математическая модель диффузии вещества в различных соприкасающихся средах .....	52
2.4. Численные расчеты по предложенным моделям.....	56
Выводы по второй главе.....	68

ГЛАВА 3. ЭКОНОМИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОИЗВОДСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК .....	69
3.1. Экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок.....	70
3.2. Экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок с учетом затрат на их производство.....	79
Выводы по третьей главе.....	85
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	86
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	88
Приложение 1.....	104
Приложение 2.....	105
Приложение 3.....	106
Приложение 4.....	118

## СПИСОК ОСНОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

$q, q(t, x_1, x_2, x_3)$  – средняя концентрация атомов материала пленки в момент времени  $t$  в точке  $(x_1, x_2, x_3)$ .

$x_1, x_2, x_3$  – декартовы координаты.

$t$  – момент времени.

$T$  – конечный момент времени.

$f$  – функция источника примеси.

$\alpha$  – коэффициент, характеризующий взаимодействие вещества с окружающей средой (или его радиоактивный распад).

$\bar{u}(t)$  – средняя скорость вектора горизонтального переноса.

$u_i = u_i(t, x_1, x_2, x_3), i = 1, 2, 3$  – проекции вектора горизонтального переноса.

$\bar{q}, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3$  – осредненные составляющие соответственно величин  $q, u_1, u_2, u_3$ .

$q', u_1', u_2', u_3'$  – флуктуационные (случайные) составляющие соответственно величин  $q, u_1, u_2, u_3$ .

$K_{ij} = K_{ij}(t, x_1, x_2, x_3), i, j = 1, 2, 3$  – коэффициенты диффузии вещества в окружающей среде.

$Q$  – мощность мгновенного источника, действовавшего в единицу времени  $t_0$  в точке  $(x_0, y_0, z_0)$  (т.е. количество вещества, выброшенного источником в момент времени  $t_0$ ).

$\delta$  – дельта-функция Дирака;

$\varpi$  – скорость гравитационного оседания примеси на подстилающую поверхность.

$v_s$  – результирующая скорость осаждения вещества на подстилающую поверхность.

$\Omega$  – область распространения примеси.

$P(t, x_1, x_2, x_3^0)$  – поток диффундирующего вещества в момент времени  $t$  в точке  $(x_1, x_2, x_3^0)$ .

$H$  – высота источника примеси.

$\Delta E$  – энергия активации диффузии.

$x_{ij}$  – объем производимого продукта  $(i, j)$ , представляющего собой  $j$ -е вещество 2-го типа (подложка), на которое нанесено в виде пленки  $i$ -е вещество 1-го типа,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, n$ .

$a_{ij}$  – число единиц  $i$ -го вещества 1-го типа, затрачиваемых на единицу производства  $(i, j)$ -го продукта.

$\alpha_i$  – общие запасы  $i$ -го вещества 1-го типа на предприятии.

$b_{ij}$  – число единиц  $j$ -го вещества 2-го типа, затрачиваемых на единицу производства  $(i, j)$ -го продукта.

$\beta_j$  – общие запасы  $j$ -го вещества 2-го типа на предприятии.

$z_{ij} = z_{ij}(T, t^0, h, c_1, c_2)$  – затраты (в денежном исчислении) на производство единицы  $(i, j)$ -го продукта.

$I$  – общие инвестиции (в денежном исчислении) в производство.

$t^0$  – температура протекания технологического процесса  
(температура образования тонкой пленки).

$h$  – толщина пленки.

$c_1$  – стоимость единицы массы пленки.

$c_2$  – стоимость единицы массы подложки.

$p_{ij}$  – стоимость единицы  $(i, j)$ -го продукта на рынке.

$u_{ij}$  – объем выпуска (число единиц) производимого продукта за  
единицу времени.

## ВВЕДЕНИЕ

**Актуальность темы диссертационной работы.** В последние годы довольно часто встречается утверждение о свершившемся переходе человечества в новую эпоху – эпоху всеобщей информатизации. Эта истина столь же справедлива, сколь и банальна. Действительно, информационный обмен резко возрастает, а современные технические возможности позволяют записывать, хранить, быстро передавать, обрабатывать и воспроизводить огромные массивы информации, причём объём памяти и быстродействие средств вычислительной техники растут необычайно. Этот рост связан с бурным развитием цифровой микроэлектроники, которое происходит в направлении повышения степени интеграции на базе традиционных схемотехнических решений, когда носителем информации является электрическое состояние ячеек схемы, построенных на активных и пассивных элементах, а также в направлении повышения быстродействия интегральных схем. Степень интеграции до недавнего времени повышалась за счёт уменьшения минимального топологического размера элементов и ячеек, а также за счёт увеличения размеров кристаллов. Достигнутые в настоящее время результаты – десятки мегабит в кристалле и единицы наносекунд по времени выборки бита – выглядят достаточно впечатляюще. Однако именно сейчас в развитии цифровой микроэлектроники наметились серьёзные проблемы, которые связаны с принципиальными ограничениями конструктивно-технологических приёмов, лежащих в основе планарной технологии, и касаются прежде всего ограничений

по степени интеграции. Анализ перспектив развития этого направления показывает, что как по технологическим, так и по принципиальным физическим причинам минимальный топологический размер не может быть существенно ниже практически достигнутой сегодня величины порядка 1 мкм: возникают неразрешимые в данном подходе проблемы взаимовлияния ячеек и соединений между ними – так называемых токоведущих дорожек.

Необходимость освобождения от «тирании межсоединений» диктует потребность поиска новых видов носителей информации и принципов её обработки и соответственно новых материалов. В качестве подобных носителей уже сравнительно долгое время используются разнообразные динамические неоднородности – изменяющиеся во времени локальные области неравновесных состояний в континуальных средах. Примерами динамических неоднородностей, широко используемых в настоящее время для решения отдельных частных задач радиоэлектроники и вычислительной техники, являются поверхностные акустические волны, цилиндрические магнитные домены, модуляции электростатического потенциала в линейках и матрицах приборов с зарядовой связью, квантовых ямах и т.д.

Необходимость обработки больших массивов информации в реальном масштабе времени ставит задачу создания устройств функциональной электроники, объединяющих функции ввода, преобразования и вывода информации для последующей её обработки в цифровом коде с помощью традиционных принципов. Создание таких устройств функциональной электроники опирается на



интеграцию различных физических эффектов и разных видов динамических неоднородностей (несущих информацию) в одном устройстве. Использование же новых видов носителей информации неизбежно должно привести к появлению новых принципов обработки информации, позволяющих, в частности, параллельно переносить большие информационные пакеты из одной континуальной среды в другую.

Создание объектов (устройств), позволяющих объединить функции ввода, преобразования и вывода информации упирается в изучение физического процесса – образование тонких пленок на подложках. Исследованию такого процесса посвящено значительное число работ [101, 103, 106, 107, 109, 110, 3, 19, 40, 47, 94]. Однако до настоящего времени математическое описание такого процесса находится в неудовлетворительном состоянии. Не существует единой и универсальной математической модели образования тонких пленок на подложках для всевозможных материалов и различных условий. Существующие модели зависят от ряда факторов: температуры, типа и компактности решетки, вида химической связи, природы диффундирующей примеси и т.д.

Поэтому тема диссертационной работы, посвященная построению математической модели процесса образования тонких пленок на подложках, является актуальной и практически значимой.

Диссертация посвящена решению следующей важной как с теоретической, так и с практической точек зрения **научной задачи** – обосновать возможность применения модели диффузионного осаждения атомов вещества на подложку для описания процессов

диффузионного роста тонких пленок на подложках и дальнейшего проникновения атомов пленки в эти подложки.

**Объект и предмет исследования.** Объект исследования – тонкие пленки, образующиеся на подложке.

Предметом исследования является процесс диффузии при образовании тонких пленок на подложках.

**Цель диссертационной работы** – построить математическую модель процесса адсорбции при высоких температурных режимах вещества, находящегося в газообразном состоянии, на поверхность твердой подложки и дальнейшего проникновения его атомов в подложку; и использовать ее для построения экономико-математической модели процесса производства таких материалов.

Поставленная цель требует решения следующих **задач исследования:**

1. Построить математическую модель образования тонких пленок на подложках, позволяющую рассчитать количество оседающего на подложку вещества в результате адсорбции.
2. Построить математическую модель проникновения атомов пленки в подложку. На ее основе предложить методику оценки концентрации и глубины проникновения этих атомов в подложку за заданное время.
3. Исследовать на адекватность результатов расчетов, выполненных в рамках предложенных математических моделей экспериментальным данным.

4. Предложить экономико-математическую модель производства пленочных структур, учитывающую технологию их производства и позволяющую определить максимальную прибыль предприятия, занимающегося производством пленочных структур.

**Методология и методы проведённых исследований.** Решение поставленных задач основывается на использовании результатов и методов уравнений математической физики, интегральных уравнений, математической статистики, численных методов, физики твёрдого тела, кристаллографии, материаловедения, аппаратных средств Microsoft Office Excel, пакета прикладных программ MathCAD Professional.

**Достоверность и обоснованность** полученных в диссертационном исследовании теоретических результатов обеспечивается корректным применением математического аппарата и инструментальных средств, в частности, языка программирования Free Pascal, пакета прикладных программ MathCAD Professional, для описания математических моделей диффузии при образовании пленочных структур на подложках, что подтверждается согласованностью расчетных данных в рамках построенных моделей с экспериментальными данными.

**Научная новизна полученных результатов.**

1. Предложена математическая модель диффузионного осаждения атомов вещества на подложку для расчета количества вещества, находящегося в газообразном состоянии и оседающего на эту подложку.
2. Разработана математическая модель диффузии атомов пленки в подложку. С ее помощью произведена оценка концентрации и

глубины проникновения атомов пленки в подложку за заданное время.

3. Построена и исследована экономико-математическая модель производства пленочных структур, учитывающая технологию их производства, которая используется для расчета максимальной прибыли предприятия, производящего такие структуры.

**Практическая значимость** изложенных в диссертационной работе научных результатов состоит в возможности создания на их основе технологических разработок процесса образования тонких пленок на подложках. Результаты исследований представляют определенный интерес для специалистов, занимающихся технологическими разработками в опто- и микроэлектронной промышленности и т.д.

**Основные положения диссертации, выносимые на защиту:**

1. Математическая модель диффузионного роста тонких пленок на подложках, позволяющая определить количество вещества, оседающего на подложке за заданное время при заданной температуре.
2. Математическая модель диффузии вещества в двух соприкасающихся средах, используемая для определения концентрации диффундирующего вещества и глубины проникновения его атомов в подложку за заданное время.
3. Экономико-математическая модель производства тонких пленок, учитывающая технологию их производства, позволяющая оценить максимальную прибыль предприятия, производящего пленки, при минимальных его затратах на их производство.

**Реализация и внедрение.** Математическая модель образования тонких пленок на подложке внедрена в производственную деятельность ООО ИП «Грунт», что подтверждается соответствующим актом о внедрении результатов диссертационного исследования (Приложение 1).

Отдельные положения диссертационного исследования использованы в учебном процессе Ставропольского государственного университета при обучении студентов 2 курса специальности «Физика» по учебной дисциплине «Вычислительная физика», что подтверждено актом об использовании научных результатов в учебном процессе (Приложение 2).

**Апробация результатов исследования.** Результаты проведенных исследований докладывались на VI и VII Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (г. Сочи, 2005 г., г. Кисловодск, 2006 г. и г. Йошкар-Ола, 2006 г.); IV Всероссийской конференции «Прогрессивные технологии в обучении и производстве» (г. Камышин, 2006 г.); 50-й, 51-й и 52-й научно-методической конференции преподавателей и студентов СГУ «Университетская наука – региону» (г. Ставрополь, 2005 – 2007 гг.); VII Международной научно-технической конференции «Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии» (г. Пенза, 2007 г.).

**Опубликованность результатов.** Основные результаты диссертации опубликованы в 13 печатных работах: из них пять – в изданиях, включенных в перечень научных и научно-технических журналов, издаваемых в Российской Федерации, рекомендуемых ВАК для опубликования основных результатов диссертационных

исследований («Обозрение прикладной и промышленной математики», «Вестник Ставропольского государственного университета»), семь – в сборниках материалов Международных, Всероссийских и региональных конференций.

Зарегистрирован программный продукт «Расчет концентрации примеси при диффузии в твердых телах (РКП при ДТТ)» в ФГНУ «Государственный координационный центр информационных технологии, отраслевой фонд алгоритмов и программ» (свидетельство об отраслевой регистрации № 8266 от 10.05.2007 г.).

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка литературы (содержащего 110 наименований) и четырех приложений. Работа содержит 13 рисунков и 8 таблиц.

Во **введении** сформулирована научная проблема, на решение которой направлено данное диссертационное исследование, обоснована актуальность выбора темы, поставлены цели и задачи исследования, сформулированы защищаемые положения, указаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов исследования.

**В первой главе** проведен обзор экспериментальных данных, полученных при исследовании процесса диффузии в твердых телах. Однако, проведённый обзор позволяет сделать вывод, что в настоящее время недостаточно изученным остается вопрос образования пленок на подложках, а поставленные эксперименты не так многочисленны, чтобы описать картину целиком.

Также рассмотрено полуэмпирическое уравнение диффузии, представляющее собой дифференциальное уравнение с частными производными. Как известно, подобные уравнения лежат в основе прикладных математических моделей.

При изучении процесса образования пленочных структур на подложках возникает вопрос о решении уравнения диффузии численными методами при заданных начальном и граничных условиях. Ранее, другими авторами, были предприняты попытки нахождения аналитического решения краевых задач для уравнения диффузии. Но, как правило, рассматриваемые задачи имеют частный характер: рассматриваются решения этих задач при постоянных коэффициентах в уравнении диффузии, изучается стационарный режим распространения примеси, исследуется турбулентная диффузия и т.д.

Во **второй главе** построена математическая модель, описывающая диффузионное осаждение атомов вещества при адсорбционно-десорбционном процессе от мгновенного точечного источника на подложку, учитывающая начально-граничные условия. Проведена оценка количества оседающего на подложку вещества.

Указаны условия существования и единственности решения начально-граничных задач, описывающих диффузию при образовании пленочных структур на подложках.

Построена математическая модель диффузии вещества в различных соприкасающихся средах. С ее помощью определена глубина проникновения атомов пленки в подложку. А также оценена концентрация диффундирующего вещества в глубину подстилающей поверхности.

Проведена проверка на адекватность предложенных математических моделей экспериментальным данным.

В третьей главе проведено исследование математическими методами некоторых экономико-математических задач, возникающих в процессе производства тонких пленок на подложках.

Разработана экономико-математическая модель производства тонких пленок на подложках, позволяющая оценить экономические эффекты этого производства. Она определяет максимальную прибыль предприятия, производящего пленки. А также предложена экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок с учетом затрат на их производство.

В заключении приведены выводы о проделанной исследовательской работе при решении поставленных целей и задач диссертационной работы, обоснованность положений, выносимых на защиту.

В списке литературы приведены публикации, выполненные автором как самостоятельно, так и совместно с научным руководителем, в которых отражены основные результаты диссертационного исследования.



# ГЛАВА 1. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК

## 1.1. Обзор экспериментальных данных по диффузии в твердых телах

Каждое вещество может находиться в состоянии, которое характеризуется содержанием примеси в нем ниже некоторого определенного предела. Предел определяется различными условиями, связанными со свойствами, областью применения веществ. Для полупроводниковых материалов достижения собственных свойств или близких к ним является тем необходимым пределом, до которого материалы должны очищаться [32, 35, 95]. Для введения в полупроводник примеси используется процесс диффузии.

В настоящее время существуют макро- и микроскопические теории диффузии. Макроскопическая теория основана на формализме, связанном с термодинамикой необратимых процессов, и выражения для потоков получают как функции термодинамических сил и параметров. В микроскопической теории вычисляют потоки, опираясь на механизмы, которые основаны на представлении об атомных скачках [54, 61, 97].

Единой универсальной математической модели диффузионных перемещений для различных материалов и всевозможных условий нет. Эти модели зависят от вида химической связи, типа и компактности решетки,

температуры, при которой происходит диффузия, природы диффундирующей примеси и других факторов. Для исследования диффузии обычно принимают ту или иную математическую модель, теоретически рассчитывают коэффициенты диффузии  $D$ , а затем сравнивают их с экспериментально измеренными величинами [54].

Попытки распространить математические модели, используемые при описании диффузии в разбавленных сплавах, на концентрированные сплавы сталкиваются с трудностью выбора правильного приближения из-за увеличивающегося числа неизвестных параметров. И поэтому во многих моделях применяют приближение с использованием малого числа энергий парного взаимодействия для стабильной и метастабильной фаз, чтобы описать влияние локального окружения на высоту потенциального барьера [104, 61, 95].

Как следствие, подобные модели позволяют вычислить только энергии активации, а не сами коэффициенты диффузии. Предэкспоненциальные множители неизвестны и произвольно считаются постоянными. Не учитываются эффекты корреляции, хотя зависимость частоты скачков от локального состава окружения нарушает трансляционную симметрию решетки. Взаимодействие атомов в рамках указанных моделей описывают с помощью парных энергий [54].

В работах [54, 55, 56] группой ученых во главе с Назыровым Д.Э. проводилось исследование диффузии редкоземельных элементов (РЗЭ) в кремнии, которое представляет интерес как в связи с использованием их для повышения термической и радиационной стойкости кремния, так и с точки зрения особенностей структуры электронных оболочек этой группы

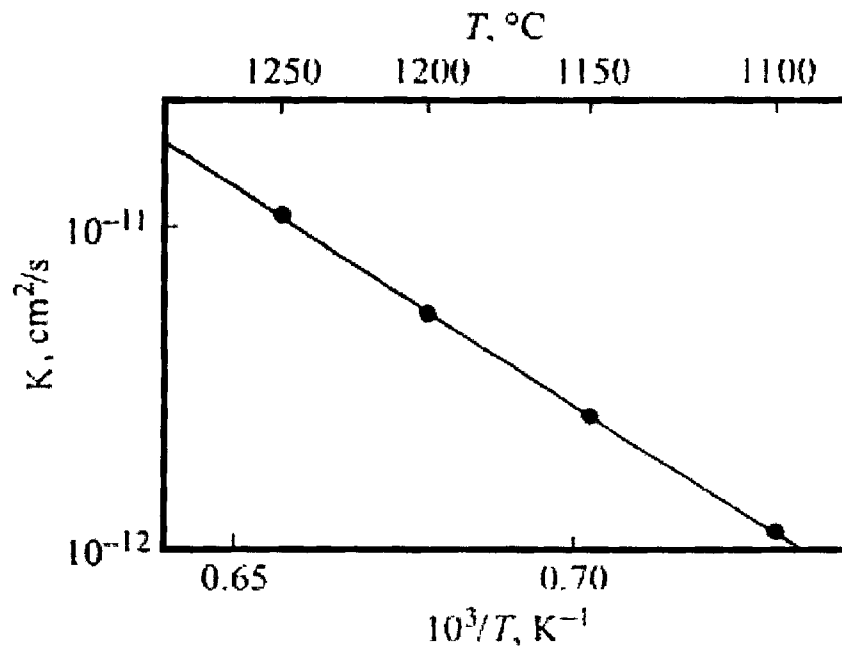
элементов, а также перспективой использования кремния, легированного РЗЭ, в оптоэлектронике в качестве источника света.

Пока, однако, число таких исследований ограничено, а их результаты в ряде случаев противоречивы. Выполненные эксперименты по диффузии РЗЭ в кремнии указывают на то, что эти примеси перемещаются в кремнии по узлам кристаллической решетки.

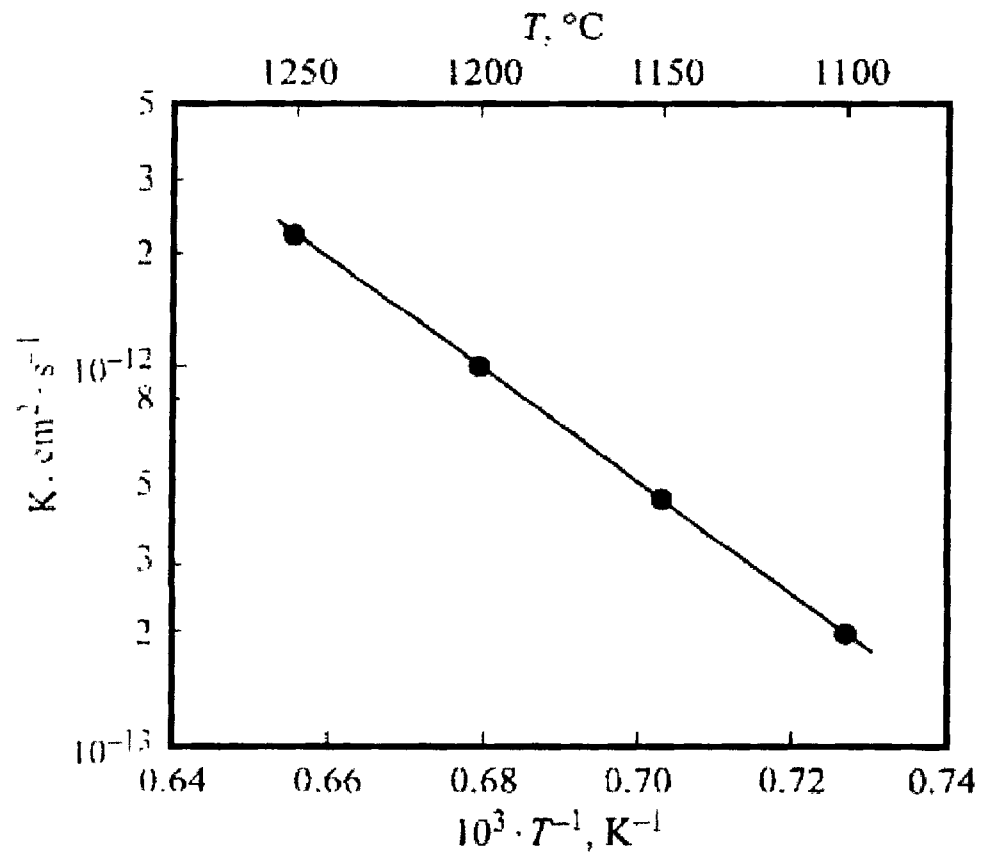
Диффузия РЗЭ в кремнии исследовалась в предположении, что соблюдается закон Фика и что поверхностная концентрация примеси не изменяется со временем (диффузия из постоянного источника в полуограниченное тело). В [54, 55, 56] определяли коэффициенты диффузии  $K$  РЗЭ в кремнии. Для этого экспериментальная кривая остаточного количества примеси аппроксимировалась теоретической кривой для диффузии из постоянного источника. Также здесь определены значения энергии активации диффузии РЗЭ в кремнии.

На рисунках 1 – 3 представлены температурные зависимости коэффициента диффузии европия, иттрия и тербия в кремнии.

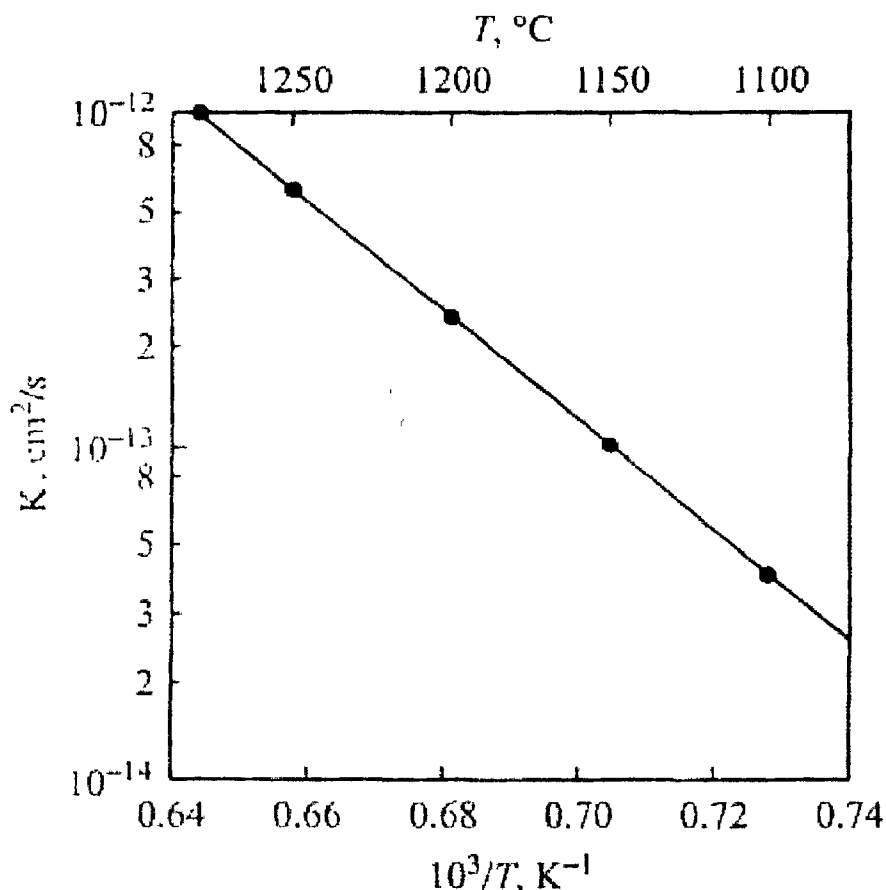
Сопоставление результатов работ [54, 55, 56] по диффузии РЗЭ в кремнии, полученными с помощью радиоактивной и других методик, показывает, что способ нанесения диффузанта и среда диффузии не влияет существенно на диффузионные параметры РЗЭ в кремнии.



**Рисунок 1** – Температурная зависимость коэффициента диффузии европия в кремнии. Точки – эксперимент, сплошная линия – расчет [54]



**Рисунок 2** – Температурная зависимость коэффициента диффузии иттрия в кремнии [56]



**Рисунок 3** – Температурная зависимость коэффициента диффузии тербия в кремнии [55]

Методами электронной оже-спектроскопии и дифракции медленных электронов исследована диффузия Си по атомарно-чистой поверхности Si(111) [36]. Установлено, что в результате диффузии на поверхности кремния образуются концентрационные распределения меди с резкой границей и формируется поверхностная фаза Si(111)-“5x5”-Cu. Показано, что процесс переноса меди по поверхности Si(111) происходит путем твердофазного растекания, известного как механизм «развертывающегося ковра». В работе [36] получена зависимость коэффициента диффузии Си на поверхности Si(111) от температуры (рис. 4), которая имеет вид  $K_{\text{Cu}} = 10^4 \exp(-1.9/kT) \text{ см}^2/\text{с}$ , где  $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура диффузии, измеряемая в К.

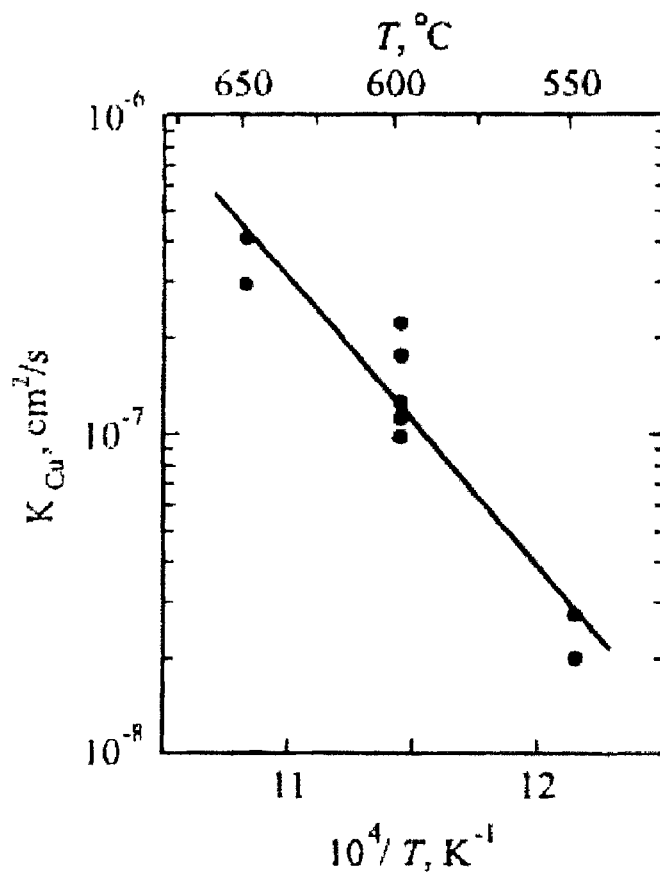
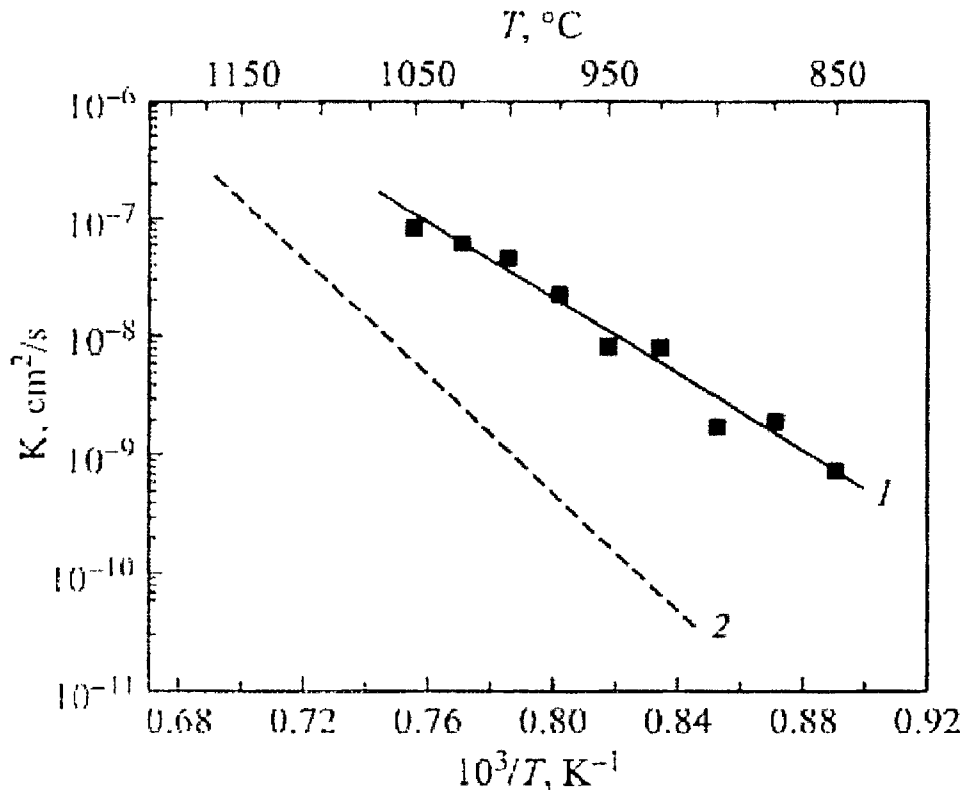


Рисунок 4 – Температурная зависимость коэффициента поверхностной диффузии Cu на поверхности Si(111)-“5x5”-Cu [36]

Хлудковым С.С. [97, 98] исследована диффузия хрома в GaAs как при равновесном, так и при большом давлении паров мышьяка. Определена температурная зависимость коэффициента диффузии и растворимости хрома в арсениде галлия, которая описывается уравнением Аррениуса (рис. 5).

Сравнение данных в работах [97, 98] коэффициента диффузии хрома в GaAs как при равновесном, так и при большом давлении паров мышьяка показывает их различие, но при прочих условиях, полностью соответствующих условиям обоих экспериментов. Это различие объясняется с позиций диссоциативного механизма диффузии примеси

хрома, согласно которому основной диффузионный поток осуществляется по междоузлиям.



**Рисунок 5** – Температурная зависимость коэффициента диффузии хрома в арсениде галлия: 1 – при равновесном давлении паров мышьяка, 2 – при давлении в 1 атм. [98]

Анализируя вышесказанное, можно отметить, что метод диффузии в настоящее время является наиболее распространенным при создании полупроводниковых структур. Однако для нормального протекания диффузионных процессов необходимы высокие температуры, чтобы уменьшить время диффузии до технологически приемлемого. При этом могут происходить: заметное перераспределение ранее введенных примесей, рост паразитных пленок, диффузия фоновых примесей на большую глубину и другие негативные процессы. Кроме того, при высоких температурах резко усложняется контроль процесса введения

примеси в локальные области кристалла. Все это приводит к большому разбросу электрофизических параметров полупроводниковых кристаллов и структур на их основе, уменьшает их стабильность.

Значительного уменьшения общей температуры в технологической системе можно добиться путем применения локального стимулирования диффузионных процессов в соответствующих областях полупроводникового кристалла [51]. Установлено, что возможно эффективное использование низкотемпературной диффузии под воздействием атомарного водорода в электронной технологии для введения заданной концентрации акцепторов в кристаллы германия без дополнительного нагрева [51].

## 1.2. Полуэмпирическое уравнение диффузии

Основу прикладных математических моделей очень часто составляют дифференциальные уравнения с частными производными. Наиболее важными для приложений являются уравнения второго порядка. Краевая задача для уравнения с частными производными состоит в том, что бы найти функцию или систему функций, удовлетворяющих в заданной области некоторому дифференциальному уравнению или системе уравнений, а на границе области и в начальный момент времени – заданным условиям [46]. Таким образом, краевая задача характеризуется заданием самого уравнения, области определения решения, граничных и начальных условий. Модели такого вида появились в математике в конце восемнадцатого века и связаны с именами Л. Эйлера и П. Лапласа.

При описании процесса диффузии примеси, используется уравнение:



$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x_1} + w \frac{\partial q}{\partial x_3} + \alpha q = \\ = \frac{\partial}{\partial x_1} K_{x_1} \frac{\partial q}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} K_{x_2} \frac{\partial q}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} K_{x_3} \frac{\partial q}{\partial x_3} + f, \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

где  $q$  – концентрация примеси;  $u$  – скорость горизонтального переноса (направленная вдоль оси  $Ox_1$ );  $K_{x_1}$ ,  $K_{x_2}$ ,  $K_{x_3}$  – коэффициенты диффузии;  $w$  – скорость гравитационного оседания примеси на подстилающую поверхность;  $\alpha$  – коэффициент, характеризующий взаимодействие частиц примеси с окружающей средой;  $f$  – мощность источника примеси. Так как вектор горизонтального переноса и коэффициенты диффузии задаются в виде эмпирических формул, то уравнение (1.2.1) принято называть полуэмпирическим уравнением диффузии.

Это уравнение, согласно классификации линейных дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка, относится к уравнениям параболического типа.

Задавая граничные и начальные условия, которым должно удовлетворять решение уравнения (1.2.1), исходят из предположений [48, 49], что время  $t$  распространения примеси принадлежит интервалу  $t \in [t_0, T]$ , а область  $\Omega$ , в которой примесь распространяется, представляет собой полупространство вида

$$\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) : -\infty < x_1 < +\infty, -\infty < x_2 < +\infty, x_3^0 \leq x_3 < +\infty\},$$

где  $x_3^0 = \text{const} > 0$ ,  $x_3^0$  – уровень шероховатости подстилающей поверхности. Исходя из этих предположений начальные и граничные условия задают следующим образом:

$$q(t_0, x_1, x_2, x_3) = \varphi(x_1, x_2, x_3), \quad (1.2.2)$$

$$\left\{ K_{x_3} \frac{\partial q}{\partial x_3} + \varpi q \right\} \Big|_{x_3=x_3^0} = \{v_s q\} \Big|_{x_3=x_3^0}, \quad (1.2.3)$$

$$q(t, x_1, x_2, x_3) \rightarrow 0, \text{ при } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \rightarrow \infty, \quad (1.2.4)$$

$$x_3 \geq x_3^0,$$

где  $\varphi(x_1, x_2, x_3)$  – фоновая концентрация примеси;  $v_s$  – результирующая скорость осаждения примеси на подстилающую поверхность. Граничное условие (1.2.3) означает, что поток примеси на подстилающую поверхность складывается из двух составляющих: диффузионного

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q}{\partial x_3} \right\} \Big|_{x_3=x_3^0}$$

и гравитационного

$$\{ \varpi q \} \Big|_{x_3=x_3^0},$$

потоков, и равен  $v_s q$ .

Источники характеризуются мощностью или интенсивностью выброса, то есть количеством вещества, выбрасываемого за единицу времени. Мощность источника примеси принято обозначать через  $Q$ . Она может быть постоянной или зависеть от времени  $t$  и пространственных координат  $(x_1, x_2, x_3)$ .

Используя понятие дельта-функции Дирака, функцию для мощности источника примеси  $f$  можно представить в виде [48]:

$$f(t, x_1, x_2, x_3) = QR(t, x_1, x_2, x_3),$$

где  $Q$  – мощность источника, а  $R(t, x_1, x_2, x_3)$  – выражение, задаваемое с помощью дельта-функций.

#### 1. Мгновенные источники:

– если источник является точечным с координатами  $(x_1^0, x_2^0, H)$ , то

$$Q = \text{const}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(t - t_0) \delta(x_1 - x_1^0) \delta(x_2 - x_2^0) \delta(x_3 - H);$$

– если источник является линейным, который сосредоточен на интервале  $[a, b]$  и расположен на прямой, параллельной оси  $Ox_2$ , то

$$Q = \begin{cases} Q, x_2 \in [a, b], \\ 0, x_2 \notin [a, b] \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(t - t_0) \delta(x_1 - x_1^0) \delta(x_3 - H);$$

– если источник является поверхностным и расположен на поверхности площадью  $S$  на высоте  $H$  параллельно плоскости  $x_1 O x_2$ , то

$$Q = \begin{cases} Q, (x_1, x_2) \in S, \\ 0, (x_1, x_2) \notin S \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(t - t_0) \delta(x_3 - H);$$

– если источник является объемным и расположен в теле объемом  $V$ , то

$$Q = \begin{cases} Q, (x_1, x_2, x_3) \in V, \\ 0, (x_1, x_2, x_3) \notin V \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(t - t_0).$$

2. Источники непрерывного действия:

– если источник является точечным с координатами  $(x_1^0, x_2^0, H)$ , то

$$Q = Q(t)$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(x_1 - x_1^0) \delta(x_2 - x_2^0) \delta(x_3 - H),$$

$$t \in [t_0, T];$$

– если источник является линейным, который сосредоточен на интервале  $[a, b]$  и расположен на прямой, параллельной оси  $Ox_2$ , то

$$Q(t, x_2) = \begin{cases} Q(t, x_2), & (x_1, x_2) \in [a, b] \\ 0, & (x_1, x_2) \notin [a, b] \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(x_1 - x_1^0) \delta(x_3 - H),$$

$$t \in [t_0, T];$$

– если источник является поверхностным и расположен на поверхности площадью  $S$ , то

$$Q(t, x_1, x_2) = \begin{cases} Q(t, x_1, x_2), & (x_1, x_2) \in S \\ 0, & (x_1, x_2) \notin S \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = \delta(x_3 - H),$$

$$t \in [t_0, T];$$

– если источник является объемным и расположен в теле объемом  $V$ , то

$$Q(t, x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} Q(t, x_1, x_2, x_3), & (x_1, x_2, x_3) \in V \\ 0, & (x_1, x_2, x_3) \notin V \end{cases}$$

и

$$R(t, x_1, x_2, x_3) = 1,$$

$$t \in [t_0, T].$$

При изучении диффузии примеси возникает вопрос о решении уравнения (1.2.1) аналитическими методами при заданных начальном (1.2.2) и граничных (1.2.3), (1.2.4) условиях. Если найдено в аналитическом виде решение указанной краевой задачи, то можно эффективно проводить анализ изменений средних значений концентрации примеси, осуществлять краткосрочный прогноз их изменений, решать многие другие интересующие нас задачи.

Проблема аналитического решения краевых задач для полуэмпирического уравнения диффузии рассматривается во многих работах [46, 48]. Но, как правило, ей уделяется мало внимания, так как эти работы сориентированы на изучение других вопросов. Даже те немногие краевые задачи, которые подвергнуты в них исследованию аналитическими методами, имеют частный характер: рассматриваются решения этих задач в случае, когда коэффициенты в уравнении диффузии являются постоянными величинами, изучается стационарный режим распространения примеси и т.д.

Устранению указанных пробелов посвящена монография [66]. В ней приведены основные физические понятия и закономерности, связанные с распространением примеси, дан вывод полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии, приведены и систематизированы известные решения некоторых частных случаев этого уравнения при заданных начальном и граничных условиях, а также изложены исследования по проблеме построения аналитического решения краевых задач в математической модели распространения примеси и связанные с этой проблемой вопросы. Все результаты получены в предположении того, что

задача (1.2.1) – (1.2.4) корректна, однако не указаны условия, обеспечивающие корректность решения.

Полного исследования корректности решения полуэмпирического уравнения диффузии (1.2.1) с начально-граничными условиями (1.2.2) – (1.2.4) не проведено. В работе [48] проведено доказательство единственности решения уравнения (1.2.1) с начальным условием (1.2.2) и граничными условиями:

$$q = q_s \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n < 0, \quad (1.2.5)$$

$$\frac{\partial q}{\partial x_1} \cos \lambda + \frac{\partial q}{\partial x_2} \cos \gamma = 0 \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n \geq 0, \quad (1.2.6)$$

$$\frac{\partial q}{\partial x_3} = Wq \text{ на } \Sigma_0, \quad (1.2.7)$$

$$\frac{\partial q}{\partial x_3} = 0 \text{ на } \Sigma_H. \quad (1.2.7)$$

Здесь решение определяется в цилиндрической области  $G$  с поверхностью  $S$ , состоящей из боковой поверхности цилиндра  $\Sigma$ , нижнего основания  $\Sigma_0$  (при  $x_3 = 0$ ) и верхнего основания  $\Sigma_H$  (при  $x_3 = H$ ),  $u_n$  – проекция вектора горизонтального переноса  $u$  на внешнюю нормаль к поверхности  $S$ .

### **1.3. Корректная постановка задач и методы их решения**

Большинство задач математической физики являются некорректно поставленными. Понятие корректной задачи является одним из важнейших понятий современной математики. Оно было сформулировано Адамаром в

связи с анализом различных задач для дифференциальных уравнений различных типов.

Рассмотрим пространство  $U$  решений дифференциального уравнения. Дифференциальное уравнение в совокупности с дополнительными условиями определяет оператор  $R$ , который ставит в соответствие любому решению  $u \in U$  набор функций, входящих в дополнительные (начальные и граничные) условия. Рассматривая этот набор функций как элемент  $f$  функционального пространства  $F$ , получаем, что решение задачи для дифференциального уравнения эквивалентно решению операторного уравнения

$$Ru = f \quad (1.3.1)$$

при условии  $u \in U$ ,  $R$  – оператор, действующий из нормированного пространства  $U$  в нормированное пространство  $F$ .

**Определение 1** [10]. Задача решения уравнения (1.3.1) называется устойчивой на паре пространств  $(U, F)$ , если для любого действительного числа  $\varepsilon > 0$  найдется такое действительное число  $\delta > 0$ , что для любого элемента  $\bar{f} \in F$ , для которого

$$\|f - \bar{f}\|_F < \delta,$$

выполняется неравенство

$$\|u - \bar{u}\|_U < \varepsilon,$$

где

$$Ru = f,$$

$$\bar{u} \in U,$$

$$R\bar{u} = \bar{f}.$$

**Определение 2** [10]. Задача решения уравнения (1.3.1) называется корректно поставленной (корректной) на паре пространств  $(U, F)$ , если она удовлетворяет следующим требованиям:

- 1) решение задачи существует при любом  $f \in F$  и принадлежит  $U$ ;
- 2) решение задачи единственно в пространстве  $U$ ;
- 3) задача устойчива на паре пространств  $(U, F)$ .

Задачи, не удовлетворяющие перечисленным требованиям, называются некорректно поставленными (некорректными).

Если задача (1.3.1) является корректно поставленной, т.е. выполняются условия существования, единственности и устойчивости решения, то имеет смысл говорить об обратной задаче, которая будет состоять в том, что по известному решению  $u \in U$  (это может быть величина наблюдаемая экспериментально) требуется определить неизвестную величину  $f \in F$  математической модели.

Обратная задача может быть записана в виде:

$$Af = u, \quad (1.3.2)$$

где  $A$  – оператор, действующий из нормированного пространства  $F$  в нормированное пространство  $U$ .

В работе [88] показано, что обратные задачи вида (1.3.2), как правило, не являются корректными по определению Адамара (не выполняется требование устойчивости) и дано новое понятие корректной постановки. Это определение корректности в [44] названо корректностью по Тихонову. По данному определению рассматривается некоторое множество  $M \subset F$ , более узкое, чем все пространство  $F$ . Пусть образ множества  $M$  при отображении с помощью оператора  $A$  в пространстве  $U$  есть множество  $R$ , т.е.  $R = AM$ .



Задача (1.3.2) называется условно корректной (корректной по Тихонову), если выполнены следующие условия [91]:

- 1) решение задачи существует и принадлежит некоторому множеству  $M$  пространства  $F$ ;
- 2) решение единственно на множестве  $M$ ;
- 3) для любого действительного числа  $\varepsilon > 0$  существует такое действительное число  $\delta > 0$ , что для любых  $u, \bar{u} \in R = AM$  и таких, что  $\|u - \bar{u}\|_U < \delta$ , выполняется неравенство  $\|f - \bar{f}\|_F < \varepsilon$ .

Множество  $M$  называется множеством корректности задачи.

В настоящее время имеется большое число работ, посвященных исследованию различных задач математической физики на условную корректность и созданию устойчивых методов численного решения классически некорректных задач [88]. А.Н. Тихонов разработал принципиально новый подход, дающий устойчивые решения сильно некорректных (существенно некорректных) задач. В его основе лежит понятие регуляризующего оператора или регуляризующего алгоритма. Разработанный метод носит название метод регуляризации Тихонова, в основе которого лежит погрешность входных данных.

Пусть  $\delta$  – погрешность входных данных, т.е. вместо  $f$  имеется такое  $f_\delta$ , что

$$\|f_\delta - f\|_F < \delta. \quad (1.3.3)$$

Тогда требуется решить уравнение (1.3.2) с приближенно заданной правой частью  $f_\delta$ . Обозначим искомое приближенное решение через  $u_r$ , где параметр регуляризации  $r$  связан с уровнем погрешности  $\delta$  соотношением  $r = r(\delta)$ . Перепишем уравнение (1.3.2) в виде

$$Au_r = f_\delta. \quad (1.3.4)$$

Таким образом, задача свелась к приближенному решению уравнения (1.3.4). Для решения этого уравнения вводится понятие невязки  $\xi$ , где  $\xi = Av - f_\delta$ .

Затем, в соответствии с методом регуляризации по Тихонову, вводится сглаживающий функционал [88]

$$J_r(v) = \|Av - f_\delta\|_F^2 + r\|v\|_F^2, \quad (1.3.5)$$

где  $r > 0$  – параметр регуляризации,  $\|v\|_F^2$  – стабилизирующий функционал. Стабилизирующий функционал добавлен в функционал решения для ограничения решения. Приближенное решение  $u_r$  исходной задачи (1.3.2) есть экстремаль сглаживающего функционала:

$$J_r(u_r) = \min_{v \in H} J_r(v), \quad (1.3.6)$$

где  $H$  – гильбертово пространство, на котором действует оператор  $A$ .

При применении метода регуляризации большое внимание уделяется выбору параметра регуляризации. Отметим некоторые наиболее употребительные способы выбора параметра  $r$  [80].

1. Способ невязки. При  $\varepsilon = 0$  параметр  $r$  выбирается из условия:

$$\|Au_r - f\|_F = \delta. \quad (1.3.7)$$

Если  $\|f\|_F \geq \delta$ , то решение уравнения (1.3.7) относительно параметра  $r$  существует и является единственным. При  $\varepsilon \neq 0$  способ невязки переходит в обобщенный принцип невязки.

Указанный метод выбора параметра регуляризации теоретически описан и апробирован, однако, если оценки погрешности неизвестны, то применение метода невязки затруднительно. Поэтому в практике

вычислений распространение получили другие методы выбора параметра регуляризации. Отметим, что выбор параметра регуляризации приводит к увеличению числа вычислений и часто носит итерационный характер. При каждом значении итерационного параметра решается задача (1.3.2), (1.3.4). С целью уменьшения вычислительной работы объединяют функции итерационного параметра и параметра регуляризации. Эта идея лежит в основе итерационных методов решения некорректных задач.

2. Способ подбора. Находятся решения  $u_r$  для ряда значений параметра  $r$ , и окончательный выбор  $r$  делается на основе дополнительной информации о решении (визуально). Описанный способ является довольно эффективным в случаях, когда имеется информация о решении или по результатам предыдущих исследований удается выделить область возможных значений параметра  $r$ .

3. Асимптотический способ. При  $\varepsilon = 0$  и  $\delta \rightarrow 0$  параметр регуляризации находится из соотношения

$$r = C\delta^2, \quad (1.3.8)$$

где  $C = \text{const} > 0$ . Указанный способ применим при малых значениях  $\delta$ .

Таким образом, следует отметить, что приведенные теоретические исследования позволяют исследовать на корректность постановки задач математической физики (Определение 1 и 2). Установить являются ли они корректно заданными или нет.

Подавляющее большинство задач математической физики относится к классу некорректно поставленных математических моделей. Для их решения нередко применяется метод регуляризации Тихонова, одним из этапов которого является выбор параметра

регуляризации. В зависимости от поставленной задачи применяется тот или иной способ выбора параметра регуляризации, которые указаны выше.

Данная теория будет использована в ходе выполнения диссертационной работы при исследовании диффузии в процессе образования тонкой пленки на подложке.

## Выводы по первой главе

1. Параметры диффузии, определяемые обычно при высокотемпературных измерениях, имеют важное значение для понимания разнообразных процессов, протекающих в твердых телах, поскольку они позволяют судить о подвижности атомов при образовании тонкой пленки на подложке. Для успешного решения все возрастающего числа нерешенных вопросов, связанных с подвижностью атомов, необходимо более широкое изучение процессов диффузии.
2. Рассмотрено полуэмпирическое уравнение диффузии, которое составляет основу прикладных математических моделей, и представляет собой дифференциальное уравнение с частными производными. Установлено, что полного исследования решения полуэмпирического уравнения диффузии не проведено.
3. Приведены теоретические исследования о корректности постановки задач математической физики. Указаны требования корректности. Обозначены способы выбора параметра регуляризации для решения некорректно поставленных математических моделей. Данная теория будет применена в ходе выполнения диссертационной работы во второй и третьей главах.

## ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИОННОГО РОСТА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ПОДЛОЖКАХ

В настоящее время в нанотехнологиях часто используются плёночные структуры. Тонкие пленки находят широкое применение в экологически чистых производственных процессах, в частности, при очистке воды, в электрографии (ксерографии), в производстве солнечных батарей, в изготовлении переключающих и запоминающих устройств (микроэлектронике) и т.д. Теоретической базой технологии производства плёнок является теория структурных фазовых переходов адсорбционно-десорбционного вещества. В рамках данной теории значительный интерес представляет так называемая хаотическая (или стохастическая) фаза [15, 38]. Эта фаза метастабильна. Наличие этой фазы служит одним из ярких проявлений совместного действия дискретности и нелинейности [15, 38]. Существование стохастической фазы впервые установлено Обри [101] для модели Френкеля-Конторовой, описывающей дискретную цепочку атомов в заданном периодическом потенциале [105].

Однако в настоящее время не существует строгой математической модели, позволяющей описать физические процессы стохастической фазы для различных материалов и всевозможных условий [15, 38].

## 2.1. Построение математической модели диффузионного роста тонкой пленки на подложке

В этом параграфе построим математическую модель диффузии при образовании тонкой пленки на подстилающей поверхности в результате адсорбции вещества на подложку, которая даст возможность оценить количество оседающего вещества. Далее укажем условия существования и единственности указанной математической модели.

Пусть  $q(t, x_1, x_2, x_3)$  – концентрация атомов пленки в момент времени  $t$ ,  $t \in [t_0, T]$ ,  $t_0 \geq 0$ ,  $t_0 < T$ ,  $T = \text{const} > 0$ , в точке  $(x_1, x_2, x_3) \in E_+^3$ ,  $E_+^3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1, x_2 \in (-\infty, \infty), x_3 \in [0, \infty)\}$ ;  $x_1, x_2, x_3$  зависят от  $t$ , и более того, являются непрерывно дифференцируемыми по  $t$ ,  $q(t, x_1, x_2, x_3)$  непрерывно дифференцируема по  $t$ ,  $t \in [t_0, T]$ , и  $x_1, x_2, x_3$ ,  $(x_1, x_2, x_3) \in E_+^3$ . Если в  $E_+^3$  отсутствуют источники примеси и примесь не подвержена изменениям (т.е. инертна), то согласно закону сохранения массы [48, 49]:

$$\frac{dq}{dt} = 0. \quad (2.1.1)$$

Если же в  $E_+^3$  присутствует источник примеси, описываемый функцией  $j$ , примесь не является инертной,  $\alpha$  – коэффициент, характеризующий взаимодействие вещества с окружающей средой (или его радиоактивный распад) в единицу времени  $t \in [t_0, T]$  из  $E_+^3$ , то соотношение (2.1.1), очевидно, следует переписать в виде:

$$\frac{dq}{dt} + \alpha \cdot q = f. \quad (2.1.2)$$

Вычислив полную производную  $\frac{dq}{dt}$  в (2.1.2), будем иметь:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x_1} \cdot \frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial q}{\partial x_2} \cdot \frac{dx_2}{dt} + \frac{\partial q}{\partial x_3} \cdot \frac{dx_3}{dt} + \alpha \cdot q = f. \quad (2.1.3)$$

Компоненты

$$\frac{dx_1}{dt}, \frac{dx_2}{dt}, \frac{dx_3}{dt}$$

вектора горизонтального переноса  $\vec{u}(t)$

$$\vec{u}(t) = \left( \frac{dx_1}{dt}, \frac{dx_2}{dt}, \frac{dx_3}{dt} \right)$$

перемещаются, вместе с которыми с той же скоростью перемещаются и частички тонкой пленки. Обозначим

$$\frac{dx_1}{dt} = u_1,$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u_2,$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u_3,$$

$$u_i = u_i(t, x_1, x_2, x_3),$$

$$i = 1, 2, 3.$$

Тогда (2.1.3) переписется в виде

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x_1} \cdot u_1 + \frac{\partial q}{\partial x_2} \cdot u_2 + \frac{\partial q}{\partial x_3} \cdot u_3 + \alpha \cdot q = f. \quad (2.1.4)$$

Согласно уравнению неразрывности [48, 49], имеем



$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.1.5)$$

Умножив (2.1.5) на  $q$  и сложив с (2.1.4), получим:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial(u_1 q)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_2 q)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_3 q)}{\partial x_3} + \alpha \cdot q = f. \quad (2.1.6)$$

Обратим внимание, что уравнение (2.1.6), описывающее миграцию частичек тонкой пленки со скоростью  $\vec{u}(t)$  в подстилающую поверхность (подложку), всегда следует рассматривать одновременно с уравнением неразрывности (2.1.5).

Представим  $q, u_1, u_2, u_3$  в виде

$$\begin{aligned} q &= \bar{q} + q', \\ u_1 &= \bar{u}_1 + u_1', \\ u_2 &= \bar{u}_2 + u_2', \\ u_3 &= \bar{u}_3 + u_3', \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

где  $\bar{q}, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3$  – осредненные,  $q', u_1', u_2', u_3'$  – флуктуационные (случайные) составляющие соответственно величин  $q, u_1, u_2, u_3$ .

Далее допускаем, что  $q', u_1', u_2', u_3'$  удовлетворяют условиям:

а) математические ожидания (средние) этих величин всегда равны нулю:

$$\begin{aligned} Mq' &= 0, \\ Mu_i' &= 0, \\ i &= 1, 2, 3; \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

б) (гипотеза Буссинеска [48])

$$\begin{aligned}
M[u_1'q'] &= -K_{11} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_1} - K_{12} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_2} - K_{13} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_3} = \\
&= -\sum_{j=1}^3 K_{1j} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j}, \\
M[u_2'q'] &= -K_{21} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_1} - K_{22} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_2} - K_{23} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_3} = \\
&= -\sum_{j=1}^3 K_{2j} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j}, \\
M[u_3'q'] &= -K_{31} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_1} - K_{32} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_2} - K_{33} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_3} = \\
&= -\sum_{j=1}^3 K_{3j} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j},
\end{aligned} \tag{2.1.9}$$

где  $K_{ij} = K_{ij}(t, x_1, x_2, x_3)$ ,  $i, j = 1, 2, 3$  – неслучайные функции своих аргументов, называемые коэффициентами диффузии вещества в подстилающей поверхности.

Подставляя (2.1.7) в (2.1.6), затем вычисляя от левой и правой части математическое ожидание и учитывая свойства математического ожидания [30, 31, 62]

$$M\left[\frac{\partial \xi}{\partial t}\right] = \frac{\partial}{\partial t}[M\xi],$$

$$M\left[\frac{\partial \xi}{\partial x_i}\right] = \frac{\partial}{\partial x_i}[M\xi],$$

$$M\bar{q} = \bar{q},$$

$$M\bar{u}_i = \bar{u}_i,$$

$$M|\alpha \bar{q}| = \alpha \bar{q},$$

$$Mf = f,$$

$$M[\bar{u}_i q'] = \bar{u}_i Mq' = \bar{u}_i \cdot 0 = 0,$$

$$M[\bar{q} u_i'] = \bar{q} Mu_i = q \cdot 0 = 0,$$

$$M[\alpha q'] = \alpha Mq' = \alpha \cdot 0 = 0,$$

$$i = 1, 2, 3$$

(для справедливости последних трех равенств необходимо выполнение условия а), т.е. (2.1.8)), а также учитывая условия б) (т.е. (2.1.9)), легко перейдем от уравнения (2.1.6) к уравнению

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_1 \bar{q})}{\partial x_1} + \frac{\partial(\bar{u}_2 \bar{q})}{\partial x_2} + \frac{\partial(\bar{u}_3 \bar{q})}{\partial x_3} + \alpha \bar{q} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \sum_{j=1}^3 K_{1j} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \sum_{j=1}^3 K_{2j} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \sum_{j=1}^3 K_{3j} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j} \right) + f, \end{aligned}$$

или в более компактной записи

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{q})}{\partial x_i} + \alpha \bar{q} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_j} + f. \quad (2.1.10)$$

Аналогично, подставляя (2.1.7) в (2.1.5), после усреднения (вычисления математического ожидания на основании его свойств, которые отмечались выше) перейти от соотношения (2.1.5) к соотношению

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.1.11)$$

Уравнение (2.1.10), очевидно, следует рассматривать совместно с соотношением (2.1.11).

Для удобства записи черта над  $u_i, q$  в (2.1.10), (2.1.11) далее всюду опускается и уравнение (2.1.10) совместно с соотношением (2.1.11) записываются в виде [48]:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(u_i q)}{\partial x_i} + \alpha q = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial q}{\partial x_j} + f, \quad (2.1.12)$$

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.1.13)$$

Для описания процесса диффузии атомов вещества при адсорбционно-десорбционном процессе от мгновенного точечного источника на подложку, согласно (2.1.12), (2.1.13) и сделанным допущениям, предлагается использовать начально-граничную задачу

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q}{\partial x_i} + \alpha q + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial q}{\partial x_j} = 0, \quad (2.1.14)$$

$$q(t_0, x_1, x_2, x_3) = Q \cdot \delta(x_1 - x_1^0) \delta(x_2 - x_2^0) \delta(x_3 - x_3^0), \quad (2.1.15)$$

$$t \in [t_0, T],$$

$$K_{33} \frac{\partial q}{\partial x_3} \Big|_{x_3=x_3^0} = 0, \quad t > t_0, \quad (2.1.16)$$

если атомы вещества отражаются от подложки, находящейся на высоте  $x_3^0$ ; начально-граничную задачу (2.1.14), (2.1.15),

$$q(t, x_1, x_2, x_3) \Big|_{x_3=x_3^0} = 0, \quad t > t_0, \quad (2.1.17)$$

если вещество полностью поглощается подложкой; и начально-граничную задачу (2.1.14), (2.1.15),

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q}{\partial x_3} + \varpi q \right\} \Big|_{x_3=x_3^0} = \{v_s q\} \Big|_{x_3=x_3^0}, \quad (2.1.18)$$

если вещество частично отражается и частично поглощается подложкой. Здесь  $Q$  – мощность мгновенного источника примеси, действовавшего в момент времени  $t_0$  в точке  $(x_0, y_0, z_0)$  (т.е. количество вещества,

выброшенного источником в момент времени  $t_0$ );  $\delta$  – дельта-функция Дирака;  $\varpi$  – скорость гравитационного оседания примеси на подстилающую поверхность;  $v_s$  – результирующая скорость осаждения атомов примеси на подложку. Равенство (2.1.18) показывает, что поток примеси на подложку складывается из двух составляющих: диффузионного потока

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q}{\partial x_3} \right\} \Big|_{x_3=x_3^0}$$

и гравитационного потока

$$\{ \varpi q \} \Big|_{x_3=x_3^0}.$$

Граничное условие (2.1.16) означает, что граница полностью отражает вещество, (2.1.17) – полностью его поглощает, а (2.1.18) – частично отражает и частично поглощает.

На рисунке 6 показано схематическое изображение процесса диффузионного роста тонкой пленки на подложке для случая, когда источник примеси является точечным и задан функцией источника  $f$ . Оседание частиц примеси на подложку происходит под действием гравитационных сил.

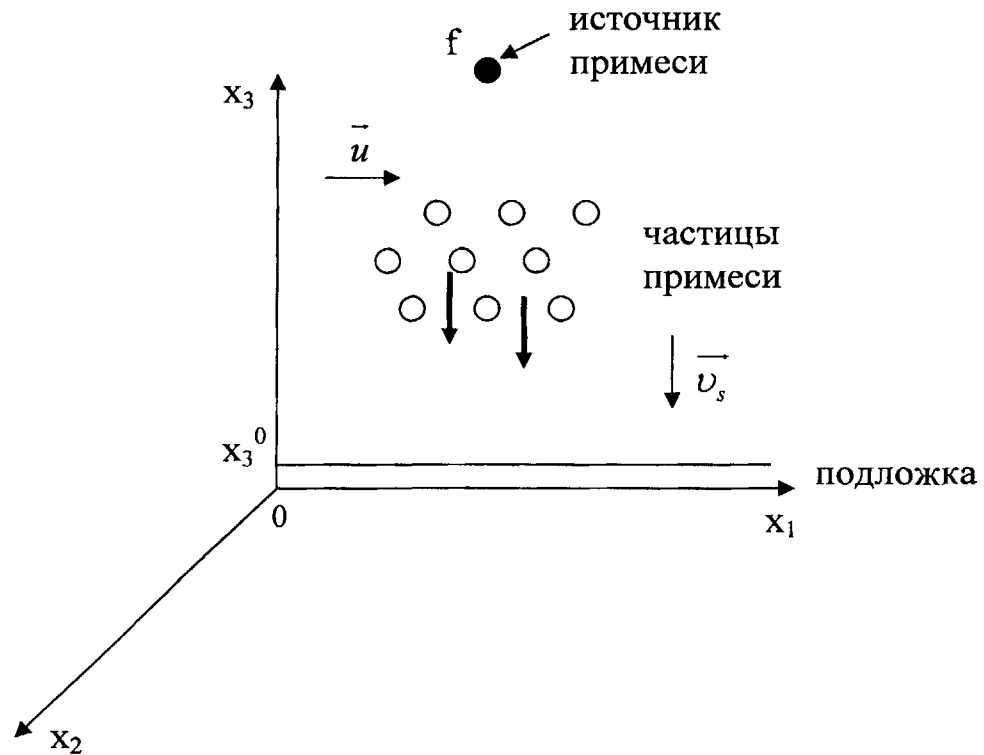


Рисунок 6 – Схематическое изображение процесса образования тонкой пленки на подложке

Если точечный источник, расположенный в точке  $(x_0, y_0, z_0)$ , является источником непрерывного действия, т.е.  $Q = Q(t)$ , то для вычисления концентрации  $q_1(t, x_1, x_2, x_3)$  от такого источника решение  $q(t, x_1, x_2, x_3)$  рассматриваемой задачи (2.1.14)–(2.1.16), или (2.1.14), (2.1.15), (2.1.17), или (2.1.14), (2.1.15), (2.1.18) следует проинтегрировать по промежутку  $[t_0, T]$ , т.е.

$$q_1(t, x_1, x_2, x_3) = \int_{t_0}^T q(\tau, x_1, x_2, x_3) d\tau.$$

Если источник является линейным, поверхностным, то концентрация от такого источника определяется путем интегрирования  $q_1(t, x_1, x_2, x_3)$  по области, образованной точками, принадлежащими источнику.

Из (2.1.18) следует, что плотность потока диффундирующего вещества  $P(t, x_1, x_2, x_3^0)$  в момент  $t$  в точке  $(x_1, x_2, x_3^0)$  равен

$$P(t, x_1, x_2, x_3^0) = \nu_s q(t, x_1, x_2, x_3^0),$$

здесь  $\nu_s = \text{const}$ . Количество оседающего диффундирующего вещества на единицу площади в точке  $(x_1, x_2, x_3^0)$  за время  $T$  равно

$$\int_{t_0}^T P(t, x_1, x_2, x_3^0) dt = \nu_s \int_{t_0}^T q(t, x_1, x_2, x_3^0) dt.$$

Количество оседающего вещества на подложку, представляющую собой горизонтальную поверхность площадью  $S$ , которая расположена на высоте  $x_3^0$  параллельно плоскости  $x_1 O x_2$  за время  $T$  равно

$$\int_{t_0}^T \iint_S P(t, x_1, x_2, x_3^0) dt dx_1 dx_2 = \nu_s \int_{t_0}^T \iint_S q(t, x_1, x_2, x_3^0) dt dx_1 dx_2.$$

Приведем аналитические решения задач (2.1.14) – (2.1.16) и (2.1.14), (2.1.15), (2.1.17). Будем предполагать, что компоненты вектора  $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$  являются постоянными величинами и он направлен вдоль оси  $Ox_1$  (это означает, что  $u_2 = u_3 \equiv 0$ ), элементы матрицы  $K$  имеют вид:

$$K_{ij} = \begin{cases} \sigma_i^2, & i = j, \sigma_i = \text{const} > 0; \\ 0, & i \neq j, i, j = 1, 2, 3; \end{cases}$$

$\alpha = 0$  (т.е. вещество не вступает в реакцию с окружающей средой и не разлагается).

Тогда решение задачи (2.1.14) – (2.1.16) имеет вид [66]:

$$\begin{aligned}
 q(t, x_1, x_2, x_3) = & \frac{Q}{(4\pi(t-t_0))^{3/2} \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3} \times \\
 & \times \exp \left\{ -\frac{(x_1 - u_1 \cdot (t-t_0))^2}{4\sigma_1^2 \cdot (t-t_0)} - \frac{x_2^2}{4\sigma_2^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \times \\
 & \times \left[ \exp \left\{ -\frac{(x_3 - H)^2}{4\sigma_3^2 \cdot (t-t_0)} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(x_3 + H)^2}{4\sigma_3^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \right];
 \end{aligned} \tag{2.1.19}$$

решение задачи (2.1.14), (2.1.15), (2.1.17) –

$$\begin{aligned}
 q(t, x_1, x_2, x_3) = & \frac{Q}{(4\pi(t-t_0))^{3/2} \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3} \times \\
 & \times \exp \left\{ -\frac{(x_1 - u_1 \cdot (t-t_0))^2}{4\sigma_1^2 \cdot (t-t_0)} - \frac{x_2^2}{4\sigma_2^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \times \\
 & \times \left[ \exp \left\{ -\frac{(x_3 - H)^2}{4\sigma_1^2 \cdot (t-t_0)} \right\} - \exp \left\{ -\frac{(x_3 + H)^2}{4\sigma_1^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \right],
 \end{aligned} \tag{2.1.20}$$

$(0, 0, H)$  – координаты мгновенного точечного источника мощности  $Q = \text{const} > 0$  адсорбционно-десорбционного вещества, действовавшего в момент времени  $t_0$ .

Таким образом, показана адаптация полуэмпирического уравнения диффузии, представляющего собой дифференциальное уравнение с частными производными, к построению математической модели диффузионного роста тонких пленок на подложках.

Предложенная математическая модель позволяет описать диффузионный рост тонких пленок на подложках. С ее помощью можно рассчитать концентрацию вещества, оседающего за заданное время при заданной температуре на подложке.



## 2.2. Разрешимость математической модели диффузии в процессе роста тонкой пленки

Проведем анализ начально-граничных задач (2.1.14) – (2.1.16); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.17); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.18). Найдем условия, выполнение которых гарантирует существование и единственность решения этих задач.

Убедимся, что для начально-граничных задач (2.1.14) – (2.1.16); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.17); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.18), используемых в прикладных исследованиях рассеяния примеси, в частности процесса диффузии при образовании тонких пленок на подложках, выполняются все условия теорем существования и единственности решения из [71]. Пусть для модели (2.1.14) – (2.1.16) выполнены условия:

- а)  $q(t, x_1, x_2, x_3)$  непрерывно дифференцируема по  $t$  в  $E_+^3$ , где  $E_+^3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1, x_2 \in (-\infty, \infty), x_3 \in [0, \infty)\}$ ;
- б)  $u_i, i = 1, 2, 3$  непрерывно дифференцируема по  $x$ , в  $E_+^3$ ;
- в)  $K_{ij}$  представимо в виде

$$K_{ij} = \begin{cases} \neq 0, & i = j, \\ = 0, & i \neq j, i = 1, 2, 3, \end{cases}$$

т.е. в матрице коэффициентов диффузии учитываются только диагональные элементы, а все элементы, не расположенные на главной диагонали, считаем равными нулю. При этом

$$K_{11} = K_{22} = c_2 u_1,$$

$$c_2 = \text{const} > 0,$$

где  $u_1$  задается выражением

$$\begin{aligned} u_1 &= c_1 u_1(x_3), \\ c_1 &= \text{const} > 0, \\ u_2 &= u_3 = 0, \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

(этот случай означает, что ось  $Ox_1$  сориентирована по направлению вектора горизонтального переноса, а скорость переноса вдоль оси  $Ox_3$  изменяется по логарифмическому закону), здесь  $u_1(x_3)$  изменяется по логарифмическому закону,

$$K_{33} = c_3 x_3 + c_4, \quad c_3 = \text{const} > 0, \quad c_4 = \text{const} > 0 \quad [71].$$

Чаще всего начально-граничные задачи процесса диффузии в твердых телах рассматривают в некоторой области  $G$ ,  $G \subset E_+^3$ ,  $E_+^3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1, x_2 \in (-\infty, \infty), x_3 \in [0, \infty)\}$ . В работе [48] в качестве  $G$  выбирают прямой круговой цилиндр высоты  $H$  с радиусом  $R$  основания, расположенного на подстилающей поверхности  $x_3 = 0$ . Предполагается, что  $H$  меньше высоты вещества наносимого на подложку [15]. Такой способ задания области  $G$  удобен при аналитических (если это возможно в отдельных случаях [66]) и численных решениях рассматриваемых начально-граничных задач.

В задачах будем считать, что функции  $\alpha, Q, \beta$  являются постоянными величинами в  $G$ .

При указанном выборе  $u_i, i=1,2,3$  (2.2.1), условие (2.1.13) выполняется.

Основываясь на рассуждениях в [71], сформулируем следующее утверждение, имеющее место для описания математической модели диффузии в процессе роста тонкой пленки на подложке.

*Теорема.* Пусть  $q(t, x_1, x_2, x_3)$  непрерывно дифференцируема по  $t \in [t_0, T]$  и дважды по  $x_1, x_2, x_3$  в  $E_+^3$ , где  $E_+^3 = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1, x_2 \in (-\infty, \infty), x_3 \in [0, \infty)\}$ ;  $u_i, i = 1, 2, 3$  непрерывно дифференцируемы по  $x_i$  в  $E_+^3$ ;  $K_{ij}$  имеют вид

$$K_{ij} = \begin{cases} K_i(x_3) > 0, & i = j, \\ = 0, & i \neq j, i = 1, 2, 3, \end{cases}$$

и дважды непрерывно дифференцируемы при  $x_3 > 0$ ;  $\alpha, Q, \beta$  являются постоянными величинами в  $E_+^3$ . Тогда решения начально-граничных задач (2.1.14) – (2.1.16); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.17); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.18) существуют и единственны.

*Доказательство.* В силу наших предположений о выполнении условий данной теоремы, очевидно, выполняются условия: 1) теоремы 16.2 из главы 4 § 16 [46], а значит, решение начально-граничной задачи (2.1.14) – (2.1.16) существует; 2) теоремы 5.2 из главы 4 § 5 [46], а значит, решение задачи (2.1.14) – (2.1.16) единственно и представимо в виде (2.1.19).

Проведя аналогичные рассуждения для задач (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.17); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.18), получим, что их решения существуют и единственны.

*Теорема доказана.*

Таким образом, исследования предложенной математической модели диффузионного роста тонкой пленки на подложке позволяют говорить о существовании и единственности решения данной математической модели.

### **2.3. Математическая модель диффузии вещества в различных соприкасающихся средах**

Разработаем математическую модель диффузионного проникновения атомов тонкой пленки в глубину подстилающей поверхности. С ее помощью произведем расчеты количества атомов пленки, проникающих в подложку, на разной глубине за заданный промежуток времени.

Тепловые колебания атомов в твердых телах являются колебаниями около средних положений равновесия с малыми амплитудами [61]. Эти перемещения, обусловленные тепловым движением, позволяют описать процесс диффузии в твердых соприкасающихся средах.

Диффузией называется перенос атомов вещества (примеси), обусловленный хаотическим тепловым движением атомов, возникающий при наличии градиента концентрации данного вещества, и направленный в сторону убывания этой концентрации [57]. С помощью диффузии можно управлять типом проводимости и концентрацией примеси в локальных областях полупроводниковой пластины, изменять тем самым электрические свойства этих областей.

В настоящем параграфе рассматривается процесс диффузии системы полупроводник (кремний) – примесь. Примесные атомы могут

располагаться в кремнии в узлах кристаллической решетки, замещая основные атомы, и между основными атомами (междоузельные примеси). Соответственно и перемещение примесных атомов может происходить по двум механизмам: вдоль дефектов кристаллической решетки (вакансиям) и по междоузлиям.

При высокой температуре ( $\sim 1000$  °C) наблюдается активация процесса диффузии. При диффузии по первому механизму после охлаждения кристалла вакансии исчезают, а примесные атомы, занимающие узлы кристаллической решетки, фиксируются. При диффузии по второму механизму после охлаждения кристалла междоузельные атомы могут вернуться в узлы, замещая основные атомы, и стать электрически активными [57].

Протекание диффузионного процесса в твердых телах следует разделить на последовательность этапов: 1) система: пленка – подложка, площадный источник– пленка; 2) система: верхний слой полупроводника (назовем его условно первым) – следующий слой твердого тела (условно назовем его вторым), площадный источник– верхний (первый) слой полупроводника; ... Полупроводник предлагается разбить на совокупность слоев толщиной несколько нанометров ( $\approx 10 - 100$  Нм).

1. Для описания процесса диффузии атомов пленки, при достаточно высокой температуре, на подложке предлагается использовать начально-граничную задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_0}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q_0}{\partial x_i} + \alpha q_0 + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 K_{ij} \frac{\partial^2 q_0}{\partial x_i \partial x_j} = \\ = Q_0 \cdot \delta(x_1 - x_1^0) \cdot \delta(x_2 - x_2^0) \cdot \delta(x_3 - x_3^0), \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = 0,$$

$$q_0(t_0, x_1, x_2, x_3) = 0, \quad t \in [t_0, T], \quad (2.3.2)$$

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q_0}{\partial x_3} + \varpi q_0 \right\} \Big|_{x_3=x_3^0} = \{ \nu_s q_0 \} \Big|_{x_3=x_3^0}, \quad t > t_0, \quad (2.3.3)$$

здесь  $q_0 = q_0(t_0, x_1, x_2, x_3)$  – концентрация адсорбционно-десорбционного вещества в единицу времени  $t_0$  в точке  $(x_1, x_2, x_3)$ ;  $Q_0$  – количество вещества, образующегося на поверхности  $x_3 = 0$  в единицу времени  $t_0$ .

Пусть, как и прежде компоненты вектора  $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$  являются постоянными величинами и он направлен вдоль оси  $Ox_1$  (т.е.  $u_2 = u_3 \equiv 0$ ), элементы матрицы  $K$  имеют вид:

$$K_{ij} = \begin{cases} \sigma_i^2, & i = j, \sigma_i = \text{const} > 0; \\ 0, & i \neq j, i, j = 1, 2, 3; \end{cases}$$

$\alpha = 0$ .

Тогда решение задачи (2.3.1) – (2.3.3) имеет вид [66]:

$$\begin{aligned} q_0(t, x_1, x_2, x_3) &= \frac{Q_0}{(4\pi(t-t_0))^{3/2} \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{(x_1 - u_1 \cdot (t-t_0))^2}{4\sigma_1^2 \cdot (t-t_0)} - \frac{x_2^2}{4\sigma_2^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \times \\ &\times \left[ \exp \left\{ -\frac{(x_3 - H)^2}{4\sigma_3^2 \cdot (t-t_0)} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(x_3 + H)^2}{4\sigma_3^2 \cdot (t-t_0)} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

2. Далее начально-граничная задача (2.3.1) – (2.3.3) используется для описания процесса диффузии системы первый слой подложки – ее второй слой. Источником примеси является первый слой подложки. Роль

подложки выполняет второй ее слой. Протекает второй этап диффузии. В этом случае диффузия во втором слое описывается начально-граничной задачей

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_1}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q_1}{\partial x_i} + \alpha q_1 + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 K_{ij} \frac{\partial^2 q_1}{\partial x_i \partial x_j} = \\ = Q_1(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \cdot \delta_3^{(2)}, \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = 0,$$

$$\begin{aligned} Q_1(t, x_1, x_2) = \nu_s^{(1)} \cdot q_0(t, x_1, x_2, x_3^{(1)}), \\ q_1(t_1, x_1, x_2, x_3) = 0, \quad t \in [t_1, T], \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q_1}{\partial x_3} + \varpi q_1 \right\} \Big|_{x_3=x_3^0} = \{ \nu_s q_1 \} \Big|_{x_3=x_3^{(1)}}, \quad t > t_1, \quad (2.3.7)$$

где  $Q_1(t, x_1, x_2)$  – количество вещества, образующегося на плоскости  $x_3^{(1)} = 0$  в точке  $(x_1, x_2)$  в момент времени  $t_1$ ;  $\delta_3^{(2)} = \delta(x_3^{(1)}) = \delta(x_3 - x_3^{(1)})$ .

3. И т.д.  $n$ -й этап диффузии протекает в  $n$ -ом слое. В этом случае рассматриваем начально-граничную задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_n}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q_n}{\partial x_i} + \alpha q_n + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 K_{ij} \frac{\partial^2 q_n}{\partial x_i \partial x_j} = \\ = Q_n(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \cdot \delta_3^{(n+1)}, \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = 0,$$

$$\begin{aligned} Q_n(t, x_1, x_2) = \nu_s^{(n)} \cdot q_{n-1}(t, x_1, x_2, x_3^{(n)}), \\ q_n(t_1, x_1, x_2, x_3) = 0, \quad t \in [t_n, T], \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

$$\left\{ K_{33} \frac{\partial q_n}{\partial x_3} + \varpi q_n \right\} \Big|_{x_3=x_3^0} = \{ \nu_s q_n \} \Big|_{x_3=x_3^{(n)}}, \quad t > t_n, \quad (2.3.10)$$

где  $Q_n(t, x_1, x_2)$  – количество вещества, образующегося на плоскости  $x_3 = x_3^{(n)}$  в момент времени  $t_n$ , представляющей собой  $(n-1)$ -слой подложки, в точке  $(x_1, x_2)$ ,  $x_3^{(n)}$  – нижняя граница подложки.

Таким образом, диффузия удовлетворяет условию  $Q_n < \dots < Q_2 < Q_1 < Q$ , где  $n$  – порядковый номер слоя полупроводника. Здесь наблюдается уменьшение количества диффундирующих атомов при увеличении числа  $n$ .

#### 2.4. Численные расчеты по предложенным моделям

Для разработанных математической модели диффузионного роста тонкой пленки на подложке (п. 2.1) и математической модели диффузионного проникновения атомов пленки в глубину подложки (п. 2.3) проведем численные расчеты.

Если диффузия является изотропной, то  $K_{ij} = K$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ , а  $K$  можно найти, воспользовавшись соотношением [52]

$$K = K_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right),$$

$K_0 = \text{const} > 0$ ,  $\Delta E$  – энергия активации диффузии,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура диффундирующего вещества в К.

1. Для галлия  $K_0 = 0,374 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $\Delta E = 3,41 \text{ эВ}$ , при  $T = 1523 \text{ К}$   $K = 0,37 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$ . В таблице 1 приведены результаты расчета концентрации галлия  $q(x)$  в  $1/\text{см}^3$  (т.е. количество атомов), диффундирующего на кремниевой подложке. Здесь  $t$  – время диффузии

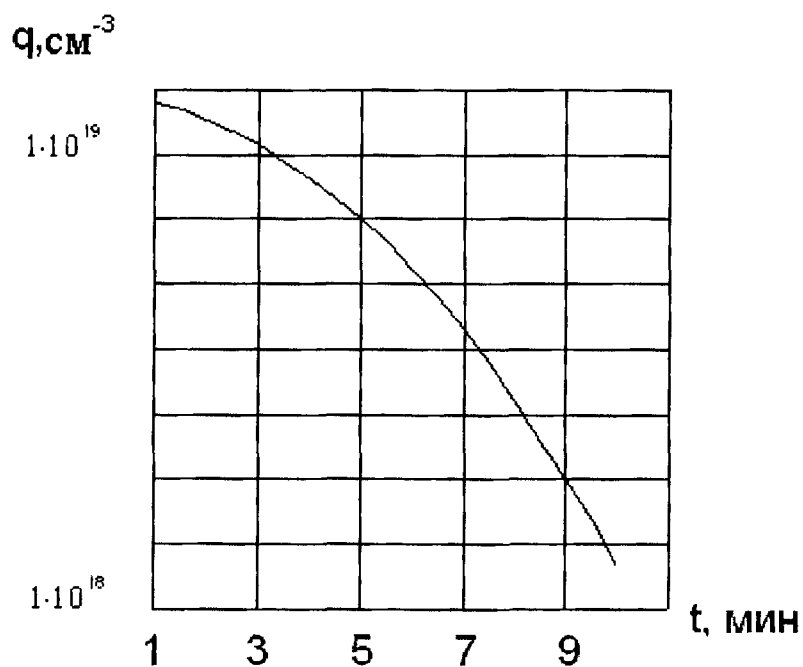


атомов галлия на кремнии,  $Q = 0,8 \cdot 10^{23} \text{ 1/(см}^3 \cdot \text{с)}$ ,  $H = 0,3 \text{ см}$  (см. Приложение 3).

**Таблица 1** – Результаты расчета концентрации  $q(x)$  галлия на кремнии в промежуток времени  $t$

$t, \text{ мин}$	$q(x), \text{ 1/см}^3$
1	$1,63 \cdot 10^{19}$
2	$1,34 \cdot 10^{19}$
3	$1,11 \cdot 10^{19}$
4	$9,33 \cdot 10^{18}$
5	$7,89 \cdot 10^{18}$
6	$6,72 \cdot 10^{18}$
7	$5,77 \cdot 10^{18}$
8	$4,98 \cdot 10^{18}$
9	$4,32 \cdot 10^{18}$
10	$3,76 \cdot 10^{18}$

Полученные результаты используются для построения графика  $q = q(x)$  – примесного профиля (рис. 7).



**Рисунок 7** – Зависимость концентрации галлия от времени диффузии его атомов на кремниевой подложке при  $T = 1523$  К

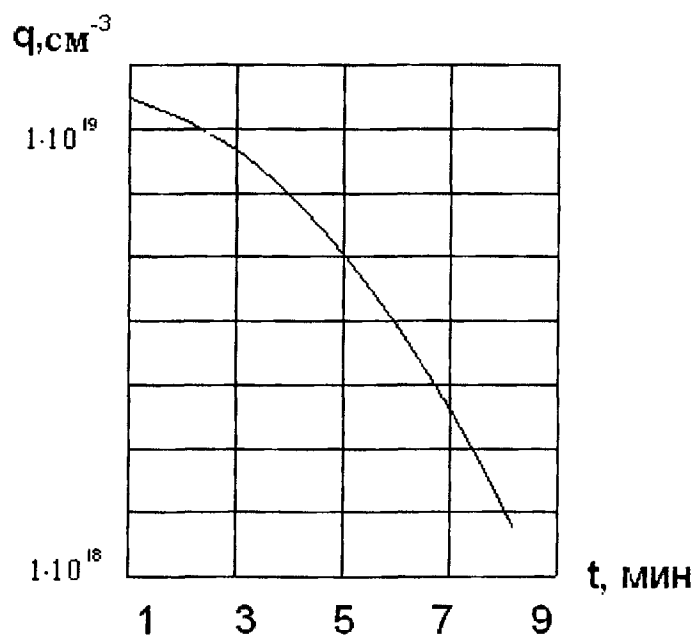
В таблице 2 приведены результаты расчеты концентрации галлия  $q(x)$  в  $1/\text{cm}^3$ , диффундирующего на кремниевой подложке при температуре  $T = 1223$  К.

**Таблица 2** – Результаты расчета концентрации  $q(x)$  галлия на кремнии в промежуток времени  $t$

$t$ , МИН	$q(x)$ , $1/\text{cm}^3$
1	$1,34 \cdot 10^{19}$
2	$1,28 \cdot 10^{19}$
3	$9,38 \cdot 10^{18}$
4	$8,45 \cdot 10^{18}$

$t, \text{мин}$	$q(x), 1/\text{см}^3$
5	$6,11 \cdot 10^{18}$
6	$5,53 \cdot 10^{18}$
7	$5,12 \cdot 10^{18}$
8	$3,47 \cdot 10^{18}$
9	$3,05 \cdot 10^{18}$
10	$2,43 \cdot 10^{18}$

Полученные результаты используются для построения графика  $q = q(x)$  – примесного профиля (рис. 8).



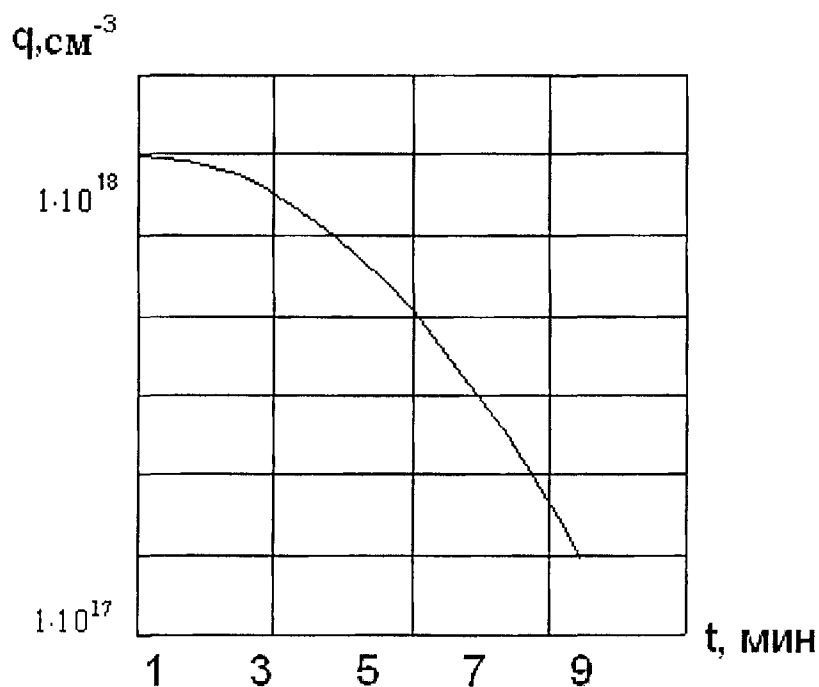
**Рисунок 8** – Зависимость концентрации галлия от времени диффузии его атомов на кремниевой подложке при  $T = 1223 \text{ К}$

В таблице 3 приведены результаты расчета концентрации галлия  $q(x)$  в  $1/\text{см}^3$ , диффундирующего на кремниевой подложке при температуре  $T = 923 \text{ К}$ .

**Таблица 3** – Результаты расчета концентрации  $q(x)$  галлия на кремнии в промежуток времени  $t$

$t, \text{ мин}$	$q(x), 1/\text{см}^3$
1	$5,32 \cdot 10^{18}$
2	$3,28 \cdot 10^{18}$
3	$2,01 \cdot 10^{18}$
4	$0,45 \cdot 10^{18}$
5	$8,67 \cdot 10^{17}$
6	$7,93 \cdot 10^{17}$
7	$7,16 \cdot 10^{17}$
8	$5,27 \cdot 10^{17}$
9	$4,35 \cdot 10^{17}$
10	$2,27 \cdot 10^{17}$

Полученные результаты используются для построения графика  $q = q(x)$  – примесного профиля (рис. 9).



**Рисунок 9** – Зависимость концентрации галлия от времени диффузии его атомов на кремниевой подложке при  $T = 923$  К

Анализ проведенных расчетов показывает, при одном и том же времени диффузии концентрация примеси  $q(x)$  в полупроводнике возрастает при возрастании температуры. Таким образом, изменяя температурный режим, можно изменить концентрацию примеси на подложке.

2. Проведенный численный эксперимент для математической модели диффузии вещества в различных соприкасающихся средах, позволяет установить диффузионные параметры примеси в приповерхностном слое кремния. В частности, рассмотрены системы Al–Si, B–Si, Cu–Si, Eu–Si, Ga–Si, In–Si и др. Расчеты проводились с использованием пакета прикладных программ MathCad Professional 2000 (см. Приложение 4).

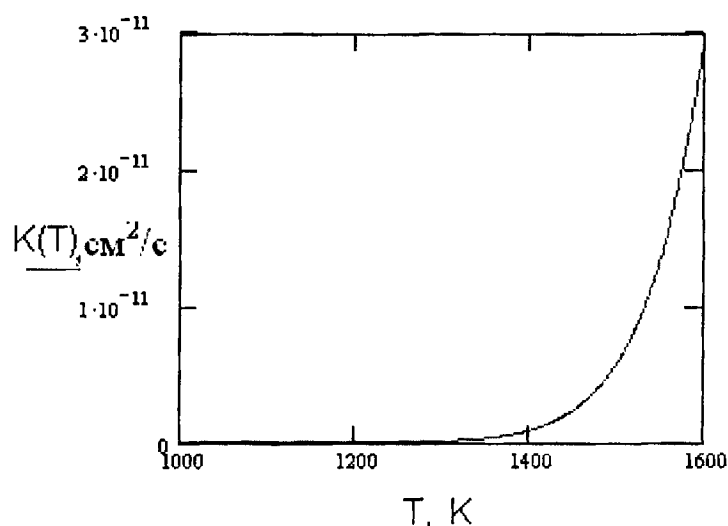
Температурная зависимость коэффициента диффузии носит аррениусовский характер и может быть описана при температуре диффузии соотношением

$$K = K_0 \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right), \quad (2.4.1)$$

где  $E_a$  – энергия активации диффузии примеси,  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана,  $T$  – температура диффузии.

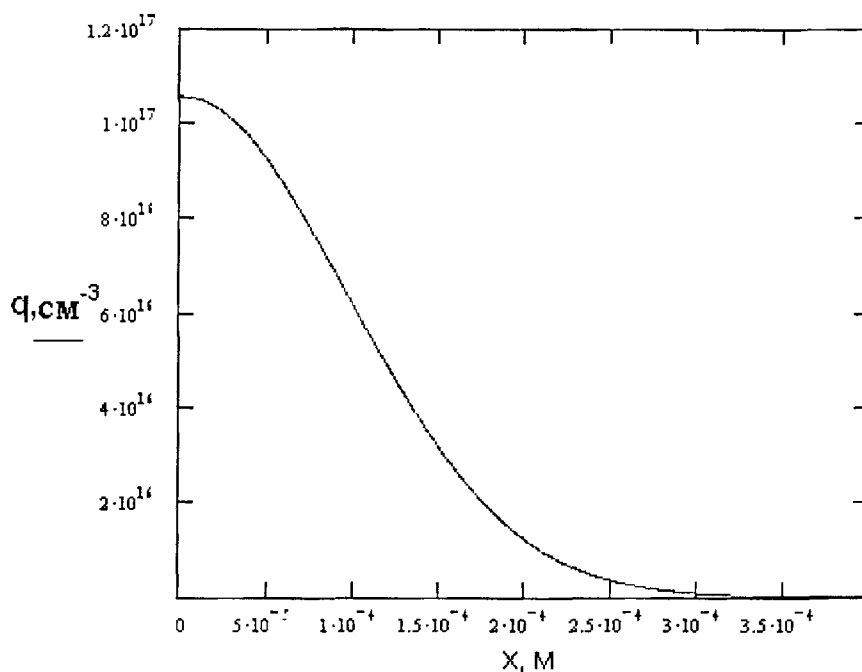
На рисунке 10 представлена зависимость коэффициента диффузии от температуры при  $T = 1000 - 1600^\circ \text{C} = 1273 - 1873$  К.

Как видно из рисунка 10 изменение коэффициента диффузии с увеличением температуры имеет экспоненциальный вид, при этом  $K(T)_{\max} = 2,88 \cdot 10^{-11}$  см<sup>2</sup>/с.



**Рисунок 10** – Температурная зависимость коэффициента диффузии для системы Al-Si

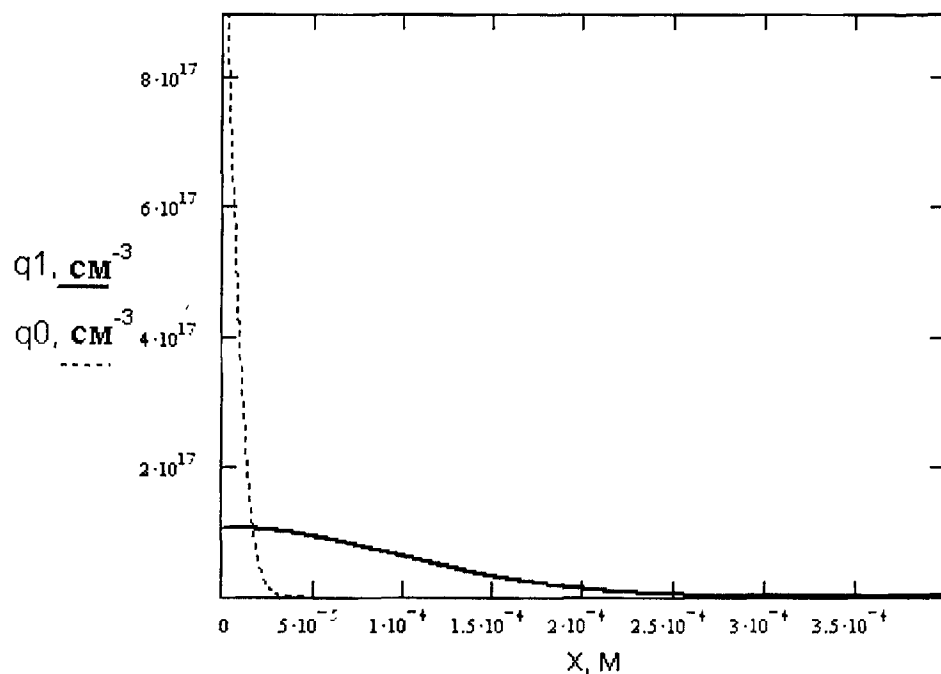
Для каждой из рассматриваемых систем получен профиль распределения примеси в приповерхностном слое полупроводника. Например, профиль распределения примеси Al в приповерхностном слое Si представлен на рисунке 11.



**Рисунок 11** – Профиль распределения примеси Al на поверхности полупроводника Si

На рисунке 12 показано количество примеси Al, проникающей в глубину кремниевой подложки. Штриховой кривой изображен профиль диффузии атомов пленки в первый слой подложки. Сплошная кривая позволяет наблюдать распределение примеси внутри полупроводника Si, проникновение атомов Al из первого слоя подложки в ее второй слой.

Как видно из рисунка 12, при проникновении атомов примеси в глубину полупроводника, наблюдается уменьшение количества диффундирующих атомов. Это связано прежде всего с тем, что мощность источника примеси также претерпевает уменьшение, т.е.  $Q_1 < Q_0$ .



**Рисунок 12** – Профиль распределения примеси Al в глубину полупроводника Si  
(сплошная линия – диффузия внутри полупроводника, штриховая –  
поверхностная диффузия)

Исследована зависимость концентрации атомов примеси в кремниевой подложке от времени диффузии. На рисунке 13 представлена зависимость от времени концентрации атомов Al в подложке. Как видно из рисунка 13 с увеличением времени диффузии концентрация атомов пленки в подложке растет, при этом максимальное значение концентрации атомов Al в Si составило  $1,8 \cdot 10^{13}$   $1/\text{cm}^3$ .



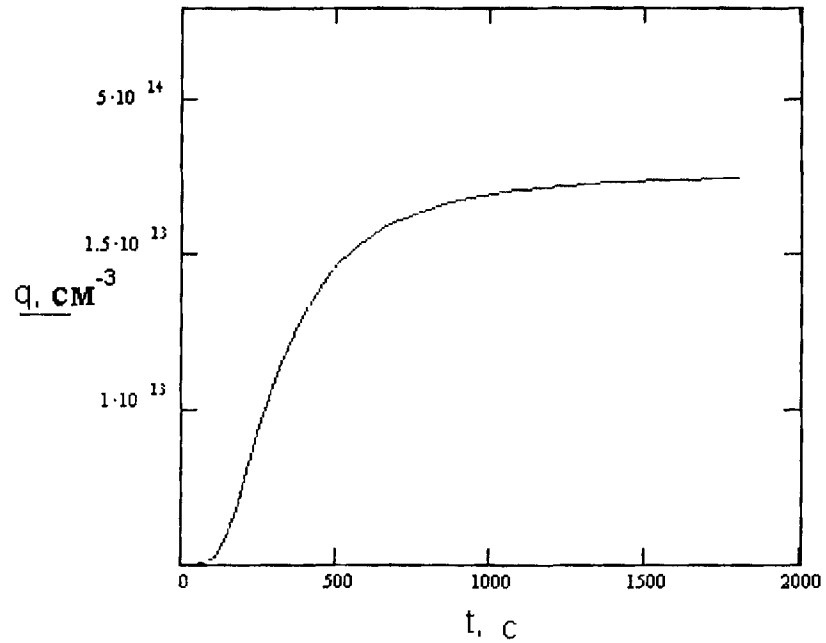


Рисунок 13 – Зависимость концентрации от времени диффузии в системе Al–Si

В таблице 4 приведены значения диффузионных параметров, данные представленные в столбце 2 взяты из экспериментальных исследований (температура диффузии) [57, 36, 54, 55, 56].

Таблица 4 – Диффузионные параметры примеси в кремнии

Элемент	Темп. диффузии $T, ^\circ\text{C}$	Глубина залегания, см	max концентрация примеси на поверхности, $1/\text{cm}^3$ (пленка – первый слой твердого тела)	max концентрация примеси в полупроводнике, $1/\text{cm}^3$ (первый слой твердого тела – второй его слой)
Алюминий, Al [57]	1000-1600	$1,85 \cdot 10^{-3}$	$1,05 \cdot 10^{13}$	$1,24 \cdot 10^{13}$
Бор, В [57]	1000-1600	$1,00 \cdot 10^{-3}$	$8,72 \cdot 10^{14}$	$9,62 \cdot 10^{15}$

Элемент	Темп. диффузии Т, °С	Глубина залегания, см	max концентрация примеси на поверхности, 1/см <sup>3</sup> (пленка – первый слой твердого тела)	max концентрация примеси в полупроводнике, 1/см <sup>3</sup> (первый слой твердого тела – второй его слой)
Медь, Cu [36]	550-650	16,71	$3,33 \cdot 10^{13}$	$6,67 \cdot 10^{14}$
Европий, Eu [54]	1100-1250	$2,45 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{13}$	$3,08 \cdot 10^{14}$
Галлий, Ga [57]	1000-1600	$8,88 \cdot 10^{-4}$	$1,04 \cdot 10^{13}$	$2,08 \cdot 10^{14}$
Индий, In [57]	1000-1600	$5,24 \cdot 10^{-4}$	$9,10 \cdot 10^{14}$	$1,82 \cdot 10^{14}$
Фосфор, P [57]	1000-1600	$1,02 \cdot 10^{-3}$	$8,93 \cdot 10^{14}$	$1,78 \cdot 10^{14}$
Мышьяк, As [57]	1000-1600	$4,59 \cdot 10^{-4}$	$7,02 \cdot 10^{14}$	$1,40 \cdot 10^{14}$
Сурьма, Sb [57]	1000-1600	$5,07 \cdot 10^{-4}$	$7,41 \cdot 10^{14}$	$1,48 \cdot 10^{14}$
Висмут, Bi [57]	1000-1600	$2,5 \cdot 10^{-4}$	$7,97 \cdot 10^{14}$	$1,59 \cdot 10^{14}$
Иттрий, Y [56]	1100-1250	$1,41 \cdot 10^{-4}$	$1,44 \cdot 10^{13}$	$2,88 \cdot 10^{14}$
Тербий, Tb [55]	1100-1280	$5,00 \cdot 10^{-4}$	$1,11 \cdot 10^{13}$	$2,23 \cdot 10^{14}$

Проводились исследования по проникновению элементов I, III и V групп периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева в кремниевую подложку. Было установлено, что:

– чем меньше порядковый номер группы элементов, тем больше глубина залегания атомов примеси в подложке Si при диффузионном процессе;

– чем больше номер группы элементов примеси, тем меньшее количество атомов пленки участвует в диффузии.

Отмеченное касается также и элементов IIIA группы Периодической системы.

## Выводы по второй главе

Во второй главе получены следующие результаты.

1. Построена математическая модель, описывающая диффузионное осаждение атомов вещества при адсорбционно-десорбционном процессе от точечного источника на подложку, учитывающая начально-граничные условия. Она позволяет оценить количество оседающего на подложку вещества.
2. Указаны условия существования и единственности решения начально-граничных задач (2.1.14) – (2.1.16); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.17); (2.1.14), (2.1.15) и (2.1.18), описывающих диффузию при росте тонких пленок на подложках.
3. Предложена математическая модель диффузии вещества в различных соприкасающихся фазах. С ее помощью можно определить глубину залегания атомов пленки в подложке, а также оценить концентрацию диффундирующего вещества на заданной глубине подстилающей поверхности.
4. Проведены численные расчеты количества адсорбируемого вещества в процессе его оседания на подстилающую поверхность и дальнейшего проникновения в глубину подложки.

### ГЛАВА 3. ЭКОНОМИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОИЗВОДСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК

В этой главе проведено исследование математическими методами некоторых экономических задач, связанных с производством тонких пленок.

При изучении процесса образования пленок на подложках практически значимым и актуальным является исследование экономических эффектов производства этих материалов.

Разработана экономико-математическая модель производства тонких пленок на подложках, позволяющая оценить экономические эффекты этого производства. Она определяет максимальную прибыль предприятия, производящего пленки. А также предложена экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок с учетом затрат на их производство. Построенные математические модели для их проверки на адекватность реализованы на примере действующих предприятий, производящих тонкие пленки.

Полученные результаты позволяют выявить экономические эффекты в процессе производства этих материалов.

### 3.1. Экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок

В работах автора [26, 27, 28] предложена и исследована математическая модель образования тонких пленок на подложках. В данном параграфе предлагается экономико-математическая модель производства таких продуктов, учитывающая технологию производства.

Пусть имеем  $m$  веществ 1-го типа, которые в виде пленки наносятся на  $n$  других веществ (подложка) 2-го типа. Пусть  $x_{ij}$  – объем производимого продукта  $(i, j)$ , представляющего собой  $j$ -е вещество 2-го типа (подложка), на которое нанесено в виде пленки  $i$ -е вещество 1-го типа,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, n$  [41, 98]. Обозначим через  $a_{ij}$  число единиц  $i$ -го вещества 1-го типа, затрачиваемых на единицу производства  $(i, j)$ -го продукта. Тогда

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_{ij}$$

– общий расход  $i$ -го вещества 1-го типа при производстве пленочных структур. Пусть общие запасы  $i$ -го вещества 1-го типа на предприятии составляют  $\alpha_i$ . Тогда в производственном процессе должно учитываться очевидное неравенство

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_{ij} \leq \alpha_i, \quad (3.1.1)$$

$$i = 1, \dots, m.$$

Аналогично, обозначим через  $b_{ij}$  число единиц  $j$ -го вещества 2-го типа, затрачиваемых на единицу производства  $(i, j)$ -го продукта. Тогда

$$\sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot x_{ij}$$

– общий расход  $j$ -го вещества 2-го типа при производстве пленочных структур. Пусть общие запасы  $j$ -го вещества 2-го типа на предприятии составляют  $\beta_j$ . Тогда в производственном процессе должно учитываться очевидное неравенство

$$\sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot x_{ij} \leq \beta_j, \quad (3.1.2)$$

$$j = 1, \dots, n.$$

Обозначим далее через  $z_{ij}$  – затраты (в денежном исчислении) на производство единицы  $(i, j)$ -го продукта,  $I$  – общие инвестиции (в денежном исчислении) в рассматриваемое производство. Так как

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij}$$

– общие затраты в рассматриваемом производстве, то

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij} \leq I. \quad (3.1.3)$$

Затраты  $z_{ij}$  зависят от времени протекания технологического процесса  $T$  (времени образования тонкой пленки), температуры  $t^0$ , при которой он протекает, толщины  $h$  тонкой пленки, стоимости единицы массы пленки  $c_1$  и единицы массы подложки  $c_2$ , т.е.

$$z_{ij} = z_{ij}(T, t^0, h, c_1, c_2).$$

Данная зависимость устанавливается экспериментально с учетом особенностей того предприятия, которое производит данный вид товара.

Через  $p_{ij}$  обозначим стоимость единицы  $(i, j)$ -го продукта на рынке.

Тогда

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} \cdot x_{ij} \quad (3.1.4)$$

– общая (суммарная) выручка предприятия, производящего пленочные структуры.

Задача предприятия, производящего пленочные структуры, состоит в такой организации производства (т.е. планировании объемов  $x_{ij}$  производимых пленочных структур  $(i, j)$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, n$ ), чтобы суммарная выручка (3.1.4) была максимальной. Назовем условно эту задачу задачей 1. Формально, с учетом указанных выше ограничений, данную задачу 1 можно записать следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} \cdot x_{ij} \rightarrow \max \\ \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_{ij} \leq \alpha_i, \\ \sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot x_{ij} \leq \beta_j, \\ \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij} \leq I, \\ x_{ij} \geq 0, \\ i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n. \end{array} \right. \quad (3.1.5)$$

Задача (3.1.5) представляет собой обычную задачу линейного программирования и может быть легко решена известными методами (например, симплекс-методом в пакете Microsoft Office Excel).

Запишем (3.1.5) в стандартном (наиболее употребляемом) виде, используя в обозначениях один индекс, а не два, как в модели (3.1.5).



Введем в рассмотрение матрицы

$$P = \{p_{ij}\} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & \cdots & p_{2n} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & \cdots & p_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ p_{m1} & p_{m2} & p_{m3} & \cdots & p_{mn} \end{pmatrix},$$

$$A = \{a_{ij}\},$$

$$B = \{b_{ij}\},$$

$$Z = \{z_{ij}\},$$

$$X = \{x_{ij}\},$$

$$i = 1, \dots, m;$$

$$j = 1, \dots, n,$$

и произведем переобозначения:

$$p_{11} = P_1, \dots, p_{1n} = P_n, p_{21} = P_{n+1}, \dots, p_{2n} = P_{2 \times n}, \dots, \\ p_{31} = P_{2 \times n + 1}, \dots, p_{3n} = P_{3 \times n}, \dots, p_{m1} = P_{(m-1) \times n + 1}, \dots, p_{mn} = P_{m \times n};$$

$$a_{11} = A_1, \dots, a_{1n} = A_n, a_{21} = A_{n+1}, \dots, a_{2n} = A_{2 \times n}, \dots, \\ a_{31} = A_{2 \times n + 1}, \dots, a_{3n} = A_{3 \times n}, \dots, a_{m1} = A_{(m-1) \times n + 1}, \dots, a_{mn} = A_{m \times n};$$

$$b_{11} = B_1, \dots, b_{1n} = B_n, b_{21} = B_{n+1}, \dots, b_{2n} = B_{2 \times n}, \dots, \\ b_{31} = B_{2 \times n + 1}, \dots, b_{3n} = B_{3 \times n}, \dots, b_{m1} = B_{(m-1) \times n + 1}, \dots, b_{mn} = B_{m \times n};$$

$$z_{11} = Z_1, \dots, z_{1n} = Z_n, z_{21} = Z_{n+1}, \dots, z_{2n} = Z_{2 \times n}, \dots, \\ z_{31} = Z_{2 \times n + 1}, \dots, z_{3n} = Z_{3 \times n}, \dots, z_{m1} = Z_{(m-1) \times n + 1}, \dots, z_{mn} = Z_{m \times n};$$

$$x_{11} = X_1, \dots, x_{1n} = X_n, x_{21} = X_{n+1}, \dots, x_{2n} = X_{2 \times n}, \dots, \\ x_{31} = X_{2 \times n + 1}, \dots, x_{3n} = X_{3 \times n}, \dots, x_{m1} = X_{(m-1) \times n + 1}, \dots, x_{mn} = X_{m \times n}.$$

Тогда (3.1.5) можно записать в виде:



Поделив целевую функцию, левые и правые части неравенств в (3.1.5) на  $T$  и учитывая обозначения (3.1.6), (3.1.7), приходим к математической модели

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} \cdot y_{ij} \rightarrow \max \\ \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot y_{ij} \leq \bar{\alpha}_i, \\ \sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot y_{ij} \leq \bar{\beta}_j, \\ \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot y_{ij} \leq \bar{I}, \\ y_{ij} \geq 0, \\ i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n, \end{array} \right.$$

позволяющей решить поставленную задачу 2.

**Пример 1.** Рассмотрим процессы хроматирования алюминия (продукт 1) и бесцветного хроматирования алюминия (продукт 2) [57].

Процесс хроматирования алюминия предназначен для образования на поверхности защитно-декоративной пленки от светло-желтого до коричневого цвета. Пленка обладает хорошими защитными свойствами, а так же увеличивает адгезию лаков и красок. Хроматирование производится погружением деталей на подвесках или насыпью во вращательных установках. Раствор можно корректировать при изменении внешнего вида покрытия или по результатам анализа. Цвет получаемой пленки зависит как от значения рН раствора, так и от продолжительности хроматирования.

Процесс бесцветного хроматирования алюминия предназначен для получения бесцветных токопроводных пленок. Пленка обладает хорошими защитными свойствами, а так же увеличивает адгезию лаков и красок.

Для изготовления конечного продукта на поверхность Al (подложка, вещество 2-го типа) в обоих случаях наносится раствор Cr (пленка, вещество 1-го типа) различной массы. Расход Al и Cr при производстве двух марок хромированного алюминия задан таблицей:

Вид изделия	Тип вещества	
	Вещество 1-го типа	Вещество 2-го типа
Продукт 1	0,21	0,78
Продукт 2	0,38	0,61

Доход компании «Высокие Технологии» от производства одного килограмма продукта 1 составляет 16,5 гривны, а продукта 2 – 22,5 гривны (см., например, [57]). В переводе на рубли по курсу ЦБ РФ получим около 82,5 и 112,5 рублей соответственно.

Определим, сколько продукта 1 и продукта 2 должна изготовить компания, чтобы ее прибыль была наибольшей.

Пусть в распоряжении компании «Высокие технологии» имеется по 5 килограммов Al и Cr. Обозначим  $x_{11}$  – количество продукта 1,  $x_{21}$  – продукта 2. Из условия задачи  $p_{11} = 82,5$ ,  $p_{21} = 112,5$ ,  $\alpha_1 = 5$ ,  $\beta_1 = 5$ ,  $a_{11} = 0,21$ ,  $a_{12} = 0,78$ ,  $b_{12} = 0,38$ ,  $b_{22} = 0,61$ , тогда (3.1.5) примет вид:

$$\begin{cases} 82,5x_{11} + 112,5x_{21} \rightarrow \max \\ 0,21x_{11} + 0,78x_{21} \leq 5, \\ 0,38x_{11} + 0,61x_{21} \leq 5, \\ x_{11} \geq 0, x_{21} \geq 0, \end{cases}$$

(здесь предполагаем, что запасы веществ на предприятии используются полностью в производственном процессе).

Обозначая  $X_1 = x_{11}$ ,  $X_2 = x_{21}$ , получаем:

$$\begin{cases} 82,5X_1 + 112,5X_2 \rightarrow \max \\ 0,21X_1 + 0,78X_2 \leq 5, \\ 0,38X_1 + 0,61X_2 \leq 5, \\ X_1 \geq 0, X_2 \geq 0, \end{cases}$$

Решение данной задачи находим симплекс-методом в пакете прикладных программ Microsoft Office Excel 2003.

Решение имеет вид:  $X_1 = x_{11} = 3,62$  килограмма,  $X_2 = x_{21} = 5,14$  килограмма. Максимальная прибыль составит 876,9 рублей или 175,38 гривен.

**Пример 2.** Рассмотрим процесс производства ферросилициума двух марок (FeSi-45 и FeSi-75).

Для изготовления FeSi-45 и FeSi-75 на поверхность Fe (подложка, вещество 2-го типа) в обоих случаях наносится пленка Si (вещество 1-го типа) различной массы. Расход Si и Fe при производстве двух марок ферросилициума задан таблицей:

Вид изделия	Тип вещества	
	Вещество 1-го типа	Вещество 2-го типа
FeSi-45	0,45	0,54
FeSi-75	0,52	0,47

Доход ООО «Импэкс Инвест» от производства одной тонны FeSi-45 составляет 21500 рублей, а FeSi-75 – 36000 рублей (см., например, [59]).

Определим, сколько FeSi-45 и сколько FeSi-75 должна изготовить компания, чтобы ее прибыль была наибольшей.

Пусть в распоряжении ООО «Импэкс Инвест» имеется по 5 тонн Si и Fe. Обозначим  $x_{11}$  – количество FeSi-45,  $x_{21}$  – FeSi-75. Из условия задачи  $p_{11} = 21500$ ,  $p_{21} = 36000$ ,  $\alpha_1 = 5$ ,  $\beta_1 = 5$ ,  $a_{11} = 0,45$ ,  $a_{12} = 0,54$ ,  $b_{12} = 0,52$ ,  $b_{22} = 0,47$ , тогда (3.1.5) примет вид:

$$\begin{cases} 21500x_{11} + 36000x_{21} \rightarrow \max \\ 0,45x_{11} + 0,54x_{21} \leq 5, \\ 0,52x_{11} + 0,47x_{21} \leq 5, \\ x_{11} \geq 0, x_{21} \geq 0, \end{cases}$$

(полученная система уравнений и неравенств имеет решение в предположении, что запасы веществ на предприятии используются полностью в производственном процессе).

Обозначая  $X_1 = x_{11}$ ,  $X_2 = x_{21}$ , получаем:

$$\begin{cases} 21500X_1 + 36000X_2 \rightarrow \max \\ 0,45X_1 + 0,54X_2 \leq 5, \\ 0,52X_1 + 0,47X_2 \leq 5, \\ X_1 \geq 0, X_2 \geq 0, \end{cases}$$

Решение имеет вид:  $X_1 = x_{11} = 9,2592$  тонны,  $X_2 = x_{21} = 0,6481$  тонны.

Максимальная прибыль составит 333 300 рублей.

### 3.2. Экономико-математическая модель объемов производства тонких пленок с учетом затрат на их производство

В данном параграфе приведем экономико-математическую модель производства тонких пленок на подложках с учетом затрат на их производство.

Учитывая рассуждения и обозначения предыдущего параграфа можно сформулировать задачу предприятия, которое производит тонкопленочные материалы: произвести планирование объемов  $x_{ij}$  производимых тонкопленочных материалов  $(i, j)$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, n$ , таким образом, чтобы суммарный доход (3.1.4) был максимальным, а общий объем затрат

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij} -$$

минимальным. Назовем условно эту задачу задачей 3. Формально, с учетом указанных выше ограничений, данную задачу 3 можно записать следующим образом:

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} \cdot x_{ij} \rightarrow \max, \quad (3.2.1)$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij} \rightarrow \min, \quad (3.2.2)$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_{ij} \leq \alpha_i, \\ \sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot x_{ij} \leq \beta_j, \\ x_{ij} \geq 0, \\ i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n. \end{cases} \quad (3.2.3)$$

Используя в обозначениях не два индекса, а один, задачу (3.2.1) – (3.2.3) можно записать в стандартном (наиболее употребляемом) виде:

$$\sum_{i=1}^{m \times n} P_i \cdot X_i \rightarrow \max, \quad (3.2.4)$$

$$\sum_{i=1}^{m \times n} Z_i \cdot X_i \rightarrow \min, \quad (3.2.5)$$

$$\begin{cases} A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots + A_n X_n \leq \alpha_1, \\ A_{n+1} X_{n+1} + A_{n+2} X_{n+2} + \dots + A_{2 \times n} X_{2 \times n} \leq \alpha_2, \\ \dots \\ A_{(m-1) \times n+1} X_{(m-1) \times n+1} + A_{(m-1) \times n+2} X_{(m-1) \times n+2} + \dots + A_{m \times n} X_{m \times n} \leq \alpha_m, \\ B_1 X_1 + B_{n+1} X_{n+1} + \dots + B_{(m-1) \times n+1} X_{(m-1) \times n+1} \leq \beta_1, \\ B_2 X_2 + B_{n+2} X_{n+2} + \dots + B_{(m-1) \times n+2} X_{(m-1) \times n+2} \leq \beta_2, \\ \dots \\ B_n X_n + B_{2 \times n} X_{2 \times n} + \dots + B_{m \times n} X_{m \times n} \leq \beta_m, \\ X_i \geq 0, i = 1, \dots, m \times n. \end{cases} \quad (3.2.6)$$

В рамках модели (3.2.1) – (3.2.3) можно изучать также следующую задачу 4: определить уровень интенсивности производства тонкопленочных материалов для максимизации дохода от продажи этих продуктов (товаров) и минимизации общих затрат на их производство.

Целевые функции (3.2.1) и (3.2.2) поделим на промежуток времени  $T > 0$ , а также поделим неравенства (3.2.3) на  $T > 0$  и учитывая обозначения (3.1.6), (3.1.7), приходим к математической модели



$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} \cdot y_{ij} \rightarrow \max, \quad (3.2.7)$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} \cdot x_{ij} \rightarrow \min, \quad (3.2.8)$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot y_{ij} \leq \bar{\alpha}_i, \\ \sum_{i=1}^m b_{ij} \cdot y_{ij} \leq \bar{\beta}_j, \\ y_{ij} \geq 0, i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n, \end{cases} \quad (3.2.9)$$

позволяющей решить поставленную задачу 4.

Математические модели (3.2.1) – (3.2.3) (или (3.2.4) – (3.2.6)), (3.2.7) – (3.2.9) представляют собой двухкритериальные (соответственно с критериями (3.2.1), (3.2.2); (3.2.4), (3.2.5); (3.2.7), (3.2.8)) оптимизационные задачи. Многокритериальные задачи относятся к классу задач, изучаемых в теории принятия решения. Основными методами построения решений таких задач являются методы свертки критериев. Один из таких методов разработан авторами данной работы и изложен в [71].

Предлагается производить линейную свертку критериев (3.2.7), (3.2.8): вместо этих двух критериев рассматривается один

$$\gamma_1 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n p_{ij} y_{ij} - \gamma_2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n z_{ij} y_{ij} \rightarrow \max, \quad (3.2.10)$$

где  $\gamma_1 = \text{const} \geq 0$ ,  $\gamma_2 = \text{const} \geq 0$ ,  $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$ , задаются экспертами и их значения отражают степень предпочтительного одного критерия перед другим (например, если эксперты задают  $\gamma_1 = 0,5$ ,  $\gamma_2 = 0,5$ , то эти критерии одинаково предпочтительны; если  $\gamma_1 = 0,75$ ,  $\gamma_2 = 0,25$ , то это означает, что первый критерий в три раза предпочтительнее второго и т.д.). Тогда

двукритериальная задача (3.2.7) – (3.2.9) сводится к однокритериальной (3.2.10), (3.2.9).

Задачи (3.2.1), (3.2.3) и (3.2.10), (3.2.9) представляют собой обычные задачи линейного программирования и могут быть легко решены известными методами (например, симплекс-методом, реализованным в пакете Microsoft Office Excel).

**Пример 1.** Рассмотрим процессы хроматирования алюминия (продукт 1) и бесцветного хроматирования алюминия (продукт 2) [57].

Для изготовления конечного продукта на поверхность Al (подложка, вещество 2-го типа) в обоих случаях наносится раствор Cr (пленка, вещество 1-го типа) различной массы. Расход Al и Cr при производстве двух марок хроматированного алюминия задан таблицей:

Вид изделия	Тип вещества	
	Вещество 1-го типа	Вещество 2-го типа
Продукт 1	0,21	0,78
Продукт 2	0,38	0,61

Доход компании «Высокие Технологии» от производства одного килограмма продукта 1 составляет 16,5 гривны, а продукта 2 – 22,5 гривны (см., например, [57]). В переводе на рубли по курсу ЦБ РФ получим около 82,5 и 112,5 рублей соответственно.

Определим, сколько продукта 1 и продукта 2 должна изготовить компания, чтобы ее доход был наибольшим, а затраты на производство минимальны.

Пусть в распоряжении компании «Высокие технологии» имеется по 5 килограммов Al и Cr.

Будем считать, что согласно оценке экспертов  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0,5$ .

Обозначим  $x_{11}$  – количество продукта 1,  $x_{21}$  – продукта 2. Из условия задачи  $p_{11} = 82,5$ ,  $p_{21} = 112,5$ ,  $\alpha_1 = 5$ ,  $\beta_1 = 5$ ,  $a_{11} = 0,21$ ,  $a_{12} = 0,78$ ,  $b_{12} = 0,38$ ,  $b_{22} = 0,61$ .

Решение данной задачи сводится к исследованию задач типа (3.2.1) – (3.2.3), т.е. к исследованию задачи линейного программирования. Находим его симплекс-методом в пакете прикладных программ Microsoft Office Excel 2003.

Решение имеет вид:  $X_1 = x_{11} = 3,62$  килограмма,  $X_2 = x_{21} = 5,14$  килограмма. Максимальный доход должен составить 711,3 рублей. При этом общий объем затрат составит 165,6 рублей. Или 142,26 и 33,12 гривен.

**Пример 2** (числовые данные в этом примере взяты из [59]). Рассмотрим процесс производства ферросилициума двух марок (FeSi-45 и FeSi-75).

Расход исходных материалов Si и Fe при производстве двух марок ферросилициума задан таблицей:

Вид изделия	Тип вещества	
	Вещество 1-го типа	Вещество 2-го типа
FeSi-45	0,45	0,54
FeSi-75	0,52	0,47

В распоряжении ООО «Импэкс Инвест» имеется по 5 тонн Si и Fe.

Доход ООО «Импэкс Инвест» от производства одной тонны FeSi-45 составляет 21500 рублей, а FeSi-75 – 36000 рублей (см., например, [59]), а затраты составляют соответственно 7000 и 15000 рублей.

Определим, сколько FeSi-45 и сколько FeSi-75 должна изготовить компания, чтобы ее доход был наибольшим, а суммарные затраты – наименьшими.

Будем считать, что согласно оценке экспертов  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0,5$ .

Обозначим через  $x_{11}$  – количество FeSi-45,  $x_{21}$  – FeSi-75. Из условия задачи  $p_{11} = 21500$ ,  $p_{21} = 36000$ ,  $q_{11} = 7000$ ,  $q_{21} = 15000$ ,  $\alpha_1 = 5$ ,  $\beta_1 = 5$ ,  $a_{11} = 0,45$ ,  $a_{12} = 0,54$ ,  $b_{12} = 0,52$ ,  $b_{22} = 0,47$ . Решение данной задачи сводится к исследованию задач типа (3.2.1) – (3.2.3), т.е. к исследованию задачи линейного программирования.

Воспользовавшись пакетом прикладных программ Microsoft Office Excel 2003, находим решение данной задачи. Оно имеет вид:  $X_1 = x_{11} = 9,2592$  т.,  $X_2 = x_{21} = 0,6481$  т. Максимальный доход должен составить 222404,4 рублей. При этом общий объем затрат составит 110895,6 рублей.

## Выводы по третьей главе

В главе три получены следующие результаты.

1. Разработана экономико-математическая модель производства тонкопленочных материалов на подложках, учитывающая технологию производства. Она позволяет рассчитать максимальную прибыль предприятия от производства определенного вида продукции (тонкая пленка – подложка).
2. Предложена математическая модель производства тонкопленочных материалов на подложках с учетом затрат на их производство. С ее помощью можно рассчитать максимальный суммарный доход и минимальный объем затрат в процессе производства тонкопленочных материалов.
3. Показано, что предложенные экономико-математические модели могут быть применены не только для производства тонкопленочных материалов на подложках, но и для сплавов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании приведенных выше результатов исследования можно сделать следующие выводы:

1. Рассмотрено полуэмпирическое уравнение диффузии, которое представляет собой дифференциальное уравнение с частными производными. Оно составляет основу прикладных математических моделей. Установлено, что до настоящего времени полного исследования решения полуэмпирического уравнения диффузии не проведено.
2. Приведены теоретические исследования о корректности постановки задач математической физики. Указаны требования корректности. Обозначены способы выбора параметра регуляризации для решения некорректно поставленных математических моделей.
3. Для описания процесса осаждения атомов вещества при адсорбционно-десорбционном процессе от точечного источника на подложку построена математическая модель диффузии, учитывающая начально-граничные условия, позволяющая определить количество оседающего на подложку вещества за заданный промежуток времени.
4. Указаны условия существования и единственности решения начально-граничных задач, описывающих диффузию при росте тонких пленок на подложках.

5. Предложена математическая модель диффузии вещества в различных соприкасающихся средах, описывающая диффузионный рост тонкой пленки на подложке от площадного источника и дальнейшего проникновения атомов пленки в глубину подложки. Эта модель позволяет определить глубину залегания атомов пленки в подложке, а также оценить концентрацию диффундирующего вещества на заданной глубине подстилающей поверхности.
6. Для расчета максимальной прибыли предприятия от производства определенного вида продукции разработана экономико-математическая модель производства тонкопленочных материалов на подложках.
7. Построена экономико-математическая модель производства тонкопленочных материалов на подложках с учетом затрат на их производство. С ее помощью можно рассчитать максимальный доход и минимальный объем затрат при производстве тонкопленочных материалов.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абросимова, Г.Е. Влияние температурной обработки на скорость звука и упругие волны в аморфном сплаве  $Zr_{52.5}Zr_{17.9}Ti_5$  [Текст] / Г.Е. Абросимова и др. // Физика твердого тела. – 2004. - Т. 46. - Вып. 10. - С. 1801-1805.
2. Адамсон, А. Физическая химия поверхностей [Текст] / А. Адамсон.- М.: Мир, 1979. - 568 с.
3. Аксенов, В.Л. Фазовый переход смешанного типа в модели сегнетоэлектрика [Текст] /В.Л. Аксенов // Физика твердого тела. – 1976. - Т. 18. - Вып. 10. - С. 2922-2933.
4. Аксенов, В.Л. Динамика решётки сегнетоэлектриков с примесями [Текст] / В.Л. Аксенов, Х. Бретер, Н.М. Плакида // Физика твердого тела. - 1978. - Т.20. - № 5. - С. 1469-1476.
5. Алексеев, Е.Р. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad 12, MATLAB 7, Maple 9 [Текст] / Е.Р. Алексеев, О.В. Чеснокова. - М.: ИТ Пресс, 2006. - 496 с.
6. Андриевский, В.Ф. Диффузия цинка в незащищенную поверхность InP [Текст] / В.Ф. Андриевский, Е.В. Гущинская, С.А. Малышев // Физика и техника полупроводников. - 2004. – Т. 38. - Вып. 1. - С. 68-71.
7. Арсенин, В.Я. О решении некоторых интегральных уравнений первого рода типа свертки методом регуляризации [Текст] / В.Я. Арсенин, В.В. Иванов // Журнал Высшая математика и математическая физика. - 1968. - №2.



8. Арсенин, В.Я. О применении метода регуляризации к интегральным уравнениям первого рода типа свертки [Текст] / В.Я. Арсенин, Т.И. Савелова // Журнал Высшая математика и математическая физика. - 1969. - № 9.
9. Бакушский, А.Б. Итеративные методы решения некорректных задач [Текст] / А.Б. Бакушский, А.В. Гончарский. - М.: Наука, 1989. - 426 с.
10. Бакушский, А.Б. Некорректные задачи. Численные методы и приложения [Текст] / А.Б. Бакушский, А.В. Гончарский. - М.: Издательство Московского государственного университета, 1989. - 202 с.
11. Бахвалов, Н.С. Численные методы [Текст] / Н.С. Бахвалов. - М.: Наука, 1973. - 614 с.
12. Бахвалов, Н.С. Численные методы [Текст]: учебное пособие для физико-математических специальностей / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков ; под общей редакцией Н.И. Тихонова. - 2-е издание. - М.: Физматлит : Лаборатория Базовых Знаний ; СПб. : Невский диалект, 2002. - 630 с. : ил. ; 25 см. - (Технический университет. Математика). - Библиография: с. 622-626. - Предметный указатель: с. 627-630. - 30000 экз. ISBN 5-93208-043-4 (в пер.).
13. Березин, И.С. Методы вычислений. Т. 1 [Текст] / И.С. Березин, Н.П. Жидков. - М.: Физматгиз, 1962. - 472 с.
14. Березин, И.С. Методы вычислений. Т. 2 [Текст] / И.С. Березин, Н.П. Жидков. - М.: Физматгиз, 1962. - 402 с.

15. Берлянд, М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы [Текст] / М.Е. Берлянд. - Л.: Гидрометеоиздат, 1975. - 448 с.
16. Боголюбов, Н.Н. Некоторые вопросы статистической механики [Текст] / Н.Н. Боголюбов, Б.И. Садовников. - М.: Наука, 1975. - 308 с.
17. Болтакс, Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках [Текст] / Б.И. Болтакс. - Л.: Мир, 1972. - 362 с.
18. Бонч-Бруевич, В.Л. Электронная теория неупорядоченных полупроводников [Текст] / В.Л. Бонч-Бруевич и др. - М.: Наука, 1981. - 486 с.
19. Брус, А. Структурные фазовые переходы [Текст] / А. Брус, Р. Каули. - М.: Мир, 1984. - 408с.
20. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов [Текст]: учебник для вузов / В.М. Вержбицкий. - М.: Высшая школа, 2005. - 840 с.
21. Вержбицкий, В.М. Численные методы [Текст] / В.М. Вержбицкий. - М.: Высшая школа, 2001. - 612 с.
22. Вержбицкий, В.М. Численные методы [Текст]: линейная алгебра и нелинейные уравнения / В.М. Вержбицкий. - М.: Высшая школа, 2000. - 612 с.
23. Верлань, А.Ф. Математическое моделирование непрерывных динамических систем [Текст] / А.Ф. Верлань, С.С. Москалюк. - Киев: Наукова думка, 1988. - 362 с.

24. Верлань, А.Ф. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы [Текст] / А.Ф. Верлань, В.С. Сизиков. - Киев: Наукова думка, 1986. - 426 с.
25. Выгодский, М.Я. Справочник по высшей математике [Текст] / М.Я. Выгодский. - М.: Наука, 1977. - 872 с.
26. Галай, Е.О. Статистическая модель образования плёнок на кристаллических подложках [Текст] / Е.О. Галай // Обозрение прикладной и промышленной математики. VII Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике. - М.: Редакция журнала «Обозрение прикладной и промышленной математики». - 2006. - Т. 13. - Вып. 1. - С. 89.
27. Галай, Е.О. Квантостатистическая модель образования пленки на кристаллической подложке [Текст] / Е.О. Галай // Современные проблемы науки и образования. - М.: Издательство Российской академии естествознания. - 2006. - Т. 2. - С. 65-66.
28. Галай, Е.О. Математическая модель образования плёнок на подложках [Текст] / Е.О. Галай // Обозрение прикладной и промышленной математики. XII Всероссийская школа-коллоквиум по стохастическим методам. VI Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике. - М.: Редакция журнала «Обозрение прикладной и промышленной математики». - 2005. - Т.12. - Вып. 4. - С. 932.
29. Галай, Е.О. Термодинамика решетки в модели  $\{\varphi^3, \varphi^4\}$  [Текст] / Е.О. Галай // Материалы 50-й юбилейной научно-методической конференции преподавателей и студентов Ставропольского

- государственного университета «Университетская наука – региону», посвященной 60-летию Победы в Великой Отечественной войне. (5-25 апреля 2005 г.). - Ставрополь: Издательство Ставропольского государственного университета. - 2005. - С. 147-151.
30. Гихман, И. И. Введение в теорию случайных процессов [Текст] / И. И. Гихман, А. В. Скороход. - М.: Наука, 1965. - 656 с.
31. Гихман, И. И. Теория случайных процессов [Текст] / И. И. Гихман, А. В. Скороход. - М.: Наука, 1971. - Т.1. - 664 с.
32. Готра, З.Ю. Технология микроэлектронных устройств [Текст] / З.Ю. Готра. - М.: Радио и связь, 1991. - 528 с.
33. Гребенников, А.И. Метод сплайнов и решение некорректных задач теории приближений [Текст] / А.И. Гребенников. - М.: Издательство Московского государственного университета, 1983. - 164 с.
34. Данилов, Н.Н. Курс математической экономики [Текст] / Н.Н. Данилов. - М.: Высшая школа, 2006. - 407 с.
35. Денисов, А.М. Введение в теорию обратных задач [Текст] / А.М. Денисов. - М.: Издательство Московского государственного университета, 1994. - 208 с.
36. Долбак, А.Е. Диффузия Си по чистой поверхности Si(111) [Текст] / А.Е. Долбак, Р.А. Жачук, Б.З. Ольшанецкий // Физика и техника полупроводников.- 2001.- Т. 35.- Вып. 9. - С. 1063-1066.
37. Дьяконов, В.П. Энциклопедия Mathcad 2001i и Mathcad 11 [Текст] / В.П. Дьяконов. - М.: Солон-Пресс, 2004. - 832 с.

38. Заславский, Г.М. Стохастичность динамических систем [Текст] / Г.М. Заславский. - М.: Наука, 1984. - 208 с.
39. Иванов, В.К. Теория линейных некорректных задач и ее приложения [Текст] / В.К. Иванов, В.В. Васин, В.П. Танана. - М.: Наука, 1978. - 306 с.
40. Изюмов, Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов [Текст] / Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников. - М.: Наука, 1984. - 248 с.
41. Ильченко, А.Н. Экономико-математические методы [Текст] / А.Н. Ильченко. - М.: Финансы и статистика, 2006. - 288 с.
42. Краснов, М.Л. Интегральные уравнения [Текст] / М.Л. Краснов, А.И. Киселев, Г.И. Макаренко. - М.: Наука, 1976. - 436 с.
43. Курносов, А.И. Технология производства полупроводниковых приборов [Текст] / А.И. Курносов, В.В. Юдин. - М.: Высшая школа, 1974. - 400 с.
44. Лаврентьев, М.М. Некорректные задачи математической физики и анализа [Текст] / М.М. Лаврентьев, В.Г. Романов, С.П. Шишатский. - М.: Наука, 1980. - 206 с.
45. Ладыженская, О.А. Краевые задачи математической физики [Текст] / О.А. Ладыженская. - М.: Наука, 1973. - 406 с.
46. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа [Текст] / О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уральцева. - М.: Наука, 1967. - 736 с.
47. Ландау, Л. Д. Собрание трудов [Текст] / Л.Д. Ландау. - М.: Наука, 1969. - Т. 1. - 512 с.

48. Марчук, Г.И. Математическое моделирование в проблеме охраны окружающей среды [Текст] / Г.И. Марчук. - М.: Наука, 1982. - 320 с.
49. Марчук, Г.И. Методы вычислительной математики [Текст] / Г.И. Марчук. - М.: Наука, 1989. - 608 с.
50. Морозов, В.А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач [Текст] / В.А. Марчук. - М.: Наука, 1987. - 472 с.
51. Матюшин, В.М. Низкотемпературная диффузия индия в германии, стимулированная атомарным водородом [Текст] / В.М. Матюшин // Физика и техника полупроводников.- 2001.- Т. 35.- Вып. 3.- С. 301-304.
52. Моделирование элементов и технологических процессов [Текст] / Под ред. П. Антонетти и др.; Пер. с англ. - М.: Радио и связь, 1988. - 496 с.
53. Мотт, Н. Электронные процессы в некристаллических веществах [Текст] / Н. Мотт, Э. Дэвис. - М.: Наука, 1982. - 328 с.
54. Назыров, Д.Э. Диффузия европия в кремнии [Текст] / Д.Э. Назыров // Физика и техника полупроводников.- 2003.- Т. 37.- Вып. 5.- С. 570-571.
55. Назыров Д.Э. Диффузия тербия в кремнии [Текст] / Д.Э. Назыров // Физика и техника полупроводников.- 2006.- Т. 40.- Вып. 6.- С. 650-651.
56. Назыров, Д.Э. Диффузия иттрия в кремнии [Текст] / Д.Э. Назыров, М.И. Базарбаев, А.А. Иминов // Физика и техника полупроводников.- 2006.- Т. 40.- Вып. 7.- С. 788-789.

57. Никоненко, В.А. Математическое моделирование технологических процессов [Текст] / В.А. Никоненко ; под редакцией Г.Д. Кузнецова. - М.: МИСиС, 2001. - 48 с.
58. Официальный сайт компании «Высокие технологии» [Электронный ресурс]: содержит сведения о деятельности компании. - Электронные данные - Киев, [200-]. - Режим доступа: <http://www.galvanicka.narod.ru> . - Загл. с экрана.
59. Официальный сайт ООО «ИМПЭКС ИНВЕСТ» [Электронный ресурс]: содержит сведения о деятельности компании. - Электронные данные - Москва, [200-]. - Режим доступа: <http://www.imprex-i.ru> . - Загл. с экрана.
60. Павлов, Л.П. Методы определения основных параметров полупроводников [Текст] / Л.П. Павлов. - М.: Высшая школа, 1975. 206 с.
61. Павлов, П.В. Физика твердого тела [Текст] : учебник студентов вузов, обучающихся по направлению «Физика» / П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. – 3-е изд., стер. - М.: Высшая школа, 2000. - 494 с. : ил. - Библиография: с. 480-481. - Предметный указатель: с. 484-490. - 8000 экз. - ISBN 5-06-003770-3 (в пер.).
62. Прохоров, Ю.В. Теория вероятностей: Основные понятия. Предельные теоремы. Случайные процессы [Текст] / Ю.В. Прохоров, Ю.А. Розанов. - М.: Наука, Издание 2-е, 1973. - 496 с.
63. Пытьев, Ю.П. Математические методы интерпретации эксперимента [Текст] / Ю.П. Пытьев. - М.: Высшая школа, 1989. - 538 с.

64. Самарский, А.А. Численные методы [Текст] / А.А. Самарский, А.В. Гулин. - М.: Наука, 1989. - 196 с.
65. Самарский, А.А. Численные методы математической физики [Текст] / А.А. Самарский, А.В. Гулин. - М.: Научный мир, 2000.
66. Семенчин, Е.А. Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии [Текст] / Е.А. Семенчин ; под редакцией И.Э. Наац. - Ставрополь: Издательство Ставропольского Краевого института усовершенствования учителей, 1993. - 141с. - Библиография: с. 137-141. - 300 экземпляров. - ISBN 5-900429-45-8.
67. Семенчин, Е.А. Статистическое моделирование некоторых случайных процессов диффузионного типа [Текст] / Е.А. Семенчин // Математическое моделирование и компьютерные технологии: тезисы докладов на 2 Всероссийском симпозиуме, Кисловодск / Кисловодский институт экономики и права. - Кисловодск, 1998.
68. Семенчин, Е.А. Диэлектрические свойства кристаллов в области фазового перехода соразмерная - несоразмерная фаза [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Галай // Университетская наука – региону: материалы 51-й научно-методической конференции преподавателей и студентов Ставропольского государственного университета, Ставрополь, 3-24 апреля 2006 г. / Ставропольский государственный университет.- Ставрополь, 2006. - С. 187-190.
69. Семенчин, Е.А. Моделирование структурных фазовых переходов в плёнках [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Галай // Фундаментальные исследования. - 2006.- №4.- С. 67-68.



70. Семенчин, Е.А. Об оценке мощности мгновенного точечного источника примеси [Текст] / Е.А. Семенчин, А.С. Ионисян // Математическое моделирование в научных исследованиях: материалы Всероссийской научной конференции, Ставрополь, 27-30 сентября 2000 г. / Ставропольский государственный университет, 2000.- Ч. 2.- С. 74-76.
71. Семенчин, Е.А. Об одном способе исследования многокритериальных задач [Текст] / Е.А. Семенчин, Т.В. Коротина // Наука Кубани.- 2004.- № 1.- С. 20-24.
72. Семенчин, Е.А. Расчёт рассеяния примеси в атмосфере от криволинейного плоскостного источника по участку: парабола, гипербола, эллипс [Текст] / Е.А. Семенчин, О.В. Сляднева // Математическое моделирование в научных исследованиях: материалы Всероссийской научной конференции, Ставрополь, 27-30 сентября 2000 г. / Ставропольский государственный университет, 2000.- Ч.2.- С. 79-82.
73. Семенчин, Е.А. Расчет концентрации примеси в атмосфере от источника в форме эллипсоида [Текст] / Е.А. Семенчин, О.В. Сляднева // Проблемы компьютерных технологий и математического моделирования в естественных, технических и гуманитарных науках: сборник научных трудов I региональной научной конференции аспирантов и преподавателей СевКавГТУ, Георгиевск, 2001 г. / Северо-Кавказский государственный технический университет.- Георгиевск, 2001.- С. 46 – 48.

74. Семенчин, Е.А. Математическая модель стохастической фазы адсорбционно-десорбционного вещества при образовании пленочных структур [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Тарасенко // Прогрессивные технологии в обучении и производстве: материалы IV Всероссийской конференции, Камышин, 2006 г. / Волгоградский государственный технический университет.- Волгоград, 2006.- Т. 3. - С. 40-43.
75. Семенчин, Е.А. Математическое моделирование образования пленок на кристаллических подложках [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Тарасенко // Обзорение прикладной и промышленной математики. XIII Всероссийская школа-коллоквиум по стохастическим методам. VII Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике.- М.: Редакция журнала «Обзорение прикладной и промышленной математики».- 2007.- Т.14.- Вып. 2.- С. 351-352.
76. Семенчин, Е.А. Моделирование процесса диффузии в полупроводниках [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Тарасенко // Обзорение прикладной и промышленной математики. XIII Всероссийская школа-коллоквиум по стохастическим методам. VII Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике.- М.: Редакция журнала «Обзорение прикладной и промышленной математики».- 2007.- Т.14.- Вып. 2.- С. 352-353.
77. Семенчин, Е.А. Моделирование структурного фазового перехода типа несоразмерная–соразмерная фаза [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Тарасенко // Вестник Ставропольского государственного университета.- 2006.- Вып. 47.- Ч. 2.- С. 5-9.

78. Семенчин, Е.А. Об одном способе определения фононной частоты при образовании пленок на кристаллических подложках [Текст] / Е.А. Семенчин, Е.О. Тарасенко // Научно-инновационные достижения физико-математического факультета в области физико-математических и технических дисциплин: материалы 52-й научно-методической конференции преподавателей и студентов Ставропольского государственного университета «Университетская наука – региону», Ставрополь, апрель 2007 г. / Ставропольский государственный университет.- Ставрополь, 2007.- С. 229-231.
79. Семенчин, Е.А. Расчет значений концентрации легкой примеси для различного вида источников [Текст] / Е.А. Семенчин, Л.К. Янковская // Проблемы физико-математических наук: материалы XLIV научно-методической конференции преподавателей и студентов Ставропольского государственного университета «Университетская наука – региону», Ставрополь, апрель 1999 г. / Ставропольский государственный университет.- Ставрополь, 1999.- С. 136 - 141.
80. Сизиков, В.С. Математические методы обработки результатов измерений [Текст] / В.С. Сизиков. - СПб: Политехника, 2001. - 240 с.
81. Сизиков, В.С. Использование регуляризации для устойчивого вычисления преобразования Фурье [Текст] / В.С. Сизиков // Вычислительная математика и математическая физика.- 1998.- Т. 38.- №3.- С. 376-386.

82. Слепян, Л.И. Интегральные преобразования в нестационарных задачах механики [Текст] / Л.И. Слепян, Ю.С. Яковлев. - Л.: Судостроение, 1980. - 208 с.
83. Стечкин, С.Б. Сплайны в вычислительной математике [Текст] / С.Б. Стечкин, Ю.Н. Субботин. - М.: Наука, 1976. - 384 с.
84. Струков, Б.А. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах [Текст] / Б.А. Струков, А.П. Леванюк. - М.: Наука, 1995. - Изд. 2е. - 265 с.
85. Тарасевич, Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс [Текст]: учебное пособие / Ю.Ю. Тарасевич. - 2-е изд., испр. - М.: Едиториал УРСС, 2002. - 144 с. - 400 экз. - ISBN 5-354-00180-3.
86. Тарасенко, Е.О. Расчет концентрации примеси при диффузии в твердых телах (РКП при ДТТ): программа [Электронный ресурс]. - Электронные данные и программа. - Ставрополь: Ставропольский государственный университет, 2007. - 1 дискета. - Системные требования: IBM PC, Windows XP. - Загл. с экрана. - Свидетельство об отраслевой регистрации № 8266 от 10.05.2007 г. программного продукта в ФГНУ «Государственный координационный центр информационных технологий, отраслевой фонд алгоритмов и программ».
87. Тарасенко, Е.О. Экономико-математическая модель производства пленочных структур [Текст] / Е.О. Тарасенко, Е.А. Семенчин // Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии: сборник статей VII

- Международной научно-технической конференции, 2007 г. / Пензенская государственная сельскохозяйственная академия.- Пенза, 2007.- С. 146-149.
88. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач [Текст] / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. - М.: Наука, 1986. - 224 с.
89. Тихонов, А.Н. О методах решения некорректно поставленных задач [Текст] / А.Н. Тихонов // Международный конгресс математиков / Московский государственный университет.- Москва, 1966.- С. 76-82.
90. Тихонов, А.Н. Обратные задачи обработки фотоизображений [Текст] / А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский, В.В. Степанов / Под ред. А.Н. Тихонова, А.В. Гончарского // Некорректные задачи естествознания / Московский государственный университет. - Москва, 1987. - С. 185-195.
91. Тихонов, А.Н. Численные методы решения некорректных задач [Текст] / А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский, В.В. Степанов, А.Г. Ягола. - М.: Наука, 1990. - 406 с.
92. Фаддеев, Д.К. Вычислительные методы линейной алгебры [Текст] / Д.К. Фаддеев, В.Н. Фаддеева. - М.: Физматгиз, 1963. - 430 с.
93. Фельдман, Л. Основы анализа поверхности и тонких пленок [Текст] / Л. Фельдман, Д. Майер. - М.: Мир, 1989. - 344 с.
94. Физика сегнетоэлектрических явлений [Текст] / Под ред. Г.А. Смоленского. - М.: Наука, 1985. - 256 с.
95. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников [Текст] / Под ред. Д.М. Гинзберга. - М.: Мир, 1990. - 640 с.

96. Фридман, А. Уравнения с частными производными параболического типа [Текст] / А. Фридман. - М.: Мир, 1968. - 428 с.
97. Хлудков, С.С. Диффузия хрома в GaAs при равновесном давлении паров мышьяка [Текст] / С.С. Хлудков, О.Б. Корецкая, Г.Р. Буршанова // Физика и техника полупроводников.- 2006.- Т. 40.- Вып. 9.- С. 1025-1027.
98. Хлудков, С.С. Диффузия хрома в арсениде галлия [Текст] / С.С. Хлудков, О.Б. Корецкая, А.В. Тяжев // Физика и техника полупроводников.- 2004.- Т. 38.- Вып. 3.- С. 274-277.
99. Экономико-математические методы и прикладные модели [Текст] / Под ред. В.В. Федосеева. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: ЮНИТИ-ДАНА, 2005. - 304 с.
100. Яноши, Л. Теория и практика обработки результатов измерений [Текст] / Л. Яноши. - М.: Мир, 1968. - 328 с.
101. Яценко, Ю.П. Интегральные модели систем с управляемой памятью [Текст] / Ю.П. Яценко. - Киев: Наукова думка, 1991. - 284 с.
102. Aubry, S. Toward a Rigorous Molecular Theory of Metastability [Text] / S. Aubry // Ferroelectrics.- 1980.- Vol. 24.- P. 53-59.
103. Bishop, A.R. Phonon Properties. III. Solitons [Text] / A.R. Bishop // Rev. Mod. Phys.- 1980.- V. 52.- № 2.- P.144-153.
104. Caplain, A. Energies de formation et demigration des iacunes fer-nickel de structure G.F.C. par la method l'anisotropie magntique induite [Text] / A. Caplain, W. Chambron // Acta Metall.- V. 9.- P. 1001-1019.

105. Frenkel, J. On the transformation of light into heat in solids [Text] / J. Frenkel, T. Kontorowa // Phys. Z. Sowjetunion. - 1938. - Bd. 13. - S. 1-10.
106. Metiu, H. Statistical Mechanical Theory of the Kinetics of Phase Transitions [Text] / H. Metiu, R. Kitahara, J. Ross // Fluctuation Phenomena. Eds. Montroll E.W., Lebowitz J.L. North-Holland. - 1979. - P. 231-291.
107. Nishizama, H. Martensitic Theory Transformations [Text] / H. Nishizama. - Academic, New-York. - 1981. - 315 p.
108. Robledo, A. The liquid-solid transition of the hard sphere system from uniformity of the chemical potential [Text] / A. Robledo // J.Chem.Phys.- 1980.- V.72.- P. 1701-1712.
109. Takeno, S. A Theory of Phonon-Like Excitations in Non-Crystalline Solids and Liquids [Text] / S. Takeno, M. Goda // Progress of Theoretical Physics.- 1972.- V. 45.- № 9.- P. 790-806.
110. Takeno, S. Phonon-Like Excitations in Liquid Helium [Text] / S. Takeno, M. Goda // Progress of Theoretical Physics.- 1972.- V. 48.- № 3.- P. 724-730.

## Приложение 1.

### Акт о внедрении результатов диссертационного исследования в практическую деятельность ООО ПП «Грунт»



УТВЕРЖДАЮ:

Директор

ООО ПП «Грунт»

*Скоробогатов* Скоробогатов О.Э.

« 16 » июля 2008 г.

#### А К Т

#### внедрения результатов диссертационных исследований Тарасенко Е.О. на объектах ООО ПП «Грунт»

« 16 » июля 2008 г.

г. Ставрополь

Мы, нижеподписавшиеся, сотрудники ООО ПП «Грунт»: главный геолог Быковский В.С., геолог I категории Хаустова Е.К., заведующий грунтоведческой лабораторией Рохно Л.И. составили настоящий акт о том, что ООО ПП «Грунт» при проведении инженерно-геологических изысканий месторождений строительных материалов при оценке качества кварцевого сырья для производства особо чистого стекла, используемого в химической и оптической промышленности, а также при изыскательских работах для оценки объемов тонких минералов, содержащих цирконий, в Бешпагирском месторождении Шпаковского района Ставропольского края была опробована, активно и результативно использована диффузионная модель образования пленочных структур на подложках для расчета количества примеси, оседающей на подложку. В качестве информативных признаков при этом, в зависимости от минералогенетических условий прогнозирования, выступали информационный вес отражения и рудоотражающий вес эталонных объектов прогноза, основанные на формуле определения концентрации примеси.

Изложенный материал прогнозных построений, выполненных с помощью математической модели диффузии атомов пленки в подложку, позволил в результате специалистам ООО ПП «Грунт»:

- повысить объективность разделения соответствующих территорий по степени перспективности относительно обнаружения месторождений особо чистого кварцевого сырья;
- предварительно локализовать перспективные участки и спрогнозировать их ресурсы;
- более обоснованно, чем прежде, составить планы проведения дальнейших изыскательских работ;
- обнаружить в пределах перспективного участка, выделенного на территории Спасского кварценосного месторождения, неотмеченные ранее крупные промышленные залежи кварцевого песка, содержащего минимальное количество примесей, предварительное опробование которой показало, что она содержит кварц высокой прозрачности и химической чистоты.

Кроме того, в Бешпагирском месторождении, позволила выделить участки потенциально более или менее перспективные для дальнейшей разведки и последующей разработки.

Все это при последующей детальной разведке месторождения позволило разделить участки по стадиям разработки: первоочередной, второй очереди и требующий дальнейших исследований.

Главный геолог

*Быковский*

Быковский В.С.

Геолог I категории

*Хаустова*

Хаустова Е.К.

Заведующий грунтоведческой лабораторией

*Рохно*

Рохно Л.И.



## Приложение 2.

### Акт о внедрении результатов диссертационного исследования в учебный процесс Ставропольского государственного университета

УТВЕРЖДАЮ  
 Проректор по учебной работе  
 Ставропольского государственного  
 университета, профессор  
 В.С. Белозеров  
 2007 г.  
 АКБ

о внедрении результатов  
 диссертационных исследований на тему «**Математическое моделирование процесса образования пленочных структур на подложках**» соискателя  
 ученой степени кандидата физико-математических наук  
**Тарасенко Елены Олеговны**  
 в учебный процесс Ставропольского государственного университета

Комиссия в составе:

**ПРЕДСЕДАТЕЛЬ:**

председатель УМК ФМФ,  
 кандидат педагогических наук, доцент Крахоткина В.К.

**ЧЛЕНЫ КОМИССИИ:**

заведующий кафедрой прикладной математики и информатики,  
 доктор технических наук, профессор Червяков Н.И.  
 доцент кафедры прикладной математики и информатики,  
 кандидат физико-математических наук Корнеев П.К.

составили настоящий акт о том, что результаты диссертационной работы Тарасенко Елены Олеговны «**Математическое моделирование процесса образования пленочных структур на подложках**» внедрены в учебный процесс СГУ при обучении студентов 2 курса специальности «Физика» по учебной дисциплине «Вычислительный практикум (Практикум на ЭВМ)».

Председатель комиссии:

председатель УМК ФМФ,  
 кандидат педагогических наук, доцент



В.К. Крахоткина

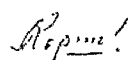
Члены комиссии:

зав. кафедрой прикладной математики  
 и информатики, доктор технических наук,  
 профессор



Н.И. Червяков

доцент кафедры прикладной  
 математики и информатики,  
 кандидат физико-математических наук



П.К. Корнеев

### Приложение 3.

Листинг программы «Расчет концентрации примеси при диффузии в твердых телах (РКП при ДТТ)», разработанной на языке программирования Free Pascal

```

PROGRAM diffusion; {программа расчета концентрации
диффундирующей примеси на поверхности Si}
Uses Crt, graph;
const
  t0=0; {начальный момент времени}
  g1=5;
  g2=5;
  g3=5;
  x1=0; {декартовы координаты источника примеси: x1,x2,x3}
  x2=0;
  x3=0;
  shag_t=0.1;
  a1=6;
  b1=5;
var A,q,q1,q2,q3,t,t1,H, u:real;
  {A - мощность источника примеси, q - концентрация примеси,
q1, q2,q3 - составляющие концентрации примеси, t - время
диффузии,
H - высота, на которой расположен источник}
  m,i,p:integer;
  {m - время диффузии, p - тип примеси, u - вектор сноса}
a,b,c,d:integer;

```

```
t,x,y:real;
x0,y0:integer;
u,v:longint;
GraphDriver:integer;
GraphMode:integer;
function B (u1:real):real;
begin
  u1:=0.8; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
function A1 (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
function Sc (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
function Ga (u1:real):real;
begin
  u1:=0.7; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
function Y (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
function Ind (u1:real):real;
begin
  u1:=0.8; {ВЕКТОР СНОСА}
end;
```

```
function Tl (u1:real):real;
begin
  u1:=0.3; {ВЕКТОР ЧОСА}
end;
function Phosfor (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР ЧОСА}
end;
function Asmut (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР ЧОСА}
end;
function Sb (u1:real):real;
begin
  u1:=0.7; {ВЕКТОР ЧОСА}
end;
function Bi (u1:real):real;
begin
  u1:=0.9; {ВЕКТОР ЧОСА}
end;
function x1(t:real):real;
begin
  x1:=(a1+b1)*cos(t)-a1*cos((a1+b1)*t/a1);
end;
function y1(t:real):real;
begin
  y1:=(a1+b1)*sin(t)-a1*sin((a1+b1)*t/a1);
end;
procedure Surface;
```

```

type Tscr=array[0..199,0..319] of byte;
  SegmentT = Array[0..65534] of byte;
  Virseg = ^SegmentT;

var
scr:Tscr absolute $A000:0000;
buf:Tscr;
  ilx,ily:integer;
  i,j,k,nx,ny,nz,rx,ry,x,y,lx,ly,x1,y1:integer;
  tx,ty,tz:real;
var segm,offs:integer;
  Segment : Virseg;
  litemap : word;
Procedure SetUpSegment(VAR segname:virseg;VAR add : word);
begin GetMem (Segname,65534); add := seg (Segname^); end;
Procedure wait; assembler;
asm mov dx,3DAh;
@l1:in al,dx;and al,08h;jnz @l1;
@l2:in al,dx;and al,08h;jz @l2;end;
Procedure SetMode (Mode:word);assembler; asm mov ax,Mode; int 10h
end;
Procedure FillBox(x,y,w,h:integer; color:byte);
var i,j,k:integer;
begin for i:=y to y+h-1 do for j:=x to x+w-1 do buf[i,j]:=color; end;
Procedure Print(x,y:integer; s:string; xs,ys:integer; color:byte);
var i,j,k,c,px,py:integer; b:byte;
begin px:=x;py:=y; for k:=1 to length(s) do begin c:=ord(s[k]);
for i:=0 to 7
do begin b:=mem[segm:offs+c*8+i]; for j:=0 to 7 do begin
if b shl j and 128<>0

```

```

    then FillBox(x,y,xs,ys,color); x:=x+xs; end;
x:=px; y:=y+ys; end; y:=py; px:=px+xs*8; x:=px; end;
end;
Procedure SetGradientPalette; var k,r,g,b:byte;
begin asm mov dx,03c8h; xor al,al;out dx,al;end;
r:=0; g:=0; for k:=0 to 255 do begin b:=(k*63 div 255);
{r:=b; g:=b; } if k>200 then begin r:=r+1;g:=g+1;end;
asm mov dx,03c9h; mov al,r;out dx,al;
mov al,g;out dx,al; mov al,b;out dx,al end;
end;end;
Procedure Blur;
var i,j,k:integer;
begin for i:=0 to 199 do for j:=0 to 319 do
buf[i,j]:=(buf[i-1,j]+buf[i+1,j]+buf[i,j-1]+buf[i,j+1]) div 4;
end;
Procedure ASMBumpmapping; assembler;
asm
{ few times faster ;) }
    mov ax, seg buf
    mov es,ax
    mov ax, offset buf
    mov bx,320*3
    add ax,bx
    mov di,ax
    mov si,bx
    mov dx,199
    sub dx,5
@1: mov cx,320
@2: xor bh,bh; xor ah,ah;

```

```
mov al, es:[di+1]
mov bl, es:[di-1]
sub ax,bx
sub ax,320; add ax,cx; add ax,lx; add ax,128;
cmp ax,255; jc @ok1; mov ax,255; @ok1:
push ax
xor ah,ah;
mov al, es:[di+320]
mov bl, es:[di-320]
sub ax,bx
sub ax,197; add ax,dx; add ax,ly; add ax,128;
cmp ax,255; jc @ok2; mov ax,255; @ok2:
pop bx
mov bh,bl; mov bl,al
push es
mov ax, litemap
mov es,ax
and bx,0FFFEh
mov bx,[es:bx]
mov ax, 0A000h
mov es,ax
mov [es:si],bx
pop es
inc di
inc si
loop @2
dec dx;
jnz @1
mov ax,$0a000
```

```

    mov es,ax
    xor ax,ax
    mov [es:si-1],ax
end; {asm Bumpmapping}
Procedure Bumpmapping;
begin
  {Bumpmapping}
  for y:=0+3 to 199-3 do begin
    for x:=0 to 319 do begin
      nx:=buf[y+1,x]-buf[y-1,x];
      ny:=buf[y,x+1]-buf[y,x-1];
      nx:=nx-x+lx;
      ny:=ny-y+ly;
      nx:=nx+128;
      ny:=ny+128;
      if (nx<0) or (nx>255) then nx:=0;
      if (ny<0) or (ny>255) then ny:=0;
      scr[y,x]:=mem[litemap:nX+nY*256]; end;
    end; { Bumpmapping }
  end;
begin
  asm
  ov ax,$1130;
  mov bh,03h;
  int 10h;
  mov segm,es;
  mov offs,bp;
  end;
  setmode($13); setgradientpalette;

```



```

SetUpSegment(Segment,litemap);
for y:=0 to 255 do for x:=0 to 255 do begin
tX:=(x-128)/128.0;
tY:=(y-128)/128.0;
tZ:=1-sqrt(tX*tX+tY*tY);
if (tZ<0) then tZ:=0; mem[litemap:x+y*256]:=round(tz*254); end;
fillchar(buf,64000,0);
  for i:=0 to 10000 do fillbox(random(320),random(200),1,1,255);
blur;
  print(60,65,'BUMPY',5,5,255);
  print(47,115,'SURFACE',4,4,255);
blur;blur;blur;
ilx:=5;ily:=5;
ly:=100;lx:=80;
REPEAT
{move(buf,scr,64000);}
wait;
{Bumpmapping;}
ASMBumpmapping;
lx:=lx+ilx;if (lx>320) or (lx<0) then ilx:=-ilx;
ly:=ly+ily;if (ly>200) or (ly<0) then ily:=-ily;
UNTIL port[$60]=1;
memw[$000:$041a]:=memw[$000:$041c];
setmode($3);
end;
begin
  clrscr;
  writeln ('Выберите тип примеси:');
  writeln ('* Бор, В      - 1 *');

```

```
writeln ('* Аллюминий, Al - 2 *');
writeln ('* Скандий, Sc - 3');
writeln ('* Галлий, Ga - 4 *');
writeln ('* Иттрий, Y - 5 *');
writeln ('* Индий, In - 6 *');
writeln ('* Таллий, Tl - 7 *');
writeln ('* Фосфор, P - 8 *');
writeln ('* Мышьяк, As - 9 *');
writeln ('* Сурьма, Sb - 10 *');
writeln ('* Висмут, Bi - 11 *');
read (p);
write ('Введите мощность источника примеси: ');
read (A);
write ('На какой высоте расположен источник примеси (в
метрах):');
read (H);
write ('В течении какого времени протекала диффузия (в мин.): ');
read (m);
if p=1 then u:=B(u);
if p=2 then u:=Al(u);
if p=3 then u:=Sc(u);
if p=4 then u:=Ga(u);
if p=5 then u:=Y(u);
if p=6 then u:=Ind(u);
if p=7 then u:=Tl(u);
if p=8 then u:=Phosfor(u);
if p=9 then u:=Asmut(u);
if p=10 then u:=Sb(u);
if p=11 then u:=Bi(u);
```

```

t:=1;
t1:=1;
surface;
for i:=1 to m do
begin
q1:=A/(exp((3/2)*ln(4*pi*(t-t0)))*g1*g2*g3);
q2:=exp((-sqr(x1-u*(t-t0)))/(4*sqr(g1)*(t-t0))-sqr(x2)/(4*sqr(g2)*(t-
t0)));
q3:=exp(-sqr(x3-H)/4*sqr(g3)*(t-t0))+exp(-sqr(x3+H)/4*sqr(g3)*(t-
t0));
q:=q1*q2*q3;
writeln ('через',t1:6:0,' мин. концентрация примеси составит: ', q);
t:=t+0.1;
t1:=t1+1;
Writeln(' Введите начальное значение A и конечное значение B
отрезка [A,B]');
Write(' оси OX, на котором вы хотите построить график: ');
readln(a,b);
Writeln(' Введите начальное значение C и конечное значение D
отрезка [C,D]');
Write(' оси OY, на котором должен изменяться график: ');
readln(c,d);
(* автоматическое определение драйвера графического устройства
*)
GraphDriver:=detect;
initgraph(GraphDriver,GraphMode,'c:\TPascal\bgi');
(* инициализация графического режима, путь к драйверу*)
if GraphResult<>Grok then
begin

```

```

writeln('Ошибка при включении графического режима');
readkey; halt;
end;
SetbkColor(LightGray);
SetColor(White);
x0:=GetMaxX div 2;
y0:=GetMaxY div 2;
moveto(x0,y0);
line(0,y0,GetMaxX,y0);
line(x0,0,x0+5,10);
line(x0,0,x0-5,10);
line(x0,0,x0,GetMaxY-20);
line(GetMaxX,y0,GetMaxX-10,y0-5);
line(GetMaxX,y0,GetMaxX-10,y0+5);
(* установка типа шрифта и размера символов *)
SetTextStyle(0,HorizDir,1);
OutTextXY(x0+10,0,'Y');
OutTextXY(x0-20,y0+5,'0');
OutTextXY(GetMaxX-20,217,'X');
OutTextXY(20,GetMaxY-20,'... ');
t:=0;
while t<=12*pi do
begin
x:=x1(t); y:=y1(t);
u:=round(GetMaxX*(x-a)/(b-a));
v:=round(GetMaxY*(d-y)/(d-c)*GetMaxX/GetMaxY)-80;
if abs(t)<=0.1 then MoveTo(u,v);
SetColor(blue);
delay(5000);

```

```
if((abs(u)<GetMaxX)or(abs(v)<GetMaxY)) then lineto(u,v)
  else moveto(u,v);
  t:=t+shag_t;
end;
readln;
end;
end;
readkey;
closegraph;
end.
```

## Приложение 4.

Листинг программы MathCad Professional

(Расчет параметров диффузии в соприкасающихся средах)

$$E_a := 3.39$$

$$T1 := 273 + 1100$$

$$t := 1000$$

$$D0 := 1.385$$

$$C0 := 1 \cdot 10^{18}$$

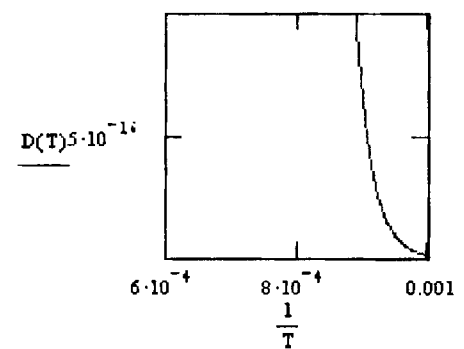
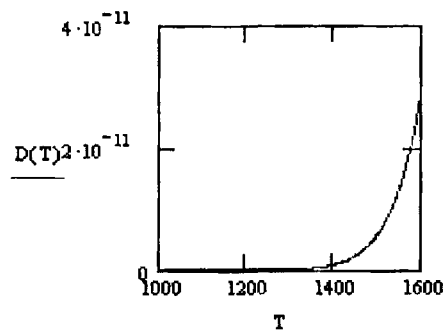
$$Cc := 10^{15}$$

$$k := 8.625 \cdot 10^{-5}$$

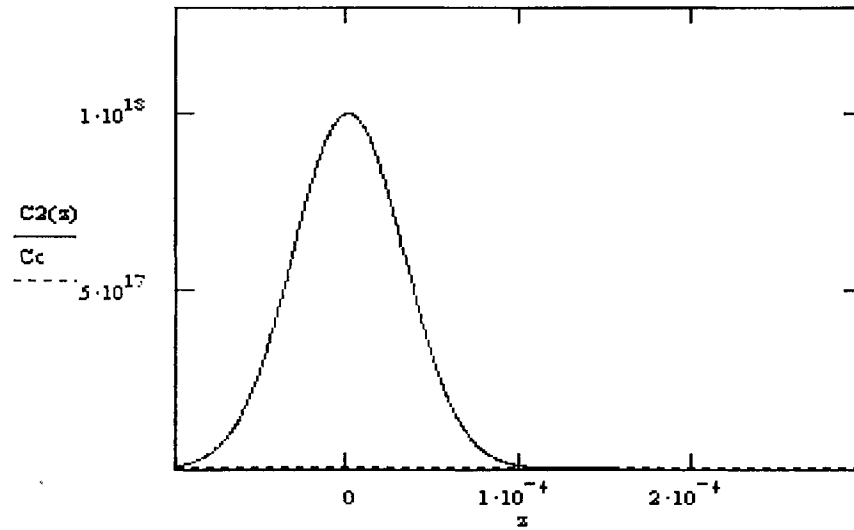
$$T := 1000..1600$$

$$D(T) := D0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{k \cdot T}\right)$$

$$D(T1) = 5.118 \times 10^{-13}$$

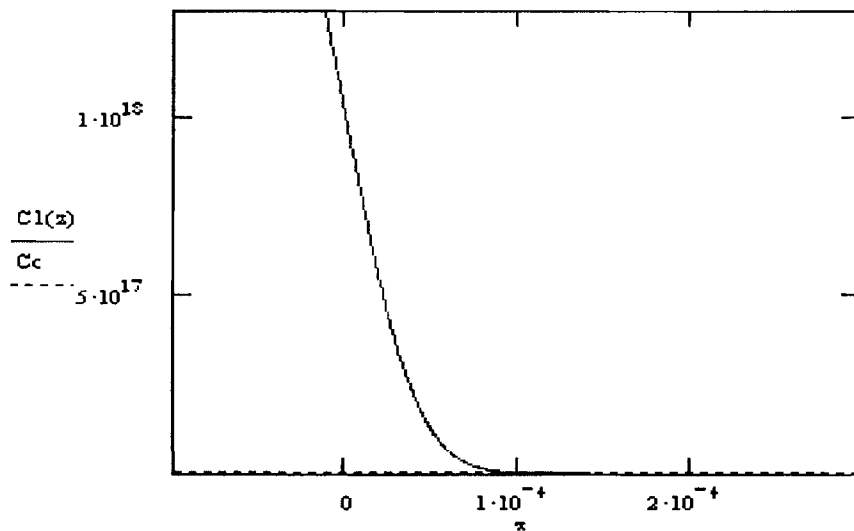


$$C2(z) := C0 \cdot \exp\left(\frac{-z^2}{4 \cdot D(T1) \cdot t}\right)$$



$$Z1 := 2 \sqrt{D(T1) \cdot t} \cdot \sqrt{\ln\left(\frac{C0}{Cc}\right)} \quad Z1 = 1.189 \times 10^{-4}$$

$$C1(x) := C0 \cdot \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D(T1) \cdot t}}\right)\right)$$



$$f(z) := \frac{C0}{Cc} \cdot \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2 \cdot \sqrt{D(T1) \cdot t}}\right) \right) - 1$$

$$z := 0.2 \cdot 10^{-4}$$

$$Z2 := \operatorname{root}(f(z), z)$$

$$Z2 = 1.053 \times 10^{-4}$$

$$C1(Z2) = 1 \times 10^{15}$$

$$T := 1000..1600$$

$$D(T) := D0 \cdot \exp\left(\frac{-Ea}{k \cdot T}\right) \quad D(T1) = 5.118 \times 10^{-13}$$

$$t1 := 100$$

$$C1(x) := C0 \cdot \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D(T1) \cdot t1}}\right) \right)$$

$$Q := C0 \cdot \sqrt{\pi \cdot D(T1) \cdot t1}$$

$$Q = 1.268 \times 10^{13}$$

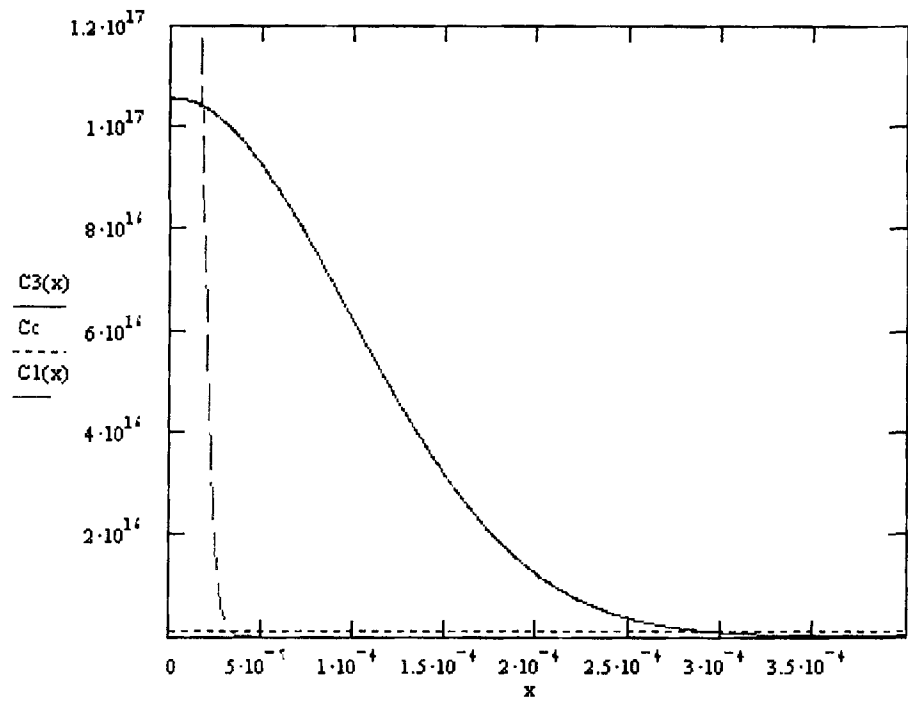
$$t2 := 9000$$

$$C3(x) := \frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D(T1) \cdot t2}} \cdot \exp\left(\frac{-x^2}{4 \cdot D(T1) \cdot t2}\right)$$

$$C3(0) = 1.054 \times 10^{17}$$



121



$$Z3 := 2 \cdot \sqrt{D(t1) \cdot t2} \cdot \sqrt{\ln \left( \frac{Q}{Cc \cdot \sqrt{\pi \cdot D(t1) \cdot t2}} \right)}$$

$$Z3 = 1.855 \times 10^{-3}$$