

УДК 51-7

Е. О. Тарасенко [E. O. Tarasenko]
 А. В. Гладков [A. V. Gladkov]
 В. С. Тарасенко [V. S. Tarasenko]
 А. В. Шапошников [A. V. Shaposhnikov]

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК
 НА ПОДЛОЖКАХ, ДОПУСКАЮЩЕЕ ПОСТРОЕНИЕ РЕШЕНИЯ
 ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ, ВОЗНИКАЮЩИХ В РАМКАХ МОДЕЛИ,
 МЕТОДОМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ КООРДИНАТ**

**MATHEMATICAL MODELING OF THIN FILM GROWTH ON SUBSTRATES,
 ALLOWING THE CONSTRUCTION OF SOLUTIONS TO INVERSE PROBLEMS
 ARISING IN THE FRAMEWORK OF THE MODEL, BY COORDINATE
 TRANSFORMATION METHOD**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
 «Северо-Кавказский федеральный университет», г. Ставрополь, Россия

Аннотация. Развитие микроэлектроники, оптоэлектроники и др. отраслей науки и техники способствует прогрессу в области пленочного моделирования

Материалы и методы. Статья посвящена математическому моделированию роста тонких плёнок на подложках. При решении прикладных задач особое значение имеют обратные задачи, возникающие в рамках рассматриваемой математической модели.

Результаты и обсуждения. В настоящей статье предлагается решение обратных задач модели роста тонких плёнок на подстилающей поверхности методом преобразования координат. Получены аналитические и численные решения задач восстановления мощности источника атомов плёнки, высоты расположения источника для случаев полного отражения и полного поглощения атомов плёнки подстилающей поверхностью.

Заключение. Численное решение получено с использованием программного продукта «Плёнка европия на кремниевой подложке» для решения обратных задач, возникающих в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках, допускающей построение решения методом преобразования координат.

Установлено, что предложенная математическая модель роста тонких плёнок на подложках проста и удобна в использовании, и может быть применена в последующих научных исследованиях.

Ключевые слова: математическое моделирование, тонкоплёночная структура, подстилающая поверхность, обратные задачи, мощность источника, высота расположения источника, метод преобразования координат.

Abstract. The development of microelectronics, optoelectronics and other branches of science and technology contributes to progress in the field of film modeling

Materials and methods. The article is devoted to mathematical modeling of thin film growth on substrates. When solving applied problems, inverse problems arising within the framework of the considered mathematical model are of particular importance.

Results and discussions. In this article the solution of inverse problems of the model of growth of thin films on the underlying surface by the method of coordinate transformation is proposed. Analytical and numerical solutions of the problems of restoring the power of the source of the film atoms, the height of the source for the cases of complete reflection and complete absorption of the film atoms by the underlying surface are obtained.

Conclusion. The numerical solution is obtained using the software product "europium Film on a silicon substrate" to solve inverse problems arising in the framework of a mathematical model of the growth of thin films on substrates, allowing the construction of the solution by the method of coordinate transformation. It is established that the proposed mathematical model of the growth of thin films on substrates is simple and easy to use, and can be applied in subsequent research.

Key words: mathematical modeling, thin-film structure, underlying surface, inverse problems, power source, height of the source, the method of coordinate transformation.

Введение. Непрерывное развитие микроэлектроники, оптоэлектроники, машиностроения, медицины и других отраслей науки и техники способствует прогрессу и углублению научных знаний в области плёночного материаловедения. Применяемые математические методы моделирования процессов роста тонких плёнок на подложках, использующие при этом возможности современных ЭВМ, способствуют оптимизации условий выращивания таких материалов.

В настоящее время актуальным является исследование математической модели образования тонких плёнок на подложках. Сегодня вопросу исследования и математического описания процесса диффузионного роста таких материалов посвящено немало работ. Математическая модель диффузии представляет собой краевую задачу с заданными для её решения начальным и граничными условиями [1, 2, 3, 5].

Особое внимание следует уделить решению обратных задач, порождаемых указанной моделью (восстановление мощности источника атомов плёнки; определение высоты расположения источника и т.д.). Они имеют большое прикладное значение [10].

Построение и решение обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках, уравнение которой допускает построение решения методом преобразования координат, остается малоисследованным.

Постановка задачи

Рассмотрим полуэмпирическое уравнение [5, 6, 9]

$$\frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z}, \quad t \in [0, T], \quad (1)$$

которое описывает образование тонкой плёнки на подстилающей поверхности от мгновенного источника (для удобства рассуждений полагаем, что коэффициент сноса случайного процесса $\alpha(t) = 0$; если $\alpha(t) \neq 0$, то в конечном результате $\alpha(t)$ можно учесть, используя соотношение

$$q^*(t, x, y, z) = q(t, x, y, z) \exp \left\{ - \int_{t_0}^t \alpha(s) ds \right\},$$

где $q^*(t, x, y, z)$ – решение $q(t, x, y, z)$). Относительно коэффициентов U , K_x , K_y предполагаем, что они удовлетворяют условиям

$$U = const, \quad K_x = K_y = K_0 U, \quad K_0 = const,$$

а K_z является дважды непрерывно дифференцируемой функцией одного аргумента z : $K_z = K(z)$. Начальное условие имеет вид:

$$q(0, x, y, z) = Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - H), \quad Q = const \quad (2)$$

граничное условие в бесконечности имеет вид:

$$q(t, x, y, z) \rightarrow 0, \quad x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, \quad z \geq 0 \quad (3)$$

а граничное условие на подстилающей поверхности, в частности,

$$\left\{ K_z \frac{\partial q}{\partial z} + wq \right\} \Big|_{z=0} = \{V_s q\} \Big|_{z=0}$$

пока не будем учитывать. Оно будет учтено и уточнено ниже, после построения решения задачи (1) – (3).

Если $q_1(t, x)$, $q_2(t, x)$, $q_3(t, x)$ являются решениями краевых задач

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} + U \frac{\partial q_1}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 q_1}{\partial x^2} \quad (4)$$

$$U = const, \quad K_x = K_0 U, \quad K_0 = const,$$

$$q_1(0, x) = Q \delta(x) \quad (5)$$

$$q_1(t, x) \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty \quad (6)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = K_y \frac{\partial^2 q_2}{\partial y^2} \quad (7)$$

$$K_x = K_y = const, \quad q_2(0, y) = \delta(y) \quad (8)$$

$$q_2(t, y) \rightarrow 0, \quad |y| \rightarrow \infty \quad (9)$$

$$\frac{\partial q_3}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} K(z) \frac{\partial q_3}{\partial z} \quad (10)$$

$$q_3(0, z) = \delta(z - H) \quad (11)$$

$$q_3(t, z) \rightarrow 0, \quad z \rightarrow \infty \quad (12)$$

то решение задачи (1) – (3) имеет вид:

$$q(t, x, y, z) = q_1(t, x)q_2(t, y)q_3(t, z) \quad (13)$$

Убедимся в этом. Если $q_1(t, x)$, $q_2(t, y)$, $q_3(t, z)$ есть решения задач

$$\frac{\partial q_1(t, x)}{\partial t} + U \frac{\partial q_1(t, x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q_1(t, x)}{\partial x} \quad (14)$$

$$U = const, \quad K_x = const.$$

$$q_1(\tau, x) = \delta(x) \quad (15)$$

$$q_1(t, x) \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty \quad (16)$$

$$\frac{\partial q_2(t, y)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q_2(t, y)}{\partial y} \quad (17)$$

$$K_y = K_x = K_0 U, \quad K_0 = const,$$

$$q_2(\tau, \eta; \tau, y) = \delta(y - \eta) \quad (18)$$

$$q_2(t, y) \rightarrow 0, \quad |y| \rightarrow \infty \quad (19)$$

$$\frac{\partial q_3(t, z)}{\partial t} - w \frac{\partial q_3(t, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} K(z) \frac{\partial q_3(t, z)}{\partial z} \quad (20)$$

$$w = const, \quad K_z = K_2 z^n, \quad K_2 = const, \quad n = const, \quad 0 < n < 2,$$

$$q_3(\tau, z) = \delta(z) \quad (21)$$

$$\left\{ K_z \frac{\partial q_3}{\partial z} + w q_3 \right\} \Big|_{z=z_0} = \{V_s q_3\} \Big|_{z=z_0} \quad (22)$$

$$q_3(t, z) \rightarrow 0, \quad |z| \rightarrow \infty \quad (23)$$

$$\tau, t \in [t_0, T], \quad \tau \leq t,$$

то функция

$$q_0(t, x, y, z) = q_1(t, x)q_2(t, y)q_3(t, z) \quad (24)$$

является решением краевой задачи

$$\frac{\partial q_0}{\partial t} + U \frac{\partial q_0}{\partial x} - w \frac{\partial q_0}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 q_0}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 q_0}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q_0}{\partial z} \quad (25)$$

$$K_x = K_y = const,$$

$$q_0 = q_0(t, x, y, z),$$

$$q_0(\tau, x, y, z) = \delta(x)\delta(y)\delta(z), \quad \tau \in [t_0, T] \quad (26)$$

$$\left\{ K_z \frac{\partial q_0}{\partial z} + w q_0 \right\} \Big|_{z=z_0} = \{V_s q_0\} \Big|_{z=z_0} \quad (27)$$

$$q_0(t, x, y, z) \rightarrow 0, \quad x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, \quad z \geq z_0 \quad (28)$$

Действительно, умножив (14) на $q_2(t, y) \cdot q_3(t, z)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_1(t, x)}{\partial t} \cdot q_2(t, y) \cdot q_3(t, z) + U \frac{\partial q_1(t, x)}{\partial x} \cdot q_2(t, y) \cdot q_3(t, z) = \\ = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q_1(t, x)}{\partial x} \cdot q_2(t, y) \cdot q_3(t, z), \end{aligned}$$

(17) на $q_1(t, x) \cdot q_3(t, z)$:

$$\frac{\partial q_2(t, y)}{\partial t} \cdot q_1(t, x) \cdot q_3(t, z) = \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q_2(t, y)}{\partial y} \cdot q_1(t, x) \cdot q_3(t, z),$$

(20) на $q_1(t, x) \cdot q_2(t, y)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_3(t, z)}{\partial t} \cdot q_1(t, x) \cdot q_2(t, y) - w \frac{\partial q_3(t, z)}{\partial z} \cdot q_1(t, x) \cdot q_2(t, y) = \\ = \frac{\partial}{\partial z} K(z) \frac{\partial q_3(t, z)}{\partial z} \cdot q_1(t, x) \cdot q_2(t, y) \end{aligned}$$

и сложив полученные равенства, убедимся, что (24) удовлетворяет условию (25); условие (26) следует из (15), (18), (21); условие (27) – из (22) (если (22) умножить на $q_1(\tau, \xi; t, x) \cdot q_2(\tau, \eta; t, y)$); условие (28) – из (16), (19), (23).

Методология и методы исследования

Решения задач (4) – (6), (7) – (9) можно построить, воспользовавшись методом преобразования координат [4, 8]:

$$q_1(t, x) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \exp\left\{-\frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)}\right\} \quad (29)$$

$$q_2(t, y) = \frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)}\right\} \quad (30)$$

$t_0 = 0$.

Уравнение (10) представим следующим образом:

$$\frac{\partial q_3}{\partial t} + K'(z) \frac{\partial q_3}{\partial z} + K''(z) q_3 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (2K(z) q_3)}{\partial z^2} \quad (31)$$

и предположим, что $K(z)$ в (16) удовлетворяет условию

$$K''(z) = 0 \quad (32)$$

то есть

$$K(z) = c_1 z + c_2 \quad (33)$$

где c_1, c_2 – произвольные постоянные. Тогда $\gamma(t, x) \equiv 0, Q(t, x) \equiv 0, R(t, x) \equiv 0, \Delta \equiv 0$. Следовательно, при выполнении условия (32), задача (31), (11), (12) сводится к решению

$$q_3'(t', z') = \frac{1}{\sqrt{2\pi t'}} \exp\left\{-\frac{(z' - H')^2}{2t'}\right\} \quad (34)$$

где $t' = \varphi(t) = t$.

$$z' = \psi(t, z) = \frac{1}{c_1} (\sqrt{2c_1 z + 2c_2} - \sqrt{2c_2}), \quad (35)$$

$$H' = \psi(t, z) = \frac{1}{c_1} (\sqrt{2c_1 H + 2c_2} - \sqrt{2c_2}),$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{2c_1 z + 2c_2}}.$$

Отсюда следует, что при выполнении условия (32) решение задачи (31), (11), (12), т.е. (10) – (12), имеет вид:

$$q_3(t, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1 z + 2c_2)}} \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1 z + 2c_2} - \sqrt{2c_1 H + 2c_2} \right)^2}{2c_1^2 t} \right\} \quad (36)$$

Подставляя (29), (30), (36) в (8), найдем решение $q(t, z, y, z)$ задачи (1) – (3) (в предположении что условие (32) выполнено).

Тот факт, что c_1, c_2 произвольные постоянные, удобно использовать при аппроксимации $K(z)$, приводя $K(z)$ к виду (33).

Пусть теперь, кроме граничного условия (3), учитывается граничное условие на подстилающей поверхности. Будем предполагать, что подстилающей поверхностью (т.е. при $z = 0$) атомы плёнки полностью поглощаются. В этом случае

$$q(t, x, y, 0) = 0. \quad (37)$$

С ростом времени всё большее и большее число частиц будет поглощаться подстилающей поверхностью и в пределе при $t \rightarrow \infty$ атомы плёнки должны полностью исчезнуть над подстилающей поверхностью, т.е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} q(t, x, y, z) = 0 \quad (38)$$

Снова вернёмся к задаче (31), (11), (12) и предположим, что $q_3(t, z)$ удовлетворяет, дополнительно к условиям (11), (12), условиям, аналогичным (31), (38):

$$q_3(t, 0) = 0, \quad (39)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} q_3(t, z) = 0. \quad (40)$$

Применяя известный метод отражения с переменной знака [9] к решению (34) краевой задачи, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial q'_3}{\partial t'} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 q'_3}{\partial z'^2} &= 0, \\ q'_3(t'_0, z') &= \delta(z' - H'), \\ q'_3(t'_1, z') &\rightarrow 0, \quad z' \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Возвращаясь по формулам (35) к старым переменным t, z , аналогично решению (36) задачи (31), (11), (12), найдем решение задачи (31), (11), (12), (39), (40):

$$q_3(t, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1 z + 2c_2)}} \times \left[\exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1 z + 2c_2} - \sqrt{2c_1 H + 2c_2} \right)^2}{2c_1^2 t} \right\} - \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1 z + 2c_2} + \sqrt{2c_1 H + 2c_2} - 2\sqrt{2c_2} \right)^2}{2c_1^2 t} \right\} \right]. \quad (41)$$

Подставляя (29), (30), (41) в (13), найдём решение задачи (1) – (3) при дополнительных ограничениях (38), (39), если только $K(z)$ имеет вид (33).

Аналогично находится решение (1) – (3) для случая распространения атомов плёнки над подстилающей поверхностью, полностью отражающей эти атомы. Решение $q_3(t, z)$ в этом случае также будет иметь вид (41), если только предварительно в (41) в квадратных скобках заменить знак минус (-) на знак плюс (+):

$$q_3(t, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1 z + 2c_2)}} \times$$

$$\times \left[\begin{array}{l} \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}-\sqrt{2c_1H+2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} + \\ + \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}+\sqrt{2c_1H+2c_2}-2\sqrt{2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} \end{array} \right]. \quad (42)$$

Из (13), (29), (30) следует, что

$$q = q_1q_2q_3 = \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \left[\begin{array}{l} \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}-\sqrt{2c_1H+2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} \pm \\ \pm \exp \left\{ -\frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}+\sqrt{2c_1H+2c_2}-2\sqrt{2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} \end{array} \right] \right). \quad (43)$$

Соотношение (43) можно использовать для решения обратных задач в рамках математических моделей образования тонкоплёночных структур на подстилающей поверхности от мгновенного точечного источника.

Результаты и обсуждения

Рассмотрим некоторые обратные задачи, возникающие при математическом моделировании роста тонкоплёночных структур на подстилающей поверхности, построение решение которой допускает применения метода преобразования координат.

Задача 1. Определить Q по известным K_x, K_y, U, H, c_1, c_2 и q . Эту задачу легко решить аналитически:

$$Q = \left(2q\sqrt{\pi K_x(t-t_0)} \exp \left\{ \frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left(2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)} \exp \left\{ \frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \left[\begin{array}{l} \exp \left\{ \frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}-\sqrt{2c_1H+2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} \pm \\ \pm \exp \left\{ \frac{\left(\sqrt{2c_1z+2c_2}+\sqrt{2c_1H+2c_2}-2\sqrt{2c_2}\right)^2}{2c_1^2t} \right\} \end{array} \right] \right). \quad (44)$$

Задача 2. Определить H по известным K_x, K_y, U, Q, c_1, c_2 и q при условиях полного отражения атомов плёнки от подстилающей поверхности.

Задачу легко решить с помощью методов решения трансцендентных уравнений, например, методом простой итерации [8].

Покажем принцип решения задачи при условии полного отражения атомов плёнки от подстилающей поверхности. Считается, что известен интервал (a, b) (находим a и b методом подбора), в котором находится только один корень H уравнения

$$q = \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right) \times \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right) \times \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \left[\exp \left\{ -\frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}-\sqrt{2c_1H+2c_2})^2}{2c_1^2t} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}+\sqrt{2c_1H+2c_2}-2\sqrt{2c_2})^2}{2c_1^2t} \right\} \right] \right]. \quad (45)$$

Уравнение (45) представим в виде

$$H = \frac{2\sqrt{2c_1z+2c_2}\sqrt{2c_1H+2c_2}-2c_2-2c_1z-2c_2}{2c_1} - \frac{(2c_1H+2c_2+2(\sqrt{2c_1H+2c_2})(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2}))}{2c_1} - \frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2})^2}{2c_1} + \frac{c_1 t \ln(q)}{\left(\ln \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \right) \left\{ \frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right)} \left(\ln \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \right) \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right)^{-1} \times \left(\ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \right) \right)^{-1},$$

тогда последовательные приближения к искомому корню можно найти по итерационной формуле

$$H^{(n+1)} = \frac{2\sqrt{2c_1z+2c_2}\sqrt{2c_1H^{(n)}+2c_2}-2c_2-2c_1z-2c_2}{2c_1} - \frac{(2c_1H^{(n)}+2c_2+2(\sqrt{2c_1H^{(n)}+2c_2})(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2}))}{2c_1} - \frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2})^2}{2c_1} + \frac{c_1 t \ln(q)}{\left(\ln \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \right) \left\{ \frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right)} \times \left(\ln \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \right) \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right)^{-1} \times \left(\ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \right) \right)^{-1} \quad (46)$$

В качестве первого приближения $H^{(1)}$ к искомому корню (первая итерация) можно принять любое значение H на интервале изоляции корня (a, b) .

Критерий окончания:

$$|H^{(n)} - H^{(n-1)}| < \varepsilon,$$

где ε – желаемая погрешность.

Задача 3. Определить H по известным K_x, K_y, U, Q, c_1, c_2 и q при условиях полного поглощения атомов плёнки подстилающей поверхностью.

По аналогичной итерационной схеме решается также задача 3. Считается, что известен интервал (a, b) (находим a и b методом подбора), в котором находится только один корень H уравнения

$$q = \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right) \times \\ \times \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \left[\exp \left\{ -\frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}-\sqrt{2c_1H+2c_2})^2}{2c_1^2t} \right\} - \right. \right. \\ \left. \left. - \exp \left\{ -\frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}+\sqrt{2c_1H+2c_2}-2\sqrt{2c_2})^2}{2c_1^2t} \right\} \right] \right] \quad (47)$$

Уравнение (46) представим в виде

$$H = \frac{2\sqrt{2c_1z+2c_2}\sqrt{2c_1H+2c_2}-2c_2-2c_1z-2c_2}{2c_1} + \\ + \frac{(2c_1H+2c_2+2(\sqrt{2c_1H+2c_2})(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2}))}{2c_1} + \\ + \frac{(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2})^2}{2c_1} + \\ + \frac{c_1 t \ln(q)}{\left(\ln \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi K_x(t-t_0)}} \right) \left\{ \frac{(x-U(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} \right\} \right) \left(\ln \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \right) \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right)^{-1}} \times \\ \times \left(\ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \right) \right)^{-1},$$

тогда последовательные приближения к искомому корню можно найти по итерационной формуле

$$+ \frac{(2c_1H^{(n)}+2c_2+2(\sqrt{2c_1H^{(n)}+2c_2})(\sqrt{2c_1z+2c_2}-2\sqrt{2c_2}))}{2c_1} + \\ \times \left(\ln \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi K_y(t-t_0)}} \right) \left\{ -\frac{y^2}{4K_y(t-t_0)} \right\} \right)^{-1} \times \\ \times \left(\ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi(2c_1z+2c_2)}} \right) \right)^{-1} \quad (48)$$

В качестве первого приближения $H^{(1)}$ к искомому корню (первая итерация) можно принять любое значение H на интервале изоляции корня (a, b) .

Критерий окончания:

$$|H^{(n)} - H^{(n-1)}| < \varepsilon,$$

где ε – желаемая погрешность.

Численное решение указанных задач найдём с помощью разработанной программы «Плёнка европия на кремниевой подложке» по их аналитическим представлениям (44), (46), (48).

Пример 1. Рассмотрим образование плёнки европия на кремниевой подложке. Определим мощность источника атомов европия Q .

Согласно [7]: источник атомов плёнки расположен на высоте $H = 0,25$ (м); средняя скорость вектора горизонтального переноса $U = 0,3$ (м/с); среда изотропна $K_x = K_y = c_1 = c_2 = 2 \cdot 10^{-12}$ (см²/с); концентрация $q = 10^{18}$ (см⁻³) атомов плёнки на подложке. Диффузия протекала в течении $t = 60$ (с) при температуре $T = 1100^\circ\text{C}$.

Согласно проведенным вычислениям мощность источника атомов европия $Q = 0,927458$ (1/(см³·с)). На рисунке 1 представлен результат работы программы «Плёнка европия на кремниевой подложке».

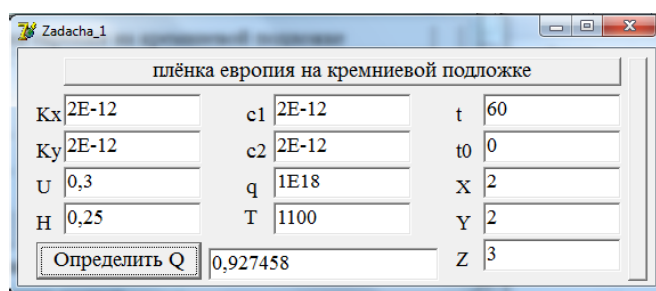


Рис. 1. Определение мощности источника атомов европия оседающих на кремниевую подложку

Пример 2. Рассмотрим образование плёнки европия на кремниевой подложке. Определим высоту источника атомов плёнки европия H .

Согласно [7]: мощность источника атомов европия $Q = 0,927458$ (1/(см³·с)); средняя скорость вектора горизонтального переноса $U = 0,3$ (м/с); $K_x = K_y = 0$; $c_1 = c_2 = 2 \cdot 10^{-12}$ (см²/с); концентрация $q = 0$ (см⁻³) атомов плёнки на подложке. Диффузия протекала в течении $t = 60$ (с) при температуре $T = 20^\circ\text{C}$.

Согласно проведенным вычислениям высота источника атомов плёнки европия $H = 0,27$ (м). На рисунке 2 представлен результат работы программы «Плёнка европия на кремниевой подложке».

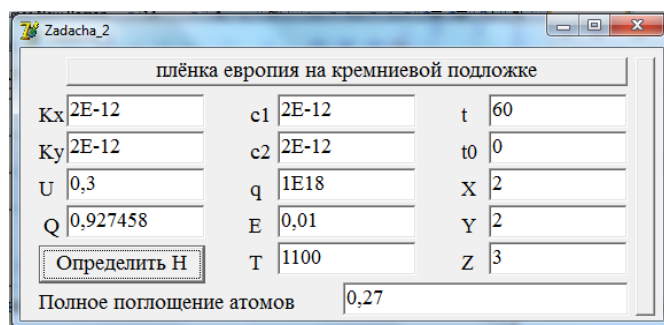


Рис. 2. Определение высоты источника при условиях полного поглощения атомов плёнки подстилающей поверхностью

Пример 3. Рассмотрим образование плёнки европия на кремниевой подложке. Определим высоту источника атомов плёнки европия H .

Согласно [7]: мощность источника атомов европия $Q = 0,927458$ (1/(см³·с)); средняя скорость вектора горизонтального переноса $U = 0,3$ (м/с); среда изотропна $K_x = K_y = c_1 = c_2 = 2 \cdot 10^{-12}$ (см²/с); концентрация $q = 10^{18}$ (см⁻³) атомов плёнки на подложке. Диффузия протекала в течении $t = 60$ (с) при температуре $T = 1100^\circ\text{C}$.

Согласно проведенным вычислениям высота источника атомов плёнки европия $H = 0,3000147$ (м). На рисунке 3 представлен результат работы программы «Плёнка европия на кремниевой подложке».

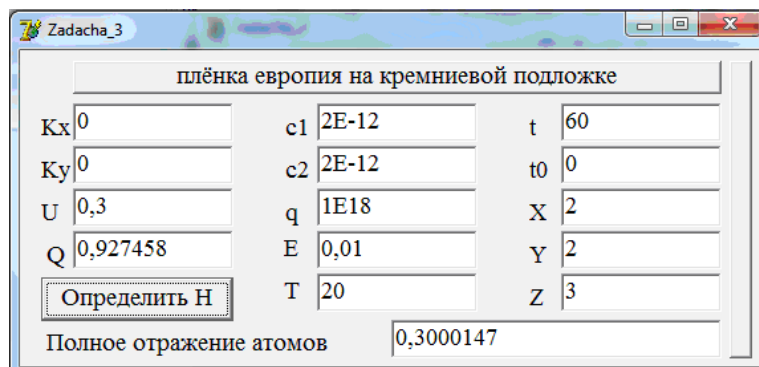


Рис. 3. Определение высоты источника при условиях полного отражения атомов плёнки от подстилающей поверхности

Заключение. В статье проведено построение решений (аналитических и численных) обратных задач, порождаемых математической моделью диффузионного роста тонких плёнок на подложке, методом преобразования координат. Поставлены задачи и приведены их аналитические решения. Рассмотрены задачи нахождения мощности источника атомов плёнки оседающих на подложку; определения высоты источника атомов плёнки при условиях полного поглощения атомов плёнки подстилающей поверхностью и при условиях полного отражения атомов плёнки от подстилающей поверхности.

Численное решение получено с использованием программного продукта «Плёнка европия на кремниевой подложке» для решения обратных задач, возникающих в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках, допускающей построение решения методом преобразования координат.

Установлено, что предложенная математическая модель роста тонких плёнок на подложках проста и удобна в использовании, и может быть применена в последующих научных исследованиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mahan J. E. Physical Vapor Deposition of Thin Films. Wiley-Interscience. 2000. 340 p.
2. Oura K., Lifshits V. G., Saranin A. A., Zotov A. V., Katayama M. Surface Science: An Introduction. Springer, 2003. 443 p.
3. Venables, J. Introduction to Surface and Thin Film Processes. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 372 p.
4. Бакушский А. Б., Гончарский А. В. Итеративные методы решения некорректных задач. М.: Физматлит, 1989. 130 с.
5. Галай Е. О. Математическая модель образования плёнок на подложках // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2005. Т.12. Вып. 4. С. 932.
6. Ладъженская О. А. Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973. 406 с.
7. Назыров Д. Э. Диффузия европия в кремнии // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37. Вып. 5. С. 570-571.
8. Самарский А. А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. М.: Научный мир. 2003. 316 с.
9. Семенчин Е. А. Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии. Ставрополь: Издательство Ставропольского Краевого института усовершенствования учителей. 1993. 141с.
10. Тарасенко Е. О., Гладков А. В. Аналитические и численные решения некоторых обратных задач в рамках математической модели роста тонких пленок на подложках, уравнение которой допускает решение гауссового вида // Параллельная компьютерная алгебра и её приложения в новых инфокоммуникационных системах. Ставрополь: Издательско-информационный центр «Фабула», 2014. С. 93-98.

REFERENCES

1. Mahan J. E. Physical Vapor Deposition of Thin Films. Wiley-Interscience. 2000. 340 p.
2. Oura K., Lifshits V. G., Saranin A. A., Zotov A. V., Katayama M. Surface Science: An Introduction. Springer, 2003. 443 p.
3. Venables, J. Introduction to Surface and Thin Film Processes. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 372 p.
4. Bakushskiy A. B., Goncharskiy A. V. Iterativnye metody resheniya nekorrektnykh zadach. M.: Fizmatlit, 1989. 130 s.
5. Galay E. O. Matematicheskaya model' obrazovaniya plyonok na podlozhkakh // Obozrenie prikladnoy i promyshlennoy matematiki. 2005. T.12. Vyp. 4. S. 932.
6. Ladyzhenskaya O. A. Kraevye zadachi matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1973. 406 s.

7. Nazyrov D. Eh. Diffuziya evropiya v kremnii // Fizika i tekhnika poluprovodnikov. 2003. T. 37. Vyp. 5. S. 570-571.
 8. Samarskiy A. A, Gulin A. V. Chislennye metody matematicheskoy fiziki. M.: Nauchnyy mir. 2003. 316 s.
 9. Semenchin E. A. Analiticheskie resheniya kraevykh zadach v matematicheskoy modeli atmosfery diffuzii. Stavropol': Izdatel'stvo Stavropol'skogo Kraevogo instituta usovershenstvovaniya uchiteley. 1993. 141s.
 10. Tarasenko E. O., Gladkov A. V. Analiticheskie i chislennye resheniya nekotorykh obratnykh zadach v ramkakh matematicheskoy modeli rosta tonkikh plenok na podlozhkakh, uravnenie kotoroy dopuskaet reshenie gaussovogo vida // Parallelnaya komp'yuternaya algebra i eyo prilozheniya v novykh infokommunikatsionnykh sistemakh. Stavropol': Izdatel'sko-informatsionnyy tsentr «Fabula», 2014. S. 93-98.

ОБ АВТОРАХ

Тарасенко Елена Олеговна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики и математического моделирования (ПМиММ) Северо-Кавказского федерального университета (СКФУ). Тел. (8905) 443-68-24. E-mail: galail@mail.ru

Tarasenko Elena Olegovna, candidate of physical and mathematical sciences, associate professor of applied mathematics and mathematical simulation (PMIMM) of the North Caucasian Federal University (NCFU). Ph. (8905) 443-68-24. E-mail: galail@mail.ru

Гладков Андрей Владимирович, старший преподаватель кафедры ПМиММ СКФУ.

Тел. (8905) 497-53-38. E-mail: gavandrew@mail.ru

Gladkov Andrey Vladimirovich, high teacher of department PMIMM SKFU. Ph. (8905) 497-53-38.

E-mail: gavandrew@mail.ru

Тарасенко Василий Сергеевич, специалист по эксплуатационно-техническому обслуживанию (ЭТО) сектора эксплуатации ИТ инфраструктуры учебных корпусов эксплуатационно-технического отдела средств вычислительной техники управления информатизации СКФУ. Тел. (8652) 33-02-82 доб. 49-32. E-mail: tarasenkovs@mail.ru

Tarasenko Vasily Sergeyevich, specialist in the plant service (PS) of a sector of maintenance of IT of infrastructure of the educational casing of the plant department of computer aids of control of informatization of SKFU. Ph. (8652) 33-02-82 of ext. 49-32. E-mail: tarasenkovs@mail.ru

Шапошников Алексей Вячеславович, кандидат технических наук, доцент кафедры ПМиММ СКФУ.

Тел. (8652) 33-02-82 доб. 49-32. E-mail: ashaposhnikov@ncfu.ru

Shaposhnikov Alexey Vyacheslavovich, Candidate of Technical Sciences, associate professor PMIMM SKFU.

Ph. (8652) 33-02-82 of ext. 49-32. E-mail: ashaposhnikov@ncfu

Дата поступления в редакцию: 07.06.2018 г.

После доработки: 12.01.2019 г.

Дата принятия к публикации: 01.06.2019 г.