

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Институт математики и естественных наук  
Кафедра высшей математики

Утверждена распоряжением по  
институту  
от 22 января 2020 № 82/19.00-03

Допущена к защите  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2020 г.  
Зав. кафедрой высшей математики  
\_\_\_\_\_ Бондарь В.В.

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**  
**РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В РАМКАХ МАТЕМАТИЧЕ-**  
**СКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ**

**Рецензент:**

Самойленко Владимир Валерьевич,  
кандидат технических наук,  
доцент, доцент кафедры электротехники,  
автоматики и метрологии ФГБОУ ВО  
«Ставропольский аграрный университет»

**Выполнила:**

Тарасенко Елена Олеговна  
студент 2 курса,  
группы МКН-м-о-18-1  
направления 02.04.01 Математика и компью-  
терные науки  
направленность (профиль) Параллельные  
компьютерные и сетевые технологии  
очной формы обучения

**Нормоконтролер:**

Скворцова Ольга Ивановна, старший пре-  
подаватель кафедры высшей математики

**Научный руководитель:**

Смирнов Александр Александрович,  
доктор технических наук, доцент,  
профессор кафедры высшей математики

Дата защиты

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2020 г.

Оценка \_\_\_\_\_

Ставрополь, 2020

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	4
<b>1 ПРЯМЫЕ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ В РАМКАХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ</b> .....	8
1.1 Прямые задачи роста тонких плёнок на подложках.....	8
1.2 Обратные задачи в рамках математического моделирования роста тонких плёнок на подложках .....	14
1.3 Особенности задания граничных условий .....	20
<i>Выводы по первому разделу</i> .....	26
<b>2 ПОСТРОЕНИЕ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В РАМКАХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ</b> .....	27
2.1 Построение решений обратных задач в математической модели образования тонких плёнок на подложках от мгновенного точечного источника .....	27
2.2 Решения обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках .....	32
<i>Выводы по второму разделу</i> .....	42
<b>3 ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ</b> .....	43
3.1 Описание программы для расчёта параметров обратных задач в рамках модели роста тонких плёнок на подложках.....	43
3.2 Задача восстановления мощности источника атомов плёнки, образующейся на подложке.....	45
3.3 Обратная задача вычисления значений вертикальной дисперсии координат атомов плёнки.....	48
3.4 Задача восстановления высоты источника атомов плёнки.....	51

<i>Выводы по третьему разделу</i> .....	55
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b> .....	56
<b>СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ</b> .....	57
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ. Листинг программы ОЗ_ММ_Г</b> .....	59

## ВВЕДЕНИЕ

*Актуальность темы.* В области плёночного материаловедения в настоящее время наблюдается непрерывное развитие и расширение научных знаний на фоне прогресса в разработках электронной промышленности. Всё более ужесточающийся ряд требований к методам получения плёнок, их толщинам и свойствам отдельных слоёв неизбежен в связи с усложнением структуры функциональных устройств микроэлектроники. Наблюдается усовершенствование и оптимизация технологий выращивания тонких плёнок на подложках. В основе этих заметно шире стали применяться методы математического моделирования процессов роста тонких плёнок, которые используют потенциал современных быстродействующих ЭВМ [1, 3, 10].

Во многих работах отечественных и зарубежных авторов можно проследить математизацию технологического процесса роста тонких плёнок на подложках [2, 4, 10, 12, 15]. В работе [16] авторами предложен подход математического описания указанного процесса на основе полуэмпирического уравнения диффузии, представляющего собой дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа с заданными для его решения начальным и граничными условиями.

Большое прикладное значение имеет класс обратных задач. Они часто возникают естественным образом при проведении математического моделирования технологического процесса. Среди всего многообразия обратных задач выделим типовую – восстановление отдельных параметров краевой задачи по концентрации атомов плёнки на подложке. Это может быть, например, концентрация атомов плёнки на подложке, коэффициенты диффузии и т.д. Восстановление неизвестных параметров производится с помощью известных значений других параметров.

При этом следует отметить, что в области построения и решения обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках

имеются «пробелы». Данная область научных исследований является мало-исследованной.

Представленные выше рассуждения определяют **научное обоснование проблемы исследования**.

**Цель исследований** – исследовать методы решения обратных задач, возникающих в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках.

Для достижения указанной выше цели необходимо решить следующие **задачи исследования**:

1. Провести анализ литературы по постановке прямых и обратных задач с заданными граничными условиями в процессе роста тонких плёнок на подложках.
2. Решить обратные задачи в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках:
  - определить мощность источника атомов плёнки по замерам их концентрации на подложке и основным параметрам модели;
  - определить высоту источника атомов плёнки;
  - построить оценку вертикальной дисперсии координат атомов плёнки по основным параметрам модели и замерам мощности источника атомов плёнки.
3. Построить программную реализацию решения обратных задач, возникающих при математическом моделировании роста тонких плёнок на подложках.

**Объект исследования** – математическая модель роста тонких плёнок на подложках.

**Предмет исследования** – обратные задачи в рамках указанной математической модели.

**Методологическую основу исследований**, приведенных в выпускной квалификационной работе, составляют результаты и методы материаловедения, физики твёрдого тела, кристаллографии, уравнений математической фи-

зики, численных методов, математической статистики, математического анализа.

**Теоретическая значимость** выпускной квалификационной работы состоит в

1. Предложены алгоритмы вычисления значения мощности источника атомов плёнки, высоты расположения источника и вертикальной дисперсии координат атомов плёнки по замерам их концентрации на подложке, основанные на численных методах решения уравнений.

2. Разработана программная реализация решения обратных задач в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках.

Полученные в ходе выполнения данной работы результаты могут быть использованы в микроэлектронной промышленности, оптики и т.д. при технологических разработках тонких плёнок на подложках. Этим определяется **практическая значимость работы.**

#### ***Краткое содержание работы.***

*В первом разделе* представлен теоретический обзор отечественной и зарубежной литературы по математическому моделированию роста тонких плёнок на подложках. Подробно изучены прямые и обратные задачи, возникающие в рамках указанной математической модели. Рассмотрены особенности выбора граничных условий для осуществления решений краевых задач, представляющих собой дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа.

*Во втором разделе* выпускной квалификационной работы представлено построение решений обратных задач в рассматриваемой математической модели. Построены приближённые решения некоторых обратных задач. Особое внимание уделено задачам: восстановления мощности источника; нахождения вертикальной дисперсии; восстановления высоты расположения источника атомов плёнки. Получены итерационные процессы, указаны критерии

окончания поиска решений с заданной погрешностью с использованием аппарата численных методов решения уравнений.

*В третьем разделе* приведена программная реализация численного решения обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках, приведённых во втором разделе.

На примерах продемонстрированы численные решения обратных задач. Проведённый вычислительный эксперимент показал, что вычисленные и экспериментальные значения исследуемых параметров хорошо согласуются и их отклонения являются незначительными.

#### ***Апробация результатов работы.***

Отдельные результаты данной работы представлялись на научных студенческих семинарах и на ежегодных научно-практических конференциях СКФУ «Университетская наука – региону» в 2018-20 годах. По результатам работы имеется 2 публикации.

#### ***Библиографический перечень публикаций автора по теме исследования.***

1. Тарасенко Е.О., Гладков А.В. Решение краевых задач определения дисперсии координат атомов пленки, образующейся на подложке // Наука. Инновации. Технологии. – 2016, Вып. 2. – С 49-60.

2. Тарасенко Е.О., Шапошников А.В., Гладков А.В., Тарасенко В.С. Математическое моделирование роста тонких плёнок на подложках, допускающее построение решения обратных задач, возникающих в рамках модели, методом преобразования координат // Современная наука и инновации. – 2019, Вып. 2 (26). – С 36-48.

# 1 ПРЯМЫЕ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ В РАМКАХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ

В данном разделе проведём теоретический обзор и анализ литературы по математическому моделированию роста тонких плёнок на подложках. Рассмотрим прямые и обратные задачи, возникающие в рамках указанной математической модели. А также изучим особенности выбора граничных условий для осуществления решений краевых задач, представляющих собой дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа.

## 1.1 Прямые задачи роста тонких плёнок на подложках

Рассмотрим некоторую открытую, связную, ограниченную область  $G$ . Ограничение  $G$  производится в

$$E_+^3 = \{(x, y, z): x, y \in (-\infty, \infty), z \in [0, \infty)\},$$

т.е.

$$G \subset E_+^3 \subset E^3,$$

здесь  $E^3$  – трёхмерное евклидово пространство.

Введём предположения и обозначения:

- $E_+^3$  – физическое пространство;
- $G(G \subset E_+^3)$  – область, в которой происходит процесс роста тонкой плёнки на подложке;
- источник атомов плёнки расположен в  $G$ ;
- $q(t, x, y, z)$  – функция, значения которой совпадают со значениями концентрации атомов плёнки на подложке в момент времени  $t \in [t_0, \infty)$  в точке  $(x, y, z) \in G$ .

*Формулировка прямой задачи.* Вычислить значения концентрации атомов плёнки на подложке  $q(t, x, y, z)$  с течением времени  $t \in [t_0, \infty)$  в некоторых произвольных точках

$$(x, y, z) \in G$$

или

$$(x, y, z) \in E_+^3$$

по известным параметрам

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}, \alpha_k \in [t_0, \infty) \times G, \quad (1.1)$$

здесь зависимость между  $q(t, x, y, z)$  и параметрами (1.1) описывается математической моделью, определяющей изменения  $q(t, x, y, z)$  в  $G$  (или в  $E_+^3$ ). Рассматриваемая математическая модель имеет множество апробаций на соответствие экспериментальным данным [3, 4, 8, 12, 13].

Далее опишем математические модели, описывающие зависимость значений  $q(t, x, y, z)$  от значений параметров (1.1)

### *1. Полуэмпирическая модель.*

Как в теоретических, так и в прикладных научных исследованиях по росту тонких плёнок на подложках центральную роль играет по частоте применения полуэмпирическая модель. Эта модель довольно широко исследована в работе [15]. За параметры (1.1) принимаются коэффициенты

$$u, v, w, \alpha, K_x, K_y, K_z$$

уравнения у частных производных параболического типа, функция мощности источника атомов плёнки  $Q$ , функции  $\varphi, \beta$  из начального и граничных условий. Таким образом, используются следующие параметры модели:

$$\{u, v, w, \alpha, K_x, K_y, K_z, Q, \varphi, \beta\}. \quad (1.2)$$

### *2. Гауссова модель.*

Далее рассмотрим модель рассеяния атомов плёнки, которая достаточно обширно распространена в прикладных исследованиях [1, 6, 12]. В ней изменения концентрации атомов плёнки  $q(t, x, y, z)$  от мгновенного точечного

источника, действовавшего в момент времени  $t_0$  в точке  $(x_0, y_0, z_0) \in E_+^3$ , описывается законом:

$$q(t, x, y, z) = \frac{Q}{[4\pi(t-t_0)]^{3/2} (K_x K_y K_z)^{1/2}} \times \exp\left\{-\frac{(x-x_0-u(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} - \frac{(y-y_0)^2}{4K_y(t-t_0)} - \frac{(z-z_0)^2}{4K_z(t-t_0)}\right\}, \quad (1.3)$$

где  $t \in [t_0, \infty)$ ,  $(x, y, z) \in E_+^3$ ,  $Q = const > 0$  – мощность источника атомов плёнки, т.е. количество атомов плёнки, выброшенное источником в момент времени  $t_0$ );

положительные постоянные величины

$$K_x, K_y, K_z,$$

называемые также коэффициентами диффузии соответственно вдоль осей  $Ox, Oy, Oz$  декартовой системы координат;

средняя скорость вектора сноса вдоль оси  $Ox$

$$u = const > 0,$$

отметим, что скорость сноса совпадает с направлением оси  $Ox$  так сориентирована декартова система координат.

Параметрами (1.1) являются

$$\{Q, u, K_x, K_y, K_z, (x_0, y_0, z_0)\}.$$

В рамках гауссовой модели учитываются как процессы отражения, так и поглощения атомов плёнки подложкой.

При полном отражении атомов плёнки от подложки  $z=0$  описание вертикального потока атомов плёнки представимо в виде

$$K_z \frac{\partial q}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0.$$

При этом случае гауссова модель описывается как:

$$\begin{aligned}
q_1(t, x, y, z) &= \frac{Q}{[4\pi(t-t_0)]^{3/2} (K_x K_y K_z)^{1/2}} \times \\
&\times \exp\left\{-\frac{(x-u(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} - \frac{(y-y_0)^2}{4K_y(t-t_0)}\right\} \times \\
&\times \left[ \exp\left\{-\frac{(z-z_0)^2}{4K_z(t-t_0)}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z+z_0)^2}{4K_z(t-t_0)}\right\} \right].
\end{aligned} \tag{1.4}$$

При полном поглощении атомов плёнки подложкой  $z=0$  концентрация плёнки описывается формулой

$$q(t, x, y, z)|_{z=0} = 0;$$

в этом случае гауссова модель представляется законом

$$\begin{aligned}
q_2(t, x, y, z) &= \frac{Q}{[4\pi(t-t_0)]^{3/2} (K_x K_y K_z)^{1/2}} \times \\
&\times \exp\left\{-\frac{(x-u(t-t_0))^2}{4K_x(t-t_0)} - \frac{(y-y_0)^2}{4K_y(t-t_0)}\right\} \times \\
&\times \left[ \exp\left\{-\frac{(z-z_0)^2}{4K_z(t-t_0)}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z+z_0)^2}{4K_z(t-t_0)}\right\} \right].
\end{aligned} \tag{1.5}$$

При частичном отражении и частичном поглощении атомов плёнки подложкой ( $\beta$  – вероятность поглощения), функция концентрации атомов плёнки  $q(t, x, y, z)$  от мгновенного точечного источника представима в виде линейной комбинации формул (1.4), (1.5), т.е.

$$q(t, x, y, z) = q_1(t, x, y, z) - \beta q_2(t, x, y, z). \tag{1.6}$$

Если заменить  $t_0$  на  $s$  в выражениях (1.3) – (1.6) и проинтегрировать их по  $s$  в пределах от  $t_0$  до  $t$  (учтя того, что  $Q = Q(s)$ ), то придём к формуле, позволяющей рассчитать концентрацию атомов плёнки от точечного источника непрерывного действия.

Если источник атомов плёнки представляет собой некоторую геометрическую фигуру (отрезок, плоскость, кривая на плоскости или в пространстве, поверхность), то заменив  $(x_0, y_0, z_0)$  на  $(\xi, \eta, \theta)$  в (1.3) – (1.6) и проинтегрировав их по множеству точек  $(\xi, \eta, \theta)$  этой фигуры, то получим формулу для расчёта концентрации атомов плёнки в  $E_+^3$  от мгновенного источника заданной геометрической формы (линейного, площадного, криволинейного, поверхностного). Обратим внимание, что в рассматриваемом случае значения  $Q$  зависят от точек  $(\xi, \eta, \theta)$ , которые принадлежат источнику, т.е.  $Q = Q(\xi, \eta, \theta)$ . Если же требуется описать формулы от непрерывного источника заданной геометрической формы, то заменим  $t_0$  на  $s$  в полученных в данном случае выражениях и проинтегрируем их по  $s$  в пределах от  $t_0$  до  $t$ .

*3. Модель адсорбционно-десорбционного роста тонких плёнок на основе линеаризации уравнений Навье-Стокса.*

Как показывают вычислительные эксперименты, значения концентрации атомов плёнки  $q(t, x, y, z)$  в  $E_+^3$  в гауссовой модели, не часто согласуются с экспериментальными данными. Если же используется полуэмпирическая модель для таких расчётов, то эти результаты показывают лучшее согласование с результатами натуральных экспериментов. Однако при использовании в прикладных исследованиях полуэмпирической модели могут возникать сложности определения коэффициентов в уравнении (1.6). Наибольшую сложность представляет определение коэффициента  $K_z$ , учитывающего все условия роста тонкой плёнки на подложках. Для избегания указанной трудностей исследователями разработана математическая модель в  $E_+^3$ , в которой коэффициенты  $K_x, K_y, K_z$  отсутствуют [13].

В указанной модели компоненты мгновенной скорости атомов плёнки

$$v = (v_x, v_y, v_z)$$

и концентрации  $q$ , которая удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial(qv_x)}{\partial x} + \frac{\partial(qv_y)}{\partial y} + \frac{\partial(qv_z)}{\partial z} + \alpha q = f(t, x, y, z)$$

и уравнениям движения Навье-Стокса, которые предварительно линеаризованы, представлены в векторной форме

$$\frac{\partial q}{\partial t} = F - \frac{1}{\rho} \text{grad}P + \frac{\eta}{\rho} \Delta v,$$

здесь обозначены через

$F$  – вектор напряжённости поля массовых сил;

$P, \rho$  – давление и плотность около подложечного пространства;

$\eta$  – коэффициент внутреннего трения;

$\Delta$  – оператор Лапласа;

$\alpha$  – коэффициент превращений плёнки;

$f$  – источник атомов плёнки.

При  $F_x = 0$ ,  $F_y = 0$ ,  $F_z = -g$  на атомы плёнки воздействуют только силы тяжести, где  $g$  – ускорение свободного падения.

Давление  $P = P(t, x, y, z)$  и плотность  $\rho = \rho(t, x, y, z)$ ,  $t \in [t_0, \infty)$ ,  $(x, y, z) \in E_+^3$ , описываются формулами

$$P(t, x, y, z) = g \int_z^\infty q(t, x, y, \xi) d\xi + P_\phi(z),$$

$$P_\phi(z) = \mu \exp\left\{ \frac{Mg}{R\gamma} \ln \frac{T_0}{T_0 + \gamma z} \right\},$$

$$\rho(t, x, y, z) = q(t, x, y, z) + \rho_\phi(z),$$

$$\rho_\phi(z) = \frac{P_\phi(z) m_\phi^0}{k T_\phi(z)},$$

$$T_\phi(z) = T_0 + \gamma z.$$

Параметры и постоянные:  $M$  – молярная масса воздуха,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $\mu$  – давление воздуха на высоте  $z = 0$ ,  $T_0$  – тем-

пература воздуха при  $z=0$ ,  $\gamma$  – сухадиабатический градиент,  $m_\phi^0$  – средняя масса молекул воздуха,  $k$  – постоянная Больцмана.

В модели адсорбционно-десорбционного роста тонких плёнок начальные условия имеют вид:

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z),$$

$$v(t_0, x, y, z) = v_0, v_0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0),$$

Граничные же условия при  $z=0$  в модели адсорбционно-десорбционного роста тонких плёнок задаются как

$$v = (0, 0, 0), \quad q(t, x, y, z) = 0,$$

в случае полного поглощения атомов плёнки

$$v = (v_x, v_y, -v_z), \quad \frac{\partial q}{\partial z} = 0,$$

в случае полного их отражения от подложки

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

Отметим, что расчётные значения концентрации атомов плёнки  $q$  в рамках данной модели показывают хорошее согласование с экспериментальными данными.

## **1.2 Обратные задачи в рамках математического моделирования роста тонких плёнок на подложках**

Предметом исследований в математике обратные задачи стали сравнительно недавно. Зарождение обратных задач наблюдалось в начале XX века, но более интенсивно исследования в этой области реализуются с 70-80-х того века [5, 6, 9, 17].

Условно классификацию обратных задач представим как [11]

1. *Ретроспективные обратные задачи* – задачи об определении начального состояния объекта исследования (т.е. начальных условий) по некоторым функционалам или операторам решения.

2. *Коэффициентные обратные задачи* – задачи, в которых требуется определить коэффициенты дифференциальных операторов и их свободные члены.

3. *Граничные обратные задачи* – задачи об определении граничных условий.

4. *Геометрические обратные задачи* – задачи об определении области, на которой определен объект исследования.

5. *Обратные задачи смешанных типов* (неизвестными являются несколько указанных выше параметров, факторов).

Далее представим формальную постановку обратной задачи.

*Формулировка обратной задачи.* Определить значения параметров

$$\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_k}$$

из совокупности (1.1) с течением времени  $t \in [t_0, \infty)$  в точках  $(x, y, z) \in G$  (или  $(x, y, z) \in E_+^3$ ) по известным значениям других параметров этого набора, т.е. по  $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\} \setminus \{\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_k}\}$  и функции  $q(t, x, y, z)$ , заданной в области  $[t_0, \infty) \times G$ .

Таким образом, обратные задачи заключаются в обращении причинно-следственных связей. А их решение основано на преодолении значительных трудностей. Отметим, что от количества, качества экспериментальных данных вытекает ожидаемый результат. Также на решение обратных задач влияет методика получения данных эксперимента [8].

Если обратная задача в рамках модели (1.3) является корректно поставленной, то только в этом случае не бессмысленно её ставить.

Это подтверждается следующими рассуждениями: постановка обратной задачи невозможна, если решение прямой задачи (1.3)  $\xi \in \Gamma$  не существует или оно не единственно (одному  $\mu \in \Omega$  соответствует множество решений  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots$ ). Здесь в первом случае – в целом подобная постановка бессмысленна. А во втором случае появляется необходимость решения сово-

купности задач соответствующих различным  $\xi_i = R(\mu)$ ,  $l=1,2,\dots,n,\dots$ . Это приводит в итоге к невозможности определения того из решений, которое будет соответствовать натурному изучаемому процессу.

Если решение задачи демонстрирует неустойчивость, то при изменении  $\mu$  на малую величину  $l$ ,  $\xi$  может измениться на величину  $\chi$  достаточно большую, т.е.

$$\xi + \chi = R(\mu + l).$$

При этом полученное решение  $\xi + \chi$  становится бессмысленным. В виду того, что оно будет значительно разниться с требуемым решением  $\xi$ . Следовательно, постановка обратной задачи становится бессмысленной.

Ниже рассмотрим некоторые формальные постановки обратных задач в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках.

### 1. Задачи восстановления мощности источника атомов плёнки.

Пусть функция источника атомов плёнки  $f$  неизвестна в множестве параметров (1.2), а остальные параметры заданы. В общем виде функция  $f$  имеет вид [8, 12]:

$$f(t, x, y, z) = Q(t, x, y, z)\delta(t, x, y, z),$$

здесь фактически неизвестной является функция мощности источника атомов плёнки  $Q$ . Значения функции  $Q$  демонстрируют количество атомов плёнки, выпущенных источником, с течением времени  $t$  в точке  $(x, y, z)$

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z), (x, y, z) \in G, \quad (1.7)$$

$$q(t, x, y, z) = 0, t \in [t_0, \infty), (x, y, z) \in \partial G, \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial q(t, x, y, z)}{\partial z} = \beta q(t, x, y, z), (x, y, z) \in \Sigma, t \in [t_0, \infty). \quad (1.9)$$

или

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z), (x, y, z) \in R_+^3, \quad (1.10)$$

$$q(t, x, y, z) \rightarrow 0 \text{ при } x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, z \geq 0, t \in [t_0, \infty), \quad (1.11)$$

$$\left( \frac{\partial g(t, x, y, z)}{\partial z} - \beta q(t, x, y, z) \right) \Big|_{z=0} = 0, \quad t \in [t_0, \infty). \quad (1.12)$$

Таким образом, необходимо найти  $Q$  по заданным в математической модели (1.1) – (1.3) (или (1.4) – (1.6)) величинам  $q = q(t, x, y, z)$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $\alpha$ ,  $K_x$ ,  $K_y$ ,  $K_z$ ,  $f$ ,  $\varphi$ ,  $\beta$ .

Во многих случаях рассмотренная обратная задача может быть сведена к решению некоторого интегрального уравнения. Обоснуем это утверждение на примере непрерывного точечного источника в  $E_+^3$ .

Предлагается рассмотреть задачу

$$\frac{\partial q_0}{\partial t} + u \frac{\partial q_0}{\partial x} + v \frac{\partial q_0}{\partial y} + w \frac{\partial q_0}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q_0}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q_0}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q_0}{\partial z}, \quad (1.13)$$

$$q_0 = q_0(\tau, \xi, \eta, \theta; \tau, x, y, z) = \delta(x - \xi)\delta(y - \eta)\delta(z - \theta), \quad (1.14)$$

$$\left( \frac{\partial q_0}{\partial z} - \beta q_0 \right) \Big|_{z=0} = 0, \quad (1.15)$$

$$x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, \quad z \geq 0. \quad (1.16)$$

Решение задачи (1.4) – (1.6), с учётом определённых ограничений, представимо в виде [8]:

$$\begin{aligned} q(t, x, y, z) = & \\ = & \int_{t_0}^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} q_0(\tau, \xi, \eta, \theta; \tau, x, y, z) f(\tau, \xi, \eta, \theta) d\xi d\eta d\theta + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} q_0(t_0, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z) \varphi(\xi, \eta, \theta) d\xi d\eta d\theta, \end{aligned} \quad (1.17)$$

здесь  $\varphi(x, y, z)$  – фоновая концентрация атомов плёнки в точке  $(x, y, z)$ .

Используя равенство (1.7) для точечного источника с учётом свойств  $\delta$ -функции, формулу (1.17) перепишем следующим образом

$$\begin{aligned}
q(t, x, y, z) = & \int_{t_0}^t Q(\tau) q_0(\tau, x_0, y_0, z_0; t, x, y, z) d\tau + \\
& + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} q_0(t_0, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z) \varphi(\xi, \eta, \theta) d\xi d\eta d\theta.
\end{aligned}
\tag{1.18}$$

При условии что  $q$ ,  $q_0$ ,  $\varphi$  заданы выражение (1.18) представляет собой интегральное уравнение Вольтера первого рода. Оно позволяет определить  $Q(t)$ .

Отдельные решения задачи (1.13) – (1.14), их частные случаи можно найти в [14].

## 2. Задача восстановления фоновой концентрации.

Предположим, что параметры в модели (1.1) – (1.3) (или (1.4) – (1.6)) известны

$$q, u, v, w, \alpha, K_x, K_y, K_z, Q, \beta,$$

а неизвестным параметром служит фоновая концентрация  $\varphi$ . Постановка этой обратной задачи: По известному распределению концентрации атомов плёнки  $q(t, x, y, z)$  с течением времени  $t > t_0$ ,  $(x, y, z) \in G$  (или  $(x, y, z) \in E_+^3$ ) и по заданным параметрам  $u, v, w, \alpha, K_x, K_y, K_z, Q, \beta$  требуется составить распределение

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z)$$

в начальный момент времени  $t_0$ .

Исходя из этого задачу определения фоновой концентрации в различных источниках литературы ещё называют задачей роста тонкой плёнки на подложке с обратным направлением времени.

Также следует отметить, что при тех же ограничениях в задаче (1.4) – (1.6) фоновая концентрация  $\varphi$  удовлетворяет интегральному уравнению (1.17). Например, для точечного источника параметр  $\varphi$  можно вычислить по формуле (1.18).

3. *Задача восстановления координат и мощности точечного источника атомов плёнки.*

Если в математической модели роста тонкой плёнки на подложке (1.1) – (1.3) ((1.4) – (1.6)) известны следующие параметры

$$q, u, v, w, \alpha, K_x, K_y, K_z, Q, \beta,$$

а координаты  $(x_0, y_0, z_0) \in G(E_+^3)$  источника неизвестны, то при определенных допущениях [3, 8] имеет место выражение (1.18), из которого можно определить  $(x_0, y_0, z_0)$  начальной точки. Если считать, что не известны координаты  $(x_0, y_0, z_0)$  и мощность  $Q(t)$  точечного источника, то рассматриваемая задача будет более широкой.

4. *Обратная коэффициентная задача.*

В процессе проведения прикладных исследований часто можно столкнуться с задачей определения коэффициента  $K_z$  по следующим заданным параметрам

$$q, u, v, w, \alpha, K_x, K_y, f, \varphi, \beta.$$

Соответствующим образом формулируется и обратная задача поиска коэффициентов

$$K_x, K_y.$$

Но такие задачи, как правило, не представляет большого практического интереса, т.к. известно [11], что

$$K_x = K_y = k_0 \cdot u, \quad k_0 = const > 0.$$

Параметр  $u$  легко измеряется экспериментально с течением времени  $t \in [t_0, \infty)$ . Затем на основе приведённых выше равенств найти значения коэффициентов  $K_x, K_y$ .

Если построить в аналитическом виде решение задачи (1.1) – (1.3) ((1.4) – (1.6)), то решение обратной задачи значительно упрощается. Здесь имеет место конкретное уравнение, из которого находится коэффициент  $K_z$ . Некоторые частные случаи решения задачи (1.4) – (1.6) описаны в [14, 15].

### 1.3 Особенности задания граничных условий

В общем виде полуэмпирическое уравнение диффузии [2, 6, 9, 17] представимо в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + v \frac{\partial q}{\partial y} - w \frac{\partial q}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} K_{xx} \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_{yy} \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_{zz} \frac{\partial q}{\partial z} + f, \end{aligned} \quad (1.19)$$

здесь

среднее значение концентрации атомов плёнки в момент времени  $t \in [t_0, T]$  в точке с координатами

$$(x, y, z) \in E_+^3 = \{(\xi, \eta, \theta) : \xi, \eta \in (-\infty, +\infty), \theta \in [0, +\infty)\}$$

обозначено через  $q = q(t, x, y, z)$ ;

$u = u(z)$  – среднее значение вектора горизонтального переноса на высоте  $z$ ;

$w = const$  – скорость оседания атомов плёнки на подложку;

$K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}$  – коэффициенты диффузии, соответственно, вдоль осей  $Ox, Oy, Oz$ ;

$f$  – функция, описывающая источник атомов пленки.

Для уравнения (1.19) задаётся [9, 17] начальное

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z) \quad (1.20)$$

и одно из граничных условий:

$$\frac{\partial q}{\partial z} = 0 \text{ при } z = 0, \quad (1.21)$$

при полном отражении атомов плёнки подложкой;

$$q = q(t, x, y, z) = 0 \text{ при } z = 0, \quad (1.22)$$

при полном поглощении подложкой атомов плёнки;

$$\frac{\partial q}{\partial z} - \beta q = 0 \text{ при } z = 0, \beta = \text{const} > 0, \quad (1.23)$$

при частичном поглощении и частичном отражении подложкой атомов плёнки.

Также отметим, что кроме перечисленных граничных условий (1.21) – (1.23), функция  $q = q(t, x, y, z)$  в  $E_+^3$  всегда удовлетворяет следующему граничному условию

$$q(t, x, y, z) \rightarrow 0 \text{ при } x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, z \geq 0. \quad (1.24)$$

Решение рассматриваемой краевой задачи, очевидно, напрямую зависит от вида граничного условия, от него же зависит и сама постановка изучаемых прямых и обратных задач. Важно при проведении исследований в рамках математического моделирования роста тонкой плёнки на подложке корректно определить условия (1.21), (1.22), (1.23), (1.24). При этом соблюсти соответствие выбранного граничного условия рассматриваемой физической задаче.

Далее приведём классификацию границ в задаче (1.19) – (1.24), зависящей от вида коэффициентов (1.19). Для реализации этого этапа работы воспользуемся известными результатами В. Феллера о классификации границ для случайных процессов диффузионного типа [11]. Это существенно упростит реализацию выбора граничных условий (1.21) – (1.24) (в каждом конкретном случае) при решении уравнения (1.19). А, как следствие, в конечном итоге, корректно сформулировать прямые и обратные задачи в модели (1.19) – (1.24).

Предположим, что  $u = u(z)$  непрерывно дифференцируема по  $z \in [0, \infty)$ , коэффициенты  $K_x, K_y, K_z$  дважды непрерывно дифференцируемы по набору переменных  $(x, y, z) \in E_+^3$ . С учётом введённых предположений полуэмпирическое уравнение (1.19) представим в следующем виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[a_x q] + \frac{\partial}{\partial y}[a_y q] + \frac{\partial}{\partial z}[a_z q] = \\ = \frac{\partial^2(K_x q)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(K_y q)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(K_z q)}{\partial z^2} + f, \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$a_x = u + \frac{\partial K_x}{\partial x}, \quad a_y = v + \frac{\partial K_y}{\partial y}, \quad a_z = -w + \frac{\partial K_z}{\partial z}. \quad (1.26)$$

В случае существования переходной плотности  $p(\tau, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z)$  Марковского процесса диффузионного типа, которая определена в  $[t_0, T] \times E_+^3$  ( $\times$  – знак декартового произведения), имеет место уравнение Планка-Колмогорова

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[a_x p] + \frac{\partial}{\partial y}[a_y p] + \frac{\partial}{\partial z}[a_z p] = \\ = \frac{\partial^2(K_x p)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(K_y p)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(K_z p)}{\partial z^2} + f, \end{aligned} \quad (1.27)$$

то она является фундаментальным решением (1.27) [11]. Это означает, что решение уравнения (1.25) с заданным начальным условием (1.20) представимо как

$$\begin{aligned} q(t, x, y, z) = \\ = \int_{t_0}^t d\tau \int_{\Omega} p(\tau, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z) f(\tau, \xi, \eta, \theta) d\xi d\eta d\theta + \\ + \int_{\Omega} p(\tau, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z) f(\tau, \xi, \eta, \theta) d\xi d\eta d\theta, \end{aligned} \quad (1.28)$$

Здесь, в случае если  $p(\tau, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z)$  удовлетворяет одному из граничных условий (1.21) – (1.23), то для  $q(t, x, y, z)$  справедливо такое же граничное условие.

Отметим некоторые свойства коэффициентов уравнения (1.19) [11]:

$$1. K_x = K_y = C_1 u(z), C_1 = const ;$$

2.  $u(z)$  сравнима с  $\lg z$ , а  $K_z(z)$  сравнима с функцией  $z^\alpha$ ,  $\alpha = const$ ,  $0 < \alpha < 2$  на  $(0, \infty)$  (т.е.  $u = u(z)$  при  $z \rightarrow \infty$  возрастает очень медленно, сравнительно с  $K_z = K_z(z)$ ). Следовательно, в достаточно малой окрестности точки  $z = 0$ ,  $z > 0$ ,  $u(z)$  можно считать постоянной, т.е.  $u(z) = const$ , тогда и коэффициенты  $K_x = K_y = const$  тоже постоянны.

С учётом указанных свойств уравнение (1.25) переписется как

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[uq] + \frac{\partial}{\partial y}[a_y q] + \frac{\partial}{\partial z}[a_z q] = \\ = \frac{\partial^2(K_x q)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(K_y q)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(K_z q)}{\partial z^2} + f. \end{aligned} \quad (1.29)$$

В работе [14] показано, что если

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_1(\tau, \xi; t, x)}{\partial t} + \frac{\partial [u p_1(\tau, \xi; t, x)]}{\partial x} = \frac{\partial^2(K_x p_1(\tau, \xi; t, x))}{\partial x^2}, \\ u = const, K_x = const, \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_2(\tau, \eta; t, y)}{\partial t} + \frac{\partial [a_y p_2(\tau, \eta; t, y)]}{\partial y} = \frac{\partial^2(K_y p_2(\tau, \eta; t, y))}{\partial y^2}, \\ K_y = const, K_x = K_y = K_0 u, K_0 = const, \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_3(\tau, \theta; t, z)}{\partial t} + \frac{\partial [a_z p_3(\tau, \theta; t, z)]}{\partial z} = \frac{\partial^2(K_z p_3(\tau, \theta; t, z))}{\partial z^2}, \\ t, \tau \in [t_0, T], \end{aligned} \quad (1.32)$$

при условии, что  $p_3$  удовлетворяет граничному условию того же вида из набора (1.21), (1.22), (1.23), так же как и решение уравнения (1.25), то функция

$$p(\tau, \xi, \eta, \theta; t, x, y, z) = p_1(\tau, \xi; t, x) p_2(\tau, \eta; t, y) p_3(\tau, \theta; t, z) \quad (1.33)$$

удовлетворяет уравнению (1.29) и тому же граничному условию из набора (1.21), (1.22), (1.23), которому должно удовлетворять решение уравнения (1.25).

В работе [11] приведено доказательство того, что всегда выполняется граничное условие (1.24) для любой функции  $q(t, x, y, z)$ , которая удовлетворяет уравнению (1.19). Это утверждение вытекает из фактических соображений. Однако, в работе [11] его доказывают формальными средствами (с учётом (1.28) и условия  $p \rightarrow 0$  при  $|y| \rightarrow \infty$ ). На основе вышеизложенного, будем в дальнейшем везде считать, что (1.24) имеет место.

Определимся, при каких условиях на границе  $z=0$  для  $q = q(t, x, y, z)$  можно использовать одно из граничных условий (1.21) – (1.23). Из выражений (1.28), (1.32) вытекает, что на границе  $z=0$  граничные условия, образуемые на основе коэффициентов  $a_z, K_z$  (они задаются для  $p_3(\tau, \theta; t, z)$ ), совпадут с граничными условиями, которые целесообразно определить для  $q = q(t, x, y, z)$ .

Предположим  $z_0 > 0$  – фиксированная точка из окрестности точки 0. Определим некоторые постоянные [8]

$$L_1 = \int_0^{z_0} \exp\left\{-\int_{z_0}^z \frac{a_z(s)}{K_z(s)} ds\right\} dz, \quad L_3 = \int_0^{z_0} \frac{1}{K_z(z)} \exp\left\{\int_{z_0}^z \frac{a_z(s)}{K_z(s)} ds\right\} dz,$$

$$L_2 = \int_0^{z_0} \frac{1}{K_z(\sigma)} \left( \int_0^\sigma \exp\left\{-\int_{z_0}^z \frac{a_z(s)}{K_z(s)} ds\right\} dz \right) \exp\left\{-\int_{z_0}^\sigma \frac{a_z(s)}{K_z(s)} ds\right\} d\sigma.$$

Граница  $z=0$  называется [11]:

регулярная, если  $L_1 < +\infty, L_2 < +\infty, L_3 < +\infty$ ;

захватывающая, если  $L_1 < +\infty, L_2 < +\infty, L_3 = +\infty$ ;

притягивающая, если  $L_1 < +\infty, L_2 = +\infty$ ;

естественная, если  $L_1 = +\infty$ .

Если  $z = 0$  является регулярной или захватывающей, то она называется достижимой; если притягивающей или естественной – недостижимой.

Отметим, что граничные условия (1.3.3) – (1.3.5) для  $p_3$  (а, значит, и для  $q$ ) могут быть поставлены исключительно в случае, если  $z = 0$  является достижимой.

В работах [3, 11] сформулированы особенности выбора граничных условий:

если  $z = 0$  захватывающая, то задаётся граничное условие для поглощающей подложке;

если  $z = 0$  регулярная, то задаётся одно из граничных условий (1.21) – (1.23) (зависящие от физических особенностей подложки);

если  $z = 0$  недостижима, то на  $z = 0$  не требуется задавать никакие граничные условия.

## *Выводы по первому разделу*

В первом разделе представлен теоретический обзор литературы по математическому моделированию роста тонких плёнок на подложках. Рассмотрены прямые и обратные задачи, возникающие в рамках указанной математической модели.

Приведена формулировка прямой задачи роста тонкой плёнки на подложке. При изучении прямых задач отмечены полуэмпирическая и гауссова математические модели. Описаны законы, по которым производится расчёт концентрации атомов плёнки на подложке. Недостатком этих моделей является недостаточное согласование с экспериментом. А также исследована математическая модель адсорбционно-десорбционного роста тонких плёнок на подложках, получаемая линеаризацией уравнений Навье-Стокса. Результаты расчётов в рамках этой модели достаточно трудоёмки, но они хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках определены обратные задачи. Приведена их обобщенная классификация. Особое внимание уделено задачам восстановления мощности источника атомов плёнки, фоновой концентрации, координат и мощности точечного источника атомов плёнки, обратной коэффициентной задачи. Описана постановка перечисленных задач и приведены основные методы их решения.

Рассмотрены некоторые особенности выбора граничных условий. Они позволяют соответственно экспериментальным данным выбирать граничные условия в краевой задаче в рамках полуэмпирической модели роста тонких плёнок на подложках.

## 2 ПОСТРОЕНИЕ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В РАМКАХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ

В настоящем разделе представим методы построения аналитических и приближённых решений некоторых обратных краевых задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках. Для построения решений обратных задач будут использованы соотношения, в рамках изучаемой математической модели.

Рассмотрим обратных задачи для восстановления мощности источника атомов плёнки  $Q$ , значений  $\sigma_z^2(t)$  – дисперсии координат атомов плёнки вдоль оси  $Oz$  в момент времени  $t$ , высоты источника атомов плёнки  $H$ .

### 2.1 Построение решений обратных задач в математической модели образования тонких плёнок на подложках от мгновенного точечного источника

Предположим, что фоновая концентрация атомов плёнки не учитывается. В процессе образования тонкой плёнки на подложке от мгновенного точечного источника и в заданном пространстве производную значений средней концентрации  $q$  атомов плёнки можно записать на основе уравнения диффузии [10]

$$\frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z} \quad (2.1)$$

с заданным начальным условием

$$q(0, x, y, z) = Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - H), \quad (2.2)$$

здесь параметр  $Q = const > 0$ ,  $\delta(x)$  –  $\delta$ -функция Дирака.

Обозначим через  $U$ ,  $K_x$ ,  $K_y$ ,  $K_z$  все непрерывные функции аргумента  $z$ , т.е.

$$\begin{aligned}
U &= U(z), \\
K_x &= K_x(z), \\
K_y &= K_y(z), \\
K_z &= K_z(z).
\end{aligned}$$

Также в случае мгновенного источника при описании изменений значений средней концентрации атомов плёнки на подложке кроме уравнения (2.2) может быть использована гауссова функция вида [11]

$$\begin{aligned}
q_1(t, x, y, z) &= \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x(t) \sigma_y(t) \sigma_z(t)} \times \\
&\times \exp \left\{ - \left[ \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2(t)} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2(t)} + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2(t)} \right] \right\}, \quad (2.3)
\end{aligned}$$

здесь  $\sigma_x^2(t)$ ,  $\sigma_y^2(t)$ ,  $\sigma_z^2(t)$  – дисперсии координат атомов плёнки соответственно вдоль осей  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  в момент времени  $t$ ;

$\bar{U}$  – средняя по высоте скорость переноса атомов вдоль оси  $Ox$ .

Также отметим, что  $\sigma_x^2(t)$ ,  $\sigma_y^2(t)$ ,  $\sigma_z^2(t)$  – непрерывные функции аргумента  $t$ ,  $t \geq 0$ ,  $\bar{U} = const$ .

Хорошее согласование с экспериментальными данными показывают значения концентрации атомов плёнки  $q_1$ , которые вычисляются по формуле (2.3) [4].

Как известно при длительном нанесении плёнки на подложку,  $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
\frac{\sigma_x^2(t)}{t} &\rightarrow \sigma_x^2, \\
\frac{\sigma_y^2(t)}{t} &\rightarrow \sigma_y^2,
\end{aligned}$$

$$\frac{\sigma_z^2(t)}{t} \rightarrow \sigma_z^2,$$

где  $\sigma_x^2 > 0$ ,  $\sigma_y^2 > 0$ ,  $\sigma_z^2 > 0$  – некоторые постоянные. Условимся считать, что при достаточно больших значениях  $t$  будут справедливы следующие равенства, причём приближенные:

$$\begin{aligned}\sigma_x^2(t) &= \sigma_x^2 \cdot t, \\ \sigma_y^2(t) &= \sigma_y^2 \cdot t, \\ \sigma_z^2(t) &= \sigma_z^2 \cdot t.\end{aligned}\tag{2.4}$$

Выражение (2.3) для вычисления концентрации атомов плёнки  $q_1(t, x, y, z)$  на подложке при условии выполнения (2.4) удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial q_1}{\partial x} - \frac{1}{2} \sigma_x^2 \frac{\partial^2 q_1}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \sigma_y^2 \frac{\partial^2 q_1}{\partial y^2} - \frac{1}{2} \sigma_z^2 \frac{\partial^2 q_1}{\partial z^2} = 0$$

и начальному условию (2.2). Тогда уравнение (2.1) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial q}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{1}{2} \sigma_x^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \sigma_y^2 \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} - \frac{1}{2} \sigma_z^2 \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} + (U(z) - \bar{U}) \frac{\partial q}{\partial x} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x(z) - \frac{1}{2} \sigma_x^2 \right) \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y(z) - \frac{1}{2} \sigma_y^2 \right) \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z(z) - \frac{1}{2} \sigma_z^2 \right) \frac{\partial q}{\partial z}.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Известно, что чем меньше разности

$$\begin{aligned}(U(z) - \bar{U}), \\ \left( K_x(z) - \frac{1}{2} \sigma_x^2 \right), \\ \left( K_y(z) - \frac{1}{2} \sigma_y^2 \right), \\ \left( K_z(z) - \frac{1}{2} \sigma_z^2 \right),\end{aligned}$$

отличны от 0, тем меньше  $q_1$  выражения (2.3) будет отличаться от точного решения  $q$ . Это происходит в случае, если  $q$  непрерывно зависит от коэффициентов уравнения (2.1). Чтобы на интервале  $[0, h]$  функции  $\bar{U}$ ,  $\sigma_x^2$ ,  $\sigma_y^2$ ,  $\sigma_z^2$  минимально отличались соответственно от функций  $U(z)$ ,  $K_x(z)$ ,  $K_y(z)$ ,  $K_z(z)$ , где  $h$  – толщина (высота) плёнки, достаточно, чтобы выполнялись условия:

$$\begin{aligned} \int_0^h (U(z) - \bar{U})^2 dz &\rightarrow \min_{\bar{U}}, \\ \int_0^h \left( K_x(z) - \frac{1}{2} \sigma_x^2 \right)^2 dz &\rightarrow \min_{\sigma_x^2}, \\ \int_0^h \left( K_y(z) - \frac{1}{2} \sigma_y^2 \right)^2 dz &\rightarrow \min_{\sigma_y^2}, \\ \int_0^h \left( K_z(z) - \frac{1}{2} \sigma_z^2 \right)^2 dz &\rightarrow \min_{\sigma_z^2}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

Тогда функции  $\bar{U}$ ,  $\sigma_x^2$ ,  $\sigma_y^2$ ,  $\sigma_z^2$ , которые удовлетворяют условиям (2.6),

запишем в виде:

$$\begin{aligned} \bar{U} &= \frac{1}{2} \int_0^h U(z) dz, \\ \sigma_x^2 &= \frac{2}{h} \int_0^h K_x(z) dz, \\ \sigma_y^2 &= \frac{2}{h} \int_0^h K_y(z) dz, \\ \sigma_z^2 &= \frac{2}{h} \int_0^h K_z(z) dz. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Следовательно, за приближённое решение задачи (2.1), (2.2) принимаем функцию  $q_1(t, x, y, z)$  выражения (2.3), здесь  $\sigma_x(t)$ ,  $\sigma_y(t)$ ,  $\sigma_z(t)$  можно вычислить из соотношений (2.4), (2.7).

Основываясь на формулу (2.3) построить формулы для расчёта средних значений концентрации атомов плёнки на подложке от мгновенного точечного источника. Если атомы плёнки полностью отражаются от подложки  $z = 0$ , то запишем

$$\left. \frac{\partial q(t, x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (2.8)$$

следовательно, плёночная структура на подложке не образуется. Если атомы плёнки полностью поглощаются подложкой, то

$$q(t, x, y, 0) = 0, \quad (2.9)$$

следовательно, плёночная структура на подложке образуется. Тогда формулы для расчёта средних значений концентрации атомов плёнки на подложке от мгновенного точечного источника в каждом из рассмотренных случаев имеют, соответственно, вид:

$$q_2(t, x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} + \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right], \quad (2.10)$$

$$q_3(t, x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} - \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right], \quad (2.11)$$

Если проинтегрировать по  $t$  в пределах от 0 до  $\infty$  равенства (2.10), (2.11), перейдём к формулам для расчета средних значений концентрации атомов плёнки  $q_2(x, y, z)$ ,  $q_3(x, y, z)$  от стационарного точечного источника непрерывного действия, расположенного на высоте  $(0, 0, H)$ :

$$q_i(x, y, z) = \int_0^{\infty} q_i(t, x, y, z) dt, \quad i = 2, 3.$$

В рамках математических моделей образования тонких плёнок на подложках от мгновенного точечного источника (2.1), (2.2), (2.10); (2.1), (2.2), (2.11) соотношения (2.10) – (2.11) можно использовать для решения обратных задач.

## 2.2 Решения обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках

В настоящем параграфе проведём построения решений некоторых обратных задач в рамках рассматриваемой математической модели. Решения представим в аналитическом виде.

*Аналитическое решение задачи восстановления мощности источника атомов плёнки.*

**Постановка задачи 1.** Пусть источник атомов плёнки мгновенный точечный. При условии полного отражения атомов плёнки от подложки известно  $q_2(t, x, y, z)$  – среднее значение атомов плёнки концентрации на подложке; при условии полного поглощения атомов плёнки подложкой известно  $q_3(t, x, y, z)$  – среднее значение концентрации атомов плёнки на подложке;  $H$  – заданная высота источника атомов плёнки;  $\sigma_x^2(t)$ ,  $\sigma_y^2(t)$ ,  $\sigma_z^2(t)$  – известные дисперсии координат атомов плёнки соответственно вдоль осей  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  в момент времени  $t$ .

Восстановить  $Q$  мощность источника атомов плёнки.

*Решение.*

Сформулированную задачу предлагается решить аналитически. Решение построим на основе соотношений (2.10) – (2.11):

$$Q = \frac{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)\right\} \left[ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} \right]}, \quad (2.12)$$

$$Q = \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)\right\} \left[ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} \right]}. \quad (2.13)$$

Решения (2.12) и (2.13) приведены, соответственно, для каждой частной подзадачи

*Аналитическое решение задачи нахождения вертикальной дисперсии координат атомов плёнки.*

**Постановка задачи 2.** Пусть источник атомов плёнки мгновенный точечный. При условии полного отражения атомов плёнки от подложки известно  $q_2(t, x, y, z)$  – среднее значение атомов плёнки концентрации на подложке; при условии полного поглощения атомов плёнки подложкой известно  $q_3(t, x, y, z)$  – среднее значение концентрации атомов плёнки на подложке;  $H$  – заданная высота источника атомов плёнки;  $Q$  – мощность источника атомов плёнки;  $\sigma_x^2(t)$ ,  $\sigma_y^2(t)$  – известные дисперсии координат атомов плёнки соответственно вдоль осей  $Ox$ ,  $Oy$  в момент времени  $t$ .

Определить неизвестные значения  $\sigma_z^2(t)$  – дисперсии координат атомов плёнки вдоль оси  $Oz$  в момент времени  $t$ .

*Решение.*

Для решения поставленной задачи 2 воспользуемся численными методами решения трансцендентных уравнений, например, методом простой итерации [5, 7]. Построим решения обратных задач математической модели роста тонких плёнок на подложке для двух случаев: полного отражения атомов плёнки от подложки и их полного поглощения подложкой.

I. *Случай полного отражения атомов плёнки подложкой.* На заданном интервале  $[a, b]$  ( $a$  и  $b$  определяем известными методами отделения корней уравнения, например, графическим методом) находим требуемый корень  $\sigma_z$  уравнения

$$q_2(t, x, y, z) - \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} + \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right] = 0.$$

В рамках поставленных ограничений и предположений равенство (2.10) представим в виде (при анизотропной среде)

$$\sigma_z = \frac{Q}{q_2(t, x, y, z) (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} + \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right],$$

Построим итерационный процесс последовательного приближения к искомому корню:

$$\sigma_z^{(n+1)} = \frac{Q}{q_2(t, x, y, z) (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} \right\} + \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} \right\} \right]. \quad (2.14)$$

Учитывая, что атомы плёнки полностью отражаются от подложки (при изотропной среде), предположим  $\sigma_z = \sigma_y = \sigma_x$ , тогда из (2.10) получим:

$$\sigma_z = \sqrt[3]{\frac{Q}{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^2 t^3}} \sqrt{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_z^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_z^2 t}\right)\right\}} \times \sqrt[3]{\left[\exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\}\right]}.$$

Вместо (2.14) построим итерационный процесс последовательного приближения к искомому корню, учитывая предположения:

$$\sigma_z^{(n+1)} = \sqrt[3]{\frac{Q}{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} (\sigma_z^{(n)})^2 t^3}} \sqrt{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} + \frac{y^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right)\right\}} \times \sqrt[3]{\left[\exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right\}\right]}. \quad (2.15)$$

Согласно алгоритму построения приближённого решения методом простой итерации из отрезка изоляции корня  $[a, b]$  на первой итерации в качестве начального приближения  $\sigma_z^{(0)}$  к искомому корню можно принять любое значение  $\sigma_z$  [7].

Критерием окончания поиска приближённого решения является условие выполнения следующего неравенства:

$$|\sigma_z^{(n)} - \sigma_z^{(n-1)}| < \varepsilon, \quad (2.16)$$

здесь  $\varepsilon$  – задаваемая погрешность вычислений.

II. *Случай полного поглощения атомов плёнки подложкой.* Воспользуемся методом простой итерации. На заданном отделённом интервале  $[a, b]$  находим требуемый корень  $\sigma_z$  уравнения

$$q_3(t, x, y, z) - \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} - \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right] = 0.$$

При анизотропной среде в рамках поставленных ограничений и предположений равенство (2.11) представим в виде

$$\sigma_z = \frac{Q}{q_3(t, x, y, z) (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} - \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\} \right].$$

Построим итерационный процесс последовательного приближения к искомому корню:

$$\sigma_z^{(n+1)} = \frac{Q}{q_3(t, x, y, z) (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y t^3} \exp \left\{ - \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right) \right\} \times \\ \times \left[ \exp \left\{ - \frac{(z - H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} \right\} - \exp \left\{ - \frac{(z + H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} \right\} \right]. \quad (2.17)$$

При изотропной среде предположим, что  $\sigma_z = \sigma_y = \sigma_x$ , тогда из (2.11) перепишем следующим образом

$$\sigma_z = \sqrt[3]{\frac{Q}{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^2 t^3}} \sqrt{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_z^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_z^2 t}\right)\right\}} \times \\ \times \sqrt[3]{\left[\exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\}\right]}.$$

Вместо (2.17) построим итерационный процесс последовательного приближения к искомому корню, учитывая предположения:

$$\sigma_z^{(n+1)} = \sqrt[3]{\frac{Q}{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} (\sigma_z^{(n)})^2 t^3}} \sqrt{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t} + \frac{y^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right)\right\}} \times \\ \times \sqrt[3]{\left[\exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2(\sigma_z^{(n)})^2 t}\right\}\right]}.$$
 (2.18)

Согласно алгоритму построения приближённого решения методом простой итерации из отрезка изоляции корня  $[a, b]$  на первой итерации в качестве начального приближения  $\sigma_z^{(0)}$  к искомому корню можно принять любое значение  $\sigma_z$  [7].

Критерием окончания поиска приближённого решения является условие выполнения следующего неравенства:

$$\left|\sigma_z^{(n)} - \sigma_z^{(n-1)}\right| < \varepsilon,$$

здесь  $\varepsilon$  – задаваемая погрешность вычислений.

*Аналитическое решение задачи восстановления высоты расположения источника атомов плёнки над подложкой.*

**Постановка задачи 3.** Пусть источник атомов плёнки мгновенный точечный. При условии полного отражения атомов плёнки от подложки из-

известно  $q_2(t, x, y, z)$  – среднее значение атомов плёнки концентрации на подложке; при условии полного поглощения атомов плёнки подложкой известно  $q_3(t, x, y, z)$  – среднее значение концентрации атомов плёнки на подложке;  $Q$  – мощность источника атомов плёнки;  $\sigma_x^2(t)$ ,  $\sigma_y^2(t)$ ,  $\sigma_z^2(t)$  – известные дисперсии координат атомов плёнки соответственно вдоль осей  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  в момент времени  $t$ .

Определить высоту  $H$  расположения источника атомов плёнки над подложкой.

*Решение.*

Для построения решения указанной обратной задачи воспользуемся численными методами решения трансцендентных уравнений [6, 7].

I. Случай полного отражения атомов плёнки подложкой. Пусть каким-либо способом отделён интервал  $[a, b]$ , содержащий требуемый корень  $H$  уравнения

$$q_2(t, x, y, z) - \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)\right\} \times \\ \times \left[ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} \right] = 0.$$

Если среда анизотропная и при выполнении условия задачи равенство (2.10) можно переписать в виде

$$H = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{Q} \right) \times \exp\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)}{-\exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\}} \right) - z}.$$

Построим последовательность итерационных приближений к искомому корню уравнения формулой:

$$H^{(n+1)} = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{Q} \right) \times \exp\left( \frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t} \right)}{-\exp\left\{ -\frac{(z - H^{(n)})^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Если среда изотропная и выполнены условия задачи, предположим, что  $\sigma_z = \sigma_y = \sigma_x$ , тогда из (2.10) приходим к следующему выражению:

$$H = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp\left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right)}{-\exp\left\{ -\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Представим последовательность приближений к искомому корню в виде следующей итерационной формулы:

$$H^{(n+1)} = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_2(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp\left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right)}{-\exp\left\{ -\frac{(z - H^{(n)})^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Из отрезка изоляции корня  $[a, b]$  в качестве начального приближения  $H^{(0)}$  к искомому корню выбираем любое значение  $H$ .

Критерием окончания итерационного процесса вычислений служит неравенство

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

здесь  $\varepsilon$  – задаваемая погрешность вычислений.

II. Случай полного поглощения атомов плёнки подложкой. Пусть известен интервал  $[a, b]$  изоляции корня  $H$  уравнения

$$q_3(t, x, y, z) - \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3} \exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)\right\} \times \\ \times \left[ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} \right] = 0.$$

Если среда анизотропная равенство (2.11) представим как

$$H = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{Q} \right) \times \exp\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right) +}{+ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\}} \right) - z}.$$

Итерационный процесс нахождения приближённого корня представим формулой:

$$H^{(n+1)} = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{Q} \right) \times \exp\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right) +}{+ \exp\left\{-\frac{(z - H^{(n)})^2}{2\sigma_z^2 t}\right\}} \right) - z}.$$

Если среда изотропная при выполнении условий задачи, предположим  $\sigma_z = \sigma_y = \sigma_x$ , следовательно, из (2.11) получим:

$$H = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp\left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right) + \exp\left\{ -\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Итерационный процесс построения последовательности приближений к искомому корню запишем как:

$$H^{(n+1)} = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp\left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right) + \exp\left\{ -\frac{(z - H^{(n)})^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Из отрезка  $[a, b]$  отделения корня выберем начальное приближение  $H^{(0)}$  к искомому корню для построения итерационного процесса.  $H^{(0)}$  может быть любым числом из  $[a, b]$ .

Критерием окончания итерационного процесса является выполнение следующего неравенства

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

здесь  $\varepsilon$  – задаваемая погрешность вычислений.

### *Выводы по второму разделу*

Во втором разделе выпускной квалификационной работы представлено построение решений обратных задач в математической модели образования тонких плёнок на подложках от мгновенного точечного источника.

В рамках рассматриваемой математической модели получены приближённые формулы для вычисления средних значений концентрации атомов плёнки на подложке в случаях их полного отражения от подложки и полного поглощения подложкой.

Построены приближённые решения некоторых обратных задач. Рассмотрены следующие задачи:

- восстановления мощности источника,
- нахождения вертикальной дисперсии,
- восстановления высоты расположения источника атомов плёнки.

Для перечисленных задач на основе аппарата численных методов решения трансцендентных уравнений получены итерационные процессы, указаны критерии окончания поиска решений с заданной погрешностью.

### 3 ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РОСТА ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ПОДЛОЖКАХ

Для решения обратных задач, возникающих в рамках математической модели роста тонких плёнок, разработаем программу восстановления параметров модели.

Проведём вычислительный эксперимент на основе программной реализации решения обратных задач модели. Приближёнными методами вычислим значения мощности источника, высоты его расположения и координат вертикальной дисперсии атомов плёнки на подложке.

#### 3.1 Описание программы для расчёта параметров обратных задач в рамках модели роста тонких плёнок на подложках

Разработана программа ОЗ\_ММ\_Г на языке программирования TurboPascal. Она даёт возможность численно решать обратные задачи, описанные во втором разделе. Программа ОЗ\_ММ\_Г позволяет определять:

- мощность источника атомов плёнки  $Q$ ,
- значение вертикальной дисперсии координат атомов плёнки  $\sigma_z(t)$  вдоль оси  $Oz$ ,
- высоту расположения источника атомов плёнки  $H$

с течением времени. Также учитывается анизотропность окружающей среды. Рассмотрены случаи полного отражения и полного поглощения атомов плёнки подложкой.

В Приложении приведён листинг программы ОЗ\_ММ\_Г (обратные задачи\_математическое моделирование\_гауссово приближение).

Ниже продемонстрируем последовательность работы этой программы.

На первом этапе после запуска программы осуществляется выбор решаемой задачи. На рисунке 1 приведено диалоговое окно «Выбор задачи» программы.

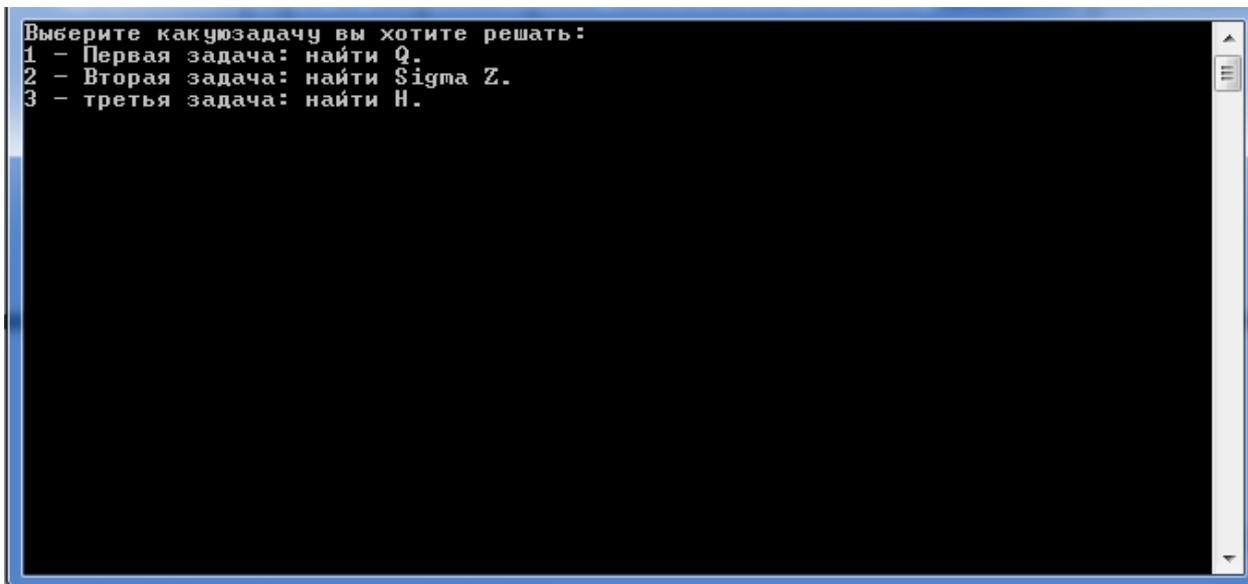


Рисунок 1 – Диалоговое окно «Выбор задачи»

На следующем этапе предлагается выбрать частную подзадачу решаемой обратной задачи. На рисунке 2 приведено диалоговое окно «Выбор случая». Здесь появляется возможность определить особенности вычислительного эксперимента, а именно, рассмотреть случаи полного отражения атомов пленки от подложки или их полного поглощения.

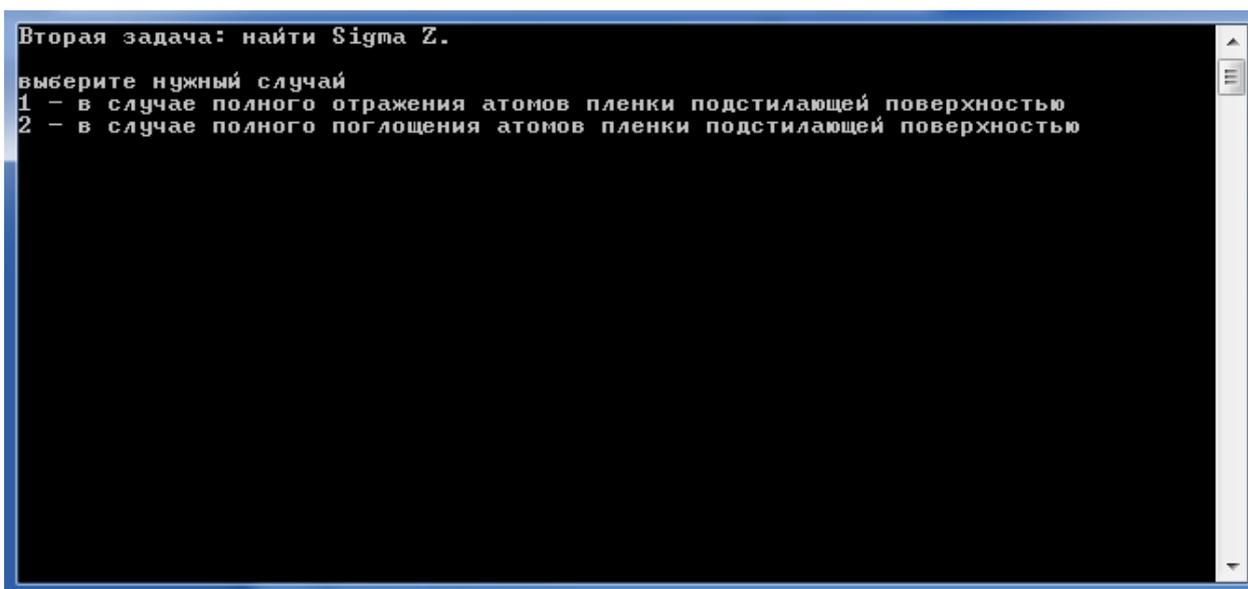


Рисунок 2 – Диалоговое окно «Выбор случая»

На рисунке 3 приведено диалоговое окно программы «Выбор среды». Здесь предлагается выбрать изотропную или анизотропную среду осуществления роста тонкой плёнки на подложке.

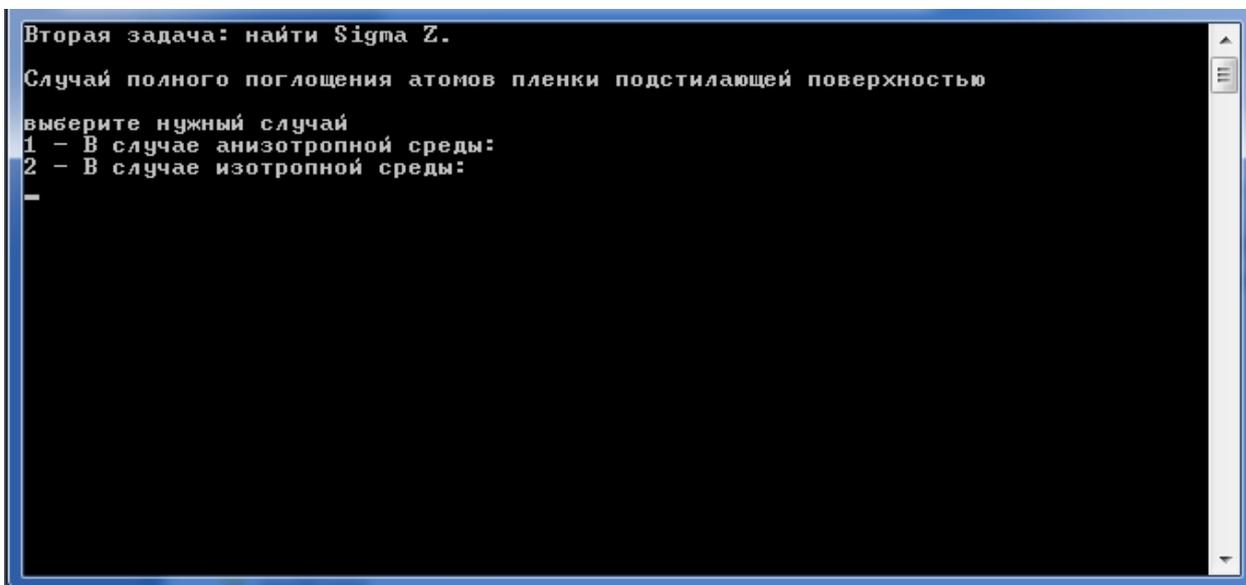


Рисунок 3 – Диалоговое окно «Выбор среды»

После того как будет осуществлён выбор случаев решаемой обратной задачи и введены числовые значения известных параметров переходим к следующему этапу работы программы – реализация математических алгоритмов, построенных во втором разделе настоящей работы.

Далее проведём вычислительный эксперимент решения указанных обратных задач на производственных примерах.

### **3.2 Задача восстановления мощности источника атомов плёнки, образующейся на подложке**

*Пример 3.1.* Рассмотрим задачу роста плёнки индия на алюминиевой подложке. Экспериментальные данные возьмём из отчетов ООО НПФ «Микротехнология» [18]. В таблицу 1 разместим значения концентрации атомов индия на подложке с течением времени  $t \in [0, 60]$ с. Известно, что значения

дисперсии координат атомов плёнки вдоль оси  $Oz$   $\sigma_z=3,15624837$ . Средняя скорость вектора сноса вдоль алюминиевой подложки  $\vec{u}(t)=0,1$  м/с. Источник атомов плёнки расположен на высоте  $H=0,3$  м, среда изотропна, атомы плёнки полностью поглощаются подложкой (т.е. образуется плёнки индия на алюминиевой подложке). Требуется найти мощность источника атомов плёнки индия  $Q$  в точке  $(2,2,3)$ .

**Таблица 1** – Концентрация атомов индия на алюминиевой подложке с течением времени  $t \in [0,60]$ с

$t, \text{с}$	$q, 1/\text{см}^3$
0	0
5	$0,854624 \cdot 10^4$
10	$0,254967 \cdot 10^6$
15	$0,585472 \cdot 10^7$
20	$0,957846 \cdot 10^8$
25	$0,548163 \cdot 10^9$
30	$0,874586 \cdot 10^{10}$
35	$0,845672 \cdot 10^{11}$
40	$0,645817 \cdot 10^{12}$
45	$0,642518 \cdot 10^{13}$
50	$0,945711 \cdot 10^{14}$
55	$0,854265 \cdot 10^{15}$
60	$0,542699 \cdot 10^{16}$

Если среда изотропная и при условии полного поглощения атомов плёнки подложкой, предположим, что  $\sigma_z = \sigma_y = \sigma_x$ , следовательно согласно (2.2) определим мощность источника атомов плёнки в виде

$$Q = \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z t^3}{\exp\left\{-\left(\frac{(x - \bar{U}t)^2}{2\sigma_x^2 t} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2 t}\right)\right\} \left[ \exp\left\{-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} - \exp\left\{-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2 t}\right\} \right]}.$$

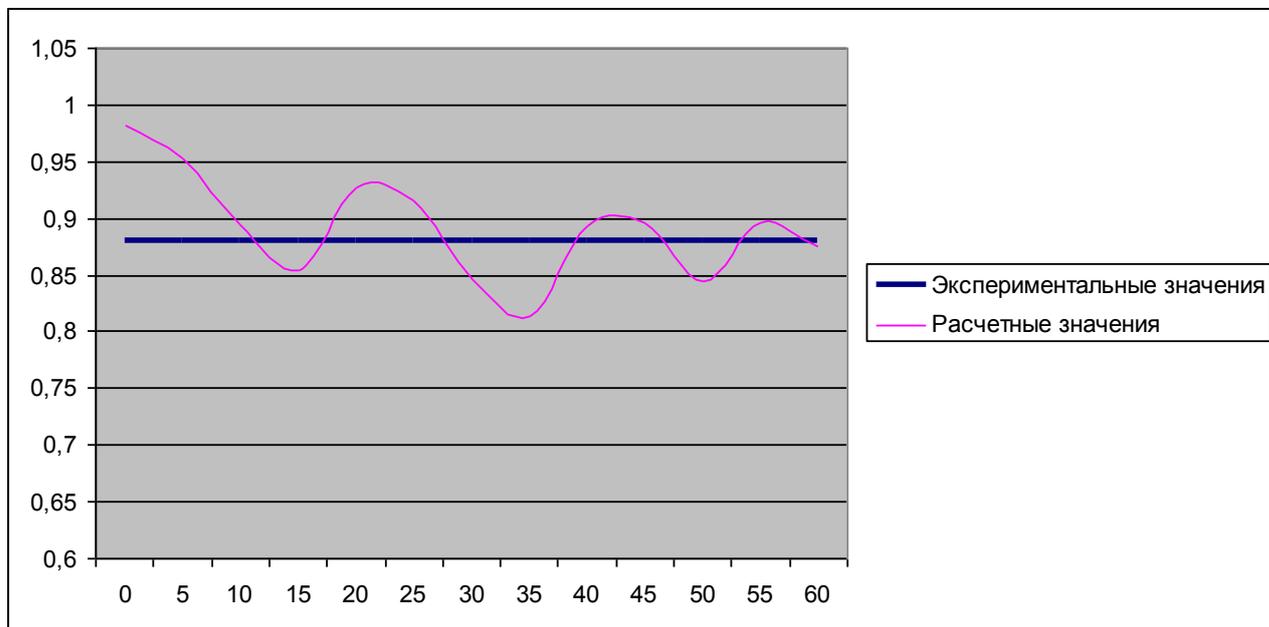
Результат вычислительного эксперимента приведён в таблице 2. В ней также для наглядности представлены экспериментальные значения мощности источника атомов плёнки индия  $Q$  в точке (2,2,3) из [18].

**Таблица 2** – Экспериментальные и вычисленные значения  $Q$  с течением времени

$$t \in [0, 60] \text{ с}$$

$t, \text{ с}$	$Q, \text{ экспериментальная}$	$Q, \text{ вычисленная}$
0	0,88	0,982100
5	0,88	0,952478
10	0,88	0,894572
15	0,88	0,854561
20	0,88	0,927458
25	0,88	0,915472
30	0,88	0,845719
35	0,88	0,814257
40	0,88	0,892423
45	0,88	0,895426
50	0,88	0,845211
55	0,88	0,897014
60	0,88	0,875136

На рисунке 4 приведена графическая интерпретация вычислительного эксперимента по восстановлению значений  $Q$  мощности источника атомов плёнки при решении обратной задачи рассматриваемой модели.



**Рисунок 4** – Значения  $Q$  с течением времени  $t \in [0,60]$ с

Проведя анализ вычислительного эксперимента, установлено, что значения  $Q$  с течением времени  $t \in [0,60]$ с отклоняются от экспериментальных значений не более чем на 17 %.

### **3.3 Обратная задача вычисления значений вертикальной дисперсии координат атомов плёнки**

*Пример 3.2.* Рассмотрим задачу роста плёнки висмута на алюминиевой подложке. Экспериментальные данные возьмём из отчетов ООО НПФ «Микротехнология» [18]. В таблицу 3 разместим значения концентрации атомов висмута на подложке и мощности источника атомов пленки в точке  $(2,2,3)$  с течением времени  $t \in [0,60]$ с. Учтём, что средняя скорость вектора сноса вдоль алюминиевой подложки  $\vec{u}(t) = 0,5$  м/с. Источник атомов плёнки рас-

положен на высоте  $H=0,3$  м, среда изотропна, атомы плёнки полностью поглощаются подложкой (т.е. образуется плёнки висмута на алюминиевой подложке). Требуется вычислить значения вертикальной дисперсии координат атомов пленки  $\sigma_z$  (вдоль оси  $Oz$ ).

**Таблица 3** – Концентрация атомов висмута на алюминиевой подложке и мощность источника с течением времени  $t \in [0, 60]$ с

$t, \text{с}$	$q, 1/\text{см}^3$	$Q(t), 1/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$
0	0	0
5	$0,186978 \cdot 10^4$	0,788888
10	$0,850842 \cdot 10^6$	0,901052
15	$0,252913 \cdot 10^7$	0,925270
20	$0,453681 \cdot 10^8$	0,933428
25	$0,622814 \cdot 10^9$	0,948164
30	$0,753651 \cdot 10^{10}$	0,950087
35	$0,158437 \cdot 10^{11}$	0,959165
40	$0,579420 \cdot 10^{12}$	0,962743
45	$0,768428 \cdot 10^{13}$	0,975482
50	$0,778513 \cdot 10^{14}$	0,980274
55	$0,548329 \cdot 10^{15}$	0,986513
60	$0,845235 \cdot 10^{16}$	0,990021

Проведём вычисления значений вертикальной дисперсии с течением времени, используя разработанную программу. Результаты занесём в таблицу 4. Также здесь укажем экспериментальные значения  $\sigma_z$  из [18].

**Таблица 4** – Экспериментальные и вычисленные значения  $\sigma_z$  с течением времени

$$t \in [0, 60] \text{ с}$$

$t, \text{ с}$	$\sigma_z$ , экспериментальная	$\sigma_z$ , вычисленная
0	2,658234846	2,731651481
5	2,658234846	2,651906245
10	2,658234846	2,661282457
15	2,658234846	2,655416482
20	2,658234846	2,659323547
25	2,658234846	2,660548722
30	2,658234846	2,662432145
35	2,658234846	2,659124231
40	2,658234846	2,655512649
45	2,658234846	2,661292135
50	2,658234846	2,672181462
55	2,658234846	2,645452579
60	2,658234846	2,693487454

На рисунке 5 приведена графическая интерпретация вычислительного эксперимента по вычислению значений  $\sigma_z$  вертикальной дисперсии атомов висмута при решении обратной задачи рассматриваемой модели.

Анализ вычислительного эксперимента позволил установить, что вычисленные значения вертикальной дисперсии  $\sigma_z$  с течением времени  $t \in [0, 60] \text{ с}$  отклоняются от экспериментальных, больше всего на концах расчётного интервала, но не более чем на 3 %.

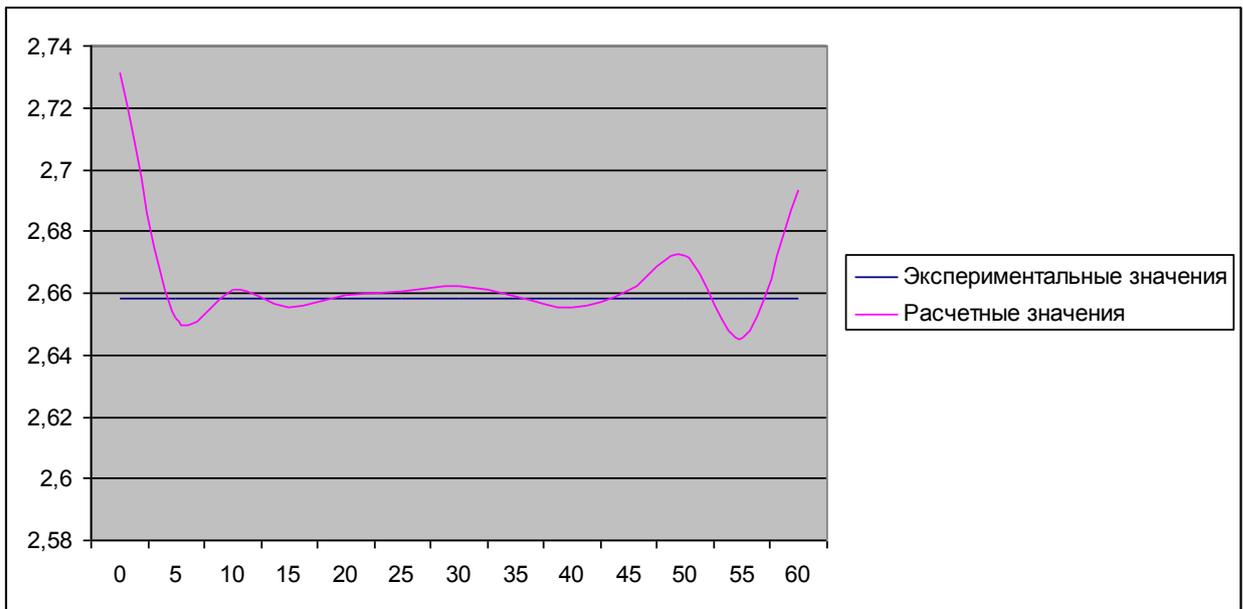


Рисунок 5 – Значения  $\sigma_z$  с течением времени  $t \in [0, 60]$ с

### 3.4 Задача восстановления высоты источника атомов плёнки

*Пример 3.3.* Рассмотрим задачу роста плёнки висмута на алюминиевой подложке. Экспериментальные данные возьмём из отчетов ООО НПФ «Микротехнология» [18]. В таблицу 5 разместим значения концентрации атомов индия на подложке и мощности их источника в точке  $(2, 2, 3)$  с течением времени  $t \in [0, 60]$ с. Известно, что значения дисперсии координат атомов плёнки вдоль оси  $Oz$   $\sigma_z = 2,658234846$ . Средняя скорость вектора сноса вдоль алюминиевой подложки  $\vec{u}(t) = 0,5$  м/с. Среда изотропна, атомы плёнки полностью поглощаются подложкой (т.е. образуется плёнки висмута на алюминиевой подложке). Требуется найти высоту источника атомов пленки  $H$ .

Таблица 5 – Концентрация атомов висмута на алюминиевой подложке и мощность источника с течением времени  $t \in [0, 60]$ с

$t, \text{с}$	$q, 1/\text{см}^3$	$Q(t), 1/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$
0	0	0

$t, c$	$q, 1/cm^3$	$Q(t), 1/(cm^3 \cdot c)$
5	$0,186978 \cdot 10^4$	0,788888
10	$0,850842 \cdot 10^6$	0,901052
15	$0,252913 \cdot 10^7$	0,925270
20	$0,453681 \cdot 10^8$	0,933428
25	$0,622814 \cdot 10^9$	0,948164
30	$0,753651 \cdot 10^{10}$	0,950087
35	$0,158437 \cdot 10^{11}$	0,959165
40	$0,579420 \cdot 10^{12}$	0,962743
45	$0,768428 \cdot 10^{13}$	0,975482
50	$0,778513 \cdot 10^{14}$	0,980274
55	$0,548329 \cdot 10^{15}$	0,986513
60	$0,845235 \cdot 10^{16}$	0,990021

Если известно, что среда изотропна, тогда из (2.11) выразим:

$$H = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right) + \exp \left\{ -\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Итерационный расчётный процесс представим в виде:

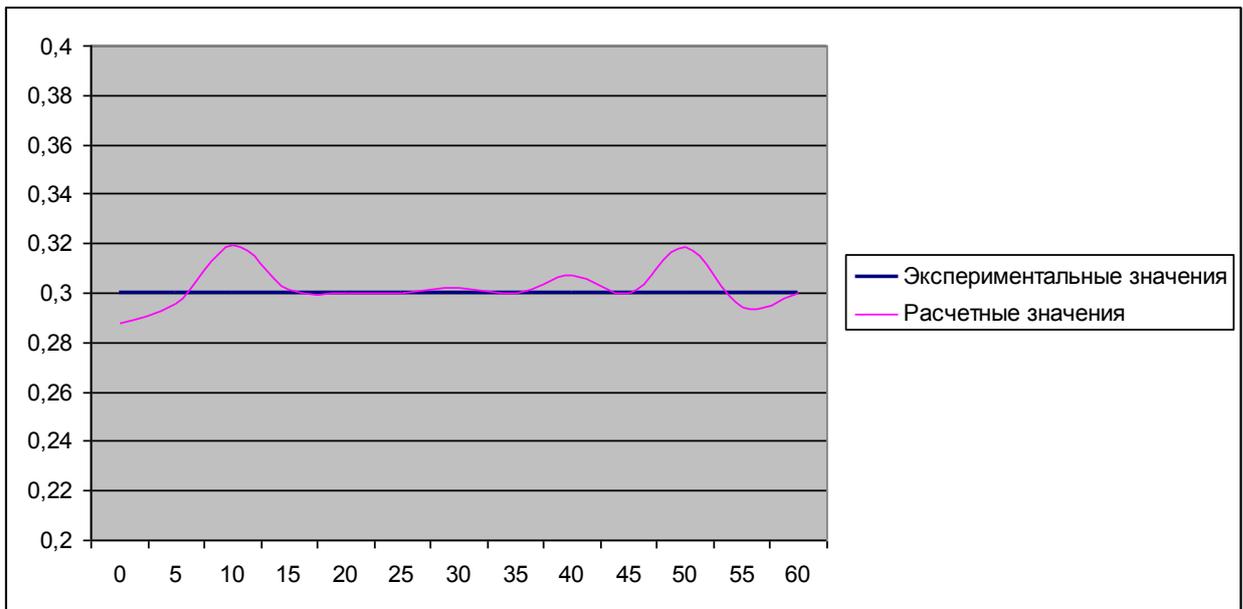
$$H^{(n+1)} = \sigma_z \sqrt{-2t \times \ln \left( \frac{\left( \frac{q_3(t, x, y, z)(2\pi)^{3/2} \sigma_z^3 t^3}{Q} \right) \times \exp \left( \frac{(x - \bar{U}t)^2 + y^2}{2\sigma_z^2 t} \right) + \exp \left\{ -\frac{(z - H^{(n)})^2}{2\sigma_z^2 t} \right\}} \right) - z.}$$

Проведём вычисления значений высоты, расположения источника атомов висмута, с течением времени, используя разработанную программу. Результаты занесём в таблицу 6. Также здесь укажем экспериментальное значение  $H$  из [18].

**Таблица 6** – Значения высоты источника висмута  $H$  с течением времени  $t \in [0, 60]$ с

$t, \text{с}$	$H$ , экспериментальная	$H$ , вычисленная
0	0,3	0,287456
5	0,3	0,295852
10	0,3	0,319714
15	0,3	0,301548
20	0,3	0,300001
25	0,3	0,300204
30	0,3	0,302487
35	0,3	0,300022
40	0,3	0,307504
45	0,3	0,300009
50	0,3	0,318978
55	0,3	0,294257
60	0,3	0,300045

На рисунке 6 приведена графическая интерпретация вычислительного эксперимента по нахождению значений  $H$  высоты расположения источника атомов висмута при решении обратной задачи рассматриваемой модели.



**Рисунок 6** – Значения  $H$  с течением времени  $t \in [0, 60]$ с

Анализ вычислительного эксперимента позволил установить, что вычисленные значения высоты расположения атомов плёнки  $H$  с течением времени  $t \in [0, 60]$ с хорошо согласуется с экспериментальным значением. При этом отклонения не превышают 2%.

### *Выводы по третьему разделу*

В третьем разделе представлена программная реализация численного решения обратных задач в математической модели роста тонких плёнок на подложках.

Разработана программа для расчёта параметров решения обратных задач в рамках рассматриваемой модели. Приведено подробное описание работы программы и представлены скриншоты её диалоговых окон.

На примерах продемонстрировано численные решения обратных задач. Особое внимание уделено задачам восстановления мощности и высоты расположения источника атомов плёнки, а также нахождению значений вертикальной дисперсии с течением времени.

Проведён вычислительный эксперимент, который показал, что вычисленные и экспериментальные значения исследуемых параметров хорошо согласуются и их отклонения являются незначительными в рамках рассматриваемой модели.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведённые исследования позволяют сформулировать следующие выводы:

1. Проведён анализ литературы по постановке прямых и обратных задач с заданными граничными условиями в процессе роста тонких плёнок на подложках.
2. Построены и решены следующие обратные задачи в рамках математической модели роста тонких плёнок на подложках:
  - восстановление мощности источника атомов плёнки по замерам их концентрации на подложке и основным параметрам модели;
  - определение высоты источника атомов плёнки;
  - вычисление вертикальной дисперсии координат атомов плёнки по основным параметрам модели и замерам мощности источника атомов плёнки.
3. Разработана программа для решения обратных задач, возникающих при математическом моделировании роста тонких плёнок на подложках.

Таким образом, все поставленные задачи были выполнены, а цель выпускной квалификационной работы достигнута.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

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. Андриевский В.Ф., Гущинская Е.В., Малышев С.А. Диффузия цинка в незащищенную поверхность InP // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. Вып. 1. – С. 68-71.
5. Бакушский А.Б., Гончарский А.В. Итеративные методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1989. – 426 с.
6. Бакушский А.Б., Гончарский А.В. Некорректные задачи. Численные методы и приложения. – М.: Издательство Московского государственного университета, 1989. – 202 с.
7. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы: учебное пособие для физико-математических специальностей; под общей редакцией Н.И. Тихонова. 2-е издание. – М.: Физматлит; Лаборатория Базовых Знаний; СПб.: Невский диалект, 2002. – 630 с.
8. Ватульян А.О. Обратные задачи в механике деформируемого твердого тела. – М.: Физматлит, 2007. – 224 с.
9. Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические дифференциальные уравнения. – Киев: Наукова думка, 1968. – 422 с.
10. Грабов В. М., Демидов Е. В., Усынин Е. В. Моделирование процесса роста пленок висмута на подложке из слюды // Известия Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена. 2011. Выпуск № 138. – С. 35-44.
11. Денисов А.М. Введение в теорию обратных задач. – М.: Издательство Московского государственного университета, 1994. – 208 с.

12. Лоскутова Е.О. Прямые и обратные задачи расчета количества примеси, выпадающей на подстилающую поверхность. Дисс. канд. физ.-мат. наук: 25.03.09 / Кубанский государственный университет. Краснодар, 2009. – 144 с.

13. Семенчин Е.А., Кузякина М.В. Стохастические методы решения обратных задач в математической модели атмосферной диффузии: Монография. – М.: Физматлит, 2012. – 176 с.

14. 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.

15. Тарасенко Е.О., Гладков А.В. Решение краевых задач определения дисперсии координат атомов пленки, образующейся на подложке // Наука. Инновации. Технологии. – 2016, Вып. 2. – С 49-60.

16. Тарасенко Е.О., Шапошников А.В., Гладков А.В., Тарасенко В.С. Математическое моделирование роста тонких плёнок на подложках, допускающее построение решения обратных задач, возникающих в рамках модели, методом преобразования координат // Современная наука и инновации. – 2019, Вып. 2 (26). – С 36-48.

17. Тихонов, А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1990. – 406 с.

18. <http://microtehnologia.ru> – Официальный сайт ООО НПФ «Микротехнология».

## ПРИЛОЖЕНИЕ. Листинг программы ОЗ\_ММ\_Г

```
Program problem1;
uses crt;
var Q,sigmaX,sigmaY,sigmaZ,t,x,y,z,H,U,q2,answer:real;
    tip_zadachi:byte;
    c:char;

function pow (pokazatel,stepen:real):real;
var rez:real;
begin
    if pokazatel>0 then
        rez:=exp(stepen*ln(pokazatel))
        else
            if pokazatel=0 then
                rez:=0
                else
                    rez:=-exp(stepen*ln(pokazatel));
            pow:= rez;
end;

procedure zadacha1(var result:real;tip:string);
var chislit,znam:real;
    error:boolean;
begin
    repeat
        clrscr;
        error:=true;
        writeln(tip);
```

```

writeln;
write('Введите q2: ');
readln(q2);
write('Введите Sigma_x: ');
readln(sigmaX);
write('Введите Sigma_y: ');
readln(sigmaY);
write('Введите Sigma_z: ');
readln(sigmaZ);
write('Введите t: ');
readln(t);
write('Введите x: ');
readln(x);
write('Введите y: ');
readln(y);
write('Введите z:');
readln(z);
write('Введите H:');
readln(H);
write('Введите U:');
readln(U);
chislit:=q2*2*pi*sqrt(2*pi)*sigmaX*sigmaY*sigmaZ*t*t*t;
znam:=exp(-(sqr(x-
U*t)/(2*sigmaX*sigmaX*t)+y*y/(2*sigmaY*sigmaY*t)))*(exp(-sqr(z-
H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))+exp(-sqr(z+H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)));
if znam<>0 then
    result:=chislit/znam
    else
    begin
        error:=false;

```

```

        writeln('Знаменатель равен нулю');
        readln;
    end;
until error;
end;

procedure zadacha2(var result:real; tip1 :string);
var proizv1,proizv2,proizv3:real;
    vibor1,vibor2:char;
    prov:boolean;
    zadanie:string;
begin
    repeat
        prov:=true;
        clrscr;
        writeln(tip1);
        writeln;
        writeln('Выберите нужный случай');
        writeln('1 – в случае полного отражения атомов пленки подстилаю-
щей поверхностью');
        writeln('2 - в случае полного поглощения атомов пленки подстилаю-
щей поверхностью');
        readln (vibor1);
        case vibor1 of
            '1': begin
                    zadanie:='Случай полного отражения атомов пленки
подстилающей поверхностью ';
                    prov:=true;
                end;
            '2': begin

```

```

        zadanie:='Случай полного поглощения атомов пленки
подстилающей поверхностью ';
        prov:=true;
        end;
    else
        begin
            prov:=false;
            writeln ('Ошибка ввода попробуйте ещё раз');
            readln;
        end;
    end;
until prov;
repeat
prov:=false;
clrscr;
writeln(tip1);
writeln;
writeln(zadanie);
writeln;
writeln('Выберите нужный случай');
writeln('1 – в случае анизотропной среды:');
writeln('2 - в случае изотропной среды:');
readln (vibor2);
case vibor1 of
    '1': prov:=true;
    '2': prov:=true;
else
    begin
        prov:=false;
        writeln ('Ошибка ввода попробуйте ещё раз ');

```

```
        readln;
    end;
end;
until prov;
write('Введите Q: ');
readln(Q);
write('Введите q2: ');
readln(q2);
write('Введите Sigma_x: ');
readln(sigmaX);
write('Введите Sigma_y: ');
readln(sigmaY);
write('Введите начальное значение Sigma_z: ');
readln(sigmaZ);
write('Введите t: ');
readln(t);
write('Введите x: ');
readln(x);
write('Введите y: ');
readln(y);
write('Введите z:');
readln(z);
write('Введите H:');
readln(H);
write('Введите U:');
readln(U);
result:=sigmaZ;
if vibor2='2' then
repeat
    sigmaZ:=result;
```

```

    proizv1:=pow(Q/(q2*2*pi*sqrt(2*pi)*sigmaZ*sigmaZ*t*t*t),1/3);
    proizv2:=pow(exp(-(sqr(x-
U*t)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)+y*y/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))),1/3);
    if vibor1='1' then
        proizv3:=pow(exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))+exp(-
sqr(z+H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)),1/3)
        else
            proizv3:=pow(exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))-exp(-
sqr(z+H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)),1/3);
        result:=proizv1*proizv2*proizv3;
        if (result=0) then
            sigmaZ:=0;
        until (abs(sigmaZ-result)<0.001)
        else
        repeat
            sigmaZ:=result;
            proizv1:=Q/(q2*2*pi*sqrt(2*pi)*sigmaX*sigmaY*t*t*t);
            proizv2:=exp(-(sqr(x-
U*t)/(2*sigmaX*sigmaX*t)+y*y/(2*sigmaY*sigmaY*t)));
            if vibor1='1' then
                proizv3:=exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))+exp(-
sqr(z+H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))
                else
                    proizv3:=exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t))-exp(-
sqr(z+H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t));
                result:=proizv1*proizv2*proizv3;
                if (result=0) then
                    sigmaZ:=0;
                until (abs(sigmaZ-result)<0.001);
            end;
end;

```

```

procedure zadacha3(var result:real;tip:string);
var proizv1,proizv2,proizv3:real;
    zadanie:string;
    vibor1,vibor2:char;
    prov:boolean;
begin
    repeat
        clrscr;
        prov:=false;
        writeln(tip);
        writeln;
        writeln('Выберите нужный случай');
        writeln('1 – в случае полного отражения атомов пленки подстилаю-
щей поверхностью');
        writeln('2 – в случае полного поглощения атомов пленки подстилаю-
щей поверхностью');
        readln (vibor1);
        case vibor1 of
            '1': begin
                zadanie:='Случай полного отражения атомов пленки
подстилающей поверхностью ';
                prov:=true;
                end;
            '2': begin
                zadanie:='Случай полного поглощения атомов пленки
подстилающей поверхностью ';
                prov:=true;
                end;
            else

```

```

begin
    prov:=false;
    writeln (' Ошибка ввода попробуйте еще раз');
    readln;
end;
end;
until prov;
repeat
clrscr;
prov:=false;
writeln(tip);
writeln;
writeln(zadanie);
writeln;
writeln('Выберите нужный случай');
writeln('1 – в случае анизотропной среды:');
writeln('2 – в случае изотропной среды:');
readln (vibor2);
case vibor1 of
    '1': prov:=true;
    '2': prov:=true
else
begin
    prov:=false;
    writeln (' Ошибка ввода попробуйте еще раз ');
    readln;
end;
end;
until prov;
write('Введите Q: ');

```

```

readln(Q);
write('Введите q2: ');
readln(q2);
write('Введите Sigma_x: ');
readln(sigmaX);
write('Введите Sigma_y: ');
readln(sigmaY);
write('Введите Sigma_z: ');
readln(sigmaZ);
write('Введите t: ');
readln(t);
write('Введите x: ');
readln(x);
write('Введите y: ');
readln(y);
write('Введите z:');
readln(z);
write('Введите начальное значение H:');
readln(H);
write('Введите U:');
readln(U);
result:=H;
if (vibor2='1') then
repeat
  H:=result;
  proizv1:=(q2*2*pi*sqrt(2*pi)*sigmaX*sigmaY*sigmaZ*t*t*t)/Q;
  proizv2:=exp((sqr(x-
U*t)/(2*sigmaX*sigmaX*t)+y*y/(2*sigmaY*sigmaY*t)));
  proizv3:=exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t));
  writeln (' под логарифмом ',proizv1*proizv2-proizv3);

```

```

writeln (' под корнем ',-2*t*ln(proizv1*proizv2-proizv3));
if (proizv1*proizv2*proizv3>0) and (pro-
izv1*proizv2*proizv3<exp(1)) then
    if (vibor1 ='1') then
        result:=sigmaZ*sqrt(-2*t*ln(proizv1*proizv2-proizv3))-z
    else
        result:=sigmaZ*sqrt(-2*t*ln(proizv1*proizv2+proizv3))-z
    else

begin
    writeln;
    writeln (' ошибка – под логарифмом или под корнем отрица-
тельное число');
    H:=0;
    result:=0
end;
until (abs(H-result)<0.001)
    else
repeat
    H:=result;
    proizv1:=(q2*2*pi*sqrt(2*pi)*sigmaZ*sigmaZ*sigmaZ*t*t*t)/Q;
    proizv2:=exp((sqr(x-
U*t)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)+y*y/(2*sigmaZ*sigmaZ*t)));
    proizv3:=exp(-sqr(z-H)/(2*sigmaZ*sigmaZ*t));
    writeln (' Под логарифмом ',proizv1*proizv2-proizv3);
    writeln (' Под корнем ',-2*t*ln(proizv1*proizv2-proizv3));
    if (proizv1*proizv2*proizv3>0) and (pro-
izv1*proizv2*proizv3<exp(1)) then
        if (vibor1 ='1') then
            result:=sigmaZ*sqrt(-2*t*ln(proizv1*proizv2-proizv3))-z
        else

```

```

        result:=sigmaZ*sqrt(-2*t*ln(proizv1*proizv2+proizv3))-z
        else
begin
    writeln;
    H:=0;
    result:=0
end;
until (abs(H-result)<0.001);
end;

procedure menu(var rezultat: real);
var i:char;
    prov:boolean;
begin
    prov:=false;
    repeat
        clrscr;
        writeln('Выберите какую задачу вы хотите решать:');
        writeln('1 – Первая задача: найти Q. ');
        writeln('2 – Вторая задача: найти Sigma Z. ');
        writeln('3 – Третья задача: найти H. ');
        readln (i);
        case i of
            '1': begin zadacha1(rezultat,' Первая задача: найти Q. ');
prov:=true; end;
            '2': begin zadacha2(rezultat,' Вторая задача: найти Sigma Z. ');
prov:=true; end;
            '3': begin zadacha3(rezultat,' Третья задача: найти H. ');
prov:=true; end;
        else

```

```
begin
    prov:=false;
    writeln (' Ошибка ввода попробуйте ещё раз');
    readln;
end;
end;
until prov;
end;
```

```
begin
    menu(answer);
    writeln;
    writeln ('Меню',answer);
end.
```