УДК 51–73

РАЗРЕШИМОСТЬ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ, ОПИСЫВАЮЩИХ ДИФФУЗИЮ АТОМОВ ПЛЕНКИ В ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР

Тарасенко Елена Олеговна,
кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики и математического моделирования Института естественных наук и математики Северо-Кавказского федерального университета, Россия, 355000, г. Ставрополь, ул. Пушкина, 1, корп. 2. E-mail: galail@mail.ru

Гладков Андрей Владимирович,
старший преподаватель кафедры прикладной математики и математического моделирования Института естественных наук и математики Северо-Кавказского федерального университета, Россия, 355000, г. Ставрополь, ул. Пушкина, 1, корп. 2.
E-mail: gavandrew@mail.ru

Маликова Наталья Владимировна,
учитель математики и информатики средней общеобразовательной школы № 1, Россия, 356250, Ставропольский край, с. Грачевка, ул. Советская, 47. E-mail: nmalik_@mail.ru

Актуальность работы. *Добыча георесурсов требует создания новых технологичных решений их производства, например, покрытие буровых шнеков средствами для защиты от коррозии. Решение указанной задачи возможно при использовании диффузионного нанесения тонкой пленки (антикоррозийное вещество) на подстилающую поверхность (шнек). Математизация такого физического процесса, как диффузионный рост тонких пленок на подстилающей поверхности, в настоящее время является малоисследованной. При математическом моделировании часто возникает вопрос о существовании и единственности решения краевых задач, описывающих указанный физический процесс. Многие отечественные и зарубежные ученые проводили исследования по решению аналитическими и численными методами начально-граничных задач, в которых изначально явно или неявно допускается, что решение рассматриваемой задачи существует и единственно. Как правило, авторы публикаций, посвященных различным проблемам математического моделирования диффузии, либо вообще не затрагивают этот вопрос (о существовании и единственности решения), либо без должного на то основания ссылаются на классические работы. Поэтому исследования на разрешимость краевых задач, проводимые в данной работе, являются актуальными.*

Цель исследования. *Разработать критерии разрешимости (существование и единственность) краевых задач, возникающих при математическом моделировании роста тонкопленочных структур на подстилающей поверхности, в различных пространствах.*

Методы исследования. *Достижение поставленной цели основывается на корректном использовании результатов и методов уравнений математической физики, интегральных уравнений, математического анализа, уравнений в частных производных, физики твёрдого тела, кристаллографии.*

Результаты. *Проведено исследование на разрешимость краевых задач, описывающих диффузионный рост тонких пленок на подложках; разработаны критерии существования и единственности решения указанных задач в различных пространствах.*

Выводы. *В ходе проведения исследований при математическом моделировании диффузионного роста тонкой пленки на подстилающей поверхности были разработаны теоремы (критерии), обеспечивающие разрешимость (существование и единственность решения) начально-граничных задач. Рассмотрены краевые задачи для случаев полного отражения и поглощения атомов пленки подстилающей поверхностью. Настоящая статья представляют значительный интерес в прикладных исследованиях, позволяет ответить на вопрос: можно ли сразу приступать к численному (или, возможно, аналитическому) решению конкретно рассматриваемой краевой задачи, описывающей диффузионный рост тонкопленочных структур на подложках, или дополнительно проводить исследования по ее регуляризации.*

Ключевые слова:
Разрешимость, краевая задача, тонкая пленка, подстилающая поверхность, подложка, диффузионный рост.

Необходимость обработки больших массивов информации в реальном масштабе времени ставит задачу создания устройств функциональной электроники, объединяющих функции ввода, преобразования и вывода информации для последующей её обработки в цифровом коде с помощью традиционных принципов. Создание таких устройств упирается в изучение физического процесса – диффузии, возникающей в процессе роста тонких пленок на подложках. Исследованию такого процесса посвящено значительное число работ [1–13], как отечественных, так и зарубежных исследователей. Задача диффузионного роста тонких пленок на подложках имеет широкое практическое применение в опто- и микроэлектронике, является прикладной задачей технологий георесурсов.

При математическом моделировании процесса диффузионного роста тонкой пленки на подстилающей поверхности возникает вопрос о разрешимости таких моделей.

В теории и практике современных исследований процесса диффузии, возникающей при образовании тонкопленочных структур, используются две начально-граничные задачи [3, 5, 14]. Одна из которых в самой общей постановке имеет вид:

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

$$K_{ij}=K_{ji},\ i,j=1,2,3,$$

$$\sum_{i=1}^{3}u_i\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=0, \qquad (2)$$

$$t\in[0,T],\ 0<T<+\infty,\ (x_1,x_2,x_3)\in G,$$

$$q(t,x_1,x_2,x_3)\ge 0,\ t\in[0,T),\ (x_1,x_2,x_3)\in G, \qquad (3)$$

$$q(0,x_1,x_2,x_3)=\varphi(x_1,x_2,x_3), \qquad (4)$$

$$q(t,x_1,x_2,x_3)\big|_{\partial G}=\psi(x_1,x_2,x_3). \qquad (5)$$

Вторая начально-граничная задача представляется в виде (1)–(4) и граничного условия

$$\left\{\frac{\partial q}{\partial v}+\beta q\right\}\Bigg|_{\partial G_0}=V, \qquad (6)$$

где $q(t,x_1,x_2,x_3)$ – функция, значения которой в каждый момент времени $t\in[0,T)$ совпадает со средним значением концентрации атомов пленки в связной области G, $\partial G=\partial G_0\cup\partial G_1\cup\partial G_2$, ∂G_0 – нижняя, ∂G_1 – боковая, ∂G_2 – верхняя части границы ∂G, $G–=G\cup\partial G$; $u_i=u_i(t,x_1,x_2,x_3)$, $i=1,2,3$ – функции, значения которых совпадают со значениями средней скорости горизонтального переноса в момент t в точке (x_1,x_2,x_3) соответственно вдоль осей Ox_1, Ox_1, Ox_1 (рассматривается декартова прямоугольная система координат); $\alpha=\alpha(t,x_1,x_2,x_3)$ – функция, характеризующая взаимодействие атомов пленки с окружающей средой (или их радиоактивный распад) в момент t в точке (x_1,x_2,x_3); $K_{ij}=K_{ij}(t,x_1,x_2,x_3)$, $i,j=1,2,3$ – элементы матрицы коэффициентов диффузии атомов пленки в подстилающей поверхности; $f=f(t,x_1,x_2,x_3)$ – функция, моделирующая источник атомов пленки (функция источника); $\varphi=\varphi(t,x_1,x_2,x_3)$ – функция, значения которой в точке $(x_1,x_2,x_3)\in G$ в момент времени t_0 совпадает со значениями концентрации атомов пленки (функция, описывающая фоновую концентрацию); $\dfrac{\partial q}{\partial v}$ – производная по внутренней нормали ∂G_0:

$$\frac{\partial q(t,x)}{\partial v(t,x)}=\lim_{y\to x}\sum_{j=1}^{3}K_{ij}(t,x)\cos(N,x)\frac{\partial q(t,x)}{\partial y_i}, \qquad (7)$$

$$x=x(x_1,x_2,x_3),\ y=y(y_1,y_2,y_3),$$

где N – внутренняя нормаль к ∂G_0 в точке $x\in\partial G_0$; K – конечный, замкнутый конус с вершиной $x\in\partial G_0$, который содержится в $G+\{x\}$; $\beta(t,x_1,x_2,x_3)$ – функция, характеризующая гравитационное осаждение атомов пленки на ∂G_0; $V(t,x_1,x_2,x_3)$ – скорость осаждения атомов пленки на ∂G_0, $t\in[0,T)$, $(x_1,x_2,x_3)\in G_0$.

Функция источника атомов пленки f задается в виде [14, 15]:

$$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(t,x_1,x_2,x_3)\delta(t,x_1,x_2,x_3), \qquad (8)$$

где $Q(t,x)$ – мощность источника атомов пленки (масса атомов пленки, выбрасываемых в области G в момент t в точке $x\in\bar{G}$), $\delta(t,x)$ – дельта-функция Дирака. При этом, если источник является (t_0 – момент начала действия источника):

1) точечным, сосредоточенным в точке $x^0=(x_1^0,x_2^0,x_3^0)\in\bar{G}$,
   1.1) мгновенного действия, то $Q(t,x)=Q=\text{const}$,
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q\delta(t)\delta(x_1-x_1^0)\delta(x_2-x_2^0)\delta(x_3-x_3^0);$$
   1.2) непрерывного действия, то
   $$Q(t,x)=Q(t),$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=$$
   $$=Q(t)\delta(t)\delta(x_1-x_1^0)\delta(x_2-x_2^0)\delta(x_3-x_3^0);$$
2) линейным, сосредоточенным на интервале $[a,b]$ числовой прямой, параллельной оси Ox_2 и пересекающей ось Ox_3 в точке $(0,0,x_3^0)$,
   2.1) мгновенного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=\begin{cases}Q(x_2), & x_2\in[a,b],\\ 0, & x_2\notin[a,b],\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(x_2)\delta(t)\delta(x_1-x_1^0)\delta(x_3-x_3^0);$$
   2.2) непрерывного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=\begin{cases}Q(t,x_2), & t\in[0,T],\ x_2\in[a,b],\\ 0, & x_2\notin[a,b],\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(t,x_2)\delta(t)\delta(x_1-x_1^0)\delta(x_3-x_3^0);$$
3) площадным, сосредоточенным на площадке S, лежащей на плоскости x_1Ox_2 и пересекающей ось Ox_3 в точке $(0,0,x_3^0)$,
   3.1) мгновенного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=\begin{cases}Q(x_1,x_2), & x_1,x_2\in S,\\ 0, & x_1,x_2\notin S,\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(x_1,x_2)\delta(t)\delta(x_3-x_3^0);$$
   3.2) непрерывного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=\begin{cases}Q(t,x_1,x_2), & t\in[0,T],\ x_1,x_2\in S,\\ 0, & x_1,x_2\notin S,\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(t,x_1,x_2)\delta(t)\delta(x_3-x_3^0);$$
4) поверхностным, сосредоточенным на поверхности S_{Π} тела Π,
   4.1) мгновенного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=\begin{cases}Q(x_1,x_2,x_3), & (x_1,x_2,x_3)\in S_{\Pi},\\ 0, & (x_1,x_2,x_3)\notin S_{\Pi},\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(x_1,x_2,x_3)\delta(t);$$
   4.2) непрерывного действия, то
   $$Q(t,x_1,x_2,x_3)=$$
   $$=\begin{cases}Q(t,x_1,x_2,x_3), & t\in[0,T],\ (x_1,x_2,x_3)\in S_{\Pi},\\ 0, & (x_1,x_2,x_3)\notin S_{\Pi},\end{cases}$$
   $$f(t,x_1,x_2,x_3)=Q(x_1,x_2,x_3).$$

Уравнение (1) можно переписать в эквивалентном виде:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}h_i\frac{\partial q}{\partial x_i}+\alpha q=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}K_{ij}\frac{\partial^2 q}{\partial x_i\partial x_j}+f, \qquad (9)$$

$$h_i=u_i-\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial K_{ij}}{\partial x_j},\ i=1,2,3. \qquad (10)$$

Следует заметить, что уравнение (9) (а значит, и (1)) совпадает с уравнением из [16]:

$$Lu=f_{\Phi}, \qquad (11)$$

$$Lu=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i\partial x_j}+\sum_{i=1}^{n}b_i\frac{\partial u}{\partial x_i}+cu-\frac{\partial u}{\partial t}, \qquad (12)$$

при n=3 с точностью до знака у f и f_{Φ}: f и f_{Φ} имеют противоположные знаки. Этот факт будет учитываться в приводимых ниже результатах исследования.

Уравнению (1) поставим в соответствие уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}u_i\frac{\partial q}{\partial x_i}+\alpha q=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}K_{ij}\frac{\partial q}{\partial x_j}+Q, \qquad (13)$$

уравнению (9) – уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}h_i\frac{\partial q}{\partial x_i}+\alpha q=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}K_{ij}\frac{\partial^2 q}{\partial x_i\partial x_j}+Q, \qquad (14)$$

отличающиеся, соответственно, от (1) и (9) лишь видом функции f: вместо f, задаваемой выражением (8), здесь рассматривается мощность источника атомов пленки Q.

Рассмотрим следующую задачу: найти (указать) условия, при выполнении которых задачи (1)–(5) и (1)–(4), (6) имеют единственное решение.

Несмотря на очевидную необходимость проведения таких исследований (решению аналитическими и численными методами указанных начально-граничных задач посвящено значительное число работ, в которых изначально явно или неявно допускается, что решение рассматриваемой задачи существует и оно единственное), подобных исследований в этом направлении до настоящего времени не проводилось. Как правило, авторы публикаций, посвященных различным проблемам математического моделирования диффузии, либо вообще не затрагивают этот вопрос (о существовании и единственности решения), либо без должного на то основания ссылаются на классические работы [16–18]. Ниже можно будет убедиться: достаточно ясное и четкое освещение данного вопроса не является тривиальным и требует скрупулезного анализа результатов из [16, 17]. Исключение составляет монография [14], однако в этой работе найдены лишь достаточные условия единственности решения задач типа (1) ((9))–(5) и (1) ((9))–(4), (6). Вопрос о существовании их решения в [14] не затрагивался.

Теорема 1. Пусть коэффициенты u_i, K_{ij}, α, i,j=1,2,3, принадлежат классу $H^{\beta,\frac{\beta}{2}}(\overline{D}_4^T)$ и ограничены на $\overline{D}_4^T$, кроме того, u_i, K_{ij} непрерывно дифференцируемы по x_i, i,j=1,2,3 в $\overline{D}_4^T$, $Q\geq0$, $\varphi\geq0$, Q, φ ограничены, Q удовлетворяет условию Гёльдера с показателем β, φ непрерывна в $\overline{D}_4^T$, удовлетворяет условиям Ляпунова. Тогда задача (1)–(5) при ψ=0 имеет единственное решение, совпадающее с решением задачи (13), (2)–(5).

Доказательство. Так как u_i, K_{ij}, i,j=1,2,3, непрерывно дифференцируемы по x_i в $\overline{D}_4^T$, то уравнение (1) эквивалентно уравнению (9), уравнение (13) – уравнению (14).

Рассмотрим задачу (13), (2)–(5), которая эквивалентна задаче (14), (2)–(5). При выполнении условий данной теоремы, очевидно, выполняются условия:

- теоремы 16.2 из гл. 4 § 16 [17], а значит, решение задачи (14) ((13)), (2), (4), (5) существует;
- теоремы 5.2 из гл. 4 § 5 [17], а значит, решение задачи (14) ((13)), (2), (4), (5) единственное и оно представимо в виде

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

$$=\int_0^t d\tau\iiint_G q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)Qdy_1dy_2dy_3+$$

$$+\iiint_G q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)\varphi(y_1,y_2,y_3)dy_1dy_2dy_3 \qquad (15)$$

(см. соотношение (16.17) из [17]), где $q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)$ – функция Грина для задачи (14) ((13)), (2), (4), (5) в области $\overline{D}_4^T$, т. е. q_0 удовлетворяет уравнениям:

$$\frac{\partial q_0}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}h_i\frac{\partial q_0}{\partial x_i}+\alpha q_0=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}K_{ij}\frac{\partial^2 q_0}{\partial x_i\partial x_j}+$$

$$+\delta(t-\tau)\delta(x_1-y_1)\delta(x_2-y_2)\delta(x_3-y_3), \qquad (16)$$

$$\left(\begin{aligned}&\frac{\partial q_0}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}u_i\frac{\partial q_0}{\partial x_i}+\alpha q_0=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}K_{ij}\frac{\partial q_0}{\partial x_j}+\\&+\delta(t-\tau)\delta(x_1-y_1)\delta(x_2-y_2)\delta(x_3-y_3)\end{aligned}\right) \qquad (17)$$

и условиям:

$$q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)=0, \qquad (18)$$

$$q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)\big|_{(x_1,x_2,x_3)\in\partial G}=0. \qquad (19)$$

Кроме того, в условиях данной теоремы выполняются условия теоремы 2.1 и следствия 2.1 из гл. 1 § 2 [17].

А тогда

$$q_0(t,x_1,x_2,x_3)\geq0,\ (t,x_1,x_2,x_3)\in D_4^T. \qquad (20)$$

Из (20) и условий $Q\geq0$, $\varphi\geq0$ следует, что если выполнены условия данной теоремы, то решение задачи (14) ((13)), (2)–(5) существует и единственно.

Учитывая равенство (8) и используя свойства δ-функции Дирака [19], соотношение (15) можно переписать в эквивалентном виде:

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

$$=\int_0^t d\tau\iiint_G q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)fdy_1dy_2dy_3+$$

$$+\iiint_G q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)\varphi(y_1,y_2,y_3)dy_1dy_2dy_3. \qquad (21)$$

Снова воспользовавшись свойствами δ-функции, непосредственным подсчетом, можно убедиться, что функция (21) удовлетворяет уравнению (9), а следовательно, и уравнению (1). Учитывая, что $q_0(t,x_1,x_2,x_3;\tau,y_1,y_2,y_3)$ является функцией Грина для задачи (13), (2)–(5) (т. е. решением задачи (17)–(19)), заключаем, что функция (21) удовлетворяет условиям (3), (4), (5). Значит, решение (1)–(5) существует и единственно. *Теорема доказана.*

Теорема 2. Пусть выполнены все условия теоремы 1. Тогда задача (1)–(5) при f=0, φ=0 имеет единственное решение.

Доказательство. Если выполнены условия данной теоремы, то:

1) выполняются все условия теоремы 16.1 из гл. 4 § 16 [17], а значит, решение задачи (9), (2), (4), (5) при f=0, φ=0 существует;
2) выполняются все условия теоремы 5.2 из гл. 4 § 5 [17], а значит, решение задачи (9), (2), (4), (5) при f=0, φ=0 единственно;
3) выполняются все условия теоремы 2.1 из гл. 1 § 2 [17], а значит, согласно следствию 2.1 из этой теоремы, решение задачи (9), (2), (4), (5) при f=0, φ=0 неотрицательно, т. е. выполняется условие (3).

Уравнение (9) эквивалентно уравнению (1). А тогда, согласно 1)–3), решение задачи (1)–(5) при f=0, φ=0 существует и единственно. *Теорема доказана.*

Теорема 3. Пусть выполнены все условия теоремы 1. Тогда (1)–(5) имеет единственное решение, совпадающее с решением (13), (2)–(5).

Доказательство. Все условия теоремы 3 те же, что и условия теорем 1 и 2. Обозначим через $q_1(t,x_1,x_2,x_3)$ решение задачи (1)–(5) при ψ=0, через $q_2(t,x_1,x_2,x_3)$ – решение этой задачи при f=0, φ=0. Непосредственным подсчетом легко убедиться, что $q(t,x_1,x_2,x_3)=q_1(t,x_1,x_2,x_3)+q_2(t,x_1,x_2,x_3)$является решением (1)–(5). Согласно теореме 1, $q_1(t,x_1,x_2,x_3)$ – единственное решение задачи (1)–(5) при ψ=0. Согласно теореме 2, $q_1(t,x_1,x_2,x_3)$ – единственное решение задачи (1)–(5) при f=0, φ=0. Очевидно, что $q(t,x_1,x_2,x_3)$ будет единственным решением задачи (1)–(5). *Теорема доказана.*

Перейдем к анализу задачи (1)–(4), (6).

Заметим, что уравнение (1) совпадает с уравнением из [16]:

$$Lq=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}k_{ij}\frac{\partial^2 q}{\partial x_i \partial x_j}-\sum_{i=1}^{n}h_i\frac{\partial q}{\partial x_i}-\alpha q-\frac{\partial q}{\partial t},$$

определенное в $\bar{D}_4^T$. Предположим, что L удовлетворяет следующим условиям:

а) L – параболический коэффициент в $\bar{D}_4^T$, т. е. при всех $(t,x)\in\bar{D}_4^T$ и любого вещественного вектора $\varepsilon=(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3)\neq(0,0,0)$ выполняется условие

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}k_{ij}(t,x)\varepsilon_i\varepsilon_j \geq 0;$$

б) коэффициент L непрерывен в $\bar{D}_4^T$ и для всех $(t,x)\in\bar{D}_4^T$, $(t^0,t^0)\in\bar{D}_4^T$ и некоторого β=const, 0<β<1, удовлетворяет условиям:

$$|K_{ij}(t,x)-K_{ij}(t^0,x^0)|\leq A(|x-x^0|+|t-t^0|),$$
$$|h_i(t,x)-h_i(t,x^0)|\leq A|x-x^0|^{\beta},$$
$$|\alpha(t,x)-\alpha(t,x^0)|\leq A|x-x^0|^{\beta},$$
$$i,j=1,2,3,\;\; A=\mathrm{const}>0.$$

Теорема 4. Пусть выполнены условия а), б), u_i, K_{ij} непрерывно дифференцируемы по x_i, i=1,2,3 в $\bar{D}_4^T$, граница $\partial G\in C^{1+\alpha}$, φ непрерывна в $\bar{G}$ и равна нулю в некоторой G – окрестности границы ∂G, β, ν непрерывны на $\partial G_0\times[0,T]$. Тогда решение задачи (1)–(4), (6) существует и единственное.

Доказательство. По условию, u_i, K_{ij}, i=1,2,3 непрерывно дифференцируемы по x_i в $\bar{D}_4^T$. Поэтому уравнение (1) эквивалентно уравнению (9), уравнение (13) – уравнению (14).

Аналогично тому, как мы это делали при доказательстве теоремы 1, рассмотрим задачу (13), (2)–(4), (6), эквивалентную задаче (14), (2)–(4), (6).

Если выполнены условия данной теоремы, то, очевидно, выполняются условия теоремы 2 из гл. 5 § 3 [16] (случай n=3). Откуда следует, что решение q задачи (14) ((13)), (2), (4), (6) существует, единственно и представимо в виде

$$q(t,x_1,x_2,x_3)=$$
$$=\int_0^t d\tau\iiint_{\partial G}\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)r(\tau,\xi,\eta,\theta)dS+$$
$$+\iiint_{G}\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)\varphi(\tau,\xi,\eta,\theta)d\xi d\eta d\theta+$$
$$+\int_0^t d\tau\iiint_{G}\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)Q(\tau,\xi,\eta,\theta)d\xi d\eta d\theta, \quad (22)$$

где $r(\tau,\xi,\eta,\theta)$ непрерывная на $\partial G\times[0,T]$ функция, являющаяся решением интегрального уравнения (22), которое представимо в виде (3.10) из гл. 5 § 3 [15], dS – элемент поверхности ∂G, Γ – фундаментальное решение уравнения Lq=0,

$$L(.)=\frac{\partial(.)}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}h_i\frac{\partial(.)}{\partial x_i}+\alpha(.)-$$
$$-\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K_{ij}\frac{\partial^2(.)}{\partial x_i\partial x_j}=0, \quad (23)$$

$$\left(\begin{array}{l} L(.)=\dfrac{\partial(.)}{\partial t}+\displaystyle\sum_{i=1}^{3}u_i\frac{\partial(.)}{\partial x_i}+\alpha(.)- \\ \quad -\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}K_{ij}\frac{\partial(.)}{\partial x_j}=0 \end{array}\right). \quad (24)$$

Обозначим в (7) (а значит, и в (6))

$$b_i(t,x)=\sum_{j=1}^{3}K_{ij}(t,x)\cos(N,x).$$

В условиях нашей теоремы выполняются (для случая n=3) все условия теоремы 2.2 из гл. 1 § 2 [17] (принцип максимума). А тогда, согласно этой теореме, $q(t,x)$ удовлетворяет неравенству

$$q(t_1,x) \ge \sup_{\lambda > a_0} \min \left\{ \begin{array}{l} 0,\ \min\limits_{\partial D_4^{t_1}} \dfrac{v e^{\lambda(t_1-t_0)}}{|b|}; \\ e^{\lambda t_1} \min\limits_G u(x,0); \\ \dfrac{1}{\lambda - a_0} \min(Q e^{\lambda(t_1-t_0)}) \end{array} \right\}, \quad (25)$$

$$|b| = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2},$$

$$a_0 = \max_{D_4^{t_1}}(-\| K(t,x) \|),$$

$$x = (x_1, x_2, x_3),\ t_1 \ge t_0 \ge 0.$$

Рассмотрим выражение

$$\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3) =$$

$$= \int_0^t d\tau \iiint_{\partial G} \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) r(\tau,\xi,\eta,\theta) dS +$$

$$+ \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) \varphi(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta +$$

$$+ \int_0^t d\tau \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) f(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta, \quad (26)$$

полученное из (22) путем замены в последнем слагаемом (22) Q на f. Из (8) и свойств δ-функции Дирака следует, что (26) эквивалентно (22) в $\bar{D}_4^T$, т. е.

$$\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3) = q(t,x_1,x_2,x_3),\ (t,x_1,x_2,x_3) \in D_4^T. \quad (27)$$

Из (27) вытекает, что $\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3)$ удовлетворяет условиям (3), (4), (6), так как этим условиям в D_4^T удовлетворяет $q(t,x_1,x_2,x_3)$.

Подставим формально (26) в (1), т. е. вычислим $L\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3)$, $(t,x_1,x_2,x_3) \in D_4^T$, $(t,x_1,x_2,x_3) \notin \partial G$, где $L(.)$ имеет вид (24).

Согласно (26), (24),

$$L\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3) =$$

$$= L \int_0^t d\tau \iiint_{\partial G} \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) r(\tau,\xi,\eta,\theta) dS +$$

$$+ L \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) \varphi(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta +$$

$$+ L \int_0^t d\tau \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) f(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta. \quad (28)$$

Вычислим выражение в правой части (28), упростив для этого каждое слагаемое:

$$L \int_0^t d\tau \iiint_{\partial G} \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) r(\tau,\xi,\eta,\theta) dS =$$

$$\iiint_{\partial G} \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) r(\tau,\xi,\eta,\theta) dS +$$

$$\int_0^t d\tau \iiint_{\partial G} [L\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)] r(\tau,\xi,\eta,\theta) dS \equiv 0, \quad (29)$$

так как по условию $\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)$ – фундаментальное решение уравнения $L\bar{q}=0$, а согласно определению Γ

$$\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) \equiv 0$$

при

$$(x_1,x_2,x_3) \notin \partial G,\ (\xi,\eta,\theta) \in \partial G,$$

и

$$L\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) = 0. \quad (30)$$

$$L \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) \varphi(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta =$$

$$= \iiint_G \begin{pmatrix} [L\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)] \times \\ \times \varphi(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta \end{pmatrix} = 0, \quad (31)$$

$$L \int_0^t d\tau \iiint_G \begin{pmatrix} \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) \times \\ \times f(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta \end{pmatrix} =$$

$$= \iiint_G \Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) f(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta +$$

$$+ \int_0^t d\tau \iiint_G \begin{pmatrix} [L\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta)] \times \\ \times f(\tau,\xi,\eta,\theta) d\xi d\eta d\theta \end{pmatrix} =$$

$$= f(t,x_1,x_2,x_3). \quad (32)$$

Равенство (32) вытекает из равенств

$$\Gamma(t,x_1,x_2,x_3;\tau,\xi,\eta,\theta) = \delta(x-\xi)\delta(y-\eta)\delta(y-\theta),$$

$$\iiint_G f(\tau,\xi,\eta,\theta)\delta(x-\xi)\delta(y-\eta)\delta(y-\theta) d\xi d\eta d\theta =$$

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

и равенства (30).

Из (28), (29), (31), (32) следует, что

$$L\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3) = f(t,x_1,x_2,x_3).$$

Из (33) заключаем, что $\bar{q}(t,x_1,x_2,x_3)$ является решением уравнения (1), из (27) – что решение единственно и оно удовлетворяет условиям (3), (4), (6) (в силу того, что этим условиям удовлетворяет $q(t,x_1,x_2,x_3)$). *Теорема доказана.*

Полученные результаты принимаются для анализа математических моделей, используемых на практике.

Убедимся, что для основных начально-граничных задач, используемых в прикладных исследованиях диффузионного роста тонкопленочных структур на подложках, выполняются все условия теорем 1–4. В этих задачах обычно полагают, что коэффициенты и функции в задачах (1)–(5), (1)–(4), (6) имеют следующий вид [20] (для полного соответствия с обозначениями, используемыми на практике, будем считать, что $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$):

$$u_1 = u_1(z) = c_1 \ln z,\ c_1 = \text{const} > 0,\ u_2 = u_3 = 0 \quad (33)$$

(этот случай означает, что ось Ox сориентирована по направлению вектора скорости горизонтального переноса, а скорость ветра вдоль оси Oz изменяется по логарифмическому закону);

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

т. е. в матрице коэффициентов диффузии учитываются только диагональные элементы, а все элементы, не расположенные на главной диагонали, считают равными нулю; при этом $K_{11}=K_{22}=c_2u_1$, c_2=const>0, где u_1 задается выражением (34), $K_{33}=c_3z+c_4$, c_3=const>0, c_4=const>0.

В качестве G часто выбирают прямой круговой цилиндр высотой H с достаточно большим радиусом R основания, расположенного на подстилающей поверхности z=0 [14]. Такой способ задания G удобен при аналитических (если это возможно в отдельных случаях [15]) и численных решениях рассматриваемых начально-граничных задач.

Функции α, Q, φ, ψ, β, v задают таким образом, что выполняются условия теорем 1–4. Чаще всего полагают, что эти функции являются постоянными величинами в G.

При данном выборе u_i, i=1,2,3, условие (2) выполняется тождественно.

Для указанных u_i, α, K_{ij}, φ, ψ, β, v, G условия теорем 1–4 выполняются. Поэтому используемые в прикладных исследованиях задачи вида (1)–(5) и (1)–(4), (6) всегда имеют (и при том одно) решение.

Обратим внимание на следующее обстоятельство. При численном решении задач (1)–(5) и (1)–(4), (6) в уравнении (1) часто f заменяют на Q без должного на то обоснования. Однако результаты численных расчетов в этом случае удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Объяснить этот факт можно следующим образом. Из доказательств теорем 1–4 следует, что вид $q(t,x_1,x_2,x_3)$ не зависит от выбора в уравнении (1) в качестве свободного члена f или Q (см. (15) и (21), (22) и (26), (27)). Поэтому и результаты численных расчетов (при замене f на Q в уравнении (1)) всегда будут хорошо согласованы с экспериментальными данными (если только, конечно, сама модель (1)–(5) или (1)–(4), (6) адекватно экспериментальным данным описывает изменения значений $q(t,x_1,x_2,x_3)$ в G).

Заключение

В работе представлены результаты исследований на существование и единственность решения краевых задач, описывающих диффузионный рост тонкой пленки на подстилающей поверхности. Найдены критерии, обеспечивающие разрешимость (существование и единственность решения) в соответствующих пространствах. Данные критерии имеют важное значение в прикладных исследованиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. – Л.: Мир, 1972. – 362 с.
2. Верлань А.Ф., Москалюк С.С. Математическое моделирование непрерывных динамических систем. – Киев: Наукова думка, 1988. – 362 с.
3. Галай Е.О. Математическая модель образования плёнок на подложках // Обозрение прикладной и промышленной математики. – 2005. – Т. 12. – Вып. 4. – С. 932.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. – М.: Научный мир, 2000. – 358 с.
5. Семенчин Е.А., Тарасенко Е.О. Моделирование процесса диффузии в полупроводниках // Обозрение прикладной и промышленной математики. – 2007. – Т. 14. – Вып. 2. – С. 352–353.
6. 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: сборник научных трудов I Международной конференции. – Ставрополь, 2014. – С. 93–98.
7. Тарасенко Е.О., Гладков А.В. Аналитическое решение краевой задачи о восстановлении мощности источника в математической модели роста тонких пленок на подложках // Параллельная компьютерная алгебра и её приложения в новых инфокоммуникационных системах: сборник научных трудов I Международной конференции. – Ставрополь, 2014. – С. 99–103.
8. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 144 с.
9. Яценко Ю.П. Интегральные модели систем с управляемой памятью. – Киев: Наукова думка, 1991. – 284 с.
10. Aubry S. Toward a Rigorous Molecular Theory of Metastability // Ferroelectrics. – 1980. – V. 24. – P. 53–59.
11. Metiu H., Kitahara K., Ross J. Statistical mechanical theory of the kinetics of phase transitions // Fluctuation phenomena. Studies in statistical mechanics / Eds. E.W. Montroll, J.L. Lebowitz. North-Holland Publish. Comp., Amsterdam. – 1979. – V. 7. – P. 229–291.
12. Nishiama H. Martensitic Theory Transformations. – New York: Academic, 1981. – 315 p.
13. Robledo A. The liquid-solid transition of the hard sphere system from uniformity of the chemical potential // J.Chem.Phys. – 1980. – V. 72. – P. 1701–1712.
14. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
15. Семенчин Е.А. Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии. – Ставрополь: СКИУУ, 1993. – 141 с.
16. Фридман А. Уравнения с частными производными параболического типа. – М.: Мир, 1968. – 427 с.
17. Ладыженская О.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. – М.: Наука, 1973. – 576 с.
18. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики. – М.: Наука, 1973. – 406 с.
19. Афанасьев В.Н., Колмановский В.Б., Носов В.Р. Математическая теория конструирования систем управления. – М.: Высшая школа, 2003. – 614 с.
20. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоиздат, 1975. – 448 с.

Поступила: 09.12.2015.

UDC 51-73

RESOLVABILITY OF BOUNDARY PROBLEMS DESCRIBING FILM ATOM DIFFUSION IN UNDERLYING SURFACE AT FORMATION OF THIN-FILM STRUCTURES

Elena O. Tarasenko,
North Caucasian Federal University,
bld. 2, 1, Pushkin Street, 355000, Stavropol, Russia. E-mail: galail@mail.ru

Andrey V. Gladkov,
North Caucasian Federal University,
bld. 2, 1, Pushkin Street, 355000, Stavropol, Russia. E-mail: gavandrew@mail.ru

Nataliya V. Malikova,
Secondary school no. 1, 47, Sovietskaya street, Grachevka village,
Stavropol region, 356250, Russia. E-mail: nmalik_@mail.ru

Relevance of the work. *Extraction of geo assets requires the development of new technological solutions for their production, for example, the coating of drill screws with anticorrosion agents. A solution to this problem is possible using diffusion lacquer coating (corrosion inhibitor) on underlying surface (auger). The mathematization of such physical process as diffusion growth of thin films on the underlying surface is currently unexplored. In mathematical models the question on the existence and uniqueness of the solution of boundary-value problems describing the specified physical process often arises. Many domestic and foreign scientists have studied the analytical and numerical methods for solving the initial-boundary value problems, in which it is originally explicitly or implicitly assumed that the solution of the problem exists and it is unique. As a rule, the authors of publications devoted to various problems of mathematical modeling of diffusion, either do not address this question at all (about the existence and uniqueness of the solution) or refer to the classic works without good reason. Therefore, the studies on solvability of boundary value problems carried out in the paper are relevant.*
The aim *of the research is to develop the criteria of resolvability (existence and uniqueness) of the boundary problems arising at mathematical modeling of the thin-film structure growth on underlying surface in various spaces.*
Research methods. *The achievement of a goal is based on correct use of results and methods of the equations of mathematical physics, the integrated equations, the mathematical analysis, the equations in private derivatives, physics of a solid body, a crystallography.*
Results. *The authors have studied the resolvability of the boundary problems describing the diffusive growth of thin films on substrates; developed the criteria of existence and uniqueness of the solution of the specified tasks in various spaces.*
Conclusions. *At mathematical modeling of diffusive growth of a thin film on underlying surface the authors developed the theorems (criteria) providing resolvability (existence and uniqueness of the decision) of initial-boundary tasks. The paper considers the boundary problems for cases of full reflection and absorption of atoms of a film by the underlying surface. The present article is of considerable interest in applied research, and allows answering a question whether it is possible to proceed immediately to a numerical (or possibly analytic) solution of the specific boundary value problem describing the diffusion growth of thin-film structures on substrates, or carry out further researches on its regularization.*

Key words:
Resolvability, boundary problem, thin film, underlying surface, substrate, diffusive growth.

REFERENCES

1. Boltaks B.I. *Diffuziya i tochechnye defekty v poluprovodnikakh* [Diffusion and dot defects in semiconductors]. Leningrad, Mir Publ., 1972. 362 p.
2. Verlan A.F., Moskalyuk S.S. *Matematicheskoe modelirovanie nepreryvnykh dinamicheskikh system* [Mathematical modeling of continuous dynamic systems]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1988. 362 p.
3. Galay E.O. Matematicheskaya model obrazovaniya plenok na podlozhkakh [Mathematical model of formation of films on substrates]. *Obozrenie prikladnoy i promyshlennoy matematiki*, 2005, vol. 12, Iss. 4, p. 932.
4. Samarskiy A.A., Gulin A.V. *Chislennye metody matematicheskoy fiziki* [Numerical methods of mathematical physics]. Moscow, Nauchny mir Publ., 2000. 358 p.
5. Semenchin E.A., Tarasenko E.O. Modelirovanie protsessa diffuzii v poluprovodnikakh [Diffusion modeling in semiconductors]. *Obozrenie prikladnoy i promyshlennoy matematiki*, 2007, vol. 14, Iss. 2, pp. 352–353.
6. 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 [Analytical and numerical solutions of some return tasks within mathematical model of growth of thin films on substrates which equation allows the solution of a Gaussian type]. *Parallelnaya kompyuternaya algebra i ee prilozheniya v novykh infokommunikatsionnykh sistemakh. I Mezhdunarodnaya konferentsiya, sbornik nauchnykh trudov* [Parallel computer algebra and its appendices in new infocommunication systems. The I International conference, collection of scientific works]. Stavropol, 2014. pp. 93–98.
7. Tarasenko E.O., Gladkov A.V. Analiticheskoe reshenie kraevoy zadachi o vosstanovlenii moshchnosti istochnika v matematicheskoy modeli rosta tonkikh plenok na podlozhkakh [The analytical solution of a boundary problem on restoration of a source power in mathematical model of thin films growth on substrates]. *Parallelnaya kompyuternaya algebra i ee prilozheniya v novykh infokommunikatsionnykh sistemakh. I Mezhdunarodnaya konferentsiya, sbornik nauchnykh trudov* [Parallel computer algebra and its appendices in new infocommunication systems. The I International conference, collection of scientific works]. Stavropol, 2014. pp. 99–103.
8. Tarasevich Yu.Yu. *Matematicheskoe i kompyuternoe modelirovanie* [Mathematical and computer modeling]. Moscow, Editorial URSS Publ., 2002. 144 p.

9. Yatsenko Yu.P. *Integralnye modeli sistem s upravlyaemoy pamyatyu* [Integrated models of systems with the operated memory]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1991. 284 p.
10. Aubry S. Toward a Rigorous Molecular Theory of Metastability. *Ferroelectrics*, 1980, vol. 24, pp. 53–59.
11. Metiu H., Kitahara K., Ross J. Statistical mechanical theory of the kinetics of phase transitions. *Fluctuation phenomena. Studies in statistical mechanics.* Eds. Montroll E.W., Lebowitz J.L. Amsterdam, North-Holland Publish. Comp., 1979. Vol. 7, pp. 229–291.
12. Nishiama H. *Martensitic Theory Transformations*. New-York, Academic, 1981. 315 p.
13. Robledo A. The liquid-solid transition of the hard sphere system from uniformiry of the chemical potential. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, pp. 1701–1712.
14. Marchuk G.I. *Matematicheskoe modelirovanie v probleme okruzhayushchey sredy* [Mathematical modeling in an environment problem]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 320 p.
15. Semenchin E.A. *Analiticheskie resheniya kraevykh zadach v matemeticheskoy modeli atmosfernoy diffuzii* [Analytical solutions of boundary problems in mathematical model of atmospheric diffusion]. Stavropol, SKIUU Publ., 1993. 141 p.
16. Fridman A. *Uravneniya s chastnymi proizvodnymi parabolicheskogo tipa* [The equations with private derivatives of parabolic type]. Moscow, Mir Publ., 1968. 427 p.
17. Ladyzhenskaya O.A., Uraltseva N.N. *Lineynye i kvazilineynye uravneniya ellipticheskogo tipa* [Linear and quasilinear equations of elliptic type]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 576 p.
18. Ladyzhenskaya O.A. *Kraevye zadachi matematicheskoy fiziki* [Boundary problems of mathematical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 406 p.
19. Afanasev V.N., Kolmanovskiy V.B., Nosov V.R. *Matematicheskaya teoriya konstruirovaniya system upravleniya* [Mathematical theory of designing control systems]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 2003. 614 p.
20. Berlyand M.E. *Sovremennye problemy atmosfernoy diffuzii i zagryzneniya atmosfery* [Current problems of atmospheric diffusion and pollution of atmosphere]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1975. 448 p.

Received: 9 December 2015.