

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Кафедра прикладної математики та моделювання
Складних систем

Допущено до захисту
Завідувач кафедри ПМ та
МСС _____ Коплик І.В.
«__» _____ 20__ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр»
спеціальність 113 «Прикладна математика»
освітньо-професійна програма «Прикладна математика»
тема роботи «**Каскади фазових переходів першого
роду у дво-шаровій системі конденсації**»

Виконавець

студент факультета ЕЛІТ

Єрмоленко Назар Владиславович _____

Науковий керівник

кандидат фіз.-мат. наук

Дворниченко Аліна Василівна _____

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет	електроніки та інформаційних технологій
Кафедра	прикладної математики та моделювання складних систем
Рівень вищої освіти	бакалавр
Галузь знань	11 математика та статистика
Спеціальність	113 Прикладна математика
Освітня програма	освітньо-професійна «Прикладна математика»

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Єрмоленко Назар Владиславович

1. Тема роботи Каскади фазових переходів першого роду у двошаровій системі конденсації

Кервіник роботи Дворниченко Аліна Василівна

затверджено наказом по факультету ЕІТ від «16»лютого 2022 р. №0146-VI

2. Термін подання роботи студентом «21» червня 2022 р.

3. Вихідні дані до роботи: основні математичні моделі процесу адсорбції

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити) : аналіз предметної області, описання моделі фазових переходів у двошаровій системі конденсації, фазових портретів еволюції концентрації адсорбату, побудова біфуркаційних діаграм залежності стаціонарних станів від параметрів системи.

5. Перелік графічного матеріалу: візуалізація теоретичного матеріалу, фазова діаграма, залежності від вхідних даних.

6. Дата видачі завдання «02»травня 2022 р.

Календарний план

Дата	Вид роботи
02.05– 17.05.2022	Ознайомитись з теоретичними основами процесу адсорбції та конденсації.
18.05– 15.05.2022	Побудувати математичну модель еволюції концентрації адсорбату у двошаровій системі з урахуванням анізотропії в переходах взаємодіючих адатомів між шарами.
19.05– 16.06.2022	Побудувати біфуркаційні діаграми залежності стаціонарних станів від параметрів системи та фазові портрети еволюції концентрації адсорбату.

Здобувач вищої освіти

Кервіник роботи

РЕФЕРАТ

Дипломна робота: стор. 43, рис. 11, дж. 24, дод. 4.

Ключові слова: АДСОРБАТ, фазові переходи першого роду, АНІЗАТРОПІЯ, конденсація, НАНОСТРУКТУРОВАНІ ТОНКІ ПЛІВКИ.

Предмет: реакційна модель двошарової конденсації для систем газ конденсат.

Об'єкт: умови реалізації каскадів переходів першого роду при конденсації з газової фази.

Методи: метод фазових траєкторій, методи дослідження систем диференціальних рівнянь на стійкість, методи чисельного розв'язку систем диференціальних рівнянь.

Висновки і кінцеві розрахунки знаходяться на останніх сторінках. Також додатки, що містять код програм для розрахунків і візуалізації в середовищі Matlab.

ЗМІСТ

ВСТУП	3
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ	5
РОЗДІЛ 1	6
1.1 Основи адсорбції.....	6
1.2 Тонкі плівки.....	8
РОЗДІЛ 2	11
2.1 Загальна модель.....	11
2.2 Біфуркаційні діаграми	14
2.3 Дослідження стаціонарних станів на стійкість.....	21
ВИСНОВКИ	26
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	27
ДОДАТОК А	30
ДОДАТОК Б	32
ДОДАТОК В	37
ДОДАТОК Г	39

ВСТУП

Час штовхає нас до розвитку, до розвитку високих технологій, що стосуються електронної техніки, приладобудування та людства загалом. Чимало з цих процесів та систем функціонують на межі поділу двох фаз. Перебіг залежить від стану і властивостей поверхонь. Одним із ключів до вирішення поставлених питань є нанофізика, яка широко використовується в науці упродовж останніх років. Наноструктуровані об'єкти задіяні у сучасній електроніці, комунікаційних приладах та пристроях, навіть у біомедицині. Все завдяки їх унікальним властивостям: наднизька теплопровідність, стійкість до корозії, висока ефективність фотоелектричних перетворень, контрольована оптична емісія, гігантський магнітоопір, вуглецеві нано-конструкції.[1],[2]. Це дозволяє використовувати їх в лазерах, пристроях пам'яті, покритті металів, фармацевтичних продуктах, комунікаційних та оптичних пристроях, магніт резистивних датчиках збільшуючи ефективність.

Таке нано-формування часто спостерігаються в тонко плівкових системах. Постає питання з'ясування механізмів, що приводять до формування нано-структур на поверхнях й контролювання основних властивостей тонких плівок.

Зважаючи на це, тонкі плівки є найпоширенішим варіантом посилення фізико-хімічних властивостей матеріалів. Приклади наведені вище, але загалом їх використання вже майже у всій промисловості від електронних пристроїв до пакування харчових продуктів.

Формування тонких плівок, а саме математичне та числове моделювання надає змогу детально проаналізувати динаміку цього процесу, встановити умову впливу основних факторів на поверхневі структури, їх тип та розмір. Можна поставити рекомендації щодо корегування технологічних умов вирощування тонких плівок із заданими фізико-хімічними властивостями. Процес росту системи може бути розглянутий на різних рівнях, подивитися на

стан з різних сторін. Наприклад формування структур зі сходинками, поява окремих острівців, зміна морфології поведінки.

Моделюючи ріст тонких плівок зазвичай використовують редакційно-дифузійні системи, які відіграють важливу роль у вивченні загальної просторової поведінки нерівноважних систем.[3]. Оскільки моделі містять основні внески локальної динаміки і масо перенесення. Такий підхід дозволяє контролювати організацію адатомів, тип та лінійний розмір структур адсорбату.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

1. Побудувати математичну модель еволюції концентрації адсорбату у двошаровій системі з урахуванням анізотропії в переходах взаємодіючих адатомів між шарами.
2. Встановити умови реалізації фазових переходів першого роду типу газ-конденсат на першому та другому шарі.
3. Побудувати біфуркаційні діаграми залежності стаціонарних станів від параметрів системи та фазові портрети еволюції концентрації адсорбату.

РОЗДІЛ 1

1.1 Основи адсорбції

Адсорбція – концентрування і достатньо міцне утримування речовин із газової фази чи розчинів на поверхні твердих тіл або на межі поділу рідин. Зумовлюється міжмолекулярними взаємодіями (вандєрвальськовими взаємодіями, диполь-дипольні взаємодії, водневими зв'язками) Це окремий випадок сорбції, що охоплює також абсорбцію – поглинання речовин в об'ємі рідин твердого тіла. [6]Сполуки, на поверхні якої відбувається адсорбція – адсорбент, речовини, що адсорбуються адсорбтив, що вже адсорбувалась – адсорбат.

Розрізняють фізичну та хімічну адсорбції. При першій молекули зберігають свою індивідуальність, при другій – утворюються поверхневі сполуки між речовиною, що адсорбується, та поверхнею адсорбенту. Відповідно фізичний процес оборотний і як правило супроводжується виділенням тепла, зменшується при підвищенні температури, хімічний навпаки, при цьому частинки втрачають свою індивідуальність.

Оборотний процес до фізичного – десорбція.[8]. Адсорбовані молекули не лише здійснюють рух уздовж поверхні адсорбенту, але і вагаються, то наближаючись до поверхні, то віддаляючись від неї. Чим вище температура, тим інтенсивніше коливає рух, а отже, більше вірогідність того, що в процесі таких коливань зв'язок молекули з поверхнею буде розірваний і молекула десорбується.[9]. Завдяки цьому із зростанням температури зменшується час адсорбції і рівноважна кількість адсорбованих молекул.

Із зростанням концентрації або тиску адсорбата в об'ємі збільшується частота попадань молекул адсорбата на поверхню адсорбенту; пропорційно їй зростає швидкість адсорбції. і збільшується рівноважна кількість адсорбованих молекул. Криві залежності рівноважної адсорбції. від

концентрації або тиску адсорбата при постійній температурі називаються ізотермами адсорбції.

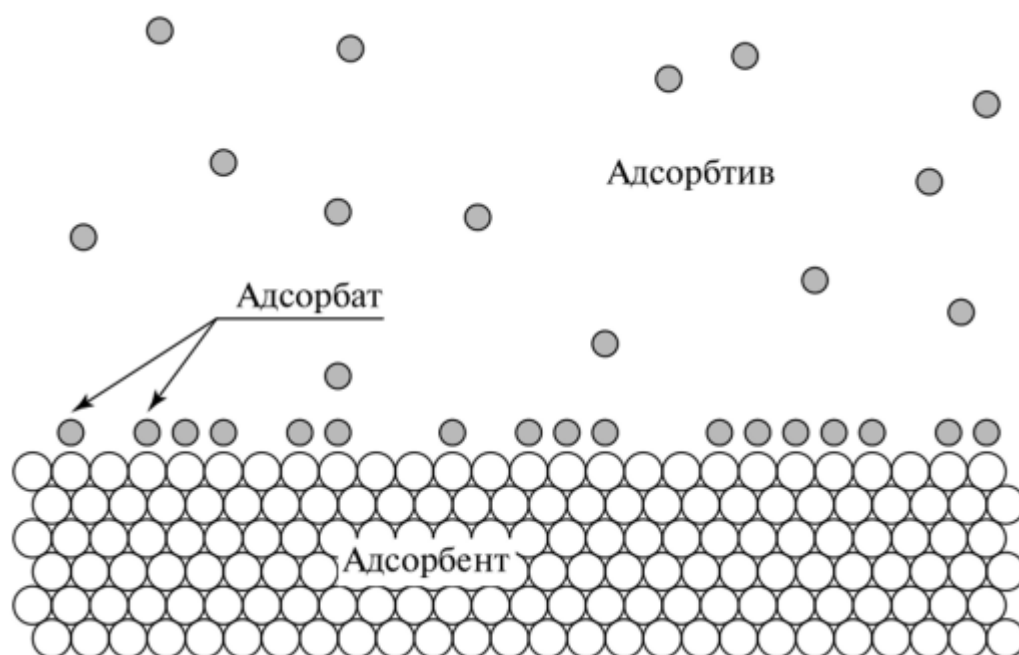


Рисунок 1.1 - Загальна модель адсорбції [4]

Розглядаючи концентрування речовин на поверхні можна виявити різні структури. Наприклад формування структур зі сходинками, поява окремих острівців, зміна морфології поведінки.

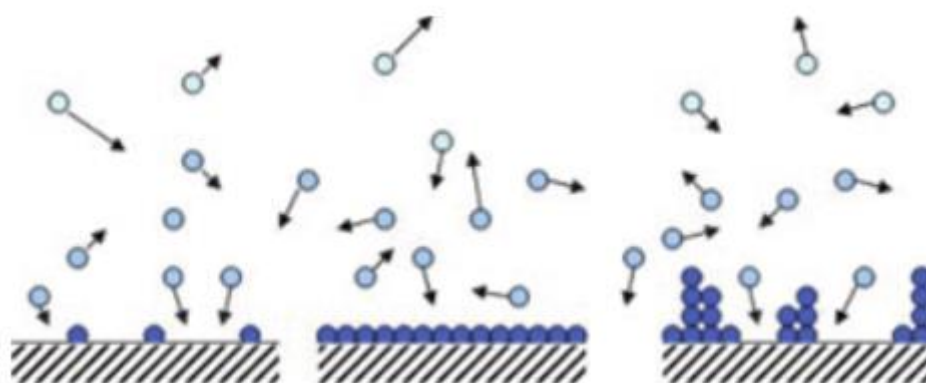


Рисунок 1.2 – Схема концентрування речовини на поверхні [5]

Існують різні моделі, що використовуються. Наведемо деякі[3]:

- Найпростіша модель Кінетичного Монте - Карло: являє собою модель багатоатомної взаємодії і використовується для моделювання процесів осадження «тверде тіло на тверде тіло». Вважається, що існує структура з певною кількістю атомів без вакансій, які утворюють скупчення атомів на поверхні в кожній комірці двовимірної ґратки.

- При моделюванні динаміки острівців широко використовується мезоскопічна модель Бартона-Кабрера-Франка. Дозволяє представити межі острівців як сходинок. Є дискретною у напрямку росту та неперервною в горизонтальному напрямку. Густина адатомів на кожній терасі описується неперервною кривою, а положення сходинок задається неперервною кривою.

- Модифікація моделі БКФ є підхід, що заснований на теорії фазового поля. Сумісно розв'язується частково диференціальні рівняння для концентрації та фазового поля, яке відіграє роль параметра порядку.

1.2 Тонкі плівки

Тонка плівка являє собою шар покриття товщиною від одного атомного шару і більше, в міліметр завтовшки (товщиною від кількох нанометрів до кількох мікрон). Сам термін використовується у фізиці, коли малий по товщині шар матеріалу має властивості, відмінні від властивостей об'ємного матеріалу. Що збільшує спектр використання та можливостей.

Відповідно вони класифікуються за складом, функціональністю та морфологією. Основні – шість груп (рис. 3).



Рисунок 1.3 – Класифікація наноструктурованих тонких плівок [3]

Існують різні методи виробництва таких плівок, що оптимізує їх специфічні властивості. Загалом, тонкі плівки можна виготовити методами осадження зверху-вниз або знизу-вгору. Зверху в них – базується на фізичних або хімічних процесах відшарування і часто використовується для отримання ламінарних наноструктур, наприклад нанолисти чи нанопластівці. Інший метод використовується для отримання складних наноструктурованих плівок. Такий метод використовується для виготовлення тонких плівок із заданими хімічними та фізичними властивостями. Він передбачає осадження з газової фази. Наведемо приклади.

Магнетронне розпорошення.[3] За допомогою катодного розпорошення мішені в плазмі магнетронного розряду плівка наноситься на підкладку. З точки зору механізму емісії електронів, магнетронний розряд постійного струму являє собою тліючий розряд. Електрони залишають поверхню катода за рахунок іонно-електронної емісії під дією іонного бомбардування. У зв'язку з тим, що коефіцієнт іонно електронної емісії дуже малий, іонний струм на катод перевищує електронний як мінімум на порядок. Баланс заряджених частинок у плазмі забезпечується іонізацією нейтральних атомів газу електронами, прискореними електричним полем у катодному просторі

Молекулярно-променева епітаксія – складний метод, що дозволяє контролювати вирощування монокристалічних епітаксіальних плівок в умовах надсильного вакууму. Атоми або кластери атомів, що утворюються при

нагріванні твердого джерела, мігрують у вакуумі та осідають на поверхню гарячої підкладки, де вони можуть дифундувати, приєднуватись до зростаючого кристала. Температура субстрату є ключовим фактором для хімічної реакції, епітаксії та десорбції надлишків реагентів. Плівки утворюються на монокристалічних підкладках шляхом повільного випаровування елементарних або молекулярних компонентів плівки, які осідають на такі субстрати, як арсенід кремнію або гал

Хімічне осадження з газової фази [3](Chemical Vapor Deposition, CVD) – універсальна методика осадження, що забезпечує вирощування тонких плівок елементних та складних напівпровідників, металевих сплавів різної стехіометрії. У процесі морфологія зростаючої поверхні залежить в основному від типу підкладки, умови осадження та форми енергії, яка вводиться в систему для активації бажаної хімічної реакції. Найпопулярніші - металеві-органічний процес, CVD зі збільшенням вмістом плазми, CVD низького тиску, лазерний CVD.

Здатність застосовувати нанокompatитні тонкі плівки знайшло важливе застосування у датчиках, акумуляторах, фільтрах та останнім часом у біомедичній галузі. Нові матеріали приводять до нового покоління можливих плівок та їх застосувань. Посилення фізичних, механічних та хімічних властивостей покращує об'ємні характеристики матеріалу, не змінюючи функціональних властивостей.

РОЗДІЛ 2

2.1 Загальна модель

Проблема фазових переходів та явищ упорядкування в адсорбованих плівках на поверхнях протягом багатьох років викликає значний інтерес. Сильні (бічні) взаємодії призводять до фазового поділу з різними покриттями, характерний для фазових переходів першого порядку. Підхід, що буде використаний демонструє фазовий перехід першого порядку у першому шарі разом з переходом у другому шарі з ознаками каскаду. Перехідні профілі, що показують конструкцію сходів, підтверджують цю картину. Також, експериментально добре відомо, що адсорбція на поверхнях обмежується не тільки утворення моношарів, а скоріше другий шар може конденсуватися на першому, третій на другому, і так далі.

Введемо просту модель, яка може описати багат шаровість адсорбції та утворення впорядкованих структур з бічною взаємодією, що ведуть до утворення меж розділу фаз з різними локальними покриттями. Аналізуючи модель адсорбатної системи розглядатимемо процес з одним типом частинок для опису. Аспектом даної моделі є вихід за рамки одношарової системи розглядаючи багат шарову систему (втім, зосередившись на випадку лише двох шарів) у тому числі між різними шарами.

Дотримуємося тут феноменологічної точки зору. Приймаємо безперервний опис поверхні та характеризуємо адсорбційні види через еволюційні рівняння для $c_i(x, t)$, локальне покриття в i -му шарі. Адсорбційний внесок характеризується k_a (константа), а адсорбція можлива лише у $(1 - c_i)$ вільних ділянках відповідного шару. Отже, швидкість адсорбції $k_a p (1 - c_i)$, де p — парціальний тиск. Крім того, для адсорбції на i -му шарі необхідно мати вільні ділянки на $(i + 1)$ -й шар.

Процес десорбції має швидкість k_d , яка включає $k_{d,0}$, десорбцію для не взаємодіючих частинок, і поправку за рахунок бічних взаємодій. Сильний локальний зв'язок, викликаний взаємодією $U_1(x)$ ($U_2(x)$ - для другого шару), коригує швидкість десорбції як: $k_d = k_{d,0} \exp\left[\frac{U_i(x)}{kT}\right]$, де k – постійна Больцмана, а T – температура. Процес десорбції в першому шарі може відбутися тільки в тому випадку, якщо відповідна ділянка включена у другий шар.

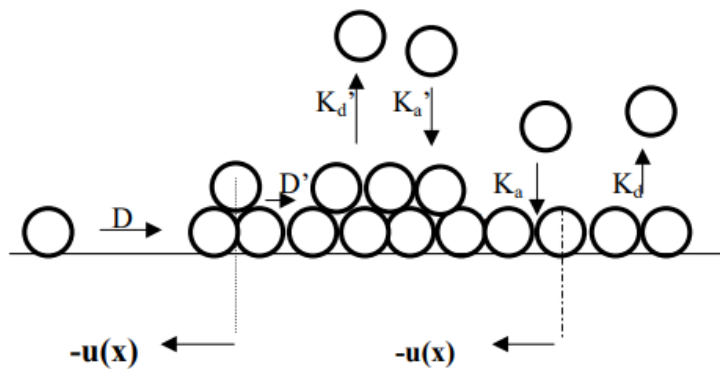


Рисунок 2.3 – Загальна модель системи

Потенціал $U_i(x)$ створює силу $F_i = -\frac{\partial U_i(x)}{\partial(x)}$, що впливає на адсорбовані частинки.

Можлива взаємодія переносу між різними шарами характеризується сполученням параметра k_T . Він включає вільні місця в кінцевому шарі та зайняті в початковому шарі. Отже, форма цього внеску є $k_T c_i (1 - c_{i+1})$ для перенесення з заданого шару на верхній, і аналогічно в інших випадках. На рисунку ми зображуємо різні процеси, що входять у нашу модель. Враховуючи все вищесказане, можна записати еволюційні рівняння для різного покриття як

$$\frac{\partial}{\partial t} c_1(x, t) = k_a p (1 - c_1)(1 - c_2) - k_{d,0} (1 - c_2) c_1 \exp\left[\frac{U_1(x)}{kT}\right] + c_1 (1 - c_2) k_T;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_2(x, t) = k'_a p c_1 (1 - c_2) - k'_{a,0} (1 - c_2) c_2 \exp \left[\frac{U_2(x)}{kT} \right] + c_2 (1 - c_1) k'_T;$$

Для функціональної форми $U_i(x)$ ми припускаємо привабливий (і, як було зазначено раніше, субстратопосередкований) потенціал між частинками, розділеними на відстань r , яку позначимо $U_i(r)$. Потенціал, що діє на частинку, розташовану в точці r у першому шарі

$$U_1(r) = -\int u_1(r - r') c(r') dr'$$

Доменом інтегрування є ціла поверхня. Як перший крок у нашому аналізі ми припускаємо, що ми маємо однаковий потенціал $u(r - r')$ серед частинок у всіх шарах. Функція $u(r)$ залежить від характеру системи. Якщо радіус взаємодії малий порівняно з довжиною дифузії, і на покриття не сильно впливають зміни цього радіусу, ми можемо наблизити

$$\begin{aligned} & \int u(r - r') c_1(r') dr' \\ & \simeq \int u(r - r') [c_1(r) + (r - r') \frac{\partial c_1}{\partial r} + \frac{1}{2} (r - r')^2 \frac{\partial^2 c_1(r)}{\partial r^2} + \dots] dr' \end{aligned} \quad (9)$$

Просторові похідні оцінюються за r . Звідси отримуємо:

$$U_1(r) = -\int u(r - r') c_1(r') dr' \simeq -u_0 c_1 - \aleph_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2}, \quad (10)$$

де коефіцієнти задані

$$u_0 = \int u(r) dr,$$

і

$$\aleph_1 = \frac{1}{2} \int r^2 u(r) dr,$$

З міркувань симетрії маємо $\int r u(r) dr = 0$. Подібним чином (і пам'ятаючи, що ми припускаємо, що бічна взаємодія є субстратомосередковано) для другого шару отримуємо

$$U_2(r) = c_1 [-\int u(r - r') c_2(r') dr'].$$

Отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_1(r, t) = k_a p (1 - c_1) (1 - c_2) - k_{a,0} (1 - c_2) c_1 e^{\frac{-u_0 c_1}{kT}} + c_1 (1 - c_2) k'_T;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_2(r, t) = k'_a p c_1 (1 - c_2) - k'_{a,0} c_2 e^{\frac{-u_0 c_1 c_2}{kT}} + c_2 (1 - c_1) k'_T;$$

В обох рівняннях ми знехтували внеском, що надходить від доданків $\chi_i \partial_r^2 c_i$, як ми стежимо, і припустимо, що це лише невеликі внески. Щоб спростити позначення, ми припустимо $D_1 = D_2 = D$ і масштабуємо змінні наступним чином: $\xi = x/L_{dif}$ $\xi = x/L_{dif}$, де довжина дифузії $L_{dif} = \left(\frac{D}{k_d}, 0\right)^{1/2}$; $\tau = t/td = t/t_d$, при $t_d = 1/k_{d,0}$; $\varepsilon = u_0/T$. Нарешті, $K = k_p/k_{d,0}$ характеризує покриття в рівновазі, коли $U(x)$ стає нульовий. Також $K = k_T/k_{d,0}$ є параметром обміну. При зазначеному масштабуванні еволюційні рівняння для $c_i(\xi, \tau)$ зводяться до:

$$\frac{\partial c_1}{\partial r} = a_1(1 - c_1)(1 - c_2) - (1 - c_2)c_1 \exp[-2\varepsilon c_1] + c_1(1 - c_2)K$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial r} = a_2 c_1(1 - c_2) - c_2 \exp[-2\varepsilon c_1 c_2] + c_2(1 - c_1)K$$

2.2 Біфуркаційні діаграми

Важливою характеристикою однорідних динамічних систем є реалізація в них стаціонарних станів, на відмінну від встановлення термодинамічної рівноваги. Виникає питання про існування таких стац. станів, їх кількості, стійкості в залежності від керуючих параметрів системи. Також становлення можливого переходу між такими станами.

Будемо використовувати рівняння виведені вище. Замінивши для зручності змінні:

1. $c_1 = x_1$;
2. $c_2 = x_2$;
3. $r = t$;
4. K на D_1 та D_2 окремо для кожного шару, відповідно

для переносу з першого на другий і з другого на перший.

Загальний вигляд системи рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = a(1-x_1)(1-x_2) - x_1(1-x_2)\exp(-2\varepsilon x_1) + D_1x_2(1-x_1) - D_2x_1(1-x_2); \\ \frac{dx_2}{dt} = a(1-x_2) - x_2\exp(-2\varepsilon x_1x_2) - D_1x_2(1-x_1) + D_2x_1(1-x_2). \end{cases}$$

Основні параметри:

- x_1 та x_2 - концентрація адатомів на 1-му і 2-му шарах відповідно
- a - коефіцієнт адсорбції даної речовини (однаковий для 1 і 2 шарів)
- ε - відношення енергії взаємодії адсорбату до температури.
- D_1 and D_2 - коефіцієнти анізотропії вертикальної дифузії адатомів на 1-му і 2-му шарах

Знаходимо стаціонарні точки відносно часу, розв'язуючи систему рівнянь :

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = 0; \\ \frac{dx_2}{dt} = 0. \end{cases}$$

Виражаємо x_2 , перенісши експоненти у праву частину і поділивши рівняння один на одного:

$$x_2 = \frac{(ax_1 - a + D_2x_1 + x_1\exp(-2\varepsilon x_1))}{(ax_1 - a + D_2x_1 + D_1(1-x_1) + x_1\exp(-2\varepsilon x_1))}$$

Виражаємо x_1 з першого рівняння перенісши невідомі по іншу сторону. Отримали квадратне рівняння:

$$\begin{aligned} & x_1^2 (D_1x_2(1-x_2) + D_2(1-x_2) - D_2x_2(1-x_2)) \\ & + x_1 (a(1-x_2) - ax_2(1-x_2) - D_1x_2(1-x_2) \\ & - x_2 \exp(x_2) (ax_2 - a - D_1x_2 - D_2 + D_2x_2)) \\ & - x_2 \exp(x_2) (a - ax_2 + D_1x_2) = 0 \end{aligned}$$

Тоді:

$$a = D_1x_2(1-x_2) + D_2(1-x_2) - D_2x_2(1-x_2);$$

$$b = a(1 - x_2) - ax_2(1 - x_2) - D_1x_2(1 - x_2) - x_2 \exp(x_2) (ax_2 - a - D_1x_2 - D_2 + D_2x_2);$$

$$c = -x_2 \exp(x_2) (a - ax_2 + D_1x_2);$$

$$D = b^2 - 4ac;$$

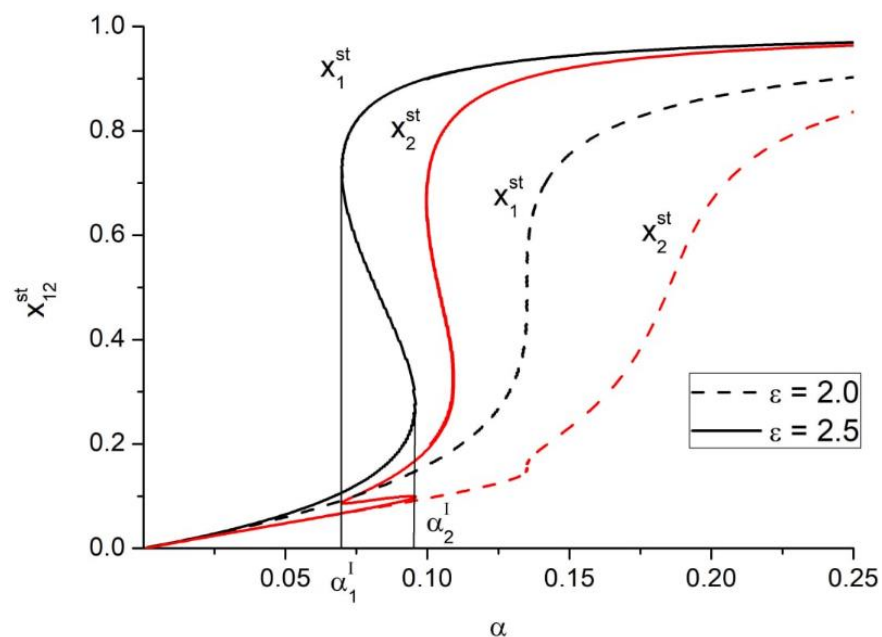
$$x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{D_{disk}}}{2a} > 0;$$

Кінцева система:

$$\begin{cases} x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{D_{disk}}}{2a} > 0; \\ x_2 = \frac{(ax_1 - a + D_2x_1 + x_1 \exp(-2\epsilon x_1))}{(ax_1 - a + D_2x_1 + D_1(1 - x_1) + x_1 \exp(-2\epsilon x_1))}. \end{cases}$$

З кінцевої системи рівнянь отримаємо залежності стаціонарних станів на окремих шарах концентрування адсорбату від коефіцієнта

Рисунок 2.4 – Залежність стаціонарних значень концентрації від



коефіцієнту адсорбції даної речовини при різних значеннях енергії взаємодії адсорбату

адсорбції a , при різних значень параметра $\epsilon = 2.0$, $\epsilon = 2.5$. Інші значення набувають константи (рис. 2.4). Розглянемо випадок малого значення енергії

взаємодії адсорбату (параметра ε), $\varepsilon = 2$, що подано штриховими кривими на рис.4. Видно, що збільшення коефіцієнта адсорбції приводить до росту стаціонарного значення концентрації адсорбату як на першому, так і на другому шарі досліджуваної двошарової системи. При цьому варто відзначити, що концентрація адсорбату на другому шарі завжди є меншою за концентрацію адсорбату на першому шарі, незалежно

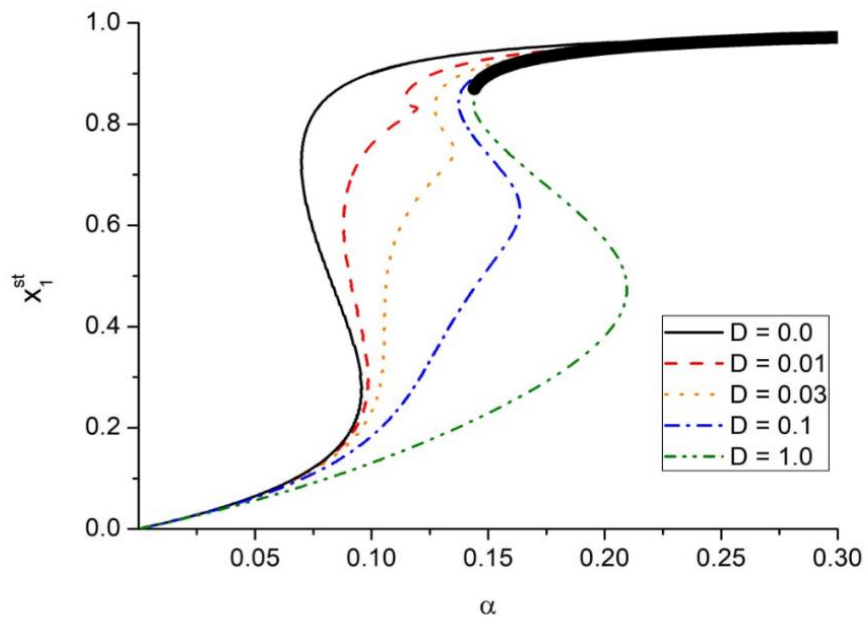


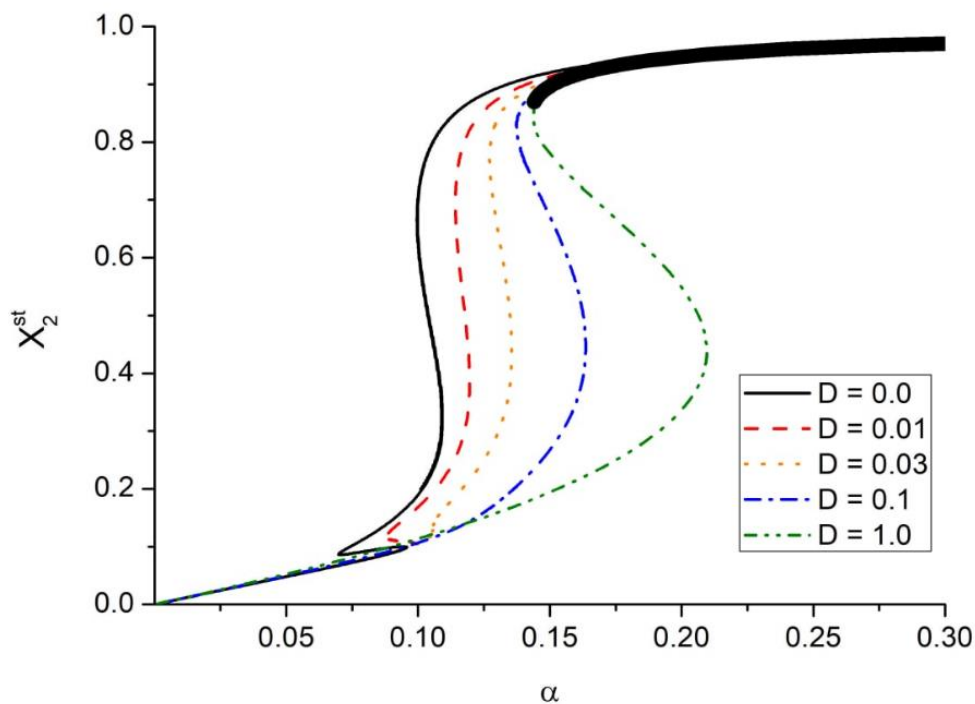
Рисунок 2.5 - Залежність стаціонарного значень концентрації на першому шарі від коефіцієнту адсорбції даної речовин при різних значеннях анізотропії

від коефіцієнту адсорбції. Збільшення енергії взаємодії адсорбату приводить до реалізації переходів першого роду при невеликих значеннях коефіцієнта адсорбції для концентрації адсорбату на обох шарах.

Далі розглянемо випадок ізотропної вертикальної дифузії, поклавши $D = D_1 = D_2$. Демонструємо залежність стаціонарних станів на окремих шарах концентрації адсорбату від α , при однакових значень параметра D_1 та D_2 (при зростанні D від 0 до 1). Інші значення набувають константи (рис. 2.5, рис.2.6). Розглянемо детально вплив коефіцієнту вертикальної дифузії на

залежність стаціонарного значення концентрації адсорбату на першому шарі двошарової системи. За відсутності переходів адатомів між шарами ($D = 0$) реалізується один перехід першого роду на малих значеннях коефіцієнта адсорбції. За умови реалізації переходів адатомів між шарами з малим коефіцієнтом вертикальної дифузії ($D = 0,01$) маємо реалізацію каскадів переходів першого роду з появою додаткового переходу при підвищених значеннях коефіцієнта адсорбції. Збільшення коефіцієнту ізотропної вертикальної дифузії приводить до зникнення переходу на малих значеннях коефіцієнта адсорбції та розширення інтервалу по a , коли реалізується перехід першого роду на підвищених значеннях коефіцієнта адсорбції.

Рисунок 2.6 - Залежність стаціонарного значень концентрації на



другому шарі від коефіцієнту адсорбції даної речовин при різних значеннях анізотропії

У випадку другого шару бачимо аналогічну тенденцію. Відмінність полягає в тому, що перехід першого роду на малих значеннях коефіцієнта адсорбції реалізується при малих значеннях концентрації адсорбату. На рис. 5

і 6 жирною кривою представлені максимальні значення концентрації адсорбату на обох шарах, що реалізується у даній математичній моделі. Залежність цих максимальних значень концентрації адсорбату на обох шарах від коефіцієнту ізотропної дифузії наведено на рис.2.7.

Для отримання даної залежності для кожного фіксованого значення коефіцієнта ізотропної дифузії розраховувалась відповідна залежність стаціонарного значення на кожному шарі від коефіцієнта адсорбції та визначалась максимально допустиме значення концентрації адсорбату. З отриманих результатів випливає, що збільшення коефіцієнту ізотропної дифузії приводить до монотонного зменшення концентрації адсорбату на кожному шарі.

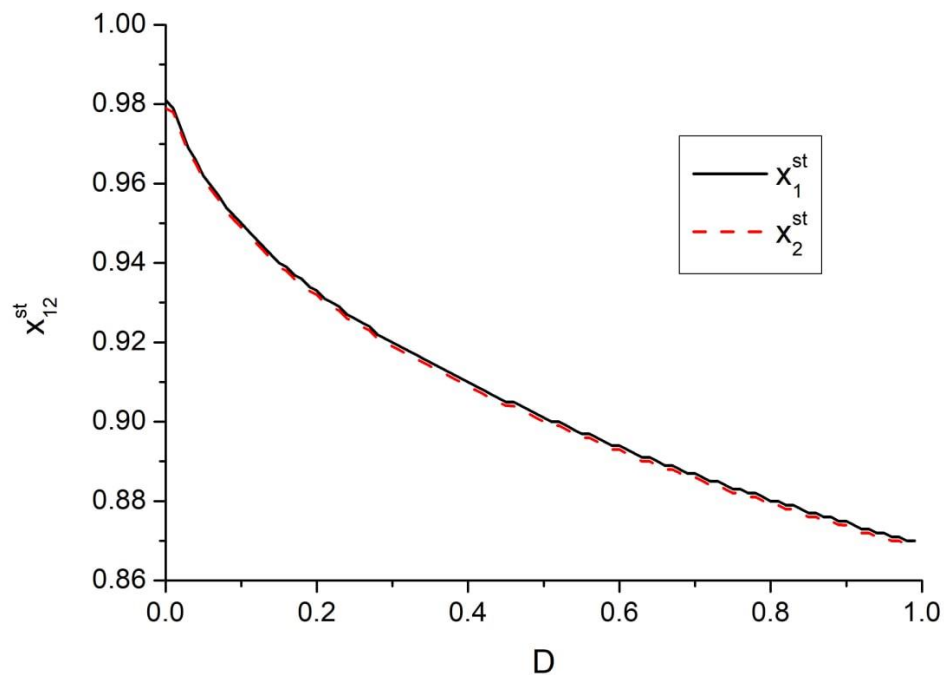


Рисунок 2.7 - Залежність цих максимальних значень концентрації адсорбату на обох шарах від коефіцієнту ізотропної дифузії

Далі розглянемо вплив анізотропії у переходах адатомів між шарами на стаціонарні стани на першому шарі двошарової системи (рис.2.8). Спочатку

проаналізуємо випадок, коли дифузія з нижніх шарів до верхніх переважає дифузію в зворотному напрямку ($D_2 > D_1$) у порівнянні з ізотропним випадком. Така анізотропія може бути викликана впливом підведеного до підкладки зовнішнього електричного поля, що реалізується наприклад в системах плазма-конденсат. Бачимо, що в такій системі зникають переходи першого роду порівняно з ізотропною системою. Тут концентрація адсорбату монотонно зростає зі збільшенням коефіцієнта адсорбції.

Далі розглянемо випадок зворотної анізотропії, коли переходи з верхніх шарів до нижніх є більш ймовірні ніж зворотні переходи ($D_1 > D_2$). Така ситуація є типовою для систем газ-конденсат, коли в результаті

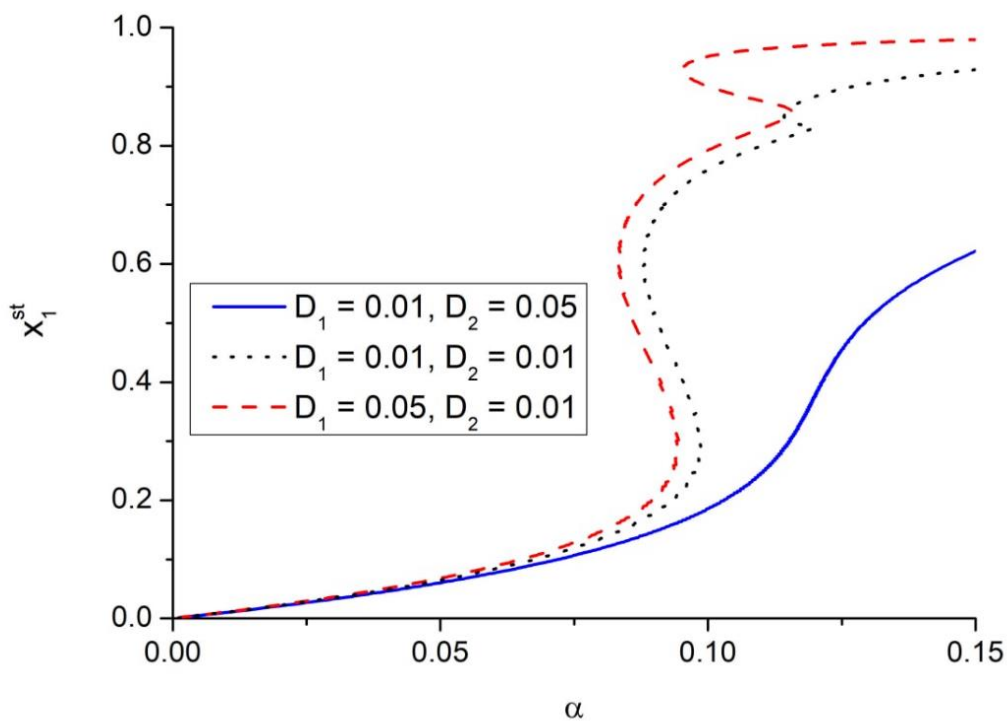


Рисунок 2.8 – Залежність концентрації на першому шарі від коефіцієнту адсорбції при різних значень D_1 та D_2 для кожного шару окремо.

мінімізації поверхневої енергії адатоми мігрують з верхніх шарів до нижніх. В такій системі зберігається каскад переходів першого роду, а інтервал значень

коефіцієнта адсорбції для переходу на підвищених концентраціях розширюється.

2.3 Дослідження стаціонарних станів на стійкість

Проведемо аналіз отриманих стаціонарних станів на стійкість за Ляпуновим. Для цього зафіксуємо усі керуючі параметри системи (рис.2.9).

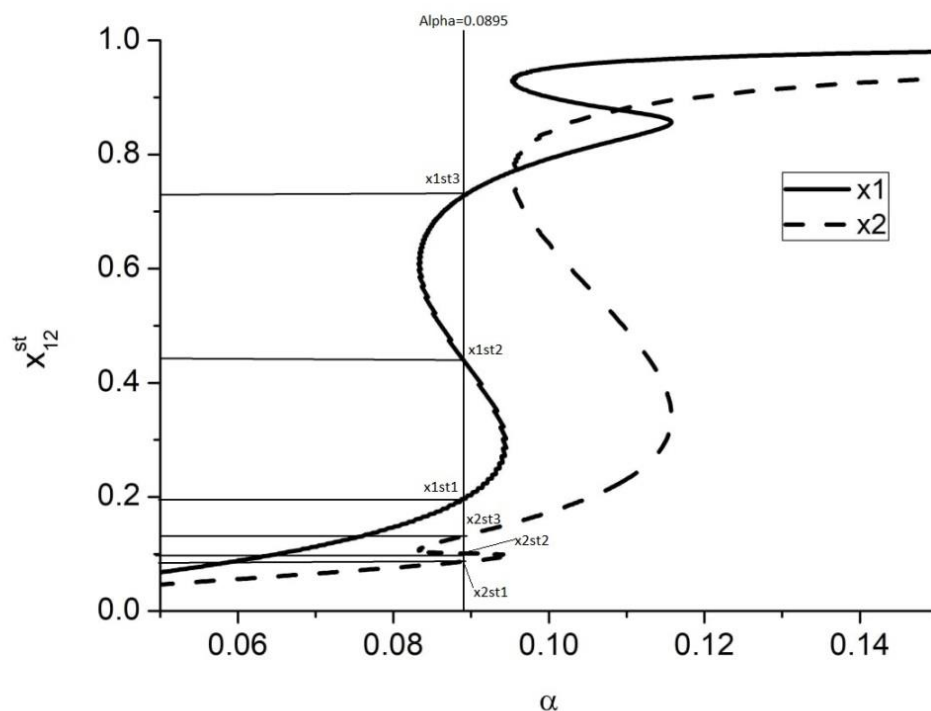


Рисунок 2.9 - Залежність стаціонарних станів від коефіцієнта адсорбції

Для фіксованих значень $D_1 = 0.05$ $D_2 = 0.01$ $\varepsilon = 2.5$ для кожного $a_1 = 0.0895$ $a_2 = 0.105$ знайдемо пари стаціонарних точок, використовуючи кінцеву систему рівнянь:

- $a_1 = 0.0895$
 $x_1^{st1} = 0.201$ $x_2^{st1} = 0.087$
 $x_1^{st2} = 0.431$ $x_2^{st2} = 0.101$
 $x_1^{st3} = 0.732$ $x_2^{st3} = 0.133$

- $a_2 = 0.105$
 $x_1^{st1} = 0.812$ $x_2^{st1} = 0.197$
 $x_1^{st2} = 0.886$ $x_2^{st2} = 0.564$
 $x_1^{st3} = 0.958$ $x_2^{st3} = 0.86$

Таким чином при різних значеннях параметрів системи існує три стаціонарні стани. Проведемо аналіз на стійкість даних точок:

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1$$

$$\frac{dx_2}{dt} = f_2$$

Диференціюємо кожне рівняння по відносно кожної концентрації:

$$\frac{df_1}{dx_1} = 2 \exp(-2\epsilon x_1) \epsilon x_1 - \exp(-2\epsilon x_1) - 2 \exp(-2\epsilon x_1) x_2 \epsilon x_1$$

$$+ x_2 \exp(-2\epsilon x_1) - a(1 - x_2) - D_1 x_2 - D_2(1 - x_2)$$

$$\frac{df_1}{dx_2} = -a(1 - x_1) + x_1 \exp(-2\epsilon x_1) + D_1(1 - x_1) + D_2 x_1$$

$$\frac{df_2}{dx_1} = 2x_2^2 \epsilon \exp(-2\epsilon x_1 x_2) + D_1 x_2 + D_2(1 - x_2)$$

$$\frac{df_2}{dx_2} = -a - \exp(-2\epsilon x_1 x_2) + 2x_2 \exp(-2\epsilon x_1 x_2) \epsilon x_1 - D_1(1 - x_1) - D_2 x_1$$

Будуємо матрицю Якобі:

$$\begin{vmatrix} \frac{df_1}{dx_1} - \lambda & \frac{df_1}{dx_2} \\ \frac{df_2}{dx_1} & \frac{df_2}{dx_2} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$D = \left(\frac{df_1}{dx_1} - \frac{df_2}{dx_2} \right)^2 + 4 \frac{df_2}{dx_1} \frac{df_1}{dx_2};$$

$$\lambda_{1/2} = \frac{\frac{df_1}{dx_1} + \frac{df_2}{dx_2} \pm \sqrt{D}}{2};$$

Використовуючи Matlab проведемо розрахунки:

- $x_1^{st1} = 0.201$ $x_2^{st1} = 0.087$

$$\lambda_1 = -0.0911 ; \lambda_2 = -0.9700$$

$\lambda_1, \lambda_2 < 0$ - стійкий вузол

- $x_1^{st1} = 0.201 \quad x_2^{st1} = 0.087$

$$\lambda_1 = 0.0338 ; \lambda_2 = -1.0802$$

$\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$ – точка спокою не стійка, сідло

- $x_1^{st3} = 0.732 \quad x_2^{st3} = 0.133$

$$\lambda_1 = -0.0308 ; \lambda_2 = -0.4384$$

$\lambda_1, \lambda_2 < 0$ - стійкий вузол

- $x_1^{st1} = 0.812 \quad x_2^{st1} = 0.197$

$$\lambda_1 = -0.0377 ; \lambda_2 = -0.2067$$

$\lambda_1, \lambda_2 < 0$ – стійкий вузол

- $x_1^{st2} = 0.886 \quad x_2^{st2} = 0.564$

$$\lambda_1 = 0.0440 ; \lambda_2 = -0.0787$$

$\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$ – точка спокою не стійка, сідло

- $x_1^{st3} = 0.958 \quad x_2^{st3} = 0.86$

$$\lambda_1 = -0.0116 ; \lambda_2 = -0.0927$$

$\lambda_1, \lambda_2 < 0$ – стійкий вузол

Отримані результати демонструють, що існує два стійких і один не стійкий стани. Таким чином, обираючи початкове значення адсорбату

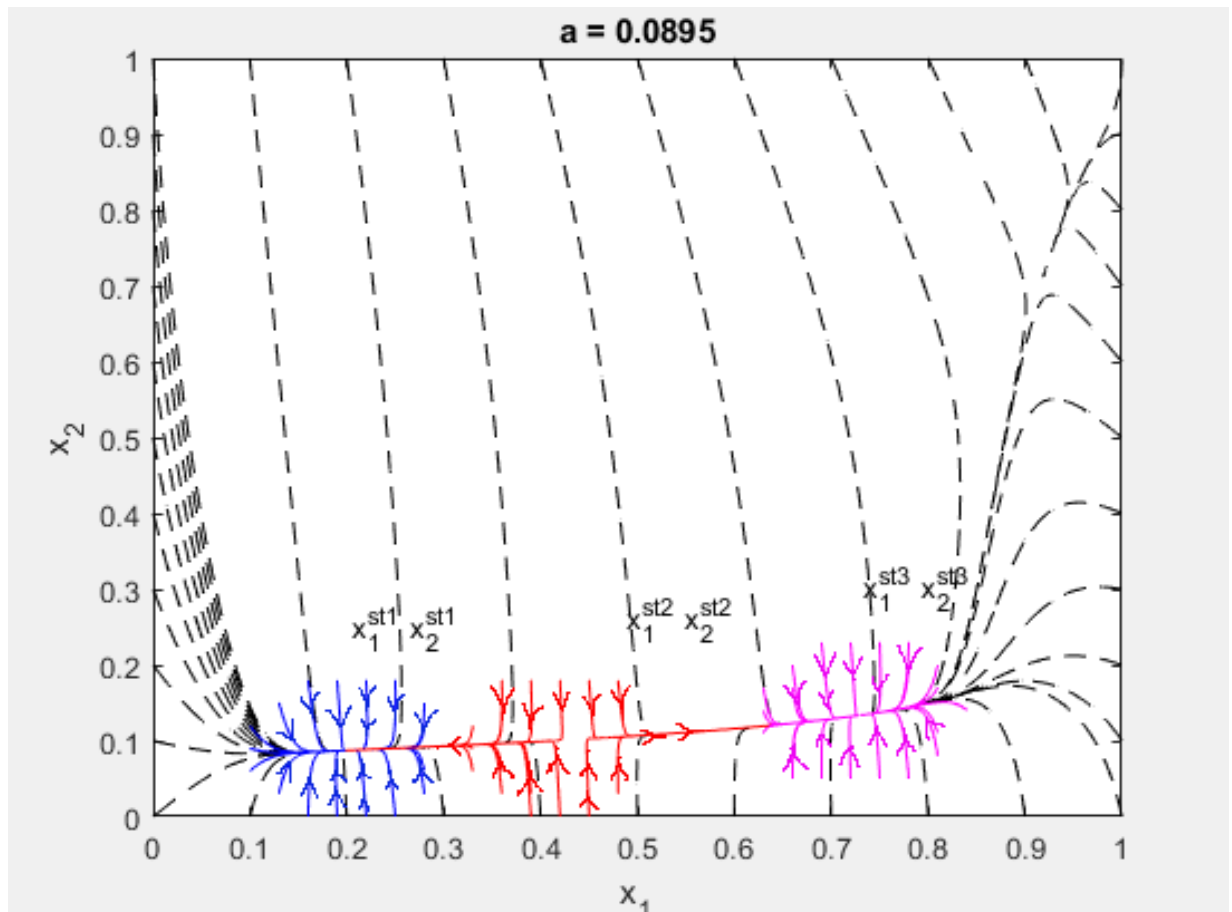


Рисунок 2.10 – Еволюція концентрації адсорбату на першому та другому шарі при заданих початкових параметрах

система прямує до одного з двох стійких стаціонарних станів. На рисунку 2.10 та 2.11 зображені саме околиці точок відповідних точок при заданих початкових параметрах на фоні загального фазового портрету. Синім кольором та фіолетовим зображується стійкі точки, червоним – не стійкі.

При дуже малих та відносно високих значеннях адсорбції концентрація на другому шарі збігається до малих значень, але при високих значеннях концентрації на першому шарі, різко змінює тенденцію до більш високого скупчення адатомів. Самі стаціонарні стани знаходяться при малій концентрації на другому шарі й рівномірній на першому (рис. 2.10). При висикх значеннях адсорбції стани зміщуються до більшої концентрації на першому шарі й рівномірній на другому (рис.2.11).

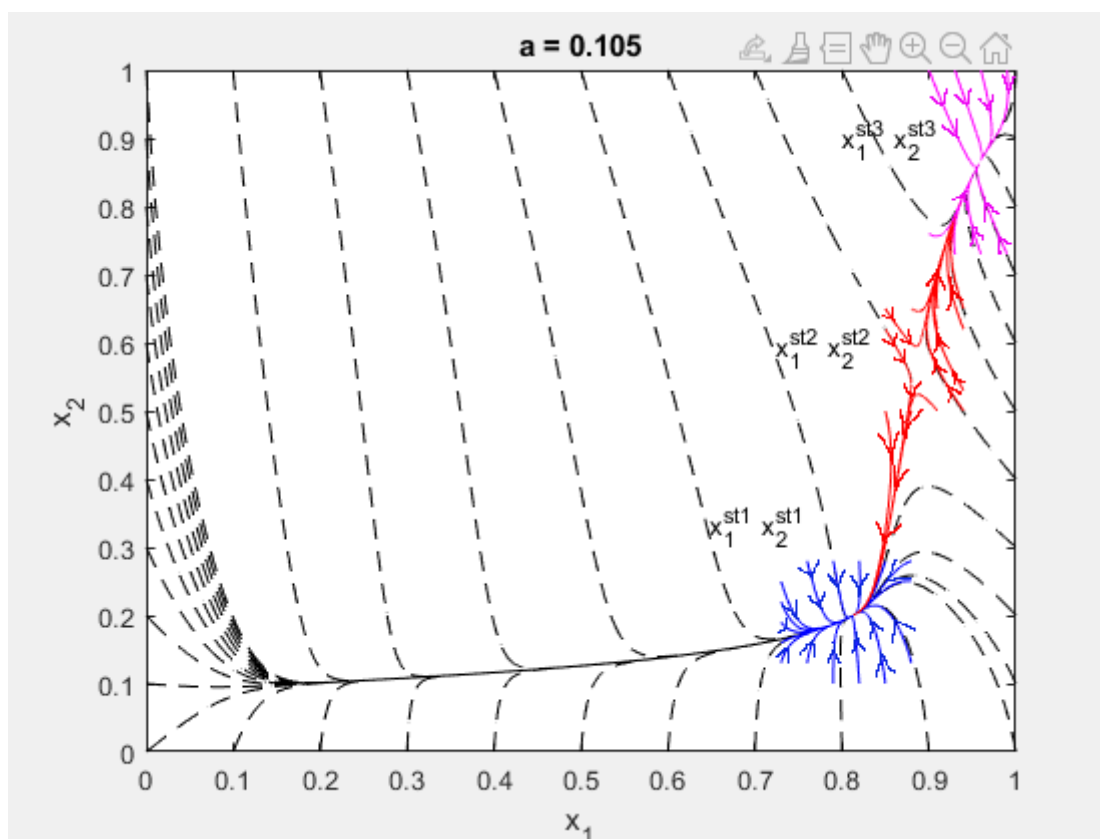


Рисунок 2.11 – Еволюція концентрації адсорбату на першому та другому шарах при заданих початкових параметрах

ВИСНОВКИ

1. Побудована математична модель концентрації адсорбату у двошаровій системі з урахуванням анізотропії вертикальної дифузії.

2. Виявлено вплив коефіцієнта адсорбції та коефіцієнтів дифузії адатомів між шарами на стаціонарне значення концентрації адсорбату на кожному шарі двошарової моделі. Показано можливість реалізації каскадів переходів першого роду газ-конденсат.

3. Отримано відповідні біфуркаційні діаграми та проаналізовано еволюцію системи в рамках методу фазової площини.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] J.E.Green, J.Vac.Sci. Technol. A, 35, 05C204 (2017).
- [2] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: <https://futurenow.com.ua/shhomozhut-nanotekhnologiyi-10-sposobiv-zastosuvannya/>
- [3] Моделирование самоорганизации адсорбата при конденсации та епітаксії : монографія / А. В. Дворниченко, В. О. Харченко, Д. О. Харченко. – Суми : Сумський державний університет, 2020. – 287 с.
- [4] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: https://studref.com/437038/matematika_himiya_fizik/adsorbtsiya_gaza_tverdoy_poverhnostyu
- [5] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: https://stud.com.ua/138585/prirodoznavstvo/kilkisni_harakteristiki_adsorbtsiyi
- [6] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: https://esu.com.ua/search_articles.php?id=42692
- [7] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: <https://www.pharmencyclopedia.com.ua/article/8936/adsorbtsiya>
- [8] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: <http://vseslova.com.ua/word/%D0%90%D0%B4%D1%81%D0%BE%D1%80%D0%B1%D1%86%D1%96%D1%8F-1506u>
- [9] Адсорбция газа твердой поверхностью [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані. – Режим доступу: https://studopedia.com.ua/1_179443_adsorbtsiya--yiyi-vidi.html

- [10] A. Patrykiejew, S. Sokolowski та К. Binder, Surf. наук. Відп. 37, 207-344 (2000).
- [11] Дж. П. Кулон, у фазових переходах у поверхневих плівках 2, Х. Тауб, Г. Торзо, Х. Дж. Лаутерта С. С. Фейн молодший (ред.) (Plenum P., N.Y., 1991).
- [12] A. Patrykiejew, D. P. Landau та К. Binder, Surf. наук. 238, 317 (1990).
- [13] В. О. Харченко, Д. О. Харченко, С. В. Кохан, В. В. Яновський* , А. В. Дворниченко**, Формування нанорозмірних структур адсорбату у процесах конденсації з газової фази, 2016, т. 14, № 1
- [14] S. Brunauer, P.H. Emmet and E. Teller, J. Am. хім. соц. 60 309 (1938).
J.P. Bucher, E. Hahn, P. Fernandez, C. Massobrio, K. Kern, Europhys. Lett., 27, 473 (1994)
- [15] Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А. и др. Введение в физику поверхности / Под ред. В. И. Сергиенко. — М.: Наука, 2006. — 490 с.
- [16] Benning L. Nucleation, Growth, and Aggregation of Mineral Phases: Mechanisms and Kinetic Controls. In: Brantley S., Kubicki J., White A. (eds) Kinetics of Water-Rock Interaction. / L. Benning, G. Waychunas // Springer: New York. – 2008.
- [17] Г. Хакен, Синергетика (Мир, Москва, 1980).
- [18] D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, Phys. Scr., 83, 045802 (2011)
- [19] D. Walgraef, Int. J. Quant. Chem. 98, 248 (2004)
- [20] Y. Mishin, D. Farkas, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B 59, 3393 (1999)
- [21] M. Hildebrand, A.S. Mikhailov, G. Ertl, Phys. Rev. Lett. 81, 2602 (1998)
- [22] K. Pohl, M.C. Bartelt, J. de la Figuera, et. al., Nature 397, 238 (1999)
- [23] Y.W. Mo, B.S. Swartzentruber, R. Kariotis, M.B. Webb, M.G. Lagally, Phys. Rev. Lett., 63, 2393 (1989)

[24] А. В. Дворниченко , В. О. Харченко , Дослідження процесів формування багаточарових анізотропних нано-розмірних структур адсорбату при конденсації та епітаксiальному рості, 2018. —52 с.

ДОДАТОК А

Основні функції

```

function [ans] = X1(a,x2,E,D1,D2)
    A = x2^2 * (D2 - D1) + x2*(D1 - 2*D2) + D2 ;
    B = x2^2 * (a + D1 - exp(x2) * (a + D2 - D1)) - x2 * (2*a + D1
- exp(x2) * (a + D2)) + a;
    C = -(a - a*x2 + D1*x2) * x2 * exp(x2) ;
    D = B*B-4*A*C;
    ans = (-B + sqrt(D))/(2*A);
end

function [ans] = X2(a,x1,E,D1,D2)
    ans = (a*x1 + x1*exp(-2*E*x1) + D2*x1 - a) / (-a + a*x1 +
x1*exp(-2*E*x1) + D1 - D1*x1 + D2*x1);
end

function [ans] = f1(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = a*(1-x1)*(1-x2) - x1*(1-x2)*exp(-2*E*x1) + D1*x2*(1-x1)
- D2*x1*(1-x2);
end

function [ans] = f2(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = a*(1-x2) - x2*exp(-2*E*x1*x2) - D1*x2*(1-x1) + D2*x1*(1-
x2)
end

function [ans] = df1x1(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = 2*E*x1*exp(-2*E*x1) - exp(-2*E*x1) - 2*exp(-
2*E*x1)*x2*E*x1 + x2*exp(-2*E*x1) - a*(1-x2) - D1*x2 - D2*(1-x2);
end

function [ans] = df1x2(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = - a*(1-x1) + x1*exp(-2*E*x1) + D1*(1-x1) + D2*x1;
end

function [ans] = df2x1(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = 2*x2^2*E*exp(-2*E*x1*x2) + D1*x2 + D2*(1-x2);
end

```

```

function [ans] = df2x2(a,x1,x2,E,D1,D2)
    ans = - a - exp(-2*E*x1*x2) + 2*x2*exp(-2*E*x1*x2)*E*x1 -
D1*(1-x1) - D2*x1;
end

```

```

function [ans] = L1(a,x1,x2,E,D1,D2)
    D = (df1x1(a,x1,x2,E,D1,D2) - df2x2(a,x1,x2,E,D1,D2))^2 +
4*(df2x1(a,x1,x2,E,D1,D2)*df1x2(a,x1,x2,E,D1,D2));
    ans = ((df1x1(a,x1,x2,E,D1,D2) + df2x2(a,x1,x2,E,D1,D2)) +
sqrt(D))/2;
end

```

```

function [ans] = L2(a,x1,x2,E,D1,D2)
    D = (df1x1(a,x1,x2,E,D1,D2) - df2x2(a,x1,x2,E,D1,D2))^2 +
4*(df2x1(a,x1,x2,E,D1,D2)*df1x2(a,x1,x2,E,D1,D2));
    ans = ((df1x1(a,x1,x2,E,D1,D2) + df2x2(a,x1,x2,E,D1,D2)) -
sqrt(D))/2; end

```

ДОДАТОК Б

Побудова залежностей концентрації від інших показників

figure

```

x1 = 0 : 0.1 : 1;
x2 = 0 : 0.1 : 1;
D1 = 0.1;
D2 = 0.1;
E=2.5;
a = 0 : 0.025 : 0.25;
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,D1,D2);
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D1,D2);
    plot (a(i),x1(i),'k');
    plot (a(i),x2(i),'r');
    xlabel('a');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    legend('-','E=2.0','--','E=2.5');
    gtext('x^{st}_{1}','x^{st}_{2}');
    hold on;
    axis ([0 0.25 0 1]);
    i = i +1;
end

E = 2.0;
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,D1,D2);
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D1,D2);
    plot (a(i),x1(i),'-k');
    plot (a(i),x2(i),'-r');
    xlabel('a');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    gtext('x^{st}_{1}','x^{st}_{2}');

```

```

        gtext('a^{I}_{1}','a^{I}_{2}');
        hold on;
        axis ([0 0.25 0 1]);
        i = i +1;
end

figure

D = 0.01;
a = 0 : 0.015 : 0.15
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,D,D);
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D,D);
    plot (a(i),x1(i),'k');
    plot (a(i),x2(i),'r');
    xlabel('a');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    legend('-', 'E=0.01', '--', 'E=0.0');
    gtext('x^{st}_{1}','x^{st}_{2}');
    hold on;
    axis ([0 0.25 0 1]);
    i = i +1;
end

D = 0.0;
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,D,D);
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D,D);
    plot (a(i),x1(i),'-k');
    plot (a(i),x2(i),'-r');
    xlabel('a');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    gtext('x^{st}_{1}','x^{st}_{2}');
    gtext('a^{II}_{1}','a^{II}_{2}');

```

```

        gtext('a^{I}_{1}','a^{I}_{2}');
        hold on;
        axis ([0 0.15 0 1]);
        i = i +1;
    end

figure

Dd = [ 0.0 0.01 0.03 0.1 1.0];
a = 0 : 0.03 : 0.30;
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,Dd(1),Dd(1));
    plot (a(i),x1(i),'-k');
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,Dd(2),Dd(2));
    plot (a(i),x1(i),'--r');
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,Dd(3),Dd(3));
    plot (a(i),x1(i),'--y');
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,Dd(4),Dd(4));
    plot (a(i),x1(i),'--b');
    x1(i) = X1(a(i),x2(i),E,Dd(5),Dd(5));
    plot (a(i),x1(i),'--g');
    xlabel('a');
    ylabel('x^{st}_{1}');
    legend('-', 'D=0.0', '--', 'D=0.01', '--', 'D=0.03', '--',
', 'D=0.1', '--', 'D=1.0');
    hold on;
    axis ([0 0.30 0 1]);
    i = i +1;
end

figure

for i = 0 : 1 : 10
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,Dd(1),Dd(1));

```

```

plot (a(i),x2(i),'-k');
x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,Dd(2),Dd(2));
plot (a(i),x2(i),'--r');
x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,Dd(3),Dd(3));
plot (a(i),x2(i),'--y');
x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,Dd(4),Dd(4));
plot (a(i),x2(i),'--b');
x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,Dd(5),Dd(5));
plot (a(i),x2(i),'--g');
xlabel('a');
ylabel('x^{st}_{2}');
legend('-', 'D=0.0', '--', 'D=0.01', '--', 'D=0.03', '--
', 'D=0.1', '--', 'D=1.0');
hold on;
axis ([0 0.30 0 1]);
i = i +1;

end

figure

D = 1 : 0.1: 1;
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x1(i),E,D(i),D(i));
    plot (a(i),x1(i),'-k');
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D(i),D(i));
    plot (a(i),x2(i),'--r');
    xlabel('D');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    legend('-', 'x^{st}_{1}', '--', 'x^{st}_{2}');
    hold on;
    axis ([0 1 0 1]);
    i = i +1;

end

```

figure

```
for i = 0 : 1 : 10
    x1(i) = X1(a(i),x1(i),E,D(i),D(i));
    plot (a(i),x1(i),'-k');
    x2(i) = X2(a(i),x1(i),E,D(i),D(i));
    plot (a(i),x2(i),'--r');
    xlabel('D');
    ylabel('x^{st}_{12}');
    legend('-', 'x^{st}_{1}', '--', 'x^{st}_{2}');
    hold on;
    axis ([0 1 0 1]);
    i = i +1;
end
```

ДОДАТОК В

Знаходження λ для пар стаціонарних точок

```

a1 = 0.0895;
a2 = 0.105;
D1 = 0.05;
D2 = 0.01;
E = 2.5;
dt = 0.1;
% a1
X1st1 = X1(a1,x2,E,D1,D2);
X2st1 = X2(a1,x1,E,D1,D2);

X1st2 = X1(a1,x2,E,D1,D2);
X2st2 = X2(a1,x1,E,D1,D2);

X1st3 = X1(a1,x2,E,D1,D2);
X2st3 = X2(a1,x1,E,D1,D2);

% a2
X1st1 = X1(a2,x2,E,D1,D2);
X2st1 = X2(a2,x1,E,D1,D2);

X1st2 = X1(a2,x2,E,D1,D2);
X2st2 = X2(a2,x1,E,D1,D2);

X1st3 = X1(a2,x2,E,D1,D2)
X2st3 = X2(a2,x1,E,D1,D2)

Xa1 = [ 0.201 0.087 ; 0.431 0.010 ; 0.732 0.133];
Xa2 = [ 0.812 0.197 ; 0.886 0.564 ; 0.958 0.869];
%-----
a = a1;
for i = 1 : 3

```



```
x1 = Xa1(i,1);  
x2 = Xa1(i,2);  
L1(a,x1,x2,E,D1,D2);  
L2(a,x1,x2,E,D1,D2);  
end  
for i = 1 : 3  
    x1 = Xa2(i,1);  
    x2 = Xa2(i,2);  
    L11(a,x1,x2,E,D1,D2);  
    L22(a,x1,x2,E,D1,D2);  
end
```

ДОДАТОК Г

Побудова фазових портретів стаціонарних точок

```

figure
% all phase
for x1 = 0 : 0.1 : 1
    for x2 = 0 : 0.1 : 1
        i = 1;
        if ( mod(x1(i),1)*mod(x2(i),1) == 0 )
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
                x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
                i = i+1;
            end
        end
        plot(x1,x2,'--k');
        hold on
    end
end

% 1 dot
for x1 = 0.1 : 0.03 : 0.3
    for x2 = 0 : 0.03 : 0.2
        i = 1;
        if (sqrt( (0.201 - x1(i))^2 + (0.087 - x2(i))^2 ) <=
0.11 )
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
            end
        end
    end
end

```

```

        x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
        i = i+1;
    end
end
plot(x1,x2,'b');
hold on
end
end

% 2 dot
for x1 = 0.3 : 0.03 : 0.5
    for x2 = 0 : 0.03 : 0.2
        i = 1;
        if (sqrt( (0.431 - x1(i))^2 + (0.1 - x2(i))^2 ) <= 0.11
)
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
                x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
                i = i+1;
            end
        end
        plot(x1,x2,'r');
        hold on
    end
end

% 3 dot
for x1 = 0.6 : 0.03 : 0.85

```

```

for x2 = 0.05 : 0.03 : 0.25
    i = 1;
    if (sqrt( (0.732 - x1(i))^2 + (0.133 - x2(i))^2 ) <=
0.11 )
        for k = 0 : dt : 100
            x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
            x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
            i = i+1;
        end
    end
    plot(x1,x2,'m');
    hold on
end
end

axis ([0 1 0 1])
title('a = 0.0895')
xlabel('x^{}_1')
ylabel('x^{}_2')
gtext('x^{st1}_1 x^{st1}_2')
gtext('x^{st2}_1 x^{st2}_2')
gtext('x^{st3}_1 x^{st3}_2')

a = a2;
for i = 1 : 3
    x1 = Xa2(i,1);
    x2 = Xa2(i,2);
    L1(a,x1,x2,E,D1,D2);
    L2(a,x1,x2,E,D1,D2);
end

```

```

figure
%all phase
for x1 = 0 : 0.1 : 1
    for x2 = 0 : 0.1 : 1
        i = 1;
        if ( mod(x1(i),1)*mod(x2(i),1) == 0 )
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
                x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
                i = i+1;
            end
        end
        plot(x1,x2,'--k');
        hold on
    end
end
% 1 dot
for x1 = 0.7 : 0.03 : 0.9
    for x2 = 0.1 : 0.03 : 0.3
        i = 1;
        if (sqrt( (0.812 - x1(i))^2 + (0.197 - x2(i))^2 ) <=
0.11 )
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
                x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
                i = i+1;
            end
        end
    end
end

```

```

        plot(x1,x2,'b');
        hold on
    end
end

% 2 dot
for x1 = 0.85 : 0.03 : 0.95
    for x2 = 0.5 : 0.03 : 0.7
        i = 1;
        if (sqrt( (0.886 - x1(i))^2 + (0.564 - x2(i))^2 ) <=
0.11 )
            for k = 0 : dt : 100
                x1(i+1) = x1(i) + dt * (a*(1-x1(i))*(1-x2(i))
- x1(i)*(1-x2(i))*exp(-2*E*x1(i)) + D1*x2(i)*(1-x1(i)) - D2*x1(i)*(1-
x2(i)));
                x2(i+1) = x2(i) + dt * (a*(1-x2(i)) -
x2(i)*exp(-2*E*x1(i)*x2(i)) - D1*x2(i)*(1-x1(i)) + D2*x1(i)*(1-x2(i)));
                *(1-x2(i)));
            end
        end
    end
end

```