

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА БАКАЛАВРА

**Вплив пружних ефектів на динаміку росту наноструктурованих  
поверхонь**

Завідуючий випускною кафедрою

Коплик І.В.

Керівник роботи

А.В. Дворниченко

Виконавець

студент гр. ПМ-61

М.А. Васильченко

Затверджено на засіданні кафедри «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2020 р.,

протокол № \_\_\_\_\_

Суми - 2020

## РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 43 стор., 11 рис., 36 джерел, 6 додаток.

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

Метою даної роботи є дослідження процесів формування адсорбату на першому шарі поверхні тонких плівок при процесі адсорбції та десорбції. У цій роботі буде побудована математична модель конденсації на першому шарі багат шарової системи з урахуванням пружних ефектів, пов'язаних із взаємодією адсорбату та підкладки. Буде встановлено умови реалізації переходів першого роду в системі газ-конденсат. Буде проаналізовано еволюцію середньої концентрації адсорбату на першому шарі та виявлено умови формування відокремлених структур при конденсації.

В роботі будуть застосовані методи дослідження фазових переходів, методи лінійного аналізу на стійкість однорідних стаціонарних станів, методи аналізу на стійкість стаціонарних однорідних станів.

Всі висновки і кінцеві розрахунки знаходяться на останніх сторінках. Додаються додатки в яких міститься код програм для розрахунку і візуалізації даних.

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	4
1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ .....	7
2. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	8
2.1. Адсорбція та основні поняття .....	8
2.2. Тонкі плівки .....	9
3. МОДЕЛЬ РЕАКЦІЙНО – ДИФУЗІЙНОЇ СИСТЕМИ.....	13
3.1 Загальна модель.....	13
3.2 Дослідження стаціонарних станів однорідної системи на стійкість	18
3.3 Умови формування відокремлених структур при конденсації. ....	25
ВИСНОВКИ.....	31
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	32
ДОДАТОК А.....	35
ДОДАТОК Б .....	38
ДОДАТОК В.....	39
ДОДАТОК Г .....	41
ДОДАТОК Д.....	42
ДОДАТОК Е .....	43

## ВСТУП

Зараз все більше розвивається приладобудування, електронна техніка та суспільство, тому нанофізика набуває все більшого інтересу у сучасній науці впродовж останніх десятиліть. Наноструктуровані об'єкти знаходять своє використання в різноманітних галузях, таких як [1] комунікаційні пристрої, біомедицина, нанoeлектроніка, тощо. Така підвищена увага до нанорозмірних об'єктів зумовлена їх унікальними властивостями та функціональними здібностями, серед яких можна виділити гігантський магнітоопір, контрольована оптична емісія, висока ефективність фотоелектричних перетворень, наднизька теплопровідність, тощо. Такі властивості дозволяють використовувати такі матеріали в лазерах, пристроях пам'яті, оптичних та комунікаційних пристроях, в магніторезистивних датчиках, тощо.

Нині піднімається актуальне питання, з'ясування механізмів, що приводять до формування наноструктур на поверхнях, а також контролювання основних властивостей цих тонких плівок. Можна відмітити, що використання різних типів матеріалів, дає можливість вирощувати наноструктури з різними властивостями та розмірами. Формування наноструктурованих об'єктів часто спостерігається в тонкоплівкових системах, що робить їх предметом підвищеної уваги.

Використання тонких плівок є найпоширенішою методикою, яка використовується для посилення фізико-хімічних властивостей матеріалів майже в усіх галузях матеріалознавства. Наноструктуровані тонкі плівки за останні кілька десятиліть привертають до себе все більшу увагу завдяки їх частому використанню у сучасних мікро- та нанoeлектронних пристроях, в багатьох типах інженерних систем та широко використовуються для реалізації різноманітних функцій. Досягнуті розробки у технології тонких плівок сприяли широкому розвиненню мініатюризації електронних пристроїв. [1]. Пристрої, засновані на технології тонких плівок використовуються як

мікрофони у слухових апаратах, монітори артеріального тиску під час фізичних вправ, тонкоплівкові дзеркала в оптичних системах відображення та зонди для визначення ступеня стиглості плодів. Інші поширені приклади включають магнітні тонкі плівки для електронного зберігання даних; прозорі провідні оксидні та поглинальні шари в сонячних елементах; тонкоплівкові резистори та діелектрики.

Існує кілька методик, що дозволяють виготовляти тонкі плівки. Серед них можна виділити епітаксію і осадження з газової фази або зростаючої поверхні [2, 3]. При осадженні з газової фази залежно від умови осадження можуть виникати різні типи структур: періодичний масив островів вакансій [4], витягнуті острови адсорбованих напівпровідників [5, 6] та метали [7] та сферичні острови вакансій (нано-дірки) або острови адсорбат (нано-крапки) [8–12]. Прилади плазмоконденсату широко використовуються для отримання відокремленого сферичного адсорбата споруди на поверхні з невеликими лінійними розмірами [13, 14]. Під впливом електричного поля поблизу субстрат частина адатомів може десорбувати назад у плазму а після додаткової іонізації вони адсорбуються на верхній частині шари багат шарової зростаючої поверхні [15]. Ці процеси ведуть до зміщення вертикального руху адатомів між шари з переважним рухом від нижніх шарів у бік верхніх і визначає силу електричного поля сила анізотропії цих переходів.

З розвитком обчислювальної техніки чисельне моделювання слугує альтернативним методом вивчення динаміки складних систем та прогнозування їх поведінки в нерівноважні умови. У проблемах формування структури зазвичай йдеться про реакційно-дифузійні системи які відіграють важливу роль у вивченні родового просторово-часова поведінка нерівноважних систем. Ці моделі містять основні внески, пов'язані з місцевими динаміка (хімічні реакції типу народження та смерті) і масовий транспорт. Такий підхід дає можливість це зробити контролюючи динаміку самоорганізації ансамблю адатоми, морфологію зростаючої поверхні, форма

структури та лінійний розмір островів адсорбатів (вакансій). Раніше, використовуючи чисельне моделювання, ми показали що морфологія поверхні та лінійний розмір адсорбатних структур у багат шаровому плазмоконденсаті системи можна керувати силою електричного поля біля підкладки [16].

Відомо, що коливання можуть грати вирішальну роль в проблемах формування структури та самоорганізації, в загальній. Ефекти, викликані коливанням, вивчалися в різних класах проблем [17, 18]. Розглядаючи адсорбат утворення скупчень під час осадження, коливання зазвичай вважається незначно малим. Тим не менш, це було показано раніше, що коливання потоку бічного адсорбату при епітаксіальному рості призводять до утворення зразків с голкоподібна структура [19]. Під час адсорбції в стохастичній моделі газоконденсатних систем внутрішній шум, що задовольняє співвідношення коливання-дисипації, регулює фазу переходи між щільною та розведеною фазами та керує типом шаблонів поверхні [20].

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

1) Побудувати математичну модель конденсації на першому шарі багат шарової системи з урахуванням пружних ефектів, пов'язаних зі взаємодією адсорбату та підкладки.

2) Виявити умови реалізації переходів першого роду в системі газ-конденсат.

3) Проаналізувати еволюцію середньої концентрації адсорбату на першому шарі.

4) Виявити умови формування відокремлених структур при конденсації.

## 2. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

### 2.1. Адсорбція та основні поняття

Для початку ознайомився з основними поняттями про адсорбцію. У загальному випадку адсорбцією називається підвищення концентрації одного з компонентів фази у або на поверхні розділу фаз в порівнянні з концентрацією цього компонента в обсязі.

У разі адсорбції газу на твердій поверхні адсорбцію можна розуміти просто як «прилипання» молекул газу до поверхні. Тверде тіло, на якому відбувається адсорбція, називають адсорбентом; газ, який адсорбується, називають адсорбтивом, а адсорбовані молекули - адсорбатом. На рисунку 1 можна побачити візуально ці поняття [21].



Рисунок 1. – Зображення багат шарових структур адсорбату [22].

Адсорбція може бути фізичної або хімічної. Хімічну адсорбцію називають також хемосорбцією. (В англійській мові - chemisorption, а фізична адсорбція - physisorption) [23]. У випадку фізичної адсорбції молекули адсорбату утримуються на поверхні слабкими ван-дер-ваальсовими силами і залишаються незмінними [24]. У разі хемосорбції молекули адсорбату



реагують з поверхнею і утворюють з нею більш міцні зв'язки, часто ковалентні. При цьому молекули адсорбату можуть диссоціювати. Тоді адсорбція називається диссоціативною.

Фізична адсорбція універсальна, тобто вона відбувається на поверхні будь-якої твердої фази, так як міжмолекулярні взаємодії є у будь-яких молекул з будь-якими твердими поверхнями.

Залежність швидкості адсорбції від температури описується рівнянням Арреніуса - аналогічно гомогенним реакцій [25]. Енергія активації хемосорбції може бути дорівнює нулю (тоді адсорбція називається неактивованою) або більше нуля - в цьому випадку вона називається активованою. Однак експериментальне визначення енергії активації є важким завданням. Це пояснюється тим, що реакційна здатність адсорбенту (або каталізатора) сильно залежить від стану його поверхні.

## 2.2. Тонкі плівки

Тонкі плівки це шар будь-якого матеріале, який має товщину від одного атомного шару до декількох мікрометрів, а наноструктури відносяться до будь-якого матеріалу, що складається з нанорозмірних частинок [26]. Ці частинки стали частиною сучасних технологій і приладів, а саме застосовуються в мікроприладах або ж самі виступають в якості мініатюрних приладів.

Наноструктуровані тонкі плівки зазвичай класифікують за їх складом, морфологією та функціональністю. Їх можна поділити на шість груп (рис. 2.) Наприклад, такі плівки можна використовувати для покриття тонким шаром інструментів, широке використання у сонячних батареях, оптичне та декоративне покриття. Така технологія дозволяє використовувати невелику кількість матеріалу для покриття площі, яка використовується, замість використання великої кількості дорогокоштуючого матеріалу.



Рисунок 2. - Класифікація наноструктурованих тонких плівок

Для оптимізації властивостей наноструктурованих тонких плівок з метою їх застосування у сучасних нано-електронних приладах використовують різні методи їх виробництва. Загалом, тонкі плівки можна виготовити методами осадження зверху – вниз або знизу-вгору.

Методики зверху-вниз базуються на фізичних або хімічних процесах відшарування та використовуються для отримання ламінарних наноструктур.

Методи синтезу тонких плівок знизу-вгору використовуються для отримання складних наноструктурованих тонких плівок і часто застосовуються для виготовлення тонких плівок із заданими хімічними та фізичними властивостями. Ці методи включають осадження з газової фази, електроосадження, корозію й безелектродне осадження та конденсація з газової фази. розглянемо метод конденсації з газової фази.

Конденсація - перехід речовини внаслідок його охолодження або стиснення з газоподібного стану в конденсована (рідке або тверде). Конденсація пара можливо тільки при температурах нижче критичної для даної речовини. Конденсація, як і зворотний їй процес - випаровування, відноситься до фазових переходів першого роду.

Відомі два режими поверхневої конденсації: плівковий і крапельний. Перший спостерігається при конденсації на змачуваній поверхні і характеризується утворенням суцільної плівки конденсату. На незмачуваних поверхнях конденсат утворюється у вигляді окремих крапель. При крапельної конденсації інтенсивність теплообміну значно вище, ніж при плівковій, так як суцільна плівка конденсату ускладнює теплообмін [27].

Також можна виділити хімічне осадження з газової фази [26]. Менш популярні методи, а саме сольгель синтез атомне осадження шару, осадження електронним пучком, розпилення, імпульсне лазерне осадження, піроліз з ультразвуковим спреєм, розпилювання напилення.

Пристрої, які займаються утворенням адсорбату називаються плазмоконденсатні пристрої. Такі системи працюють за принципом: іони, які були розпилені магнетроном, досягають поверхні і стають адатомами. Через наявність електричного поля поблизу підкладки, частина адатомів випаровується (десорбує), після цього знову іонізується і повертається назад на плівку або верхній шар. Така система характеризується переходами адатомів між сусідніми шарами під дією електричного поля. Тому за допомогою різних методів осадження можна отримувати різні види наноплівки, а саме: періодично розташовані наноотвори в матричній фазі (острови вакансій), [28], видовжені острови адсорбованих напівпровідників та металів [28] та сферичні вакансії острови (нано-отвори) або острови адсорбату (нано-точки) [20].

Можна виділити три основних режими зростання тонких плівок: а) режим тривимірного або острівкового росту, також відомий як режим Волмера-Вебера; б) 2-мірне або пошарове зростання, також відоме як режим Френка-ван-дер-Мерре; в) змішаний режим, що розпочинається 2-мірним зростанням, яке переходить в острівний режим після заповнення одного або декількох моношарів; цей режим також відомий як Режим Странського-Крастанова [29].

Числове моделювання служить альтернативним методом для детального вивчення динаміки формування структур в таких системах. Такі підходи можуть бути використані для прогнозування морфології зростаючої поверхні в різних умовах росту тонких плівок [28]. Для тестування теоретичних моделей росту тонких плівок виконуватися різні типи комп'ютерних симуляції. У задачах формування структур зазвичай розглядаються реакційно-дифузійні системи, які відіграють важливу роль у вивченні загальної просторово-часової поведінки нерівноважних систем. Ці моделі містять основні внески, пов'язані як з локальною динамікою (хімічні реакції типу народження та смерті) так і з масоперенесенням. Такий підхід дає можливість контролювати динаміку самоорганізації ансамблю адатомів, морфологію зростаючої поверхні, тип структур та лінійний розмір структур адсорбату або отворів (вакансії) в матричній фазі.

### 3. МОДЕЛЬ РЕАКЦІЙНО – ДИФУЗІЙНОЇ СИСТЕМИ

Математичне моделювання процесів росту наноструктурованих тонких плівок надає змогу детально проаналізувати динаміку цього процесу, встановити умови впливу основних факторів (тиску всередині камери, температури осадження, енергетичних характеристик та зовнішнього впливу) на морфологію зростаючої поверхні, тип та розмір поверхневих структур. Такий підхід дозволяє виробити певні рекомендації щодо корегування технологічних умов вирощування тонких плівок з заданими фізико-хімічними властивостями.

Реакційно-дифузійні системи в закритому середовищі та за відсутності зовнішніх сил з часом переходять у стан хімічної рівноваги, коли динамічні моди розподіляються рівномірно у просторі. Процес переходу системи до рівноважного стану характеризується експоненційним затуханням. У випадку складної системи, проявляється немонотонна поведінка, коли реалізується осциляційна динаміка основних мод системи або нетривіальна просторова залежність основних мод з реалізацією просторових структур.

#### 3.1 Загальна модель

Для опису еволюції концентрації адсорбату на підкладці у багато-шаровій системі при конденсації з газової фази розглянемо модель лише з однієї типом частинок. При проведенні досліджень на мезоскопічному рівні зручно розбити всю поверхню кожного шару на комірки лінійним розміром  $l$  та увести локальну концентрацію адсорбату в комірці як відношення кількості адсорбованих частинок у комірці поверхні до кількості доступних вузлів у кожній комірці. В такому разі концентрація адсорбату у кожній комірці на кожній рівні приймає значення  $x_n(\mathbf{r}, t) \in [0, 1]$ ,  $n=1..N$ ,  $N$  – загальна кількість шарів досліджуваної системи. Просторово-часова еволюція концентрації адсорбату може бути описана моделлю реакційно-дифузійна система у стандартній формі:

$$\partial_t x_n(r, t) = f(x_n) - \nabla \cdot J_n, \quad (1)$$

де  $f(x_n)$  – реакційна складова, визначається властивостями досліджуваної системи і, як правило, є нелінійною, оскільки константи швидкості залежать від температури та хімічної кінетики і  $J_n$  – дифузійна складова, що має універсальну структуру і, як правило, є лінійною до тих пір, поки система не буде у безпосередній близькості до точки фазового переходу. Дифузійна складова або потік пов'язана з масою транспортування; індекс  $n$  визначає номер шару багат шарової системи. Відповідно до стандартного підходу для опису процесів конденсації, реакційна складова  $f(x_n)$  включає процеси адсорбції (збільшення локальної концентрації адсорбату за рахунок того, що атом/іон досягає певного шару і стає адатомом), десорбції (зменшення локальної концентрації адсорбату коли адатом з ненульовою ймовірністю покидає шар, десорбуючи назад у газову фазу) та реакції переходу між сусідніми шарами (для багат шарового осадження). Слід враховувати, що такі переходи можуть бути як з верхнього шару на нижній так і з нижнього на верхній. Схематичне зображення процесу росту поверхні показано на рис. 3.

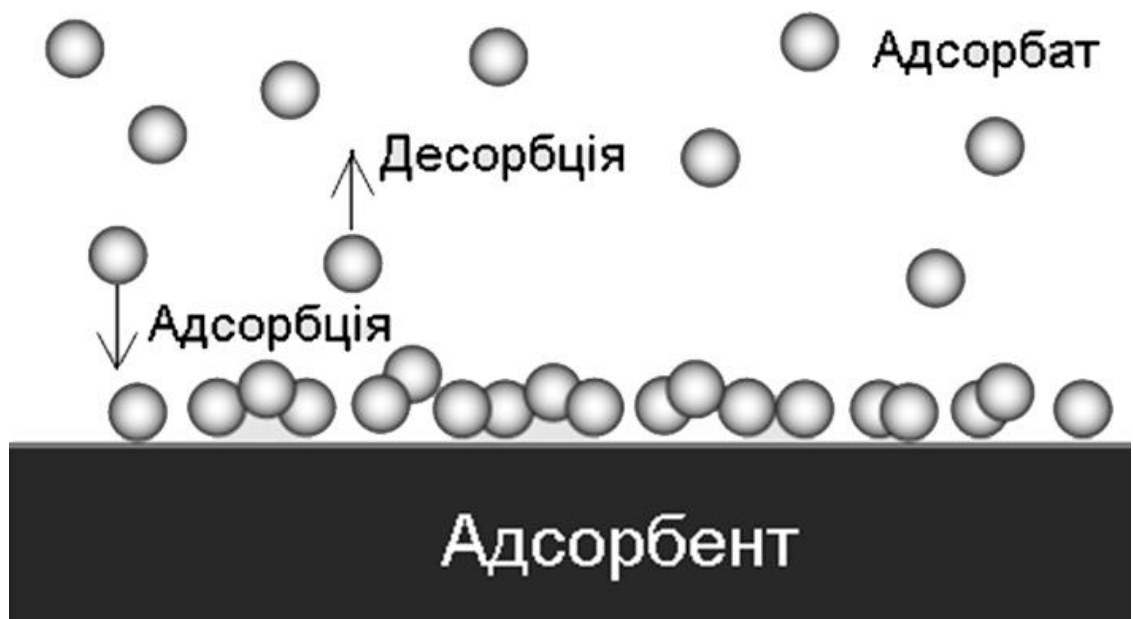


Рисунок 3. – Схематичне зображення процесів адсорбції.

У загальному випадку реакційну складову можна подати сумою

$$f(x_n) = f_{ads} + f_{des} + f_{trans} . \quad (2)$$

Процеси адсорбції описуються умовою  $k_a = \omega r \exp(-E_a / T)$  - коефіцієнт адсорбції, визначений через тиск  $P$  всередині камери, енергія активації для адсорбції  $E_a$ , температура  $T$ , вимірювана тут в енергетичних одиницях, і частота фактор  $\omega$ . Для цих процесів потрібні вільні ділянки на поточному шарі, вільні  $(1 - x_{n+1})$  ділянки на наступному шарі, а ненульова концентрація  $x_{n-1}$  на попередньому шарі служить субстратом для адсорбції на  $n$ -му шарі. Таким чином, процеси адсорбції описуються реакційною складовою:

$$f_{ads} = k_a x_{n-1} (1 - x_n) (1 - x_{n+1}), \quad (3)$$

Адсорбовані частинки можуть десорбувати з шару зі швидкістю  $k_d = k_d^0 \exp(U_n / T)$  визначений через коефіцієнт десорбції для невзаємодіючі частинки  $k = \omega r \exp(-E_d / T)$  та потенціал взаємодії  $U_n(r)$ ; тут  $E_d$  - енергія активації для десорбції. Шкала життя адатомів  $\tau_d$  залежна до  $k_d^0$  як  $\tau_d = [k_d^0]^{-1}$ . Розглядаючи процеси десорбції, умова десорбції досягає форми.

$$f_{des} = -k_d x_n x_{n-1} (1 - x_{n+1}) \exp(U_n / T). \quad (4)$$

Тут адамоти можуть переміщатися між собою з сусідніх шарів з вірогідністю руху з верхнього шару до нижнього та з нижнього до верхнього  $\omega_{\downarrow}$  і  $\omega_{\uparrow}$ , відповідно. У випадку  $\omega_{\downarrow} = \omega_{\uparrow}$  виходить стандартна вертикальна дифузія [30]. У загальному випадку, ці ймовірності можуть бути різними. Наприклад, в системах газ-конденсат, з низьким вакуумом під тиском газоподібна фаза викликає анізотропію у вертикальному русі з переважним рухом від верхніх шарів до низу ті, що ведуть до  $\omega_{\downarrow} / \omega_{\uparrow} < 1$  [20]. У плазмі конденсату систем електричне поле біля підкладки викликає протилежне рух з  $\omega_{\downarrow} / \omega_{\uparrow} > 1$  [15]. В останньому випадку  $\omega_{\uparrow} = \omega_{\downarrow} + \omega_E$ , де сила анізотропії  $\omega_E = |E| Z_e / T$  пропорційна силі електричного поля біля підкладки  $|E|$ ;  $Z$  - координаційне число, а  $e$  - заряд

електрона. Припускаючи, що передача можлива тільки на вільні майданчики для отриманих реакцій перенесення  $\omega_{\downarrow}(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n) + \omega_E(x_{n-1}(1 - k_n) - x_n(1 - x_{n+1}))$ , де перший член відповідає стандартній вертикалі дифузії, а друга стосується електричного поля індукований рух.

Загальний дифузійний потік на n-му шарі  $J_n$  включає частину вільної дифузії  $-D_{\leftrightarrow}\nabla x_n$  з коефіцієнтом бічної дифузії  $D_{\leftrightarrow}$  та дифузією спричиненою адсорбатом взаємодії з потенційним  $U_n(r)$  у наступній формі  $-D_{\leftrightarrow} / T\mu(x_n)\nabla U_n$ , де  $\mu(x_n) = x_n(1 - x_n)$  вказує що ця дифузія можлива лише на вільних ділянках. Дотримуючись [15, 19] потенціал взаємодії  $U_n(r)$  може бути визначений через потенціал взаємодії для двох частинок адсорбату, розділені відстанню  $r$  як  $U_n(r) = -x_{n-1}(r)\int U(r - r')x_n(r') dr'$  (припускаючи, що це взаємодія, опосередкована субстратом) з  $x_0 = 1$  як субстрат. У загальному випадку взаємодія Потенціал першого (нижнього) шару  $U_1$  повинен включати додатковий внесок  $U_1^{el} = \varepsilon_s < 0$ , що відповідає взаємодії між субстратом і адсорбованих частинок (приваблива взаємодія) [31,32]. Цей термін може бути важливим у деяких випадках, коли зв'язок між адатомами та підкладкою є сильним (наприклад, атоми *Сu*, нанесені на *Ti*, *Ta* або *Mo* субстрат) [32]. У такому випадку сильний зв'язок адатом-субстрат робить десорбцію незначною під час росту першого шару через визначення швидкості десорбції  $k_d$  через потенціал взаємодії. При цьому потік  $J_1^{el} \propto \nabla U_1^{el}$ , що відповідає цій взаємодії, дорівнює нулю Для достатньо невеликої решітки між плівкою і субстрат, еластичність та ефект стресу можуть бути наслідками знехтують (наприклад, при осаді атомів *Al* на *TiN* поверхнях невідповідність решітки становить близько 4%) [34]. У цій роботі будуть визначені формування структури на проміжному n-му шарі багат шарового система з  $n > 1$ , де неможлива пряма взаємодія між адсорбованими частинками і підкладкою. Ефективність та стресові ефекти, спричинені зв'язком між адатомами та субстратом, впливатимуть на розподіл адатомів на першому шарі. Конфігурація просторового адсорбату на будь-якому шарі число  $n > 1$



повторить конфігурацію на шар попередника (починаючи з першого шару). Тому далі, не втрачаючи загальності, ми нехтуємо еластичними ефектами. Дотримуючись [35,36] ми припускаємо що  $u(r)$  має симетричну форму, тобто  $\int r^{2m+1}u(r) dr = 0$ , де  $m = 1, \dots, \infty$ . Як просте наближення потенціалу взаємодії ми обираємо його як профіль Гаусса

$$u(r) = \frac{2\varepsilon}{\sqrt{4\pi r_0^2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4r_0^2}\right), \quad (5)$$

де  $\varepsilon$  енергія взаємодії і  $r_0$  - радіус взаємодії. Якщо припустити, що концентрація адсорбату  $x$  не змінюється суттєво в радіусі взаємодії розширюємо інтеграл

$$\int u(r - r')x_n(r') dr' \approx \int u(r - r') \sum_m \frac{(r-r')^m}{m!} \nabla^m x_n(r) dr'. \quad (6)$$

Підставляємо рівняння (5) в рівняння (6) до термінів четвертого замовлення отримує потенціал взаємодії у вигляді:

$$U_n(r) \approx -\varepsilon x_{n-1} (x_n + (1 + r_0^2 \nabla^2)^2 x_n)'. \quad (7)$$

Для визначення концентрації адсорбату для обох  $(n + 1)$ -го і  $(n - 1)$ -го шарів через один на  $n$ -му шарі ми використовуємо спосіб, запропонований у [22]. Розглядаючи режим росту островів адсорбату ми можемо визначити адсорбат концентрація на будь-якому  $n$ -му шарі як  $x_n = S_n / S_0$ , де  $S_0 \propto L_0^2$ - це поверхня підкладки з лінійними розмірами  $L_0$  і  $S_n = \sum_i S_{ni} = \frac{\pi}{4} \sum_i L_{ni}^2$ - площа, покрита адсорбатом на  $n$ -му шарі; сума береться за всі структури (див. рис.1). Припускаючи  $S_n \propto r_n^2$  і те що концентрація адсорбату зменшується з числом шарів за принципом мінімізації поверхневої енергії лінійний розмір  $r_n$  багат шарової пірамідально-подібної адсорбатної структури зменшується з числом шарів  $n$  як  $r_n = r_1 - (n - 1)d$ , де  $d$  - ширина тераси пірамідальної структури (див схему рис.1.). У такому випадку для концентрації адсорбату на

виходить  $n$ -й шар:  $x_n = (S_1 / S_0)(1 - (n - 1)d / r_1)^2$ . Отже, концентрація адсорбату на  $(n - 1)$ -й та наступному  $(n + 1)$ -й шарі маємо:

$$x_{n\pm 1} = \frac{S_1}{S_0} \left( \left( 1 - (n - 1) \frac{d}{r_1} \right) \mp \left( \frac{d}{r_1} \right) \right)^2 = \quad (8)$$

$$\frac{S_1}{S_0} \left( 1 - (n - 1) \frac{d}{r_1} \right)^2 \mp 2 \frac{d S_1}{r_1 S_0} \left( 1 - (n - 1) \frac{d}{r_1} \right) + \frac{S_1}{S_0} \left( \frac{d}{r_1} \right)^2.$$

Після простих алгебраїчних перетворень отримаємо:

$$x_{n\pm 1} = (\sqrt{x_n} \mp \beta / 2)^2, \quad (9)$$

де  $\beta = 2d / L_0 < 1$ .

Використовуючи відносини (9), реакційна частина  $f(x = x_n)$  набуває вигляду:

$$f(x) = \alpha(1 - x)v(x) - xv(x)e^{-2\varepsilon x(\sqrt{x} + \frac{1}{2}\beta)^2} \quad (10)$$

$$+ u\beta\sqrt{x}(1 - 2x) + \frac{1}{4}\beta^2(u + 2D),$$

де безрозмірні константи  $\varepsilon \equiv \epsilon / T$ ,  $\alpha \equiv k_a / k_d^0$ ,  $u = \omega_E / k_d^0$ ,  $D \equiv \omega_{\downarrow} / k_d^0$  та  $v(x) = \left( \sqrt{x} + \frac{1}{2}\beta \right)^2 \left[ 1 - \left( \sqrt{x} - \frac{1}{2}\beta \right)^2 \right]$ .

Загальний потік  $J$ :

$$J = -D(\nabla x - \varepsilon\gamma(x)\nabla(x + (1 + r_0^2\nabla^2)^2x)), \quad (11)$$

де  $\gamma(x) = \mu(x)(\sqrt{x} + \frac{1}{2}\beta)^2$

### 3.2 Дослідження стаціонарних станів однорідної системи на стійкість

Однією із важливих властивостей відкритих однорідних динамічних систем є реалізація в них стаціонарних станів, на відміну від встановлення термодинамічної рівноваги. У такому разі виникають питання щодо можливості існування однорідних стаціонарних станів та їх кількості;

стійкості стаціонарних станів в залежності від керуючих параметрів системи та можливості переходів між такими станами.

Для описання процесу конденсації із газової фази використовується рівняння поля концентрації адсорбату у стандартному вигляді (1),  $f(x)$  відповідає за квазіхімічні реакції та визначає процеси адсорбції або десорбції.

Для описання еволюції концентрації адсорбату на першому однорідному шарі використана формула (12):

$$\partial_t x_1 = f_{ads}(x_1, x_2) + f_{des}(x_1, x_2) + f_{tran}(x_1 \cdot x_2) \quad (12)$$

Основні значення:

- Адсорбція:  $f_{ads} = \alpha(1 - x_1)(1 - x_2)$
- Десорбція:  $f_{des} = -x_1(1 - x_2) \exp(-2\varepsilon_0 x_1 - \varepsilon_{el})$
- Перенесення:  $f_{tran} = D(x_2(1 - x_1) - x_2(1 - x_2)) = D(x_2 - x_1)$

Основні параметри:

- $\alpha$  - коефіцієнт адсорбції;
- $\varepsilon_0$  - енергія взаємодії адсорбат-адсорбат;
- $\varepsilon_{el}$  - еластичну енергію, викликану взаємодією між адсорбатом на першому шарі та підкладці;
- $D$  – дифузійний коефіцієнт для адсорбату між сусідніми шарами;

Також важливим параметром в подальшому буде утворення адсорбату на другому рівні, яке описується формулою:

$$x_2 = (\sqrt{x_1} - \beta)^2 \quad (13)$$

Отже, перепишемо основне рівняння (12) з використанням значень адсорбції, десорбції та перенесення, для  $x \equiv x_1$ , отримаємо:

$$R(x) = \alpha\mu(x)(1 - x) - x\mu(x) \exp(-\varepsilon_0(2x + \delta)) - D((1 - x) - \mu(x)), \quad (14)$$

де  $\mu(x) = 1 - (\sqrt{x} - \beta)^2$ ,  $\delta = \varepsilon_{el} / \varepsilon_0$  (відношення пружної енергії взаємодії адатом-підкладка до енергії взаємодії адатом-адатом).

З рівняння (14) отримаємо залежність стаціонарних однорідних станів від  $\delta$  при різних значеннях параметра  $\beta$ . Інші параметри приймаємо за:  $\alpha \in (0.0; 0.1)$ ,  $\varepsilon_0 = 4$ ,  $D = 0.1$ . з рис. 4 видно, що у границі  $\delta = 0$  при достатньо малих значеннях  $\beta$  реалізуються три стаціонарних стани (див. штриховану криву при  $\beta = 0.01$  рис. 4). Такий випадок відповідає системі з відсутністю пружних ефектів. Збільшення вкладу взаємодії адсорбат-підкладка приводить до реалізації фазового переходу першого роду. При підвищених значеннях параметра  $\beta$  спостерігається дві точки фазового переходу першого роду при малих та підвищених значеннях параметра  $\delta$ . При цьому, збільшення параметра  $\beta$  приводить до звуження інтервалу значень параметра  $\delta$ , коли реалізується бістабільний режим (рис.4). При великих значеннях параметра  $\beta$  в системі завжди реалізується єдиний стаціонарний стан не залежно від параметра  $\delta$ . При цьому, збільшення  $\delta$  приводить до монотонного зростання значення стаціонарної концентрації адсорбату.

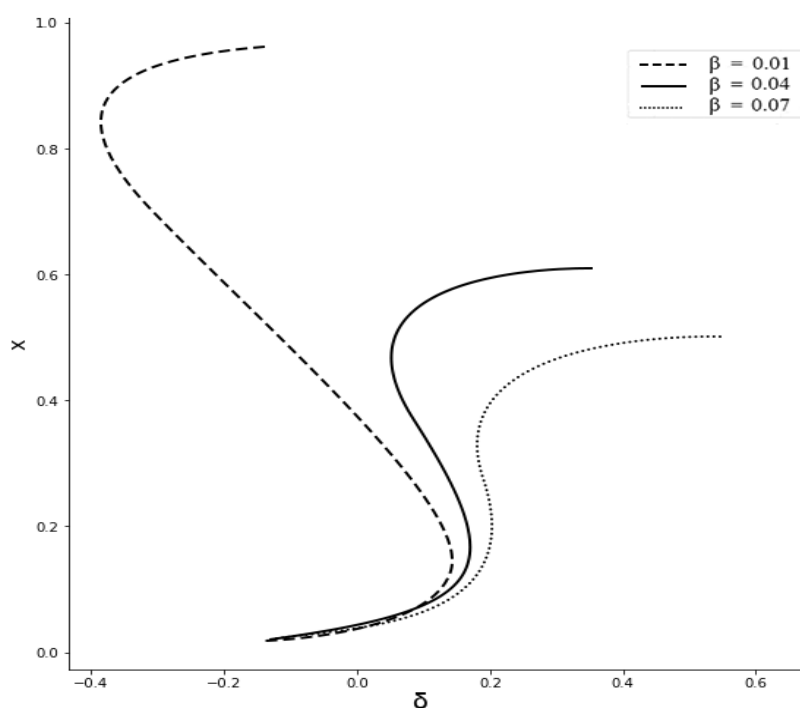


Рисунок 4. – Залежності стаціонарного значення концентрації адсорбату від відношення між енергією взаємодії адсорбат-підкладка та адсорбат-адсорбат при різних значеннях параметра  $\beta$  та  $\alpha = 0.03$ ,  $\varepsilon = 4$ .

Отримані залежності стаціонарних станів від параметрів системи дозволяють встановити вигляд фазової діаграми, що ілюструє область параметрів, коли в системі реалізується декілька стаціонарних станів (область бістабільності), що представлено на рис.4. Тут в області, обмеженій суцільними кривими система характеризується наявністю декількох стаціонарних станів. Поза обмеженої області можливим є лише один стаціонарний стан.

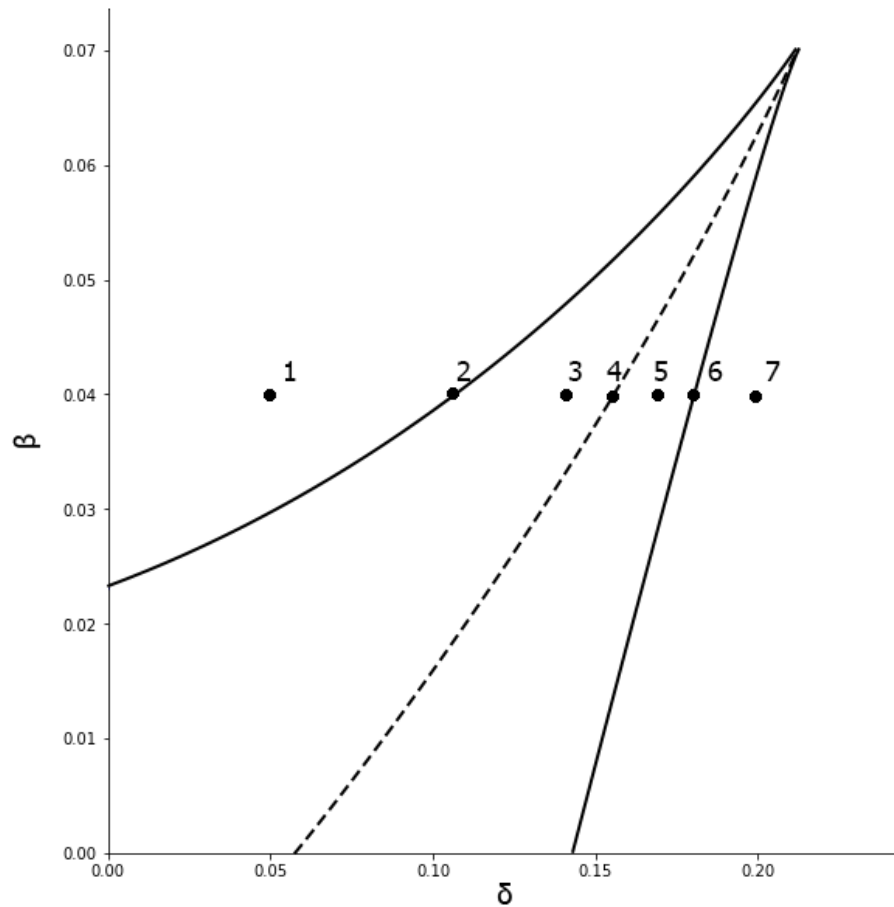


Рисунок 5. – Фазова діаграма реалізації бістабільного режиму при  $\alpha=0.03, \varepsilon_0=4, D=0.1$ .

На рис. 6 наведено вигляд ефективного потенціалу в точках 1-7 на рис.5, за формулою (15).

$$V(x) = -\int R(x) dx \quad (15)$$

В точках 1 та 7 потенціал характеризується наявністю одного мінімуму. При цьому збільшення коефіцієнту  $\beta$  приводить до зменшення значення стаціонарної концентрації адсорбату, що супроводжується зміщенням відповідного мінімуму потенціалу в бік малих значень  $x$ . Так, при фіксованих значеннях  $\beta$  та  $\delta$  (точка 1 на рис. 5) реалізується один стаціонарний стан, а відповідний потенціал характеризується наявністю одного мінімуму при підвищених значеннях концентрації адсорбату  $x$  (див. панель 1 на рис.5). Зменшення параметру  $\delta$  приводить до переходу в область бістабільності через перетинання суцільної кривої в точці 2 на рис. 5. В області 3 на рис.5 система характеризується трьома стаціонарними станами, а відповідний потенціал  $V(x)$  характеризується наявністю двох мінімумів та одного максимуму (див. панель 3 на рис.6). при цьому мінімуми потенціалу відповідають стійким стаціонарним станам, тоді як максимум характеризує нестійкий стаціонарний стан. Слід зазначити, що в точці 3 мінімум потенціалу при підвищених значеннях концентрації адсорбату є глибшим за інший мінімум. Останнє свідчить про те, що система із більшою ймовірністю буде знаходитись у щільній фазі ( підвищене значення концентрації адсорбату). Штрихова крива на рис.5 визначає критичні значення параметрів системи, коли ймовірність реалізації кожного стійкого стаціонарного стану є однаковою. Останнє супроводжується вирівнюванням мінімумів потенціалу за глибиною, як показано на панелі 4 рис.5. Фіксуючи значення параметра  $\delta$ , та збільшуючи значення параметра  $\beta$  відбуваються наступні трансформації. При переході з точки 4 в точку 5 на рис.5 мінімум потенціалу, що характеризується малими значеннями концентрації адсорбату стає глибшим (див. панель 5 на рис.6). Подальше збільшення  $\delta$  приводить до виродження стаціонарного стійкого стану з підвищеним значенням концентрації адсорбату (див. панель 6 на рис.6). При значеннях параметрів системи ззовні області бістабільності (точка 7 на рис.5) реалізується один стаціонарний стан з малою концентрацією

адсорбату, що характеризується наявністю одного потенціалу (див. панель 7 рис. 6.)

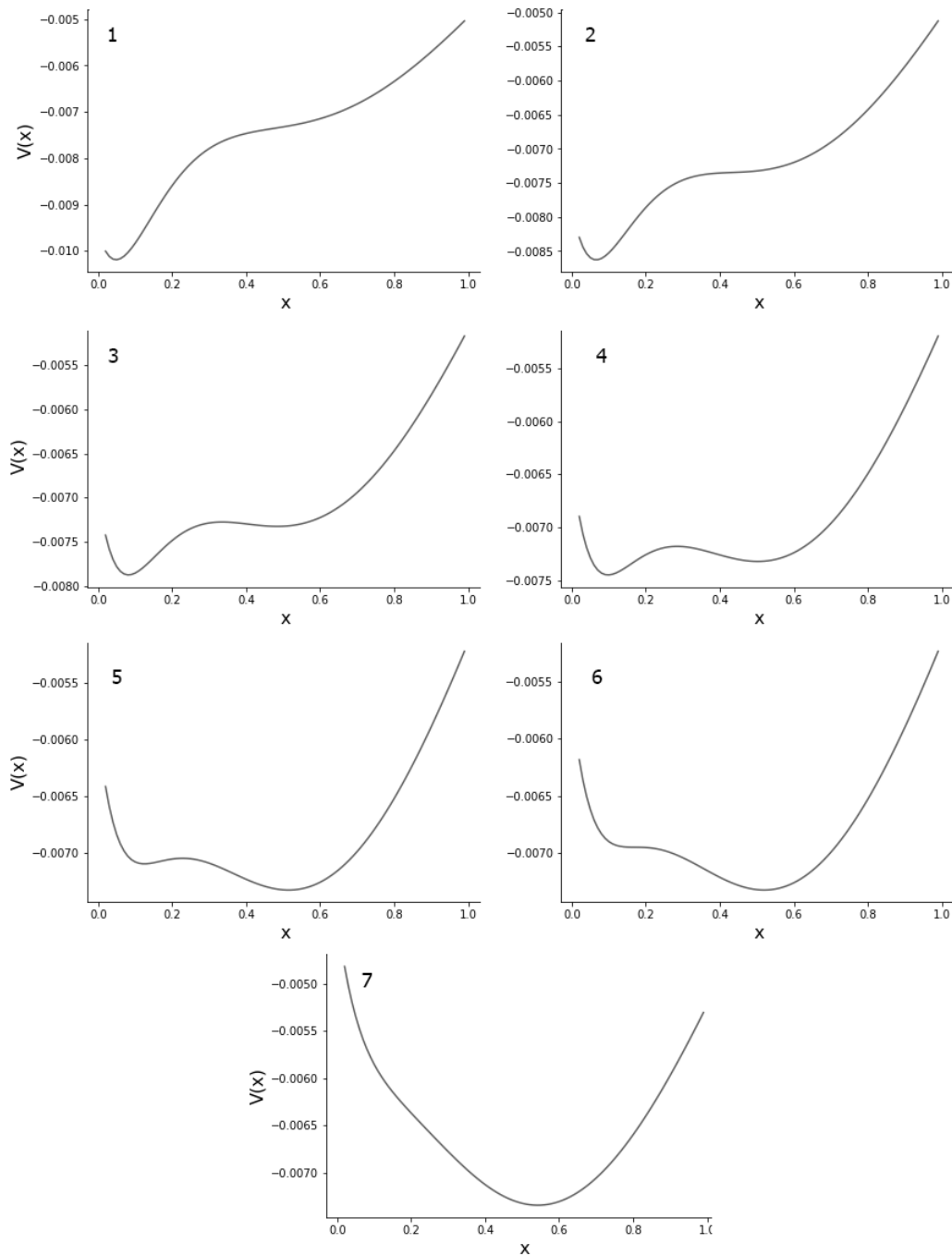


Рисунок 6. - Потенціали  $V(x)$  різних областей фазової діаграми рис. 5

Для візуалізації динаміки однорідної системи на рис.7 наведено фазовий портрет  $dx/dt(x)$  при різних значеннях параметрів системи. Так, при значеннях параметрів з області бістабільності між суцільними кривими на рис.5 фазова траєкторія перетинає ось абсцис тричі, що відповідає наявності

трьох стаціонарних станів (див. суцільну криву на рис.7). при цьому, фіксуючи початкове значення концентрації адсорбату система може перейти як в стаціонарний стан з малою концентрацією так і в стаціонарний стан з великою концентрацією. При значеннях параметрів системи ззовні області бістабільності на рис. 7 можлива реалізація лише одного стаціонарного стану з малою концентрацією адсорбату (штрих-пунктирна крива). Або великою концентрацією адсорбату (штрихова крива).

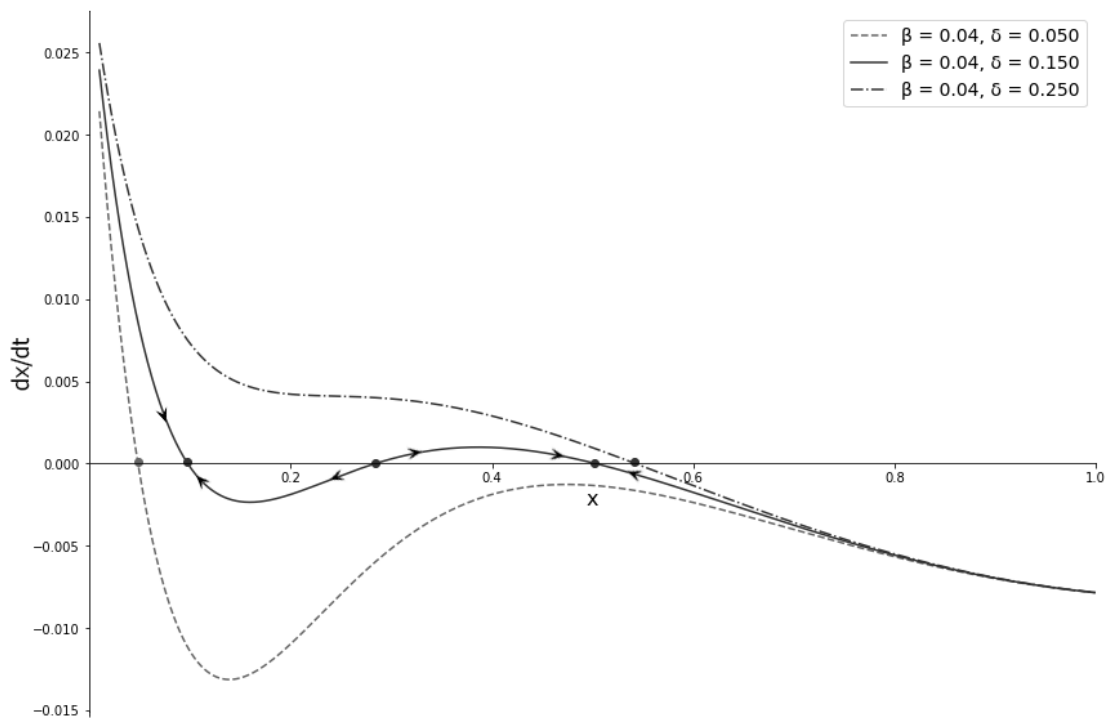


Рисунок 7. – графік для пошуку стаціонарних значень, для  $\alpha=0.03, \varepsilon_0=4, D=0.1$ .

Динаміку еволюції однорідної системи подано рис.8. тут для обраних значень параметрів системи в області бістабільності (між суцільними кривими на рис.5) реалізуються три стаціонарні стани: стійкий стан з малою концентрацією адсорбату ( $x=0.097$ ); стійкий стан з великою концентрацією адсорбату ( $x=0.502$ ) та нестійкий стан з ( $x=0.284$ ). таким чином, обираючи



початкове значення концентрації адсорбату система прямує до одного з двох стійких стаціонарних станів.

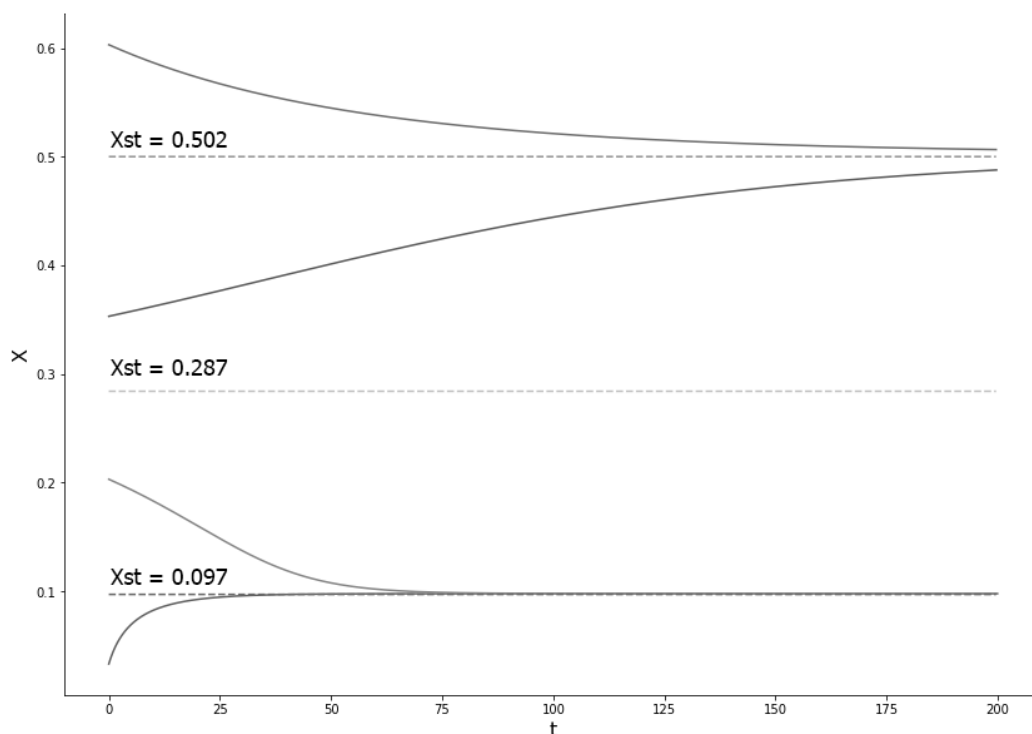


Рисунок 8. – Еволюція концентрації адсорбату  $x$  при значеннях параметрів з області бістабільності на рис. 5.

### 3.3 Умови формування відокремлених структур при конденсації.

Просторово-розподілені реакційно-дифузійні системи типу (16) за певних умов, що визначаються значеннями керуючих параметрів у якості розв'язків допускають реалізацію просторових структур. Типовим прикладом є формування відокремлених структур адсорбату на підкладці. Або реалізація відокремлених отворів в матриці адсорбату при осадження та конденсації. Для встановлення умов, коли такі розв'язки будуть стійкими впродовж еволюції системи, використовують лінійний аналіз стійкості стаціонарних однорідних станів на стійкість до неоднорідних збурень.

Для описання просторово розподіленої системи рівняння (1) приймає вигляд рівняння (16).

$$\frac{\partial x}{\partial t} = R(x) - D\nabla J, \quad (16)$$

$D$  – коефіцієнт дифузії;  $J$  – поверхневий потік,  $\nabla$  – оператор просторової похідної.

Поверхневий потік приймемо у вигляді:

$$J = -(\nabla x - \varepsilon\gamma(x)\nabla(x + (1 + r_0^2\nabla^2)^2x)), \quad (17)$$

де  $\gamma(x) = x(1 - x)$ .  $r_0$ - радіус взаємодії адсорбату [20].

В такому разі рівняння просторово-часової еволюції адсорбату набуває вигляду, де введено дифузійну довжину  $L_d = \sqrt{\frac{D}{k_d}}$ ,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = R(x) + L_d^2(\nabla^2 x - 2\varepsilon\gamma(x)\nabla^2 x - 2\varepsilon\gamma(x)r_0^2\nabla^4 x) \quad (18)$$

Для проведення аналізу стійкості стаціонарних однорідних станів до неоднорідних збурень з метою встановлення умов реалізації просторових структур розглянемо мале відхилення  $\delta x = x - x_{st}$  від стаціонарного значення  $x_{st}$  поля  $x(\mathbf{r}, t)$ , яке представляється у вигляді  $\delta x \propto e^{\lambda(k)t + ikr}$ , де  $k \in [0, 2\pi]$  - хвильове число, а  $\lambda(k)$  -- показник стійкості.

Тоді, похідна за часом

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial \delta x}{\partial t} = \lambda(k)e^{\lambda(k)t + ikr} = \lambda(k) \cdot \delta x. \quad (19)$$

Просторова похідна

$$\nabla \delta x(\mathbf{r}, t) = \partial_r \delta x(\mathbf{r}, t) = ik\delta x, \quad (20)$$

Розкладаючи реакційну складову  $f(x)$  у точці  $x_{st}$  у ряд Тейлора та підставляючи отримані похідні до рівняння (18), отримуємо рівняння

$$\begin{aligned} \lambda(k)\delta x = R(x_{st}) + \frac{\partial R}{\partial x}(x = x_{st})\delta x + \\ + L_d^2(-k^2\delta x + 2\varepsilon\gamma(x_{st})k^2\delta x - 2\varepsilon\gamma(x_{st})r_0^2k^4\delta x \end{aligned} \quad (21)$$

Враховуючи  $R(x_{st}) = 0$ , та використовуючи позначення  $\kappa = \kappa L_d$  та  $p_0 = \frac{r_0}{L_d}$  отримаємо рівняння для показника стійкості

$$\lambda(\kappa) = \frac{\partial R}{\partial x}(x = x_{st}) - \kappa^2 + 2\varepsilon\gamma(x_{st})\kappa^2 - 2\varepsilon\gamma(x_{st})\kappa^4 p_0^2 \quad (22)$$

У випадках коли  $\lambda(\kappa) < 0$ , для будь якого  $\kappa$ , не можуть бути утворені стійкі відокремлені структури. Якщо  $\lambda(\kappa) > 0$ , для  $\kappa = [0, \kappa_c]$ , реалізується сценарій фазового розшарування, коли розмір просторової структури може набувати значень розміру системи. У випадку коли  $\lambda(\kappa) > 0$ , для  $\kappa = [\kappa_1, \kappa_2]$  в системі реалізуються відокремлені просторові структури, розмір яких визначається максимальним значенням показника  $\lambda$ .

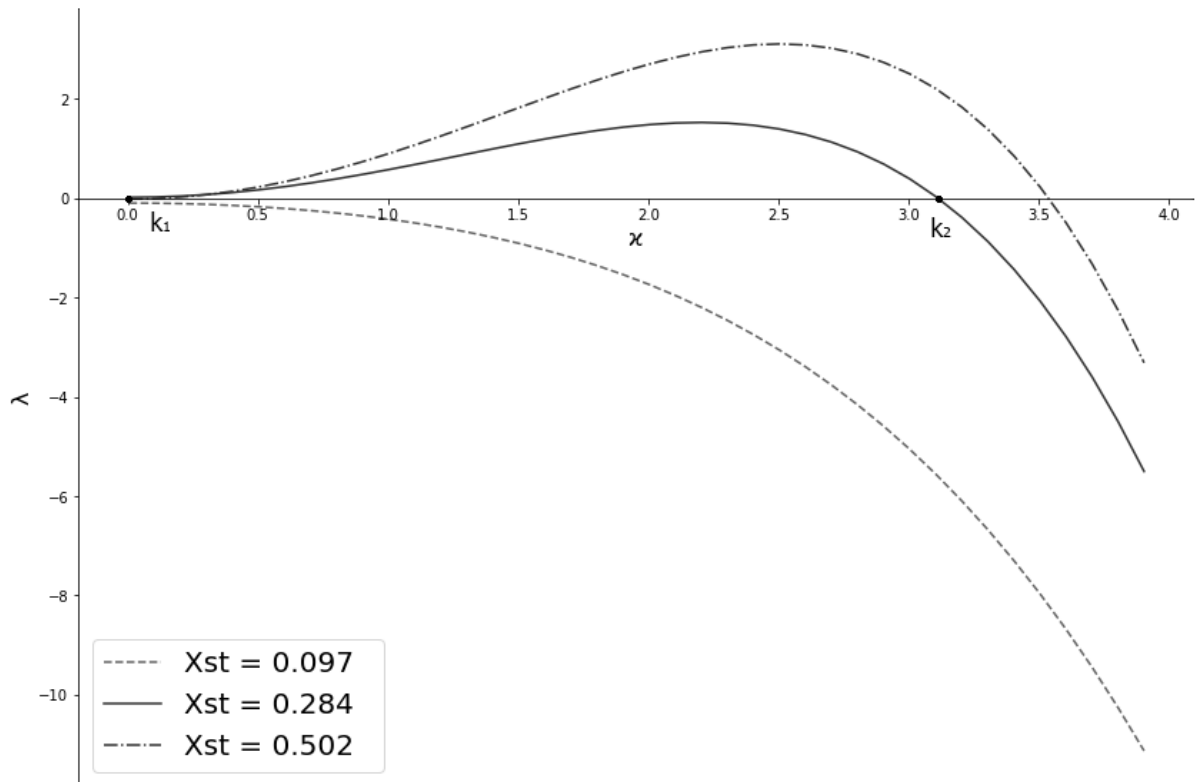


Рисунок 9. – Залежність показника стійкості від хвильового числа при  $\beta = 0.04$ ,  $\delta = 0.15$ .

Типові залежності показника стійкості від хвильового числа подано на рис. 9. Так, при фіксованих значеннях параметрів системи, коли реалізується

стаціонарний стан з малим значенням концентрації  $x$  будь-яке просторове збурення від однорідного розподілу з часом згасатиме, а відповідний однорідний стаціонарний стан є стійким (див. пунктирну криву на рис.9). змінюючи значення параметрів системи для випадку реалізації стаціонарного однорідного стану з підвищеним значенням концентрації показник стійкості приймає позитивні значення в обмеженому інтервалі значень хвильового числа. У такому разі однорідний розподіл адсорбату є нестійким до просторових збурень і в системі можливим є формування просторових структур. Шляхом варіації параметрів системи та аналізуючи залежності відповідних показників стійкості від хвильового числа було побудовано діаграму стійкості стаціонарного однорідного стану до неоднорідних збурень, яку подано на рис.10.

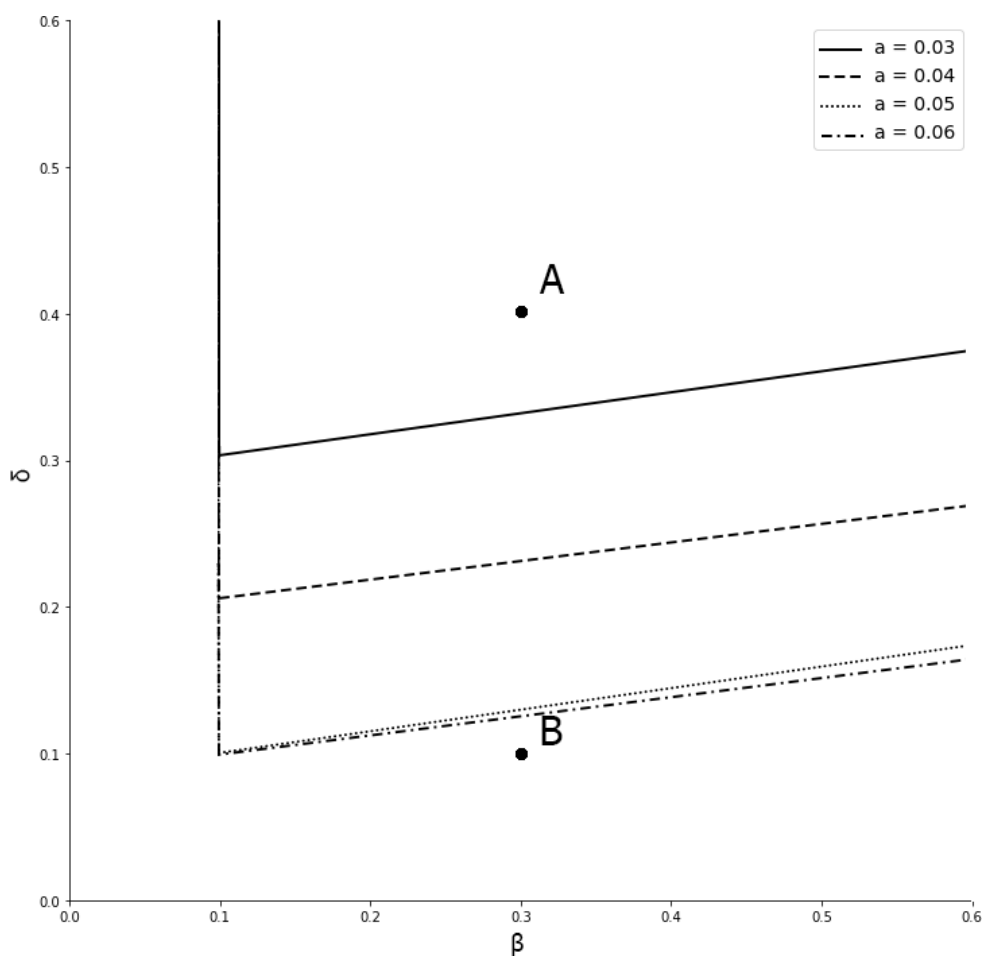
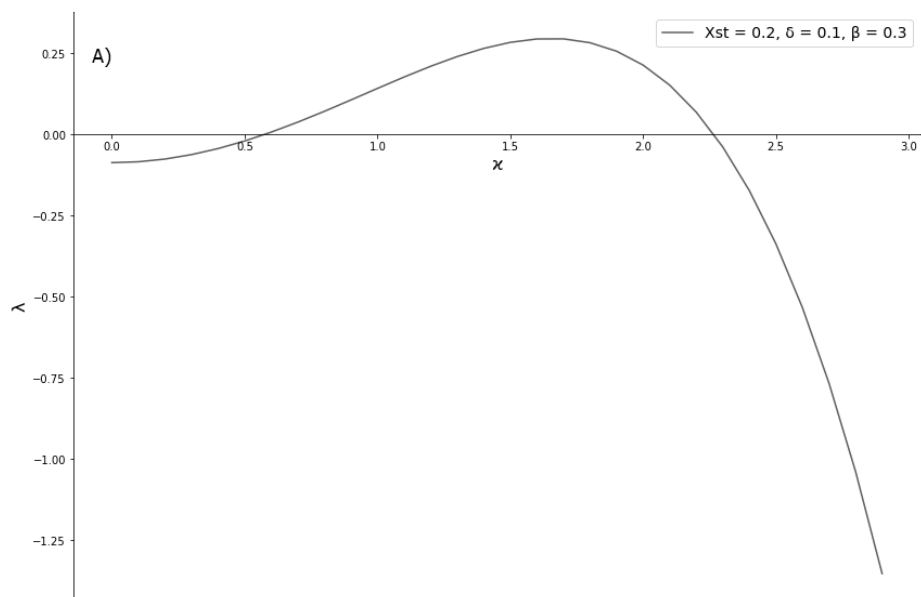


Рисунок 10. – Графік залежності  $\delta(\beta)$  для встановлення значень при яких можливе утворення адсорбату.

Так при фіксованому значенні коефіцієнта адсорбції  $\alpha$  всю площину  $\beta(\delta)$  розділено на дві області, позначені літерами А та В. В області В незалежно від значень параметрів системи показник стійкості приймає неггативні значення не залежно від значення хвильового числа (див. штрихову криву рис.9). В області А показник стійкості  $\lambda$  приймає позитивні значення в обмеженому інтервалі значень хвильового числа. Таким чином при значеннях параметрів системи з області А в системі можливим є існування відокремлених просторових структур. Збільшення коефіцієнту адсорбції  $\alpha$  приводить до розширення області структуроутворення.

На прикладі точок А та В, які мають значення  $\delta = 0.1, 0.5; \beta = 0.3$ , за формулою (18) знайдемо стаціонарне значення параметру  $x$ , та підставимо всі знайдено значення у рівняння (2). Отримаємо два графіки (рис. 11), які відповідають двом різним ділянкам на рисунку 10.



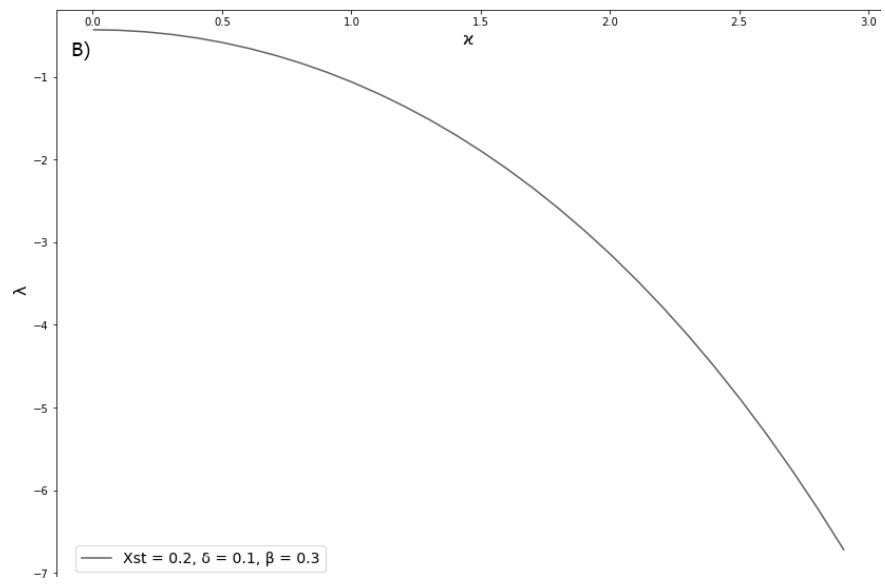


Рис. 11. – Графік стабільності для різних ділянок А та В.

## ВИСНОВКИ

Побудована математична модель еволюції концентрації адсорбату на першому шарі підкладки з урахуванням пружних ефектів які пов'язані зі взаємодією адсорбату та підкладкою. Виявлені умови реалізації переходів першого роду при зміні енергії пружної взаємодії. Розраховано діаграму, що ілюструє область реалізації бістабільного режиму. Встановлено умови формування відокремлених структур адсорбату на поверхні підкладки в даній моделі. Встановлено, що збільшення коефіцієнту адсорбції  $\alpha$  приводить до розширення області структуроутворення. Показано, що збільшення ефективності пружних ефектів при фіксованих умовах вирощування тонкої плівки індукує процеси формування поверхневих структур.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. J.E.Green, J.Vac.Sci. Technol. A, 35, 05C204 (2017).
2. 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, сс. 47–121.
3. J.A.Venables, G.D.T.Spiller, M.Hanbücken, Rep.Prog.Phys., 47, 399 (1984)
4. A.Pimpinelli, J.Villian Physics of Crystal Growth (Cambridge: Cambridge University Press, 1998)
5. K.Pohl, M.C.Bartelt, J.de la Figuera, et. al., Nature 397, 238 (1999)
6. Y.W.Mo, B.S.Swartzentruber, R.Kariotis, M.B.Webb, M.G.Lagally, Phys.Rev.Lett., 63, 2393 (1989)
7. G.E.Cirlin, V.A.Egorov, L.V.Sokolov, P.Werner, Semiconductors, 36, N11, 1294-1298 (2002)
8. J.P.Bucher, E.Hahn, P.Fernandez, C.Massobrio, K.Kern, Europhys.Lett., 27, 473 (1994)
9. V.Gorodetskii, J.Lauterbach, H.A.Rotermund, et. al., Nature, 370, 276 (1994)
10. K.Kern, H.Niehus, A.Schatz, et. al., Phys.Rev.Lett, 67, 855 (1991)
11. T.M.Parker, L.K.Wilson, N.G.Condon, F.M.Leibsl, Phys.Rev.B, 56, 6458 (1997)
12. H.Brune, M.Giovannini, K.Bromann, K.Kern, Nature, 394, 451 (1998)
13. P.G.Clark, C.M.Friend, J.Chem.Phys., 111, 6991 (1999)
14. V.I.Perekrestov, A.I.Olemskoi, Yu.O.Kosminska, A.A.Mokrenko, Physics Letters A 373, 3386 (2009)
15. Y.A.Kosminska, A.A.Mokrenko, V.I.Perekrestov, Tech. Phys. Lett. 37, 538 (2011)
16. A.G.Zhiglinskiy, V.V.Kuchinskiy, Mass Transfer at an Interaction of Plasma with Surface (Energoizdat: Moscow, 1991) (in Russian).



17. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, V.V.Yanovsky, *Nanoscale Research Letters* 12, 337 (2017)
18. N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (NorthHolland, Amsterdam, 1992).
19. J.Garcia-Ojalvo, J.M.Sancho, *Noise in Spatially Extended Systems* (Springer, New York, 1999).
20. D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, *Phys. Scr.*, 83, 045802 (2011)
21. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, *Phys. Rev. E* 86, 041143 (2012)
22. Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А. и др. Введение в физику поверхности / Под ред. В. И. Сергиенко. — М.: Наука, 2006. — 490 с.
23. А. В. Дворниченко , В. О. Харченко , Дослідження процесів формування багаточарових анізотропних нано-розмірних структур адсорбату при конденсації та епітаксiальному рості, 2018. —52 с.
24. Адсорбция газа твердой поверхностью. моделирование [Електронний ресурс]: [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: [https://studref.com/437038/matematika\\_himiya\\_fizik/adsorbtsiya\\_gaza\\_tverdoy\\_poverhnostyu](https://studref.com/437038/matematika_himiya_fizik/adsorbtsiya_gaza_tverdoy_poverhnostyu)
25. Адсорбция газа твердой поверхностью [Електронний ресурс]: [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: [https://studref.com/437038/matematika\\_himiya\\_fizik/adsorbtsiya\\_gaza\\_tverdoy\\_poverhnostyu](https://studref.com/437038/matematika_himiya_fizik/adsorbtsiya_gaza_tverdoy_poverhnostyu)
26. Адсорбция газа твердой поверхностью [Електронний ресурс]: [Веб-сайт]. – Електронні дані. – Режим доступу: [https://studref.com/437038/matematika\\_himiya\\_fizik/adsorbtsiya\\_gaza\\_tverdoy\\_poverhnostyu](https://studref.com/437038/matematika_himiya_fizik/adsorbtsiya_gaza_tverdoy_poverhnostyu)
27. Kharchenko V.O. Formation of adsorbate structures induced by external electric field in plasma-condensate systems. / V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, V.N.Borysiuk // *Eur. Phys. J. B.* – 2018. – V.91. – P.93.

28. Конденсация [Электронный ресурс]: [Веб-сайт]. – Электронні дані.  
– Режим доступу:  
URL:<http://www.heuristic.su/effects/catalog/est/byId/description/435/index.html>
29. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, Surface Science 637- 638 90  
(2015)
30. 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.
31. S.B.Casal, H.S.Wio, S.Mangioni, Physica A, 311, 443 (2002)
32. D.Walgraef, Physica E 18, 393 (2003)
33. D.Walgraef, Int. J. Quant. Chem. 98, 248 (2004)
34. Y.Mishin, D.Farkas, M.J.Mehl, D.A.Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B 59, 3393 (1999)
35. M.Hildebrand, A.S.Mikhailov, G.Ertl, Phys. Rev. Lett. 81, 2602 (1998)
36. M.Hildebrand, A.S.Mikhailov, G.Ertl, Phys. Rev. E 58, 5483 (1998)

## ДОДАТОК А

### Код для отримання значень $\delta$ та $\beta$

```
#библиотеки

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
import copy
from scipy.integrate import odeint

#Константы

a = 0.03
eps0 = 4
D = 0.1
beta = []
kritdelt = []
centrdelt = []

#Основная функция R

def DR(a, b, eps0, delt, x):
    return a*(1-(sqrt(x)-b)**2)*(1-x)-x*(1-(sqrt(x)-b)**2)*exp(-
eps0*(2*x+delt))+D*((1-x)-(1-(sqrt(x)-b)**2))

#Выраженное дельта

def deltaF(x, b):
    return log((-b**2*x + 2*b*x**(3/2) - x**2 + x)*exp(-
2*eps0*x)/(D*b**2 - 2*D*b*sqrt(x) + a*b**2*x - a*b**2 -
2*a*b*x**(3/2) + 2*a*b*sqrt(x) + a*x**2 - 2*a*x + a))/eps0

# Нахождение притических значений

def krit(Dnew, D, Dold, k):
    if D > Dnew and D > Dold or D < Dnew and D < Dold:
        k.append(float(D))

#Проверка значение на тип (должен быть с точкой)

def checkFloat(Dnew, D, Dold):
    if type(D) != Float or type(Dold) != Float or type(Dnew) !=
Float:
        return true
```

```

#построение графиков

def grafiki(k, b, k2,b2):
    plt.subplot(1, 2, 2)
    plt.plot(k, b, c = 'blue')
    plt.plot(k2,b2, c = 'blue', linestyle = 'dashed')
    plt.grid()
    plt.xlim(0)
    plt.ylim(0)
    plt.xlabel('delta',fontsize = 16)
    plt.ylabel('beta',fontsize = 16)
    plt.show()

#Сортировка значений дельта и бетта

def sortir(k,b):
    b2 = []
    k2 = []
    for i in range(len(b)):
        if i %2 == 0:
            b2.append(b[i])
            k2.append(k[i])
    for i in range(len(b) - 1, 0, -1):
        if i %2 != 0:
            b2.append(b[i])
            k2.append(k[i])
    return k2, b2

def polovina(beta):
    b = []
    for i in range(int((len(beta)/2))):
        b.append(beta[i])
    return b

# Нахождение центральной линии

def centrlinia(kritdelt, beta):
    length = int((len(beta)/2))
    beta2 = polovina(beta)
    kritVx = []
    centr = []
    dx = 0.05
    for j in range(length):
        for i in np.arange(kritdelt[j]-0.01,kritdelt[len(beta)-(j+1)],-0.001):
            kritVx.clear()
            for x in np.arange(0.05, 1, dx):
                Vxold = Vv(x-dx,beta[j],i)
                Vx = Vv(x,beta[j],i)
                Vxnew = Vv(x+dx,beta[j],i)
                krit(Vxnew, Vx, Vxold, kritVx)
            if kritVx[0] <= kritVx[2]:
                centr.append(i)

```

```

        break;
    centr.append(kritdelt[length])
    return centr

# нахождение критических значений дельта

def kriticheskie_delta():
    dx = 0.01
    delta = []
    X = []
    beta = []
    kritdelt = []
    plt.figure(figsize=(12, 6))
    plt.subplot(1, 2, 1)
    plt.grid()
    l = ['dashed', 'solid']
    m = 0
    for b in np.arange(0.0001, 0.1, dx):
        if len(beta) != len(kritdelt)+2:
            beta.append(b)
            beta.append(b)
            for x in np.arange(0.02, 1, dx):

                delt = deltaF(x, b)
                deltnew = deltaF(x+dx, b)
                deltold = deltaF(x-dx, b)

                if checkFloat(deltnew,delt,deltold): break

                krit(deltnew,delt,deltold, kritdelt)

                delta.append(delt)
                X.append(x)

            plt.plot(delta, X, linestyle = l[m%2])
            m = m +1
            delta.clear()
            X.clear()
    plt.xlabel('delta',fontsize = 16)
    plt.ylabel('x',fontsize = 16)
    beta.pop()
    beta.pop()
    kritdelt, beta = sortir(kritdelt, beta)
    #vivod(kritdelt, beta)
    kritdelt2 = centrlinia(kritdelt, beta)
    #vivod(kritdelt2, polovina(beta))
    grafiki(kritdelt,beta,kritdelt2,polovina(beta))
    #grafiki2(kritdelt,beta)
    return beta, kritdelt

beta, kritdelt = kriticheskie_delta()

```

## ДОДАТОК Б

### Побудова потенціалів $U(x)$

```
#библиотеки

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
import copy
from scipy.integrate import odeint

#интеграл R по x

def Vv(x, b, delta):
    return -a*((1/3)*x**3-(1/2)*x**2+2*b*(-
(2/5)*x**(5/2)+(2/3)*x**(3/2))+(-b**2+1)*(x-(1/2)*x**2))-2*(-
(1/4)*x**2*exp(-2*eps0*x)/eps0+(-(1/4)*x*exp(-2*eps0*x)/eps0-
(1/8)*exp(-2*eps0*x)/eps0**2)/eps0)/exp(eps0*delta)+4*b*(-
(1/4)*x**(3/2)*exp(-2*eps0*x)/eps0+(3/4)*(-(1/4)*sqrt(x)*exp(-
2*eps0*x)/eps0+(1/16)*sqrt(pi)*sqrt(2)*erf(sqrt(2)*sqrt(eps0)*sqrt(x))
/eps0**(3/2))/eps0)/exp(eps0*delta)-2*b**2*(-(1/4)*x*exp(-
2*eps0*x)/eps0-(1/8)*exp(-2*eps0*x)/eps0**2)/exp(eps0*delta)+(2*(-
(1/4)*x*exp(-2*eps0*x)/eps0-(1/8)*exp(-
2*eps0*x)/eps0**2))/exp(eps0*delta)-D*(-(4/3)*b*x**(3/2)+b**2*x)

# Нахождение значений и построение графиков V

def Vvalues():
    V = []
    Xv = []
    b = 0.04
    delt = [0.05,0.15,0.25]
    plt.figure(figsize=(14,20))
    for i in range(len(delt)):
        for x in np.arange(0.02, 1, 0.01):
            Vx = Vv(x,b, delt[i])
            V.append(Vx)
            Xv.append(x)
        plt.subplot(4,2,i+1)
        plt.grid()
        plt.plot(Xv, V)
        V.clear()
        Xv.clear()
        plt.xlabel('x',fontsize = 16)
        if i % 2 == 0:
            plt.ylabel('V(x)',fontsize = 16)
    plt.show()

Vvalues()
```

## ДОДАТОК В

### Знаходження стаціонарних значень $X$ і типи точок

```
#библиотеки

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
import copy
from scipy.integrate import odeint

#Основная функция R

def DR(a, b, eps0, delt, x):
    return a*(1-(sqrt(x)-b)**2)*(1-x)-x*(1-(sqrt(x)-b)**2)*exp(-
eps0*(2*x+delt))+D*((1-x)-(1-(sqrt(x)-b)**2))

# Нахождение притических значений
def критD(Dnew, D, Dold,k, M,m):
    if Dnew > 0 and Dold < 0 or Dnew < 0 and Dold > 0:
        k.append(float(D))
        m.append(float(M))

def stacX():
    delt = [0.05, 0.15,0.25]
    b = 0.04
    dx = 0.001
    критRx = []
    X = []
    I = []
    m = []
    r = []
    color = ['red', 'green', 'blue']
    lines = ['dashed', 'solid','dashdot']
    plt.figure(figsize=(14,10))
    for j in range(len(delt)):
        for i in np.arange(0.01, 1, dx):
            Rx = DR(a, b, eps0, delt[j], i)
            Rxold = DR(a, b, eps0, delt[j], i-dx)
            Rxnew = DR(a, b, eps0, delt[j], i+dx)
            критD(Rxnew,i,Rxold, критRx, Rx,m)
            X.append(Rx)
            I.append(i)
        plt.plot(I, X, c = color[j],label='beta = 0.04, delta
= %0.3f' % delt[j], linestyle = lines[j])
        for i in range(len(критRx)):
            if i % 2 == 0:
                r.append(критRx[i])
                plt.scatter(критRx[i], m[i], c = color[j])
    X.clear()
    I.clear()
    критRx.clear()
```

```
plt.grid()
plt.legend(fontsize=20)
plt.xlabel('x', fontsize = 16)
plt.ylabel('R(x)', fontsize = 16)
plt.show()
return r
```

```
xs = stacX()
for i in range(len(xs)):
    print('Xstac%d'%i, '= %0.4f ' % xs[i])
```

Вид стаціонарних точок точок:

```
alfa0 = -0.3813 (стійка)
alfa1 = -0.0953 (стійка)
alfa2 = 0.0193 (Не стійка)
alfa3 = -0.0151 (стійка)
alfa4 = -0.0231 (стійка)
```



## ДОДАТОК Г

### Графічний вигляд залежності стаціонарних точок від часу

```
#библиотеки

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
import copy
from scipy.integrate import odeint

#Основная функция R

def DR(a, b, eps0, delt, x):
    return a*(1-(sqrt(x)-b)**2)*(1-x)-x*(1-(sqrt(x)-b)**2)*exp(-
eps0*(2*x+delt))+D*((1-x)-(1-(sqrt(x)-b)**2))

b = 0.04
delt = 0.15

dt = 0.1
t = 200
steps = int(t/dt-3)
Xpro = [0.03,0.2,0.35,0.6]
Xst1 = [0.098]*steps
Xst2 = [0.284]*steps
Xst3 = [0.502]*steps
Xx = []
Tt = []
plt.figure(figsize=(14,10))
for i in range(len(Xpro)):
    x0 = Xpro[i]
    x = 0
    Tt.clear()
    Xx.clear()
    for t in np.arange(0,t,dt):
        x = x0 + dt*DR(a, b, eps0, delt, x)
        Xx.append(x)
        x0 = x
        Tt.append(t)
    plt.plot(Tt,Xx)
plt.plot(Tt,Xst1, linestyle = '--')
plt.plot(Tt,Xst2, linestyle = '--')
plt.plot(Tt,Xst3, linestyle = '--')
plt.xlabel('t', fontsize = 16)
plt.ylabel('Xst',fontsize = 16)
plt.grid()
plt.show()
```

## ДОДАТОК Д

### Графіки стабільності $\lambda(k)$

```
#библиотеки

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import *
import copy
from scipy.integrate import odeint

def difR(b, delt,x):
    return -a*(sqrt(x)-b)*(1-x)/sqrt(x)-a*(1-(sqrt(x)-b)**2)-(1-
(sqrt(x)-b)**2)*exp(-eps0*(2*x+delt))+sqrt(x)*(sqrt(x)-b)*exp(-
eps0*(2*x+delt))+2*x*(1-(sqrt(x)-b)**2)*eps0*exp(-
eps0*(2*x+delt))+D*(-1+(sqrt(x)-b)/sqrt(x))

ro = 0.2
delt = 0.15
b = 0.04
xs = [0.097,0.284,0.502]
Li = []
Ki = []
color = ['red', 'green', 'blue', 'yellow', 'black']
plt.figure(figsize=(14,10))
lines = ['dashed', 'solid','dashdot']
for i in range(len(xs)):
    for k in np.arange(0,4,0.1):
        Li.append(difR(b, delt,xs[i]) - k**2+2*eps0*xs[i]*(1-
xs[i])*k**2-2*eps0*xs[i]*(1-xs[i])*k**4*ro**2)
        Ki.append(k)
    plt.plot(Ki,Li,label='xst = %0.3f' % xs[i], c = color[i],linestyle
= lines[i])
    Ki.clear()
    Li.clear()
plt.title('beta = 0.04, delta = 0.15,ro=0.2')
plt.legend(fontsize=20)
plt.xlabel('K', fontsize = 16)
plt.ylabel('lambda',fontsize = 16)
plt.grid()
plt.show()
```

## ДОДАТОК Е

### Діаграма стабільності

```
def Lambda(a,delt,b,xs,k):
    ro = 0.2
    return difR(a,b, delt,xs) - k**2+2*eps0*xs*(1-xs)*k**2-
2*eps0*xs*(1-xs)*k**4*ro**2

def xst(b):
    return (1.0-0.5*b)*(1.0-0.5*b)

def xhom(a,b,delt):
    dx = 0.01
    for x in np.arange(2*dx, xst(b),dx):
        if DR(a, b, eps0, delt, x-dx)<0 and DR(a, b, eps0, delt,
x+dx) > 0 or DR(a, b, eps0, delt, x-dx)>0 and DR(a, b, eps0, delt,
x+dx) < 0:
            break
    return x

dx = 0.1
Bb = []
Dd = []
Xx = []
flag = 0
i = 0
plt.figure(figsize=(14,10))
lines = ['solid','dashed','dashdot',':','']
for a in np.arange(0.03,0.061,0.01):
    for delt in np.arange(0,1,dx):
        for b in np.arange(0,1,dx):
            x = xhom(a,b,delt)
            if x > 0 and x < xst(b):
                for k in np.arange(0,4,dx):
                    lambd_prev = Lambda(a,delt,b,x,k-dx)
                    lambd_curr = Lambda(a,delt,b,x,k)
                    #print(lambd_prev, lambd_curr)
                    if lambd_prev <0 and lambd_curr>0:
                        #print(delt, b)
                        Dd.append(delt)
                        Bb.append(b)
                        Xx.append(x)
                        flag = 1
                        break
                if flag == 1:
                    flag = 0
                    break
            plt.plot(Bb,Dd, linestyle = lines[i], label='a = %0.3f' % a)
            i += 1
            Dd.clear()
            Bb.clear()
            #print(Xx)
plt.axis([0,0.6,0,0.6]) plt.legend(fontsize=14)
plt.xlabel('beta', fontsize = 14) plt.ylabel('delta',fontsize = 14)
plt.grid()
plt.show()
```