якщо тільки вираз в квадратних дужках належить області визначення функції $G^{-1}(z)$, оберненої до $G(z)$.

Дійсно, розглядаючи рівняння

$$z(t^1,...,t^N) = f(t^1,...,t^N) + \int_{a^1}^{t^1}...\int_{a^N}^{t^N}\beta(s^1,...,s^N)g(z(s^1,...,s^N))ds^1...ds^N \qquad (24)$$

і диференціюючи його $m$ разів та використовуючи умови (20), (21), маємо

$$\frac{\partial^N G(z)}{\partial t^1...\partial t^N} \le \beta(t^1,...,t^N).$$

Інтегруючи останню нерівність $N$ раз, приходимо до нерівності

$$z(t^1,...,t^N) \le G^{-1}\left[G(c) + \int_{a^1}^{t^1}...\int_{a^N}^{t^N}\beta(s^1,...,s^N)ds^1...ds^N\right]. \qquad (25)$$

Оскільки з **теореми 2** (див. також теорему 3 із [3]) $u(t) \le z(t)$, то робимо висновок, що правдива нерівність (23).

*1. Бондаренко В.А. Интегральные неравенства для уравнения Вольтерра в банаховом пространстве с конусом // Мат. заметки. 1971. 9. № 3. С. 151–160. 2. Курпель Н.С., Шувар Б.А. Двусторонние операторные неравенства и их применение. К., 1980. 3. Шувар Б.А., Копач М.И. О двусторонних интегральных неравенствах типа Вольтерра со многими независимыми переменными // Укр. мат. журн. 1981. Т. 33. № 6. С. 848–853. 4. Беккенбах Э., Беллман Р. Неравенства. М.,1965. 5. Walter W. Differential and integral inequalities. Berlin, 1970. 6. Gutowski R. Etude d'une inequalite integrale nonlineare en deux variables // Ann. pol. math. 1977. 35, № 3. P.247–252.*

**УДК 517.9+538.8**

**Кравець В.І., Пилипів В.М.**
Прикарпатський університет ім. В. Стефаника, Ів.-Франківськ

# МОДЕЛЮВАННЯ ПРОФІЛІВ ДЕФОРМАЦІЇ ПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ МОНОКРИСТАЛІВ



**The paper considers the Takagi differential equations for simulating the deformation profiles of the surface layers of monocrystals applying the dynamic theory of X-rays waves scattering. The correspondent correlation of the calculated theoretical models with experimental curves of the diffraction reflection has been obtained.**

**Розглянуто використання диференціальних рівнянь Такагі для моделювання профілів деформації поверхневих шарів монокристалів на основі динамічної теорії розсіювання рентгенівських хвиль. Отримано відповідну кореляцію розрахованих теоретичних моделей із експериментальними кривими дифракційного відбивання.**

Однією із важливих областей використання диференціальних рівнянь є моделювання профілів різноманітних фізичних характеристик із глибиною. До неї належить і матеріал роботи, в якій запропоновано моделювання профілів деформації поверхневих шарів монокристалів на основі динамічної теорії розсіювання рентгенівських хвиль, вузловим елементом якої є диференціальні рівняння Такагі, а також порівняння отриманих теоретичних висновків із експериментальними результатами.

Для описання динамічного хвильового поля у кристалі у двохвильовому наближенні Такагі використав фундаментальні рівняння в частинних похідних, які є функцією двох змінних:

$$i\frac{\lambda}{\pi}\frac{\partial D_0}{\partial x_0} = \chi_0 D_0 + \chi_h D_h , \qquad i\frac{\lambda}{\pi}\frac{\partial D_h}{\partial x_h} = \chi_h D_0 + (\chi_0 - \alpha_h) D_h , \tag{1}$$

де $x_0$, $x_h$ – косокутні координати вздовж напрямів падаючої і дифрагованої хвиль; $\chi_0$, $\chi_h$ – фур'є – компоненти поляризованості (магнітної сприйнятливості) кристала; $\alpha_h$ – функція відхилення від точного бреггівського напряму; $\alpha_h = 2\Delta\Theta_h \sin 2\Theta_h$, $\Theta_h$ – "уточнений" кут Брегга, $\Delta\Theta_h$ – відхилення від точного кута Брегга; $D$ – вектор електричної індукції [1].

В роботах [2] та [3], де автори розв'язали рівняння Такагі для випадків Лауе та Брегга відповідно, розглядалось розсіювання рентгенівських хвиль в досконалому кристалі. В даній роботі цей підхід (для дифракції Брегга) було застосовано і розвинуто для розсіювання як в досконалих штучно вирощених монокристалах, так і в цілеспрямовано модифікованих їх поверхневих шарах.

Для розв'язання системи рівнянь Такагі (1) необхідне задання відповідних граничних умов. В роботі [4] подано розв'язання цієї системи для кристала, в якому спотворення є функцією тільки однієї координати – глибини, яка відраховується вздовж внутрішньої нормалі до поверхні. Для характеристики структури кристала введено такі параметри, як усереднена за площиною, паралельною до поверхні кристала, міжплощинна відстань, а також аморфізація (фактор Дебая-Валлера), що характеризує хаотичні зміщення атомів всередині елементарної комірки, які є функціями глибини. Для випадку Брегга подано диференціальне рівняння для комплексної амплітуди інтенсивності дифрагованої хвилі $A(z',y)$:

$$iL_{ex}\frac{\partial A(z',y)}{\partial z'} = 2[y - iy_0 - Y(z')]\, A(z',y) + \hat{C}e^{-W(z')}[1 + A^2(z',y)], \tag{2}$$

де $L_{ex} = \dfrac{\lambda\sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}}{\pi|\chi_{hr}|}$ – довжина екстинкції,

$z'=L-z$, $L$ – товщина порушеного шару, $z$ – глибина від поверхні кристала,

$y = -\sqrt{\beta}\,\dfrac{\sin 2\Theta_B}{|\chi_{hr}|}\Delta\Theta$ – приведений кут, $\beta = \dfrac{\gamma_0}{|\gamma_h|}$, $y_0 = \dfrac{\chi_0}{|\chi_{hr}|}\dfrac{1+\beta}{2\sqrt{\beta}}$,

$Y(z') = \pi\dfrac{L_{ex}}{d}\dfrac{\Delta d(z')}{d}$, $\dfrac{\Delta d}{d}$ – зміна міжплощинної відстані,

$\hat{C} = \dfrac{C\sqrt{\chi_h\chi_{-h}}}{|\chi_{hr}|}$, $C = \begin{cases} 1, \sigma - \textit{поляризація}, \\ |\cos 2\Theta_B|, \pi - \textit{поляризація}, \end{cases}$

$\Theta_B$ – кут Брегга,

$W(z)$ – фактор аморфізації.

Як гранична умова для диференціального рівняння (2) використовувалась амплітуда інтенсивності дифрагованої від ідеального монокристала хвилі, яку можна легко отримати із (2) за умови $\frac{\partial A}{\partial z'} = Y = W = 0$:

$$A(0, y) = A_0(y) = -[y - iy_0 \pm \sqrt{(y - iy_0)^2 - \hat{C}^2}\ ] \ / \ \hat{C}. \tag{3}$$

Рівняння (2) – диференціальне рівняння Рікарті із змінними коефіцієнтами.

Розглянута методика розрахунку дає можливість визначити коефіцієнт відбивання як для цілого порушеного шару, так і для будь-якої його частини.

Для бікристала [5], який складається з товстої досконалої підкладки ($Y = W = 0$) і шару, товщина якого $L$ з постійними значеннями $Y \neq 0$ і $W > 0$ (тобто шар частково однорідно аморфізований і має відмінну від підкладки міжплощинну відстань), рівняння (2) має аналітичний розв'язок в області $0 < z < L$ з граничною умовою (3):

$$A(z, y) = \frac{x_1 - x_2 x_3 \exp[-2\sigma(L - z)]}{1 - x_3 \exp[-2\sigma(L - z)]}, \tag{4}$$

де $x_{1,2} = -\frac{1}{Ce^{-W}}[b \pm \sqrt{b^2 - \hat{C}^2 e^{-2W}}$, $\ b = y - iy_0 - Y$,

$$x_3 = \frac{x_1 - A_0}{x_2 - A_0}, \qquad \sigma = \frac{1}{iL_{ex}} \sqrt{b^2 - C^2 e^{-2W}}.$$

Розв'язок (4) використовувався нами для розрахунку інтенсивності дифрагованої хвилі від набагато складнішої структури – монокристалічної підкладки з плівкою і порушеним шаром із змінними параметрами. Увесь порушений шар розділявся на підшари, в межах кожного з яких параметри $\frac{\Delta d(z)}{d}$ та $W(z)$ сталі. Для кожного наступного підшару використовувалась амплітуда інтенсивності дифрагованої хвилі від підкладки, плівки та всіх підшарів, що нижче залягають, які можуть мати різну товщину, що дає більшу гнучкість під час підбирання профілю. Після обчислення інтенсивності дифрагованої хвилі здійснювалась згортка розрахованої кривої дифракційного відбивання (КДВ) з апаратною функцією спектрометра, яка визначається недосконалістю монохроматора та шириною щілин.

Враховуючи специфічний вигляд функції середнього квадратичного відхилення (СКВ), була складена програма для автоматичного комп'ютерного пошуку профілю деформації за експериментальною КДВ, яка не вимагає спеціального вибору стартового наближення, як це пропонується в інших роботах. Суть запропонованої нами методики відновлення профілю деформації за експериментально отриманою двокристальною КДВ полягає в автоматизованій мінімізації нев'язки розрахованої КДВ з експериментальною.

Розглянемо $2m$-вимірний простір, координатами якого є товщини підшарів порушеного шару $L_k$ та їхні відносні деформації $\delta_k$.. Кожній точці простору ($L_k$ , $\delta_k$) відповідає певне значення СКВ:

$$\sqrt{\frac{1}{\Delta\Theta_k - \Delta\Theta_n} \int_{\Delta\Theta_n}^{\Delta\Theta_k} [I^E(\Delta\Theta) - I^T(\Delta\Theta)]^2 \, d(\Delta\Theta)},$$

де $\Delta\Theta$ – відхилення променя, що падає, від бреггівського напрямку, $\Delta\Theta_n$ і $\Delta\Theta_k$ – відповідно початковий і кінцевий кути вибраної ділянки КДВ, $I^E(\Delta\Theta)$ та $I^T(\Delta\Theta)$ – інтенсивності відповідно експериментальної і теоретичної КДВ.

Для початку обчислення можна вибрати довільну точку $2m$ – вимірного простору ($L_k$, $\delta_k$) і отримати значення СКВ для вибраної стартової точки. Після цього програма по черзі змінює параметри $L_k$, $\delta_k$ на задане значення у бік більших та менших значень, враховуючи обмеження на параметри $L_k \geq 0$, і обчислює СКВ для нових $4m$ точок, де $m$ – кількість підшарів. Далі програма вибирає серед $4m$ точок точку з мінімальним СКВ і запам'ятовує її.

Оскільки цей метод пошуку оптимального профілю за осями $L_k$, $\delta_k$ не завжди дає можливість досягти успіху достатньо швидко, ми об'єднали з ним ще два методи, які в даному випадку найефективніші, зокрема, градієнтний і метод найменших квадратів Гаусса.

Градієнт функції СКВ в $2m$-вимірному просторі параметрів порушеного шару обчислюється через частинні похідні СКВ за цими параметрами, для розрахунку яких програма використовує раніше знайдені значення СКВ для $4m$ точок і запам'ятовує напрям максимального зменшення СКВ.

Суть третього методу можна виразити у матричній формі:

$$\breve{T} = [(\breve{A}^T \times \breve{A})^{-1} \times \breve{A}^T] \times \breve{Y}.$$

Оскільки під час обчислення двома попередніми методами програма запам'ятала значення функції $I(\Delta\Theta, L_k, \delta_k)$ у кожній точці параметричного простору ($L_k$, $\delta_k$) і для всіх кутів $\Delta\Theta$, то введення додаткових методів розрахунку суттєво не вплинуло на збільшення часу обчислення, оскільки елементами двовимірної матриці $\breve{A}$ є вищенаведені числа, а елементами матриці $\breve{Y}$ є різниці між експериментальною і розрахованою інтенсивностями дифрагованої хвилі на кожному з кутів.

Для кожного з трьох методів програма перевіряє, чи переміщення точки на знайдений вектор виявилось успішним, тобто, чи зменшилось СКВ. Якщо так, то програма намагається покращити результат, переміщуючи точку і далі в тому самому напрямку, якщо ні – то кілька разів половинить крок, шукаючи точку ($L_k$, $\delta_k$) з меншим, ніж у стартовій, СКВ. Програма знаходить три або менше придатних для подальшого розгляду точок і порівнює їх між собою та із стартовою точкою для відшукання точки з мінімальним СКВ. Якщо в точці, знайденій одним з цих методів, СКВ виявиться меншим за стартове, то ця точка переіменовується на стартову і увесь цикл обчислення повторюється, а якщо жоден метод не дав покращання результату, то програма припиняє роботу. Після цього можна розділити кожен із підшарів на два або зменшити крок і знову запустити програму на виконання. Закінчується обчислення після досягнення СКВ заданого значення, яке визначається експериментальною похибкою знімання КДВ.

Отримані теоретично розраховані результати добре корелюють із експериментальними [6].

*1. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осиновский М.Е. Динамическая теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей и электронов в кристаллах, содержащих дефекты кулоновского типа // Металлофизика. 1983. Т.5. № 1. С. 3–15. 2. Слободецкий И.Ш., Чуховский Ф.Н., Инденбом В.Л. Дифракция рентгеновских лучей в условиях пространственно-неоднородной динамической задачи // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т.8. С. 90–94. 3. Афанасьев А.М.,* *Кон В.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах. (Препр.№1890 / Ин–т атомной энергии). М., 1969. 4. Kohn V.G., Kovalchuk M.V. On the Theory of External Photoeffect Accompanying X – Ray Diffraction in an Ideal Crystal with Disturbed Surface Layer // Phys. Stat. Sol. A. 1981. V.64, №2. P.359 – 366. 5. Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лобанович Э.Ф. Измерение малых деформаций в тонких эпитаксиальных пленках кремния методом фотоэлектронной эмиссии, возбужденной стоячей рентгеновской волной // ФТТ. 1985. Т.27. С. 3379–3387. 6. Остафийчук Б.К., Кравец В.И., Олиховский С.И., Василишин Б.В. Определение профиля деформации в ионно–имплантированных монокристаллах со структурой граната // Металлофизика. 1991. Т.13. № 2. С. 81–87.*

**УДК 517.946**

**Крехівський В.В.**
Чернівецький державний університет ім. Ю. Федьковича

# ГРАНИЧНІ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЕЛІПТИЧНИХ СИСТЕМ З ОПЕРАТОРОМ БЕССЕЛЯ, ЗАЛЕЖНИХ ВІД ПАРАМЕТРА



**The model boundary value problem for linear elliptical systems with Bessel operator is investihated. The systems coefficients contain a degree parameter.**

**Вивчено модельну крайову задачу для лінійних еліптичних систем з оператором Бесселя, коефіцієнти яких степеневим чином містять параметр.**

В працях М.С. Агроновича і М.І. Вішика [1] розглянуто загальні граничні задачі для еліптичних систем і вивчені граничні задачі еліптичних рівнянь з оператором Бесселя, які спеціальним чином містять параметр [2]. В даній статті вивчаються аналогічні граничні задачі еліптичних систем з оператором Бесселя.

I. Нехай $R_{n+1}^{+}$ – півпростір $y>0$ евклідового $(n+1)$ – вимірного простору $R_{n+1}$ точок $(y,x)$, $\left(x=\left(x_1,\dots,x_{n-1},x_n\right)=\left(x',x_n\right)\right)$. $R_{n+1}^{++}$ – четвертина простору $y>0$, $x>0$. Число $l$ скрізь вважаємо цілим невід'ємним.

Простір $\mathrm{H}_l\left(R_{n+1}^{+}\right)$ визначається як поповнення звужень на $R_{n+1}^{+}$ простору $\widetilde{C}_0^{\infty}\left(R_{n+1}\right)$ нескінченногладких комплекснозначних фінітних парних по $y$ функцій $u(y,x)$ за нормою

$$\|u\|_{l,R_{n+1}^{+}}=\left\{\sum_{|\alpha|+2s\le l}\int_{R_{n+1}^{+}}\left|D_x^{\alpha}B^{s}u(y,x)\right|^{2}\cdot y^{2\gamma+1}dydx\right\}^{1/2}, \qquad (1)$$