

Численное моделирование совместного термодиффузионного процесса в кремниевых пластинах

М.И. Васильев¹, Ю.А. Костиков¹, А.М. Романенков^{1,2}

¹Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва

²Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук, Москва

Аннотация: В работе рассматривается модельная задача совместного термического и диффузионного процесса в кремнии. Математической моделью этого процесса является начально-краевая задача для системы линейных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. В этой системе одно уравнение описывает процесс распространения тепла в кремнии, а другое - процесс диффузии примеси в нем. При этом уравнения не являются независимыми так, как коэффициент диффузии зависит от температуры. Для каждого уравнения в этой системе поставлены соответствующие начально-краевые условия. Для поиска приближенного решения возникшей задачи используется неявная разностная схема и классический метод прогонки. В работе представлено описание численного алгоритма и точные расчетные формулы для решения дискретизированной параболической задачи.

Ключевые слова: Модель термодиффузионного процесса, численное моделирование, метод прогонки, неявная разностная схема.

Введение

С физической точки зрения процессы диффузии и теплопроводности относятся к кинетическим процессам, которые приближают тело к состоянию равновесия. Процессы диффузии возникают при наличии различных концентраций веществ в газе или жидкости, а также в твердых телах при наличии в них примесей или контакте различных твердых тел. Процессы теплопроводности возникают при наличии градиента температур в теле [1].

Соответствующие процессы описываются уравнениями теплопроводности и диффузии, которые аналогичны друг другу [2]. С некоторыми модификациями эти уравнения возникают и в задачах распространения тепла, диффузии на поверхностях различных материалов и изделий [3, 4], в задачах тепло и влагообмена в пористых структурах [5]. Для линейного уравнения диффузии и для некоторых начально-краевых условий

удается выписать явную формулу решения этих задач, однако в большинстве случаев получить решение в конечном виде или даже в виде бесконечно ряда не удастся. В этом случае используются различные интегральные представления искомой функции [6, 7], методы аппроксимации решения функциями из заданного набора и численные методы получения приближенного решения.

Результатом исследования процесса диффузии явилась разработка ряда математических моделей, описывающих ее ход для различных технологических условий. Основу всех этих математических моделей составляют уравнения математической физики, описывающие первый и второй законы Фика [8]. На основе математических моделей разработаны вычислительные методы моделирования диффузионными процессами [9-11], которые базируются на различных подходах [12-**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

К сожалению, все эти системы рассчитаны для мгновенного измерения температуры, которая существенно влияет на коэффициент диффузии в твердом теле, а значит, и на конечное распределение примеси в полупроводнике. В данной работе совмещены оба процесса, то есть, термический и диффузионный, с целью учесть инерционность распространения тепла вдоль полупроводниковой пластины. Считается, что температурный режим может меняться с течением времени, оставаясь сосредоточенным на границах полупроводника. В данной работе используется метод конечных разностей для аппроксимации производных искомой функции и выражений, которые уже содержат дискретизации производной первого порядка.

Моделирование совместного термодиффузионного процесса

Рассматривается модельная задача совместного процесса теплопроводности и диффузии в твердом теле. Данная задача возникает при

очищении от примесей кремниевой пластины при производстве интегральных схем. Характерной особенностью процесса диффузии в твердых телах является ее медлительность, по сравнению с диффузией в жидкостях и газах. Однако, известно, что процесс диффузии зависит от температуры вещества, в котором рассматривается этот процесс, и ускоряется с ее ростом, а распределение температуры подчинено линейному параболическому уравнению. Поэтому в работе рассматривается одновременно сразу два процесса, а именно термический и диффузионный. Такая постановка позволяет учесть инертность изменения коэффициента диффузии в зависимости от распределения температуры. Изменение же температуры происходит на краях пластины (либо с одной стороны, либо с обеих сторон).

Рассмотрим формальную постановку задачи. Отметим, что рассматривается одномерный случай, то есть случай с одной пространственной координатой x . Пусть $\varphi(x, t)$ – концентрация легирующей примеси в момент времени t , в точке x ; $T(x, t)$ – температура в момент времени t , в точке x . Будем считать, что $x \in [0; 1]$. Пусть, далее, D_0 – коэффициент теплопроводности, который является постоянной величиной. Так как мы рассматриваем процесс диффузии в твердом теле, то мы должны учитывать, что атомы в твердом теле окружены потенциальным барьером. Чтобы атом мог покинуть свое место, он должен обладать энергией активации ΔE_1 для преодоления потенциального барьера. Пусть $D(T)$ – коэффициент диффузии, который зависит от температуры T . Следуя работам [15, 16], замечаем, что для коэффициента диффузии справедливо модельное уравнение Аррениуса:

$$\frac{D'(T)}{D(T)} = \frac{\Delta E_1}{kT^2},$$

решение которого определяется формулой (1):

$$D(T) = D_1 e^{-\frac{\Delta E_1}{kT}}, \quad (1)$$

где D_1 – константа, не зависящая от температуры и определяемая свойствами вещества, ΔE_1 – энергия активации диффузии, зависящая от вида легирующей примеси, k – постоянная Больцмана.

Функция концентрации удовлетворяет линейному уравнению диффузии:

$$\frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(T(x, t)) \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} \right). \quad (2)$$

В силу сохранения вещества примеси внутри кремниевой пластины используется предположение о нулевом диффузионном потоке на краях кремниевой пластины, то есть решение уравнения (2) удовлетворяет краевым условиям Неймана (3):

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=1} = 0. \quad (3)$$

Начальное распределение примеси считается известным, то есть задано начальное условие (4):

$$\varphi(x, 0) = f(x). \quad (4)$$

Функция $T(x, t)$ описывает распределение температуры в Кельвинах и удовлетворяет линейному однородному уравнению теплопроводности:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}. \quad (5)$$

При этом на краях кремнёвого образца поддерживается заданный температурный режим:

$$T|_{x=0} = u_1(t), \quad T|_{x=1} = u_2(t). \quad (6)$$

Начальная температура $T(x, 0)$ кремниевго образца считается заданной:

$$T(x, 0) = T_0(x). \quad (7)$$

Формально рассматриваемый совместный термодиффузионный процесс можно представить в виде параболической системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ T \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\begin{pmatrix} D(T) & 0 \\ 0 & D_0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \varphi \\ T \end{pmatrix} \right), \quad (8)$$

с краевыми условиями:

$$P \begin{pmatrix} \varphi \\ T \end{pmatrix} \Big|_{x=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ u_1(t) \end{pmatrix}, \quad P \begin{pmatrix} \varphi \\ T \end{pmatrix} \Big|_{x=1} = \begin{pmatrix} 0 \\ u_2(t) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ – матричный дифференциальный оператор первого порядка, и с начальными условиями:

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ T \end{pmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{pmatrix} f(x) \\ T_0(x) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

Разностная задача для термодиффузионного процесса

Зададим шаг h по оси абсцисс и τ по временной оси. Введем равномерные сетки на отрезке $[0; 1]$ и на временном интервале $[0; t_1]$, где $t_1 > 0$. Зададим в узлах сетки дискретные функции $T_i^n = T(ih, \tau n)$ и $\varphi_i^n = \varphi(ih, \tau n)$, которые подлежат определению в дальнейшем. Для аппроксимации частных производных по пространственным переменным будем использовать неявную дискретизацию с помощью неявных схем:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T_i^n = \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \varphi_i^n = \frac{\varphi_{i+1}^{n+1} - \varphi_i^{n+1}}{h}. \quad (12)$$

После дискретизации уравнения (5) получим:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = D_0 \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2} \quad (13)$$

Здесь значения с индексами $n + 1$ неизвестны и подлежат определению. После перегруппировки слагаемых получаем:

$$T_{i+1}^{n+1} - \left(2 + \frac{h^2}{\tau D_0}\right) T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1} = -\frac{h^2 T_i^n}{\tau D_0}, \quad (14)$$

Для каждого i –го узла справедливо уравнение (14), а следовательно, возникает система линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. Данную систему можно решить стандартным методом прогонки. Для этого предположим, что существует набор параметров a_i, b_i , которые называются прогоночными коэффициентами, что имеет место равенство:

$$T_{i-1}^{n+1} = a_i T_i^{n+1} + b_i, \quad (15)$$

$$T_0^{n+1} = u_1((n+1)\tau), \quad T_N^{n+1} = u_2((n+1)\tau), \quad (16)$$

где N –номер точки по оси абсцисс такой, что $x_N = 1$.

Далее, получим рекуррентные соотношения для прогоночных коэффициентов. Для этого подставим выражение из (15) в формулу (14):

$$T_{i+1}^{n+1} - \left(2 + \frac{h^2}{\tau D_0}\right) T_i^{n+1} + a_i T_i^{n+1} + b_i = -\frac{h^2 T_i^n}{\tau D_0}, \quad (17)$$

и выразим величину T_i^{n+1} :

$$T_i^{n+1} = \frac{1}{2 + \frac{h^2}{\tau D_0} - a_i} T_{i+1}^{n+1} + \frac{b_i + \frac{h^2 T_i^n}{\tau D_0}}{2 + \frac{h^2}{\tau D_0} - a_i}, \quad (18)$$

Если сравнить выражение (18) с формулой (15), то несложно заметить, что прогоночные коэффициенты должны удовлетворять рекуррентным соотношениям:

$$a_{i+1} = \frac{1}{2 + \frac{h^2}{\tau D_0} - a_i}, \quad b_{i+1} = \frac{b_i + \frac{h^2 T_i^n}{\tau D_0}}{2 + \frac{h^2}{\tau D_0} - a_i} \quad (19)$$

Для вычисления стартовых значений в формуле (15) положим $i = 0$ и получим, что $T_0^{n+1} = a_1 T_1^{n+1} + b_1$. Для выполнения краевого условия (16) на левом конце необходимо положить:

$$a_1 = 0, \quad b_1 = u_1((n+1)\tau), \quad (20)$$

Из формулы (16) значение T_N^{n+1} на правом конце и определенные прогоночные коэффициенты позволяют по формуле (15) вычислить значения сеточной функции T_i^{n+1} для всех i . Далее выпишем разностное уравнение для функции концентрации $\varphi(x, t)$:

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{\tau} = \frac{1}{h} \left(D_{i+\frac{1}{2}} \frac{\varphi_{i+1}^{n+1} - \varphi_i^{n+1}}{h} - D_{i-\frac{1}{2}} \frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i-1}^{n+1}}{h} \right), \quad (21)$$

здесь $D_{i+\frac{1}{2}} = D \left(\frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{2} \right)$ и $D_{i-\frac{1}{2}} = D \left(\frac{T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{2} \right)$. Отметим, что для аппроксимации производных функции $\varphi(x, t)$ по пространственной переменной x используется формула (12). Обозначим $\frac{\tau}{h^2} = r$ и сгруппируем слагаемые так, чтоб справа было выражение, зависящее от индекса $n + 1$:

$$-rD_{i+\frac{1}{2}}\varphi_{i+1}^{n+1} + \left(1 + r \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}} \right) \right) \varphi_i^{n+1} - rD_{i-\frac{1}{2}}\varphi_{i-1}^{n+1} = \varphi_i^n. \quad (22)$$

Соотношение (22) аналогично (14), поэтому снова используем метод прогонки. Пусть существует набор параметров A_i, B_i такой, что:

$$\varphi_{i-1}^{n+1} = A_i \varphi_i^{n+1} + B_i, \quad (23)$$

и необходимо определить рекуррентные соотношения для этих параметров. Для этого подставим (23) в формулу (22):

$$-rD_{i+\frac{1}{2}}\varphi_{i+1}^{n+1} + \left(1 + r \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}} \right) \right) \varphi_i^{n+1} - rD_{i-\frac{1}{2}}(A_i \varphi_i^{n+1} + B_i) = \varphi_i^n. \quad (24)$$

В формуле (24) после выполнения элементарных преобразований получим выражение:

$$\varphi_i^{n+1} = \frac{1}{1 + r \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}}(1 - A_i) \right)} \left(rD_{i+\frac{1}{2}}\varphi_{i+1}^{n+1} + rD_{i-\frac{1}{2}}B_i + \varphi_i^n \right). \quad (25)$$

Откуда следует, что искомые рекуррентные соотношения примут вид (26):

$$A_{i+1} = \frac{rD_{i+\frac{1}{2}}}{1 + r \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}}(1 - A_i) \right)}, \quad B_{i+1} = \frac{rD_{i-\frac{1}{2}}B_i + \varphi_i^n}{1 + r \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}}(1 - A_i) \right)},$$

(26)

Для вычисления прогоночных коэффициентов по формулам (26) необходимо задать стартовые значения. Для решения этой проблемы воспользуемся граничным условием слева в точке $x = 0$. И так по условию (3), с помощью аппроксимации первой производной на центральную точку и введения фиктивной точки с отрицательным индексом получаем, что:

$$\frac{\varphi_1^{n+1} - \varphi_{-1}^{n+1}}{2h} = 0. \quad (27)$$

Далее, применяя известный прием, в формуле (22) положим $i = 0$:

$$-rD_{\frac{1}{2}}\varphi_1^{n+1} + \left(1 + r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right) \right) \varphi_0^{n+1} - rD_{-\frac{1}{2}}\varphi_{-1}^{n+1} = \varphi_0^n, \quad (28)$$

где $D_{\frac{1}{2}} = D \left(\frac{T_0^{n+1} + T_1^{n+1}}{2} \right)$, $D_{-\frac{1}{2}} = D(T_0^{n+1})$. В силу равенств (27) и (28) получаем выражение для φ_0^{n+1} :

$$\varphi_0^{n+1} = \frac{r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)}{1 + r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)} \varphi_1^{n+1} + \frac{\varphi_0^n}{1 + r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)},$$

откуда немедленно определяются формулы для A_1 и B_1 :

$$A_1 = \frac{r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)}{1 + r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)}, \quad B_1 = \frac{\varphi_0^n}{1 + r \left(D_{\frac{1}{2}} + D_{-\frac{1}{2}} \right)}. \quad (29)$$

Для вычисления неизвестных значений φ_i^{n+1} необходимо определить φ_N^{n+1} . Однако в данном случае ситуация отличается от случая для определения T_i^{n+1} . Сложность состоит в том, что краевое условие дает ограничение на первую производную. Из краевого условия (3) получаем

разностное выражение, аппроксимирующее первую производную по пространственной переменной на правом краю:

$$\frac{\varphi_{N+1}^{n+1} - \varphi_{N-1}^{n+1}}{2h} = 0, \quad (30)$$

далее, в формулах (22) и (23) положим $i = N$:

$$-rD_{N+\frac{1}{2}}\varphi_{N+1}^{n+1} + \left(1 + r\left(D_{N+\frac{1}{2}} + D_{N-\frac{1}{2}}\right)\right)\varphi_N^{n+1} - rD_{N-\frac{1}{2}}\varphi_{N-1}^{n+1} = \varphi_N^n, \quad (31)$$

$$\varphi_{N-1}^{n+1} = A_N\varphi_N^{n+1} + B_N, \quad (32)$$

где $D_{N-\frac{1}{2}} = D\left(\frac{T_N^{n+1} + T_{N-1}^{n+1}}{2}\right)$, $D_{N+\frac{1}{2}} = D(T_N^{n+1})$. Уравнения (30), (31), (32) можно разрешить относительно φ_N^{n+1} и получить выражение (33):

$$\varphi_N^{n+1} = \frac{B_N r \left(D_{N+\frac{1}{2}} + D_{N-\frac{1}{2}}\right) + \varphi_N^n}{1 + r \left(D_{N+\frac{1}{2}} + D_{N-\frac{1}{2}}\right) (1 - A_N)}. \quad (33)$$

Отметим, что расчет сеточных функций для процессов теплопроводности и диффузии необходимо проводить одновременно. На каждом слое по времени для вычисления новых значений функции концентрации необходимо использовать только что полученные значения температуры. При раздельном вычислении возникает необходимость хранить все промежуточные результаты расчетов, что может приводить к использованию больших объемов памяти.

Численное моделирования и численные примеры

Теперь представим явное описание алгоритма численного метода построения приближенного решения задачи (8) -(10). Определим необходимые переменные:

- a, b – одномерные массивы вещественных чисел, в которых будут храниться текущие значения пригоночных коэффициентов;
- $d0$ – постоянная диффузии;

D – одномерный массив, в котором хранятся значения коэффициента диффузии в текущий момент времени;

$U1, U2$ – заданные одномерные массивы вещественных чисел, в которых содержатся значения температур на левом и правом концах кремния;

$r, par, Di15, Di05$ – скалярные вещественные переменные.

Далее введем величину r :

$$r = d0 * tau / (h * h).$$

Шаг 1. На основании формулы (6) выполним инициализацию первого и последнего элементов в массиве значений температуры:

$$\text{Temperature}[0] = U1[n];$$

$$\text{Temperature}[\text{Temperature.Length} - 1] = U2[n].$$

Здесь параметр n обозначает номер соответствующего временного слоя. Далее, на основании формулы (20) выполняем инициализацию стартовых значений прогоночных коэффициентов:

$$n=n+1$$

$$a[0] = 0$$

$$b[0] = U1[n].$$

Шаг 2. После этого выполняем расчет прогоночных коэффициентов на основании формулы (19) и рассчитываем все значения массива температур по формуле (15):

```
for (i=1; i < a.Length; i++){  
    par = 1 / (1 - r * a[i - 1] + 2 * r);  
    a[i] = r * par;  
    b[i] = (r * b[i - 1] + Temperature[i - 1]) * par;  
}  
for (i = Temperature.Length - 1; i > 1; i--)
```

$$\text{Temperature}[i - 1] = a[i] * \text{Temperature}[i] + b[i];$$

Теперь есть возможность сразу на текущем временном слое рассчитать приближенное значение концентрации примесей в кремнии. Для этого выполним инициализацию параметров, которые необходимы для численного решения уравнения (2):

$$r = r/d_0;$$

$$par = 2 * r * D(\text{Temperature}[0]).$$

Для экономии памяти будем использовать те же самые массивы прогоночных коэффициентов.

Шаг 3. По формуле (29) инициализируем стартовые значения:

$$a[1] = par / (1 + par);$$

$$b[1] = \text{Profile}[0] / (1 + par);$$

Шаг 4. Далее, по формуле (26) заполняем все значения прогоночных коэффициентов:

```
for (i = 1; i < a.Length - 1; i++){  
    Di05 = D((Temperature[i - 1] + Temperature[i]) *  
0.5);  
    Di15 = D((Temperature[i] + Temperature[i + 1]) *  
0.5);  
    par = 1.0 / (1 + r * (Di15 + Di05 * (1 - a[i])));  
    a[i + 1] = r * Di15 * par;  
    b[i + 1] = (r * Di05 * b[i] + Profile[i]) * par;  
}
```

Шаг 5. Последним шагом здесь будет вычисление приближенного значения концентрации примеси на правом конце с помощью формулы (33)

$$par = 2 * r * D(\text{Temperature}[\text{Temperature.Length} - 1]);$$

$\text{Profile} [\text{Profile.Length} - 1] = (b [\text{b.Length} - 1] + \text{Profile} [\text{Profile.Length} - 1] / par) / (1.0 / par + 1 - a[\text{a.Length} - 1]);$

и типичный расчет всех значений массива на основании формулы (32):

```
for (i = Profile.Length - 1; i > 0; i--)  
    Profile [i - 1] = a[i] * Profile[i] + b[i];
```

К этому моменту на текущем временном слое имеем приближенные значения температуры и концентрацию примесей в кремнии. Для перехода к следующему временному слою необходимо снова вернуться к Шагу 1 и повторить вычисления.

Рассмотрим пример задачи (2)-(7). Пусть в (4) начальное распределение концентрации примеси определяется по следующему закону:

$$f(x) = \begin{cases} 20, & x \in [0; 0.15] \cup [0.3; 0.62] \cup [0.82; 1] \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}.$$

На рис. 1 представлен график $f(x)$.

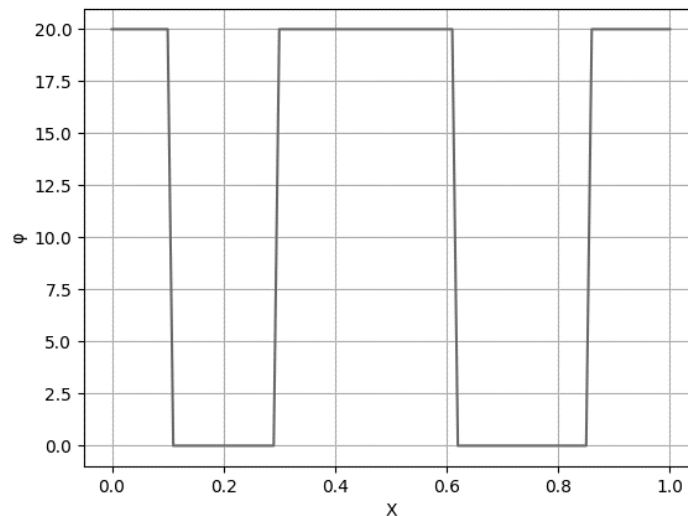


Рис. 1. – Начальное распределение примеси.

В (7) определим линейное распределение температуры:

$$T_0(x) = 100(8 - 7x),$$

условия (3) для функции φ оставляем без изменения, а краевые условия в формуле (6) определим по следующим формулам:

$$u_1(t) = 800 + 3t, \quad u_2(t) = 700 + 25t^2,$$

что соответствует неравномерному нагреванию на левом и правом краю соответственно. На рис. 2 представлен график распределения температуры $T(x, t)$ на 300 временном слое, то есть, $t = 300\tau$.

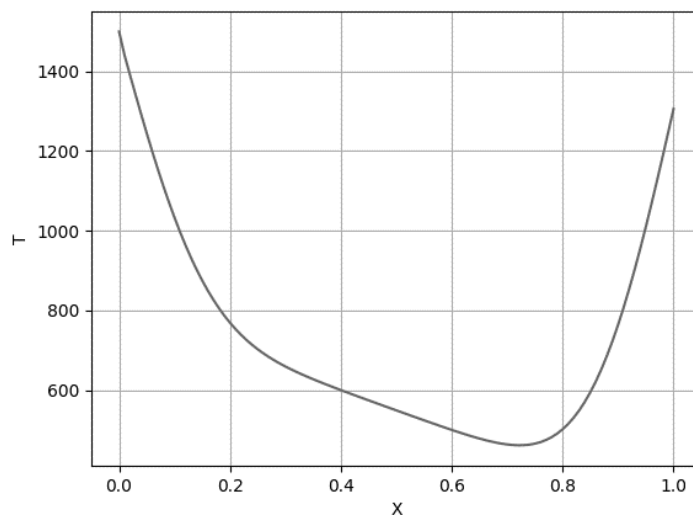


Рис. 2. – Распределение температуры $T(x, 300\tau)$.

На рис. 3 показан график распределения примеси в тот же самый момент времени.

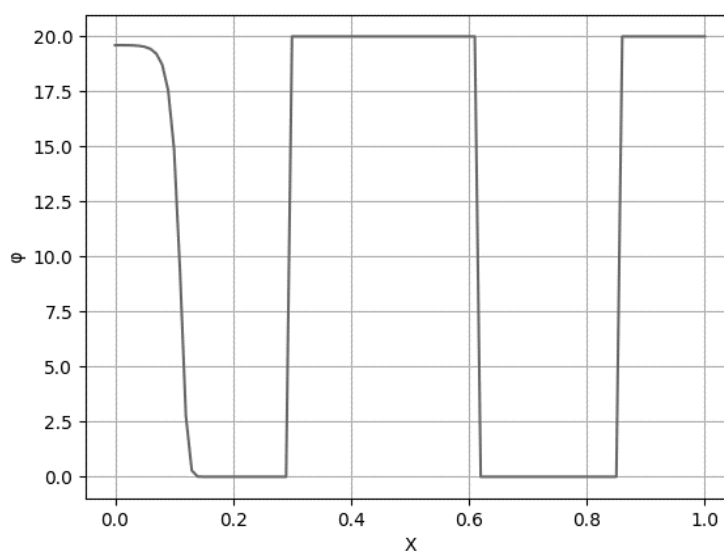


Рис. 3. – График концентрации $\varphi(x, 300\tau)$.

В силу выбранных краевых условий для уравнения теплопроводности весь кремневый образец нагревается, что естественно приводит к ускорению

процесса диффузии примеси. В качестве примера рассмотрим распределение температуры (рис. 4) и концентрации примеси (рис. 5) при $t = 4500\tau$.

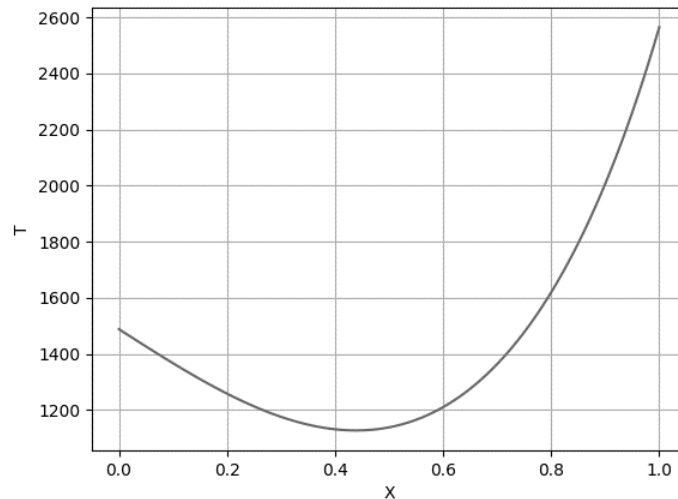


Рис. 4. – Распределение температуры $T(x, 4500\tau)$.

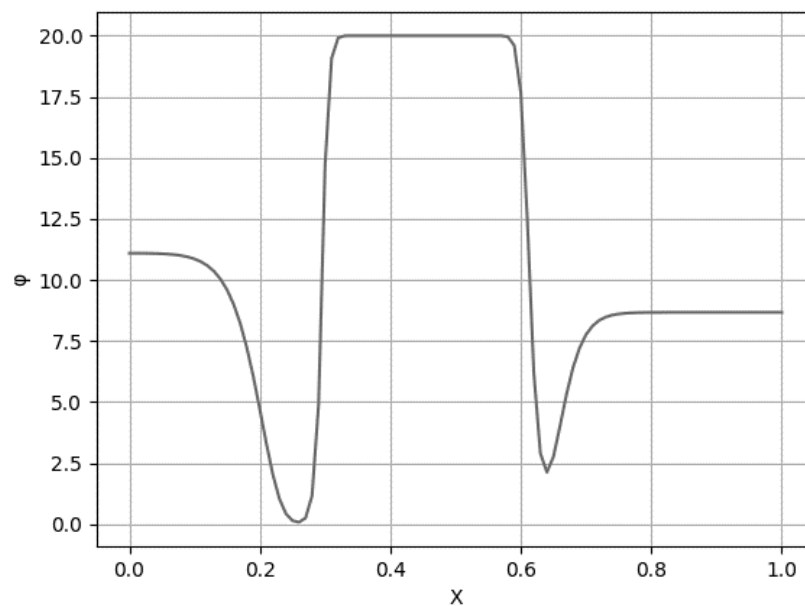


Рис. 5. – График концентрации $\varphi(x, 4500\tau)$.

Заключение

В работе рассмотрена математическая модель совместного термодиффузионного процесса. Поставлена начально-краевая задача для

параболической системы дифференциальных уравнений в частных производных. С использованием неявной разностной схемы для этой дифференциальной задачи построен численный алгоритм поиска приближенного решения, который основывается на методе прогонки. Проведено формальное описание этого алгоритма.

Литература

1. Матвеев А.Н. Молекулярная физика. - Москва: Высшая школа, 1999. – 400 с.
2. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. - 6-е изд. - Москва: Московский университет, 1999. - 798 с.
3. Fuziki M. E. K., Lenzi M. K., Ribeiro M. A., Novatski A., and Lenzi E. K. Diffusion Process and Reaction on a Surface. Hindawi Advances in Mathematical Physics. –2018, Volume 2018, Article ID 6162043. URL: doi.org/10.1155/2018/6162043
4. Yongbin G., Fei Z., Jianying W. A High Order Compact ADI Method for Solving 3D. Unsteady Convection Diffusion Problems. – 2018, Vol. 7, No. 1, Pp. 1-10.
5. Гурьев V., Никитин V., & Кофанов V. Исследование тепловлагообмена в высокопористых газонаполненных полимерах применительно к расчету их теплопроводности. International Journal for Computational Civil and Structural Engineering, 15(1), 2019, Сс. 67–77. URL: doi.org/10.22337/2587-9618-2019-15-1-67-77
6. Шевелев В.В. Интегральная формулировка решений краевых задач тепломассопереноса в областях с движущимися границами // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Технические науки». - 2021. - Т. 29. - №1. - Сс. 73-91. doi: 10.14498//tech.2021.1.6

7. Berger, J., Dutykh, D. Evaluation of the reliability of building energy performance models for parameter estimation // Computational Technologies. 2019. Vol. 24, No. 3. Pp. 4–32. DOI: 10.25743/ICT.2019.24.3.002.

8. Телеснин Р.В. Молекулярная физика. - 2-е изд. - Москва: Высшая школа, 1973. - 360 с.

9. Емельянов И.Г., Миронов В.И. Термодиффузионная задача наводороживания стальной оболочечной конструкции // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – № 3. – Сс. 27–35. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.3.03

10. Гадиева С.С., Гахраманов П.Ф. Применение методов конечных разностей для решения модельных уравнений теплопереноса // Вестник Дагестанского государственного университета. Серия 1: Естественные науки. 2017. №4. URL: cyberleninka.ru/article/n/primenenie-metodov-konechnyh-raznostey-dlya-resheniya-modelnyh-uravneniy-teplomassoperenosa

11. Deepak Jain, Abhijit Mukherjee, Naveen Kwatra. Numerical modelling of moisture diffusion in FRP with clustered microstructures. Applied Mathematical Modelling. 2016, V. 40, Pp. 1873–1886.

12. Котова Е.В., Еремин А.В., Кудинов В.А., Ткачев В.К., Кузнецова А.Э. Метод дополнительных искомых функций в задачах теплопроводности с переменными физическими свойствами среды. «Вестник Игэу». 2019 г. Вып. 2. Doi: 10.17588/2072-2672.2019.2.059-070

13. Мусорина Т.А., Петриченко М.Р. Математическая модель теплопереноса в пористом теле. Строительство: наука и образование. 2018. Т. 8. Вып. 3. Сс. 35-53. DOI: 10.22227/2305-5502.2018.3.3

14. Al-Amin M. and Murphy J. D. Combining Low-Temperature Gettering With Phosphorus Diffusion Gettering for Improved Multicrystalline Silicon. in IEEE Journal of Photovoltaics, Nov. 2017, vol. 7, no. 6, Pp. 1519-1527, doi: 10.1109/JPHOTOV.2017.2741100.

15. Штиллер В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. — М.: Мир, 2000. — 176 с.

16. Герцрикен С.Д., Дехтяр И.Я. Диффузия в металлах и сплавах в твёрдой фазе. - Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960. - 565 с.

References

1. Matveev A.N. Molekuljarnaja fizika [Molecular physics]. Moskva: Vysshaja shkola, 1999. 400 p.
2. Tihonov A.N., Samarskij A.A. Uravnenija matematicheskoj fiziki [Equations of mathematical physics]. 6-e izd. Moskva: Moskovskij universitet, 1999. 798 p.
3. Fuziki M. E. K., Lenzi M. K., Ribeiro M. A., Novatski A., and Lenzi E. K. Hindawi Advances in Mathematical Physics. 2018, Volume 2018, Article ID 6162043. URL: doi.org/10.1155/2018/6162043
4. Yongbin G., Fei Z., Jianying W. Unsteady Convection Diffusion Problems. 2018, Vol. 7, No. 1, Pp. 1-10.
5. Gur'ev V., Nikitin V., Kofanov V. International Journal for Computational Civil and Structural Engineering, 2019, 15(1), Pp. 67–77. URL: doi.org/10.22337/2587-9618-2019-15-1-67-77
6. Shevelev V.V. Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tehničeskogo universiteta. Serija «Tehničeskie nauki». 2021. T. 29. №1. Pp. 73-91. doi: 10.14498//tech.2021.1.6
7. Berger, J., Dutykh, D. Computational Technologies. 2019. Vol. 24, No. 3. Pp. 4–32. DOI: 10.25743/ICT.2019.24.3.002.
8. Telesnin R.V. Molekuljarnaja fizika [Molecular physics]. 2-e izd. Moskva: Vysshaja shkola, 1973. 360 p.

9. Emel'janov I.G., Mironov V.I. Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politehnicheskogo universiteta. Mehanika. 2018. № 3. Pp. 27–35. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.3.03
10. Gadieva S.S., Gahramanov P.F. Vestnik Dagestanskogo gosudarstvennogo universiteta. Serija 1: Estestvennye nauki. 2017. №4. URL: cyberleninka.ru/article/n/primenenie-metodov-konechnyh-raznostey-dlya-resheniya-modelnyh-uravneniy-teplomassoperenosa
11. Deepak Jain, Abhijit Mukherjee, Naveen Kwatra. Applied Mathematical Modelling. 2016, V. 40, Pp. 1873–1886.
12. Kotova E.V., Eremin A.V., Kudinov V.A., Tkachev V.K., Kuznecova A.Je. Vestnik Igjeu. 2019 G. Vyp. 2, Doi: 10.17588/2072-2672.2019.2.059-070
13. Musorina T.A., Petrichenko M.R. Stroitel'stvo: nauka i obrazovanie. 2018. T. 8. Vyp. 3. Pp. 33-53. DOI: 10.22227/2305-5502.2018.3.3
14. Al-Amin M. and Murphy J. D. IEEE Journal of Photovoltaics, Nov. 2017vol. 7, no. 6, Pp. 1519-1527, , doi: 10.1109/JPHOTOV.2017.2741100.
15. Shtiller V. Uravnenie Arreniusa i neravnovesnaja kinetika [Arrhenius equation and non-equilibrium kinetics]. M.: Mir, 2000. 176 p.
16. Gercriken S.D., Dehtjar I.Ja. Diffuzija v metallah i splavah v tvjordoju faze [Diffusion in metals and alloys in the solid phase]. Moskva: Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoi literatury, 1960. 565 p.