

15. Rowland R.E. Confocal microscopy opens the door to 3-dimensional analysis of cells / Rowland R.E., Nickless E.M. – Bioscene. – 2000. – 26(3). – P. 1–7.
16. Verveer P.J. A comparison of image restoration approaches applied to three-dimensional confocal and widefield fluorescence microscopy / Verveer P.J., Gemkow M.J., Jovin T.M. – J.Microscopy. – 1999. – 193. – P. 50–61.
17. Claxon N.S. Laser scanning confocal microscopy / Claxon N.S., Fellers T.J., Davidson M.W. – Olympus Fluoview Resource Center. – National High Magnetic Field Laboratory. – Retrieved on 2007-07-25.
18. Peternam E.A. Single molecule spectroscopy and microscopy for biomedical motors / Peternam E.A., Sosa H., Moerner W.Ю – Ann. Rev. Phys. Chem. – 2004. – 55. – P. 79–96.
19. Pawley J. Fundamental limits in confocal microscopy/ Pawley J. – Handbook of biological confocal microscopy. – New York: Plenum Press. – 1995. – P. 19.
20. Дюков В.Г. Растровая оптическая микроскопия / В.Г. Дюков, Ю.А. Кудеяров. – М. : Наука. – 1992. – 208 с.
21. Кондратов В.Т. Визуализация в метрологии: урони, напрвления, цели, задачи, методы и программное обеспечение/ В.Т. Кондратов // Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах, 2001. – №1. – С. 7–22.

Надійшла 5.9.2011 р.

УДК 539.234

Б.П. ЯЦИШИН, Н.І. ДОМАНЦЕВИЧ
Львівська комерційна академія

ОПТИМІЗАЦІЯ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИХ КРИТЕРІЇВ ЗІ СТВОРЕННЯ МІКРОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ЧУТЛИВИХ ЕЛЕМЕНТІВ СЕНСОРНИХ ПРИСТРОЇВ

Створено модель та проведено розрахунки з математичного прогнозування умов формування тонких плівок тернарних систем. Розроблена модельна графіка дає змогу оцінити часові зміни фізичних характеристик конденсатів.

The diagrammatical model is created and the calculation from mathematical prediction of forming requirements of thin films ternary systems is produced. The designed model graph enables to estimate changes of physical properties of condensates.

Ключові слова: тонкі плівки, термоелектрорушійна сила, часова стабільність.

Вступ. Для створення тонкопліткових матеріалів, які визначаються структурою та фізичними характеристиками, необхідними для використання та експлуатації, першочергово застосовуються методи математичного моделювання, з допомогою яких визначаються найбільш перспективні для досліджень склади та умови формування конденсатів. Отримані таким чином математичні моделі також використовуються як джерело інформації, необхідної для створення систем оптимального управління процесом “випаровування–конденсації”, і можуть застосовуватись для різних технологічних методів отримання конденсатів (дискретне випаровування сплавів, узгоджене випаровування тощо).

Методика досліджень. Технологічний процес отримання тонких плівок інтерметалідів та формування наноструктур на їх основі має низку особливостей щодо проведення моделювання, а саме: недостатній рівень автоматизації, відсутність засобів і методів оперативного контролю формування структур, дискретно-неперервний характер технологічних процесів, що призводять до утворення великої кількості різновидів структур, складність спостереження за зміною параметрів процесу “випаровування–конденсації” та перетворень “аморфна–кристалічна фаза”. Вибір самої математичної моделі визначається, з одного боку, обмеженнями, які накладаються концентраційним складом матеріалу, з іншого боку – низькою інформативністю пасивних статистичних методів дослідження технологічних особливостей формування структури конденсатів.

Виходячи із перспективності матеріалів тернарних систем рідкісноземельний (або 5-*d*) метал-перехідний метал–германій (R-M-Ge, де R: Sc, Y, La, Hf; M: Fe, Co, Ni) в якості термоелектричних перетворювачів, були додатково встановлені основні параметри тонкопліткового матеріалу, які визначали якісні характеристики первинного перетворювача, а саме – термо-е.р.с. – u_1 та часова стабільність – u_2 . Діапазони змін параметрів технологічних процесів визначався з літературних джерел та експериментально [1, 2]. При цьому було встановлено, що найбільш значущими факторами, що найсуттєвіше впливають на фізичні властивості РЗМ, є концентрація металу (x_1), швидкість росту (x_2) та температура підкладки під час конденсації (x_3).

Число проведених досліджень зі встановлення взаємозв'язку технологічних параметрів та фізичних характеристик зразків визначали згідно з ортогональним планом другого порядку Бокса-Вілсона [3].

Результати досліджень. При знаходженні оптимальної області значень факторів визначались умови планування експерименту [5, 6]. Факторний експеримент здійснювався з використанням 3-х змінних.

У табл. 1 наведено основні рівні та інтервали зміни досліджуваних незалежних величин x_1 , x_2 та x_3 при проведенні експерименту для створення нанокристалічних та мікрокристалічних конденсатів R-M-Ge.

Таблиця 1

Умови планування експерименту

Фактори та основні рівні факторів	x_1 , (C, ваг. %)	x_2 , (v_p , нм/с)	x_3 , (T, K)
Зоряне плече (+ α) 1,650	55	27	750
Верхній рівень (+1)	50,0	25	650
Основний рівень, Z_{of}	30	15	600
Нижній рівень (-1)	10	5	550
Зоряне плече (- α) 1,650	5	2	450

Створена на основі розрахунків матриця планування показує розкид значень факторів, які, відповідно до потреб досліджень, переведені у безрозмірні величини. Параметри оптимізації фізичних характеристик y_1 та y_2 відповідають дослідним натуральним значенням термо-е.р.с. – y_1 та часової стабільності – y_2 , відповідно. При цьому враховувались особливості вимірювання термо-е.р.с. плівкових зразків y_1 (за методикою, порівнюючи із зразковою платино-платинородієвою термопарою [6, 7]) та визначення часової стабільності y_2 (за зміни питомого електроопору та контрольними електронно-мікроскопічними структурними [2, 8]) і проводилось їх експериментальне оцінювання. Для статистичного аналізу рівнянь регресії було поставлено по 2 паралельних дослідження у центрі плану. На основі отриманих даних були визначені значення \hat{y}_1 та \hat{y}_2 , розраховані за отриманими рівняннями регресії (табл. 2). Аналіз отриманих даних проводили за оцінкою однорідності дисперсії вимірювань, яку порівнювали з критерієм Кохрена, визначаючи середньоквадратичне відхилення експериментально отриманого параметра (Y_1 або Y_2):

$$S_i^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{iu} - \hat{y}_i)^2}{n-1}, \quad (1)$$

де n – число паралельних дослідів (у нашому випадку воно дорівнює 2); y_i – середньоарифметичне значення, знайдене за значеннями параметра оптимізації у всіх точках. Однорідність дисперсій перевіряється за критерієм Кохрена, згідно якого:

$$G = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{i=1}^m S_i^2} \leq G_{кр}. \quad (2)$$

Експериментальне значення величини $G = 0,3262$ є значно менше критичного значення, визначеного за довідниковими таблицями [4, 5], згідно з якими $G_{кр} = G_{0,05(1,16)} = 0,4709$. При такій постановці експерименту вважається, що дисперсія розкидів значень S_i^2 є достатньо однорідною.

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^m S_i^2}{m} \quad (3)$$

$$S_e^2 = \sum 589,8424/16 = 36,8615 \text{ з числом ступенів свободи, що дорівнює } f = m(n-1). \quad (4)$$

Таблиця 2

Матриця планування і результати дослідів (для мікрокристалічних плівок)

№ з/п	X_1	X_2	X_3	Y_1	$Y_1 - \hat{y}_1$	Y_2	$Y_2 - \hat{y}_2$	$(Y_1 - \hat{y}_1)^2$	$(Y_2 - \hat{y}_2)^2$	S_i^2	S_e^2
1	+	+	+	-12	-5,13	2160	-1025	26,3169	105625		
2	-	+	+	-9	-2,13	3000	-185	4,5369	34225		
3	+	-	+	-8	-1,13	3500	315	1,2769	99225		
4	-	-	+	-7	-0,13	3200	15	0,0169	225		
5	+	+	-	-6	0,87	3100	-85	0,7569	7225		
6	-	+	-	-5	1,87	2900	-285	3,4969	81225		
7	+	-	-	-1	5,87	2800	-385	34,4569	148225		
8	-	-	-	3	9,87	2600	-585	93,5089	342225		
9	+1,650	0	0	-2	-4,87	3000	-185	23,7169	34225	589,8424	3958000
10	-1,650	0	0	7	13,87	3500	315	192,3769	99225		
11	0	+1,650	0	-5	1,87	3000	-185	3,4969	34225		
12	0	-1,650	0	-12	-5,13	2800	-385	26,3169	148225		
13	0	0	+1,650	-10	-3,13	3600	415	9,7969	172225		
14	0	0	-1,650	-13	-6,13	3800	615	37,5769	378225		
15	0	0	0	-15	-8,13	4000	815	66,0969	664225		
16	0	0	0	-15	-8,13	4000	815	66,0969	664225		
				Σ -110		Σ 50960		Σ 589,8424	Σ 3958000		
				$Y_1 = -6,87$		$Y_2 = 3185$		$S_e^2 = 36,86515$	$S_e^2 = 247375$		
								$G = 0,3262$	$G = 0,1678$		
								$G_{табл.} = 0,4709$			

Встановлена можливість отримання допустимої відтворюваності дозволила розпочати розрахунки коефіцієнтів регресії, для чого були складені таблиці, які відображали пряму та корельовану взаємодію між досліджуваними величинами (табл. 3) та використали формули:

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^N y_u}{N} = \bar{y}; \quad b_i = \frac{\sum_{u=1}^N x_{ui} \cdot y_u}{\sum_{u=1}^N x_{ui}^2}; \quad b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^N x_{ui} \cdot x_{uj} \cdot y_u}{\sum_{u=1}^N (x_{ui} \cdot x_{uj})^2}. \quad (5)$$

Дисперсію коефіцієнтів регресії знаходили за формулою:

$$S^2(b_i) = \frac{S_e^2}{\sum_{i=1}^m (x_i - \bar{x})^2} = \frac{S_e^2}{m} = 36,865/16 = 2,30 \quad (6)$$

Звідки $S(b_i) = 1,5179$, при $f_e = m(n-1) = 16(2-1) = 16$.

Коефіцієнти регресії для рівняння за термо-е.р.с. (\hat{y}_1) були визначені як:

$$b_1 = -23,85/13,445 = -1,773; \quad b_2 = 2,45/15,445 = 0,1586; \quad b_3 = -22,05/17,445 = -1,2639;$$

$$b_{11} = -0,125; \quad b_{22} = -0,875; \quad b_{33} = -0,125; \quad b_{12} = -5,1993; \quad b_{13} = -0,0022; \quad b_{23} = -1,4151; \quad b_0 = -26,03.$$

Відповідно рівняння регресії описувалось наступною формулою:

$$\hat{y}_1 = -26,03 - 1,773x_1 + 0,1586x_2 - 1,2639x_3 - 5,1993x_1 \cdot x_2 - 0,0022x_1 \cdot x_3 - 1,4151x_2 \cdot x_3 - 0,125x_1^2 - 0,875x_2^2 - 0,125x_3^2$$

Для спрощення вищеприведеного рівняння було перевірено значущість коефіцієнтів регресії за формулою відповідно до критерію Стьюдента (за t -критерієм)

$$t_i = \frac{b_j}{S(b)} \leq t_{кр} \quad (7)$$

Враховуючи, що величина $t_{кр} = 1,75$ (див. [4, 5]), можемо записати спрощене рівняння регресії.

$$\hat{y}_1 = -26,03 - 1,773x_1 - 5,1993x_1 \cdot x_2 - 1,4151x_2 \cdot x_3$$

Провівши аналогічні розрахунки за рівнянням часової стабільності (\hat{y}_2), знаходимо:

$$\hat{y}_2 = 3673,06 - 71,77x_1 + 381,35x_2 + 7,45x_3 + 116,62x_1 \cdot x_2 - 1267,17x_1 \cdot x_3 + 96,33x_2 \cdot x_3 - 142,5x_1^2 - 267,5x_2^2 - 555,0x_3^2.$$

Спростивши рівняння, аналогічно до вище наведеного та відкинувши неважливі коефіцієнти b_1, b_3, b_{12} , отримуємо рівняння регресії у вигляді:

$$\hat{y}_2 = 3673,06 + 381,35x_2 - 1267,17x_1 \cdot x_3 - 142,5x_1^2 - 267,5x_2^2 - 555,0x_3^2$$

Додатково проведена перевірка вибіркової дисперсії за критерієм Кохрена підтвердила їх однорідність, а розрахунки за критерієм Фішера – адекватність рівнянь регресії.

Таблиця 3

Експериментальні дані для розрахунку коефіцієнтів регресії

№ точки	X ₁	X ₂	X ₃	X ₁ X ₂	X ₂ X ₃	X ₁ X ₃	X ₁ ²	X ₂ ²	X ₃ ²	X ₁ Y ₁	X ₂ Y ₁	X ₃ Y ₁	X ₁ Y ₂	X ₂ Y ₂	X ₃ Y ₂	Y ₁	Y ₂
1	+	+	+	+	+	+	+	+	+	-12	-12	-12	2160	2160	2160	-12	2160
2	-	+	+	-	+	-	+	+	+	9	-9	-9	-3000	3000	3000	-9	3000
3	+	-	+	-	-	+	+	+	+	-8	8	-8	3500	-3500	3500	-8	3500
4	-	-	+	+	-	-	+	+	+	7	7	-7	-3200	-3200	3200	-7	3200
5	+	+	-	+	-	-	+	+	+	-6	-6	6	3100	3100	-3100	-6	3100
6	-	+	-	-	-	+	+	+	+	5	-5	5	-2900	2900	-2900	-5	2900
7	+	-	-	-	+	-	+	+	+	-1	1	1	2800	-2800	-2800	-1	2800
8	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-3	-3	-3	-2600	-2600	-2600	3	2600
9	+1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	+	+	-3,3	-2	0	4950	3000	0	-2	3000
10	-1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	+	+	-11,55	7	0	-5775	3500	0	7	3500
11	0	+1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	+	0	-8,25	0	0	4950	0	-5	3000
12	0	-1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	+	0	19,8	0	0	-4620	0	-12	2800
13	0	0	+1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	0	0	-16,5	0	0	5940	-10	3600
14	0	0	-1,650	0	0	0	0	0	+2,7225	0	0	21,45	0	0	-6270	-13	3800
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-15	4000
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-15	4000
							13,445	15,445	17,445	-23,85	2,45	-22,05	-965	5890	130	Σ=-110	Σ=50960
										-1,490	0,1531	-1,3778	-60,3	368,12	8,125	Ȳ ₁ =6,87	Ȳ ₂ =3185

Для проведення аналізу отриманих рівнянь використовуємо деякі логічні аспекти складання рівнянь регресії та графічний апарат комп'ютерного математичного пакету Maple 7. Враховуючи, що всі коефіцієнти регресії по першому рівнянню переважно мають від'ємний знак, можемо однозначно вказати, що значення термо-е.р.с. збільшується в разі зростання концентрації металевих компонентів (R+M). Водночас зростання цих факторів, відповідальних за зменшення термо-е.р.с., зумовлює зменшення параметра y_2 – часової стабільності, що вступає в конфлікт з роботоздатністю тонкоплівкового елементу в якості термоелектричного перетворювача. Це знаходить своє відображення у позитивних значеннях коефіцієнтів b_0 та b_2 в рівнянні регресії за параметром y_2 . Отже, для оптимізації процесу формування якості необхідно

розв'язувати так звану “компромісну” задачу – знаходження оптимального рішення для обох, взаємно протилежних параметрів.

Першим кроком дослідження рівнянь регресії є їх приведення до канонічної форми, тобто перехід до нової системи координат, що описує поверхню відклику.

Визначимо нові значення координат центру поверхні відклику, використовуючи коефіцієнти із рівнянь регресії та координати центру поверхні відклику в старій системі:

$$\begin{cases} 2b_{11} \cdot x_{c1} + b_{12} \cdot x_{c2} + b_{13} \cdot x_{c3} + b_1 = 0 \\ 2b_{22} \cdot x_{c2} + b_{12} \cdot x_{c1} + b_{23} \cdot x_{c3} + b_2 = 0 \\ 2b_{33} \cdot x_{c3} + b_{13} \cdot x_{c1} + b_{23} \cdot x_{c2} + b_3 = 0 \end{cases} \quad (8)$$

```
> eqn1:=-0.2500*x-5.1993*y-0.0022*z=1.7730:
eqn2:=-5.1993*x-1.750*y+1.4151*z=-0.1586:
eqn3:=-0.0022*x+1.4151*y-0.2500*z=1.2639:
soln:=solve({-0.2500*x-5.1993*y-0.0022*z=1.7730,-5.1993*x-1.750*y+1.4151*z=-0.1586,-
0.0022*x+1.4151*y-0.2500*z=1.2639},{x, y, z});
soln := {y = -.2587686030, x = -1.653086688, z = -6.505786637}
```

```
> eqn1:=-285.0*x+116.62*y-1267.17*z=71.77:
eqn2:=116.62*x-535.0*y+96.33*z=381.35:
eqn3:=-1267.17*x+96.33*y-1110.0*z=7.451:
soln:=solve({-285.0*x+116.62*y-1267.17*z=71.77,116.62*x-535.0*y+96.33*z=381.35,-
1267.17*x+96.33*y-1110.0*z=7.451},{x, y, z});
soln := {x = .05861146556, y = -.7246064918, z = -.1365072380}
```

Отримуємо наступні значення нових координат центру поверхні відклику:

$$X_1^c = -0,258; X_2^c = -1,653; X_3^c = -6,505 \text{ (для } \hat{y}_1)$$

$$X_1^c = 0,058; X_2^c = -0,724; X_3^c = -0,136 \text{ (для } \hat{y}_2)$$

та параметрів Y_1 та Y_2 ($Y_1 = -40,0015$ та $Y_2 = 3256,06$).

У такому випадку канонічна форма рівняння буде мати вигляд :

$$\hat{Y}_1 - Y^c = B_{11} \cdot X_1^2 + B_{22} \cdot X_2^2 + B_{33} \cdot X_3^2 \quad (9)$$

де B_{ji} – коефіцієнти канонічного рівняння.

Розрахунок проводимо, використовуючи характеристичний детермінант та прирівнюючи його до нуля:

$$\begin{vmatrix} (b_{11} - B) & 0,5b_{12} & 0,5b_{13} \\ 0,5b_{21} & (b_{22} - B) & 0,5b_{23} \\ 0,5b_{13} & 0,5b_{23} & (b_{33} - B) \end{vmatrix} = 0 \quad (10)$$

Отримані за методикою [3–5] та розраховані через Maple 7 канонічні рівняння другого порядку мають вигляд:

$$\hat{Y}_1 - 40,0015 = -3,2205 X_1^2 - 0,1240 X_2^2 + 2,21 X_3^2 \quad (11)$$

$$\hat{Y}_2 - 3256,06 = -1087,05 X_1^2 - 145,192 X_2^2 + 267,246 X_3^2 \quad (12)$$

Поверхня відклику задана рівняннями у графічній програмі

```
> plot3d(40.0015-3.2205*X^2-0.1240*Z^2, X=-30..40,Z=-60..70);
```

```
> plot3d(3256.06-1087.05*X^2-145.192*Z^2, X=-30..40,Z=-60..70);
```

та зображена на рис. 1 відповідає отриманим канонічним рівнянням.

Проведений аналіз поверхонь відклику виявив, що збільшення концентрації металу (вісь X_1) та збільшення швидкості (вісь X_2) призводять до початкового зростання термо-е.р.с. у певному концентраційному діапазоні та подальшого зменшення цієї величини.

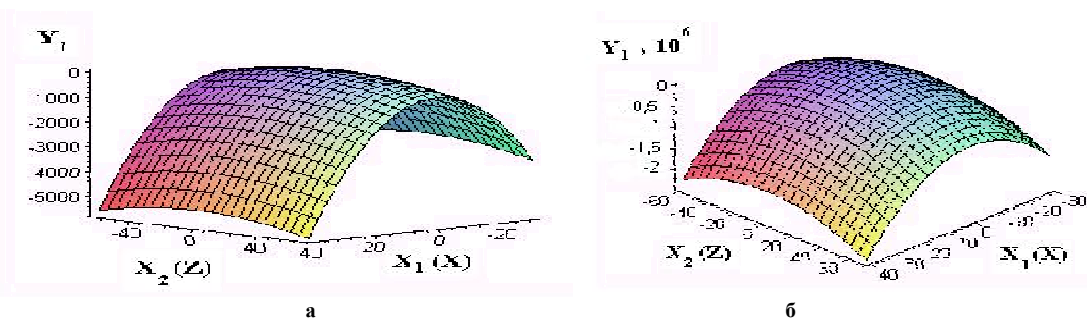


Рис. 1. Просторове зображення поверхні відклику канонічного рівняння другого порядку для визначальних параметрів по термо-е.р.с. Y_1 (а) та часовій стабільності Y_2 (б)

Однак, за результатами досліджень відомо, що збільшення вмісту металу в тонкоплівковій інтерметалічній системі неодмінно приводить до зниження термічної та часової стабільності матеріалу, який можна описати як “нанокристалічні або мікроткристалічні утворення, розміщені в аморфній матриці”. Відповідно до канонічного рівняння з часової стабільності видно, що швидкість росту v_p (X_2) не впливає на

часову стабільність конденсату, що не узгоджується з результатами експериментальних спостережень і свідчить про доцільність використання регресивного аналізу для вироблення підходів щодо формування термічних та хронометрично стабільних мікрокристалічних матриць.

Оскільки вплив експериментальних факторів на параметри оптимізації доволі складний, то для вирішення цього питання вважається необхідним знайти розв'язок "компромісної задачі", застосовуючи аналітичний і графічний методи аналізу. Для цього складаємо систему рівнянь, використовуючи метод невизначених множників Лагранжа [3]:

$$\begin{cases} (b_{11} - I)x_1 + 0,5b_{12}x_2 + 0,5b_{13}x_3 + 0,5b_1 = 0 \\ 0,5b_{21}x_1 + (b_{22} - I)x_2 + 0,5b_{22}x_3 + 0,5b_2 = 0 \\ 0,5b_{31}x_1 + 0,5b_{32}x_2 + 0,5(b_{33} - I)x_3 + 0,5b_3 = 0 \end{cases} \quad (13)$$

Рішення системи здійснюється за заданих значень множника Лагранжа λ , яке визначається згідно із параметром Хорля:

$$\lambda' = 2(B_{\max} - b_{kk}) = 2(2,21 + 0,125) = 4,67 \\ 4,67 \geq \lambda > 2,21$$

Підставляючи значення коефіцієнтів регресії та декількома різними значеннями множників Лагранжа λ (від 4,67 до 2,21) до системи рівнянь 13, розраховуємо значення x_1 та x_2 та визначаємо оптимальні технологічні режими (табл. 4, 5).

Таблиця 4

Значення параметрів оптимізації y_1 , вираховані для різних множників Лагранжа

№ з/п	l	X_1	X_2	X_3	y_1
1	2,25	- 2,56	7,74	- 8,84	- 38,6297
2	2,5	- 1,87	1,55	- 0,65	- 10,605
3	3,0	- 0,32	0,56	- 0,74	-23,1765
4	3,5	- 0,23	0,32	- 0,47	-24,685
5	4,0	- 0,19	0,22	- 0,35	-24,9517
6	4,5	- 0,16	0,16	- 0,28	-25,2013

Таблиця 5

Значення параметрів оптимізації y_2 , вираховані для різних множників Лагранжа

№ з/п	λ	X_1	X_2	X_3	y_2
1	270	-0,29	0,38	-0,41	3257,82
2	370	0,29	0,40	0,27	3667,52
3	470	0,10	0,14	0,25	3637,73
4	570	0,06	0,08	0,22	3658,41
5	670	0,20	0,04	0,06	3652,23
6	770	0,18	0,05	0,03	3667,99

За даними розрахунків (табл. 4, 5) можна зауважити, що найбільш прийнятні значення експлуатаційних показників нанокристалічних та мікрокристалічних плівок R-M-Ge як датчиків (максимальний час експлуатації за помірних значень проникності) відповідають певній області концентрації компонентів та умовам отримання.

Проведені розрахунки дали змогу визначити оптимальні значення сумарної концентрації металевих компонент (R+M) та умов росту, які забезпечують найкращі фізичні та експлуатаційні властивості мікрокристалічних плівок і відповідають досягненню необхідного рівня якості первинного перетворювача. Розв'язання цієї „компромісної задачі” провели графічним методом. Для цього визначили кут обертання нової системи координат відносно старої для кожного із параметрів, використовуючи відомі тригонометричні рівняння.

Обчислення показали, що для рівняння (3.19) $\sin \varphi_1 = 0,4286$ та $\cos \varphi_2 = 0,5713$. Це відповідає кутам повороту $\varphi_1 = 25,37^\circ$ та $\varphi_2 = 56,15^\circ$. Для рівняння (3.20) $\sin \varphi_3 = 0,1344$ та $\cos \varphi_4 = 0,8656$. Це відповідає кутам повороту $\varphi_3 = 7,72^\circ$ та $\varphi_4 = 30,04^\circ$. Координати центру кожної з нових систем координат визначені за рівняннями 3.16 і наведені раніше.

Радіус сфери, яка обмежує область оптимальних значень параметрів оптимізації (R), визначали за даними табл. 4 за рівнянням:

$$R^2 = \sum_{i=1}^n X_i^2 \quad (14)$$

Тобто $R^2 = 144,6168$. Розраховане значення радіуса складає 12,0256.

$$X_1^c = -0,258; X_2^c = -1,653; X_3^c = - 6,505 \text{ (для } y_1)$$

На рис. 2 наведено приклад розв'язання „компромисної задачі” графічним методом. Для цього в кожній системі координат побудовано двомірний переріз поверхні відклику за фіксованого бажаного значення параметра оптимізації.

Як можна бачити з наведеного рис. 2, перетин ліній, які відповідають цим перерізам, попадає всередину області оптимальних значень y_1 та y_2 . Цьому перетину відповідають такі координати: $x_1 = 0,5$, $x_2 = 0,5$. Тобто на основі математичного моделювання, дослідження поверхні відклику та зв'язання компромисної задачі оптимізовано склад та умови отримання тонкоплівкового мікрокристалічного матеріалу R-M-Ge, а саме – загальна концентрація металу в мікрокристалічній плівці, що характеризувалась максимально можливими параметрами по термо-е.р.с. та часовій стабільності, рівна $c = 40$ ат. % при дотриманні умов напильня – $v_p = 20$ нм/с (рис. 3).

Аналогічно визначені оптимальні значення концентрацій компонентів та умов отримання для аморфних плівок, які характеризувались максимальною стабільністю та позитивними значеннями термо-е.р.с., були $c = 22$ ат. % при $v_p = 5$ нм/с.

Висновки. Розроблена модельна графіка дає змогу оцінити часові зміни фізичних характеристик тонкоплівкових матеріалів у взаємозв'язку з концентраційними змінами складу конденсату, умовами його формування (через швидкість росту та температуру відпалу), що дозволило прогнозувати отримання нанорозмірного матеріалу із характеристиками придатними для створення високочутливих стабільних сенсорних пристроїв.

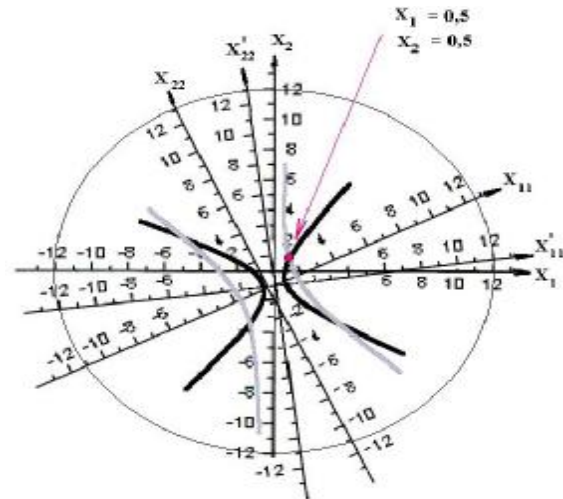


Рис. 2. Графічне рішення компромисної задачі для значень $y_1 = -24,9517$ та $y_2 = 3667,52$

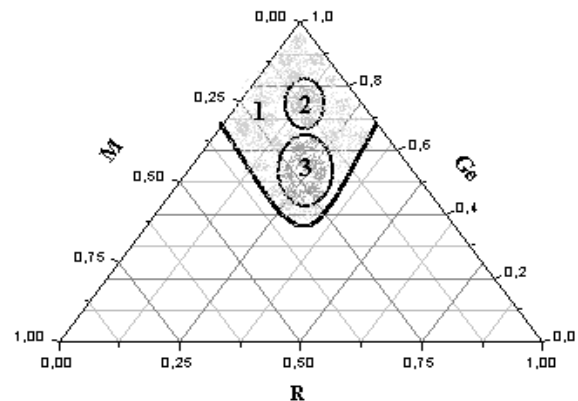


Рис. 3. Розміщення найбільш перспективних для досліджень концентраційних областей тонкоплівкових матеріалів R-M-Ge: 1 – загальна область; 2 – для аморфних конденсатів; 3 – для мікрокристалічних та нанокристалічних конденсатів

Література

1. Байцар Г. Вплив термодинамічних умов напильня на властивості та кінетику кристалізації аморфних конденсатів Hf-(Fe, Co, Ni) – Ge / Г. Байцар, О. Миколайчик, Б. Яцишин // Фізика і хімія твердого тіла. – 2005. – Т. 6. – № 1. – С. 74–77.
2. Яцишин Б.П. Матеріали та технології формування аморфних та наноструктурних плівок на основі германідів РЗМ : [монографія] / Яцишин Б.П. – Львів : вид-во Львівської комерційної академії, 2008. – 336 с.
3. Рузинов Л.П. Статистические методы оптимизации химических процессов / Рузинов Л.П. – М. : Химия, 1972. – 200 с.
4. Рузинов Л.П. Планирование эксперимента в химии и химической технологии / Л.П. Рузинов, Р.И. Слободчикова. – М. : Химия, 1980. – 280 с.
5. Ашназарова С.Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С.Л. Ашназарова, В.В. Кафаров. – М. : Высшая школа, 1985. – 328 с.
6. Точность контактных методов измерения температуры / [А.Н. Гордов, Я.В. Малков, Н.Н. Эргардт, Н.А. Ярышев]. – М. : Изд-во стандартов, 1976. – 232 с.
7. Методы измерения характеристик термоэлектрических материалов и преобразователей / [А.С. Охотин, А.С. Пушкарский, Р.П. Боровикова, В.А. Симонов]. – М. : Наука, 1974. – 166 с.
8. Структура, электропроводность и магнитные характеристики пленок РЗМ (Y, La, Sc)-Fe-Ge / [Яцишин Б. П., Миколайчук А. Г., Фреик Д. М. та ін.] // Изв. РАН. Неорган. матер. – 2009. – Т. 45. – № 3. – С. 1–6.

Надійшла 9.9.2011 р.