



## Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 537.226

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9063>

### Модель взаимодиффузии при формировании тонких плёнок металлов на монокристаллическом кремнии в условиях ограниченной растворимости компонентов

Н. Н. Афонин<sup>1✉</sup>, В. А. Логачева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный педагогический университет,  
ул. Ленина, 86, Воронеж 394043, Российская Федерация

<sup>2</sup>Воронежский государственный университет,  
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

#### Аннотация

Для создания выпрямляющих и омических контактов к монокристаллическому кремнию в технологии полупроводниковых и микроэлектронных приборов применяются тонкие плёнки ряда металлов. Общими особенностями используемых контактных систем Me–Si является малая растворимость компонентов друг в друге и поликристаллический характер металлических плёнок. Твёрдофазное взаимодействие в процессе осаждения металлов на монокристаллический кремний и последующий вакуумный отжиг приводят к перераспределению компонентов в окрестности межфазной границы Me/Si. Разработка механизма твёрдофазного взаимодействия тонких плёнок металлов и монокристаллического кремния является актуальной задачей материаловедения твёрдотельной электроники. Цель статьи – разработка количественной модели взаимодиффузии в системе Me–Si в условиях ограниченной растворимости компонентов.

Предложен механизм формирования систем Me–Si, основанный на диффузии и сегрегации кремния в области межзёренных границ металла и ограниченном образовании комплексов в процессе диффузионного проникновения металла в кремний. Разработана количественная модель реакционной взаимодиффузии в системах тонкая плёнка металла – монокристаллический кремний в условиях ограниченной растворимости компонентов. Методом математического моделирования исследовано взаимодействие магнетронным способом распылённых металлов Ti, W, Nb с монокристаллическим кремнием в процессе изотермического вакуумного отжига. Численным анализом полученных методом Резерфордского обратного рассеяния экспериментальных концентрационных распределений Me и Si определены значения их индивидуальных коэффициентов диффузии в системах Me–Si.

Модель может быть использована для эмпирического исследования перераспределения компонентов в двухслойных системах с ограниченной растворимостью компонентов, а также для прогнозирования технологических режимов в производстве изделий электронной техники.

**Ключевые слова:** моделирование, реакционная взаимодиффузия, ограниченная растворимость, тонкие плёнки металлов, монокристаллический кремний

**Для цитирования:** Афонин Н. Н., Логачева В. А. Модель взаимодиффузии при формировании тонких плёнок металлов на монокристаллическом кремнии в условиях ограниченной растворимости компонентов. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(1): 129–135. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9063>

**For citation:** Afonin N. N., Logachova V. A. A model of interdiffusion occurring during the formation of thin metal films on single-crystal silicon under conditions of limited solubility of the components. *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy = Condensed Matter and Interphases*. 2022;24(1): 129–135. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9063>

✉ Афонин Николай Николаевич, e-mail: [nafonin@vspu.ac.ru](mailto:nafonin@vspu.ac.ru)

© Афонин Н. Н., Логачева В. А., 2022



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

## 1. Введение

В технологии полупроводниковых и микроэлектронных приборов для создания выпрямляющих и омических контактов к кремнию используются плёнки металлов Al, Pt, Nb, Au, Ag, Co, Pd, Ni, Ti и W [1]. Процесс создания контактов предусматривает осаждение металла на кремний и последующий отжиг в инертной среде. Простейшие представления о взаимодействиях металла с полупроводником заключаются в том, что присутствие металла в кристаллической решётке кремния приводит к ослаблению и разрыву ковалентных связей Si–Si с образованием подвижных атомов кремния [2]. Поток атомов кремния в направлении межфазной границы (МФГ) металл–кремний сопровождается направленным в противоположном направлении потоком атомов металла. Таким образом, возникает процесс взаимного диффузионного перераспределения как металла в кремнии, так и кремния в металлической плёнке. Различие в коэффициентах диффузии мигрирующих навстречу друг другу атомов приводит к появлению эффекта Киркендалла [3], проявляющемуся в перемещении межфазной границы в диффузионной паре.

Физико-химическое взаимодействие металлов с кремнием приводит к образованию эвтектических систем. В случае, если диффундирующие атомы металла обладают электроотрицательностью, существенно отличающейся от электроотрицательности Si, может проходить твердофазная химическая реакция образования силицидов [1, 4]. Предполагается послойный рост на МФГ Me/Si силицидных фаз с разным содержанием кремния и металла [5].

Общая особенность используемых систем Me–Si заключается в том, что металл после осаждения на кремний и в процессе последующих отжигов в инертной среде находится в поликристаллическом состоянии. Термообработка способствует движению границ зерен в металле и ускоренной диффузии Si в металлической плёнке. Однако существующие представления о взаимодиффузии в системе Me–Si не учитывают роль межзёренных границ в процессе диффузионного роста силицидных фаз и образования твердых растворов в широком температурном диапазоне.

Другой особенностью используемых систем M–Si является малая растворимость кремния в кристаллитах металла и металла в монокристаллическом кремнии. Вопрос о механизмах диффузии используемых металлов в кремнии

и кремния в металле в литературе разработан недостаточно.

Для контроля перераспределения компонентов в окрестности МФГ металл–кремний и получения требуемых в технологии полупроводниковых и микроэлектронных приборов электрических конструктивно-технологических параметров формируемых приборных структур необходима разработка механизма твердофазного взаимодействия тонких плёнок металлов и монокристаллического кремния. Поэтому моделирование процессов взаимодиффузии, сегрегации и твердофазных химических реакций в системе Me–Si остается актуальной и важной задачей материаловедения твердотельной электроники.

Целью статьи является разработка модели взаимодиффузии при формировании систем тонкая плёнка металла – монокристаллический кремний в условиях ограниченной растворимости компонентов.

## 2. Описание модели

Будем полагать, что при взаимодействии металла с монокристаллическим кремнием происходит частичное разрушение его кристаллической решётки. При этом часть атомов кремния, входящих в состав кристаллической решётки, высвобождается и переходит в свободное, способное к миграции состояние. В моно-Si они мигрируют как собственные междоузельные атомы, а в плёнке металла – в его межзёренном пространстве.

Кремний имеет малую растворимость в объёме кристаллитов металла. Поэтому в отношении процесса растворения кремния в плёнке металла будем полагать, что в кристаллитах металла диффузия и растворение кремния отсутствуют. Однако в условиях малой растворимости в кристаллитах возможна глубокая диффузия кремния по межзёренным границам и растворимость в межзёренном пространстве, содержащем высокую концентрацию дефектов. В результате предел растворимости кремния в межзёренном пространстве металла может значительно превышать таковой в объёме кристаллитов.

Межзёренные границы содержат выходящие на поверхность зёрен металла координационно-ненасыщенные связи и представляют собою ловушечные центры для кремния, характеризующие наличие вакантных позиций для его захвата. Предполагается обменный механизм захвата кремния на ловушки в металле – с высвобождением свободного металла (кремний в ловушках

замещает металл). Процесс образования твёрдого раствора кремния в металле будем представлять, как диффузионное проникновение подвижного кремния из фазы моно-кремния в межзёрненное пространство плёнки металла с последующим частичным сегрегационным захватом на свободные ловушечные центры. В результате мигрирующие в плёнке Me атомы Si иммобилизуются на границах зёрен Me, теряя свою подвижность.

Эта стадия процесса осуществляется по механизму физической сорбции, без химического взаимодействия с образованием соединений (силицидов). Она носит топохимический характер, происходит в объеме плёнки Me в результате диффузионного проникновения в него кремния, локализуясь на межзёрненных границах, где потери энергии на деформацию связей минимальны, и существует некоторый свободный объем, облегчающий переориентацию реагирующих частиц. Захват кремния на ловушки будет происходить до тех пор, пока все они не заполнятся. По мере заполнения ловушек процесс растворения кремния в металле подходит к своему насыщению. По численному значению концентрация ловушек будет совпадать с пределом растворимости кремния в межзёрненном пространстве поликристаллического металла и составлять долю  $g$  от общей концентрации металла.

В отношении процесса растворения металла в фазе монокристаллического кремния будем полагать, что по мере диффузионного проникновения металла в кремний происходит процесс распада твёрдого раствора металла в кремнии с образованием неподвижных многочастичных комплексов, содержащих собственные точечные дефекты кремния и атомы металла. Этим процессом ограничивается растворимость металла в монокристаллическом кремнии.

Многие металлы при взаимодействии с кремнием способны образовывать ряд силицидов с различным содержанием компонентов. В рамках предлагаемого механизма эта способность интерпретируется следующим образом. Межзёрненное пространство плёнки металла обладает повышенной концентрацией дефектов и, соответственно, необходимым свободным объемом для потенциального образования силицидов, имеющих разные с металлом молярные объёмы. На развитой стадии процесса и при повышенной температуре отжига в окрестности межфазной границы раздела (МФГ) Me/Si со стороны плёнки металла и в её глубине возможна

стадия химической сорбции с образованием силицидов, обогащённых металлом. В окрестности МФГ Me/Si со стороны кремния на основе образованных комплексов возможно образование силицидов, обогащённых кремнием. Необходимый свободный объем для этого будут составлять собственные точечные дефекты кремния. Образование силицидов происходит в этом случае не путем послойного роста на МФГ Me/Si, а внутри довольно протяженной реакционной зоны в её окрестности, соизмеримой с исходной пленкой Me. Большая протяженность этой зоны свидетельствует об относительно низкой скорости твердофазной реакции по сравнению со скоростью диффузии подвижных атомов Si и металла.

Удобная с точки зрения численного анализа математическая форма описания процесса взаимодиффузии была предложена в [6] для случая бинарной системы с неограниченной растворимостью. Она не учитывает возможные химические превращения в процессе взаимодиффузии и в качестве исходного положения предполагает неизменность мольного объема системы, связанную с изменением его состава. Процесс в [6] описывается краевой задачей для двух уравнений диффузии, содержащих один эффективный коэффициент взаимодиффузии, являющийся линейной комбинацией индивидуальных коэффициентов диффузии компонентов.

Теория [6] применяется к образованию и росту пограничных фаз в диффузионной зоне [7–10].

В [11] теория [6] впервые развита на случай объемных реакций образования силицидов металла в процессе взаимодействия пленки образующего силициды металла Ni с SiC. Однако модель [11] не позволяет хорошо описать перераспределение компонентов внутри имеющей большую протяженность реакционной зоны. Это связано, на наш взгляд, с отсутствием учёта изменения мольного объема системы в процессе твердофазной реакции образования силицидов.

В [12–14] математическая форма [6] использовалась в количественной модели, развивающей теорию [6] на случай реакционной взаимодиффузии в двухслойных системах металл-оксид второго металла с ограниченной растворимостью компонентов. Показана её применимость к описанию процесса формирования сложных оксидов в тонкопленочных поликристаллических системах Co–TiO<sub>2</sub> и Fe–TiO<sub>2</sub> не путем послойного роста на границе раздела металл-оксид, а по всей толщине пленки TiO<sub>2</sub>.

В [15] теория [6] развита в модели реакционной взаимодействия в нестехиометрических поликристаллических плёночных оксидных системах с ограниченной растворимостью в условиях вакуумного отжига. Модель [16] применена к описанию образования фаз сложных оксидов распределённых по глубине системы двух нестехиометрических поликристаллических оксидов титана и кобальта.

Вопрос о распространении теории [6] на случай плёнка металла – монокристаллический кремний в условиях ограниченной растворимости компонентов остаётся открытым.

Будем рассматривать следующие компоненты системы:

- атомы кремния А, составляющие решётку монокристаллического кремния и находящиеся в неподвижном состоянии;

- атомы подвижного кремния В, образующиеся в результате взаимодействия металла с кремнием;

- свободные ловушечные центры  $C_t$  для подвижного кремния в межзёренном пространстве металла;

- атомы кремния  $C_{Bt}$ , захваченные на ловушки в межзёренном пространстве металла;

- атомы подвижного (свободного) металла С;
- неподвижные комплексы  $C_p$  в кремнии, содержащие атом металла и кремния.

Полная концентрация кремния складывается из:

- концентрации кремния  $C_A$  в узлах кристаллической решётки кремния А;

- концентрации  $C_B$  подвижного кремния В;

- концентрации кремния  $C_{Bt}$ , захваченного на ловушки Вt в межзёренном пространстве металла и

- концентрации кремния  $C_{Cp}$  в составе комплексов металл-кремний  $C_p$ :

$$C_A + C_B + C_{Bt} + C_{Cp}.$$

Полная концентрация металла складывается из:

- концентрации подвижного (свободного) металла С;

- концентрации металла в составе свободных ловушечных центров для подвижного кремния в межзёренном пространстве металла  $C_{Bt}$

- концентрации металла  $C_{Cp}$  в составе комплексов металл-кремний  $C_p$ :

$$C_C + C_{Bt} + C_{Cp}.$$

Способными к диффузионной миграции компонентами системы являются атомы под-

вижного металла С и атомы подвижного кремния В, высвобожденные в присутствии металла из кристаллической решётки кремния. Если начало системы отсчёта положить на внешней границе плёнки Ме, то при соотношении индивидуальных коэффициентов диффузии ( $D_C \gg D_B$ ) будет происходить перемещение межфазной границы Ме–Si к поверхности плёночной системы вследствие эффекта Киркендалла [3]. При этом не способные к диффузионной миграции компоненты системы будут играть роль инертных меток в опыте Смигельска и Киркендалла [3].

В нашем случае неизменность мольного объёма системы предполагается качественной картиной процесса. Поэтому полагаем, что в системе Ме–Si диффузионное перемешивание Ме и Si также может быть описано в рамках математического формализма теории [6]. Определим эффективный коэффициент взаимодействия для моделируемой системы в виде:

$$D^* = \frac{D_B \cdot C_C + D_C \cdot C_B}{C_{tot}}, \quad (1)$$

где  $D_B$  и  $D_C$  – индивидуальные коэффициенты диффузии подвижных компонентов – свободного кремния и металла соответственно,  $C_{tot} = C_A + C_B + C_C + C_{Cp} + C_{Bt} + C_{Ct}$  – общая (суммарная) концентрация всех компонентов системы.

Будем полагать, что скорость разрушения кремния А в узлах кристаллической решётки и скорость генерации подвижного кремния В прямо пропорциональны концентрации кремния  $C_A$  в узлах его кристаллической решётки А и концентрации металла  $C_C$ , находящегося в кремнии С. Уравнение для концентрации кремния  $C_A$  в узлах кристаллической решётки А имеет вид:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) - k_1 \cdot C_C \cdot C_A. \quad (2)$$

Будем полагать, что подвижный кремний В участвует в трёх процессах:

- генерации в результате разрушения кристаллической решётки кремния со скоростью прямо пропорциональной концентрации атомов в узлах кристаллической решётки кремния А и концентрации атомов подвижного металла С;

- диффузии в кремнии и в межзёренном пространстве плёнки металла, испытывая сегрегационный захват со скоростью прямо пропорциональной концентрации  $C_{Ct}$  свободных ловушек  $C_t$  металла и концентрации  $C_B$  подвижного кремния В;



– захвате в состав неподвижных комплексов  $C_p$  в кремнии со скоростью прямо пропорциональной концентрации атомов подвижного металла С.

В соответствии с этим уравнение для концентрации  $C_B$  подвижного кремния В имеет вид:

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) + k_1 \cdot C_A \cdot C_C - k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B - k_3 \cdot C_B \cdot C_C. \quad (3)$$

Кремний захватывается на ловушки в межзёрненном пространстве металла со скоростью, прямо пропорциональной концентрации  $C_B$  подвижного кремния В и концентрации  $C_{Ct}$  свободных ловушек  $C_t$ . Уравнение для концентрации  $C_{Bt}$  кремния Вt, захваченного на ловушки в межзёрненном пространстве металла:

$$\frac{\partial C_{Bt}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_{Bt}}{\partial x} \right) + k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B. \quad (4)$$

Скорость заполнения ловушек  $C_t$  в межзёрненном пространстве металла прямо пропорциональна их концентрации  $C_{Ct}$  и концентрации  $C_B$  подвижного кремния В. Уравнение для концентрации  $C_{Ct}$  свободных ловушечных центров  $C_t$ :

$$\frac{\partial C_{Ct}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_{Ct}}{\partial x} \right) - k_2 \cdot C_B \cdot C_{Ct}. \quad (5)$$

Уравнение диффузии для концентрации  $C_C$  подвижного металла С учитывает высвобождение его из состава ловушек в межзёрненном пространстве металла по обменному механизму и захват в состав неподвижных комплексов в кремнии со скоростью прямо пропорциональной концентрации  $C_B$  подвижного кремния В:

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_C}{\partial x} \right) + k_2 \cdot C_{Ct} \cdot C_B - k_3 \cdot C_B \cdot C_C, \quad (6)$$

Уравнение для концентрации  $C_{Cp}$  атомов металла, иммобилизованных в комплексах  $C_p$ , учитывает, что скорость связывания подвижного Ме в состав комплексов металл-кремний прямо пропорциональна концентрации  $C_B$  подвижного кремния В и концентрации  $C_C$  металла С, находящегося в кремнии:

$$\frac{\partial C_{Cp}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D^* \frac{\partial C_{Cp}}{\partial x} \right) + k_3 \cdot C_B \cdot C_C. \quad (7)$$

В уравнениях (2)–(7)  $t$  – время,  $x$  – глубина, отсчитываемая от внешней поверхности плёнки металла,  $k_1, k_2$  и  $k_3$  – константы скорости генера-

ции подвижного кремния, захвата его на ловушки в плёнке металла и образования комплексов металл-кремний соответственно.

На границах плёночной системы Ме-Si полагалось условие отражения для всех компонентов системы:

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_B}{\partial x} = \frac{\partial C_C}{\partial x} = \frac{\partial C_{Cp}}{\partial x} = \frac{\partial C_{Bt}}{\partial x} = \frac{\partial C_{Ct}}{\partial x} = 0 \quad \text{при } x = 0 \text{ и } x = L, \quad (8)$$

где  $L$  – толщина области решения в кремнии.

Начальными условиями для уравнений (2)–(7) при моделировании перераспределения компонентов являются:

$$C_A(x, 0) = 0, C_{Ct}(x, 0) = rN_{SC}, C_C(x, 0) = (1 - r)N_{SC}, \quad \text{при } 0 \leq x \leq h, \quad (9)$$

$$C_A(x, 0) = N_{SA}, C_{Ct}(x, 0) = 0, C_C(x, 0) = 0, \quad \text{при } h < x \leq L, \quad (10)$$

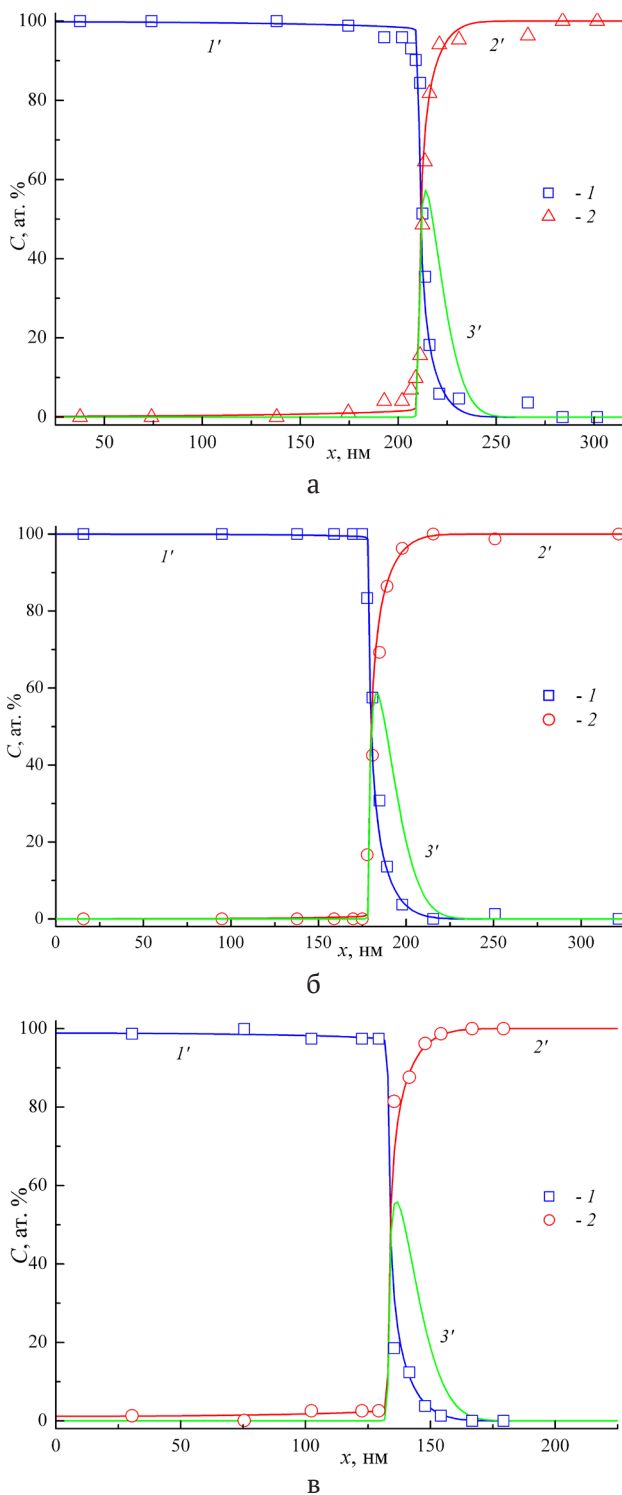
$$C_B(x, 0) = 0, C_{Bt}(x, 0) = 0, C_{Cp}(x, 0) = 0 \quad \text{при всех } 0 \leq x \leq L, \quad (11)$$

где  $h$  – толщина пленки металла,  $N_{SA}$  – собственная концентрация атомов Si ( $N_{SA} = 4.98 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ),  $N_{SC}$  – собственная концентрация атомов металла ( $N_{SC} = 5.68 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  для Ti,  $6.34 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  для W и  $5.55 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  для Nb),  $r$  – доля ловушек для атомов Si в межзёрненном пространстве Ме.

Система уравнений (2)–(7) с концентрационно зависимым эффективным коэффициентом взаимодиффузии (1) решалась численно методом факторизации с использованием консервативных неявных разностных схем [17].

Параметрами модели являлись: индивидуальные коэффициенты диффузии металла Ме и кремния Si, константы скорости  $k_1, k_2$  и  $k_3$ , а также  $r$ .

На рис. 1 а–с представлены полученные методом резерфордского обратного рассеяния (РОР) экспериментальные (точки 1, 2) и расчётные (кривые 1', 2') концентрационные распределения Ме и Si по глубине пленочной системы Ме-Si после магнетронного осаждения Ме (Ti, W, Nb) на монокристаллический кремний и вакуумного отжига в режиме  $T = 673 \text{ K}$ ,  $t = 30 \text{ мин}$ . Хорошее приближение экспериментальных и расчётных распределений достигнуто при одинаковых значениях  $k_1 = 1.0 \cdot 10^{-26} \text{ см}^3/\text{с}$ ,  $k_2 = 1.0 \cdot 10^{-18} \text{ см}^3/\text{с}$ ,  $k_3 = 1.0 \cdot 10^{-19} \text{ см}^3/\text{с}$  для всех используемых металлов и значениях параметров модели, приведённых в табл. 1. Как видно из полученных данных, доминирующим диффузантом во всех исследуемых системах является подвижный кремний



**Рис. 1.** Экспериментальные (метод POF) (точки 1, 2) и расчетные (кривые 1', 2', 3') распределения по глубине системы Me–Si полной концентрации  $C$  металла (1'), кремния (2') и подвижной его части (3'). 1 – Me, 2 – Si; кривые: 1' – Me, 2' – Si после магнетронного распыления и вакуумного отжига в режиме  $T = 673\text{ K}$ ,  $t = 30\text{ мин}$ : (а) – Ti, (б) – W, (в) – Nb

**Таблица 1.** Значения параметров модели для металлов Ti, W и Nb в системе Me–Si

Металл	$D_B \times 10^{14}\text{ см}^2/\text{с}$	$D_C \times 10^{16}\text{ см}^2/\text{с}$	$r$
Ti	4.0	4.0	0.02
W	1.0	6.0×	0.008
Nb	6.0	4.0	0.028

(кривые 3' на рис. 1 а–с). Максимум его распределения локализуется на МФГ Me/Si.

### 3. Заключение

Разработана модель взаимодиффузии при формировании систем поликристаллическая плёнка металла – монокристаллический кремний в условиях ограниченной растворимости компонентов. Модель основана на представлениях о растворимости кремния в межзёрненном пространстве металла с сегрегацией его на межзёрненных ловушках, а также о растворимости металла в кремнии, ограниченном процессом комплексообразования. Численным анализом экспериментальных концентрационных распределений компонентов в системах Me(Ti, W, Nb)–Si в рамках модели определены значения индивидуальных коэффициентов диффузии металла и кремния, а также доля ловушек для атомов Si в межзёрненном пространстве Me.

Модель применима к описанию перераспределения компонентов в системе Me–Si для условий синтеза, обеспечивающих химическое взаимодействие металла с кремнием и образование силицидов. Она иллюстрирует механизм возможного образования силицидных фаз не путём послойного роста на МФГ Me/Si, а в её окрестности за счёт глубокой взаимной диффузии компонентов.

Показана возможность использования математического формализма теории [6], разработанной для описания процесса взаимодиффузии в бинарных системах с неограниченной растворимостью, для описания перераспределения компонентов в системе Me–Si с в условиях ограниченной растворимости компонентов.

Модель может быть использована для эмпирического исследования процессов взаимодиффузии в системах Me–Si с ограниченной растворимостью, а также для прогнозирования технологических режимов при создании выпрямляющих и омических контактов Me–Si в приборных структурах изделий микро и нанoeлектроники.

### Заявленный вклад авторов

Афонин Н. Н. – научное руководство, концепция исследования, моделирование, написание

текста, итоговые выводы. Логачева В. А. – проведение исследования, написание обзора и редактирование текста.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

### Список литературы

1. Мюрарка Ш. *Силициды для СБИС*. М.: Мир; 1986. 176 с.

2. *Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции* / Под ред. Дж. Поута, К. Ту, Дж. Мейера. М.: Мир; 1982. 576 с.

3. Smigelskas A. D., Kirkendall E. O. Zinc diffusion in alpha-brass. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. 1947;171: 130–142.

4. Адамчук В. К., Любинецкий И. В., Шикин А. М. Особенности взаимодействия кремния с благородными металлами. *Письма в ЖТФ*. 1986;12(17): 1056–1060. Режим доступа: <http://www.mathnet.ru/links/40bbc0b0c2e762d4bc2a2c3dc92a18b9/pjtf250.pdf>

5. Prasad S., Paul A. Growth mechanism of phases by interdiffusion and diffusion of species in the niobium–silicon system. *Acta Materialia*. 2011;59: 1577–1585. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.11.022>

6. Darken L. S., Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. 1948;175: 84–201. <https://doi.org/10.1007/s11661-010-0177-7>

7. Гуров К. П., Карташкин Б. А., Угасте Ю. Э. *Взаимная диффузия в многофазных металлических системах* / Под ред. К. П. Гурова. М.: Наука; 1981. 352 с.

8. Barge T., Gas P. d’Heurle F.M. Analysis of the diffusion controlled growth of cobalt silicides in bulk and thin film couples. *Journal of Materials Research*. 1995;10: 1134–1145. <https://doi.org/10.1557/JMR.1995.1134>

9. Milanese C., Buscagliab V., Magliaa F., Anselmi-Tamburinia U. *Reactive growth of niobium silicides in bulk diffusion couples*. *Acta Materialia*. 2003;51(16): 4837–4846 [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00323-9](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00323-9)

10. Gas P., D’Heurle F. Diffusion processes in silicides: A comparison between bulk and thin film phase formation. *MRS Online Proceedings Library*. 1995;402: 39–50. <https://doi.org/10.1557/PROC-402-39>

11. Александров О. В., Козловский В. В. Моделирование взаимодействия никеля с карбидом кремния при формировании омических контактов. *Физика и техника полупроводников*. 2009;43(7): 917–923. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=20317760>

12. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Моделирование реакционной взаимодиффузии в поликристаллических системах с ограниченной растворимостью компонентов. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2019;85(9):35–41. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2019-85-9-35-41>

13. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Взаимодиффузия и фазообразование в тонкопленочной системе Fe–TiO<sub>2</sub>. *Физика и техника полупроводников*. 2017;51(10): 1351–1356. <https://doi.org/10.21883/FTR.2017.10.45012.8531>

14. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Модификация кобальтом тонких пленок рутила при магнетронном распылении и вакуумном отжиге. *Журнал технической физики*. 2018;4: 621–627. <https://doi.org/10.21883/JTF.2018.04.45734.2436>

15. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Моделирование взаимодиффузии и фазообразования в тонкопленочной системе поликристаллических оксидов титана и кобальта. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2019;21(3): 358–365. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2019.21/1157>

16. Афонин Н. Н., Логачева В. А. Реакционная взаимодиффузия компонентов в нестехиометрической двухслойной системе поликристаллических оксидов титана и кобальта. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2020;22(4): 430–437. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2020.22/3058>

17. Самарский А. А. *Теория разностных схем*. М.: Наука; 1977. 656 с.

### Информация об авторах

Афонин Николай Николаевич, д. х. н., с. н. с., профессор кафедры технологических и естественнонаучных дисциплин, Воронежский государственный педагогический университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-9163-744X>  
nafonin@vsu.ac.ru

Логачева Вера Алексеевна, к. х. н., с. н. с. кафедры общей и неорганической химии, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-2296-8069>  
kcmf@main.vsu.ru

Поступила в редакцию 30.01.2022; одобрена после рецензирования 15.02.2022; принята к публикации 15.03.2022; опубликована онлайн 25.03.2022.