

## ОБ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МЕТОДИКЕ АНАЛИЗА ПРОЦЕССОВ МАССО- И ТЕПЛОПЕРЕНОСА

Е. Л. Панкратов<sup>1</sup>, Е. А. Булаева<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

<sup>2</sup> Нижегородский архитектурно-строительный университет

Статья получена 15 сентября 2015 г.

**Аннотация.** В данной работе рассматривается аналитическая методика анализа и анализ модели формирования полевого гетеротранзистора. Данная методика позволяет проводить анализ нелинейных массо- и теплопереноса в многослойных структурах с переменными во времени параметрами без сшивки решений на границах раздела между слоями многослойных структур. Данный метод проиллюстрирован на примере анализа формирования полевого гетеротранзистора.

**Ключевые слова:** массо- и теплоперенос; аналитическая методика анализа; оптимизация радиоэлектронных устройств.

**Abstract.** In this paper we consider an analytical approach for analysis and optimization of formation of a field-effect heterotransistors. The approach gives a possibility to analyse nonlinear mass and heat transport in a multilayer structure with time-varying parameters without crosslinking of solutions on interfaces between layers of the multilayer structure. The approach has been illustrated by analysis of manufacturing of a field-effect heterotransistor.

**Keywords:** mass and heat transport; analytical approach for analysis; optimization of radio-electronic devices.

### Введение

Развитие твердотельной электроники приводит к необходимости уменьшения размеров элементов интегральных схем. К настоящему времени разработаны несколько методов уменьшения размеров данных элементов. Одним из этих методов является выращивание тонкопленочных устройств [1-4]. Вторым методом является диффузионное или ионное легирование необходимых

участков образцов или гетероструктур с дальнейшим лазерным или микроволновым отжигом примеси и/или радиационных дефектов [5-7]. Использование данных методов отжига приводит к формированию неоднородного температурного поля и, как следствия, к формированию неоднородности легируемой структуры и уменьшению размеров элементов интегральных схем. Еще одним способом изменения свойств легируемого материала является его радиационная обработка [8,9].

В данной работе рассматривается способ формирования полевого гетеротранзистора с неоднородно легированным каналом. Неоднородное легирование канала при изготовлении полевых транзисторов позволяет изменить скорость переноса носителей заряда [10] и, уменьшив длину канала, предотвратить эффект смыкания истока со стоком [11]. Для иллюстрации предлагаемого метода оптимизации легирования канала рассмотрим гетероструктуру, представленную на рис. 1.

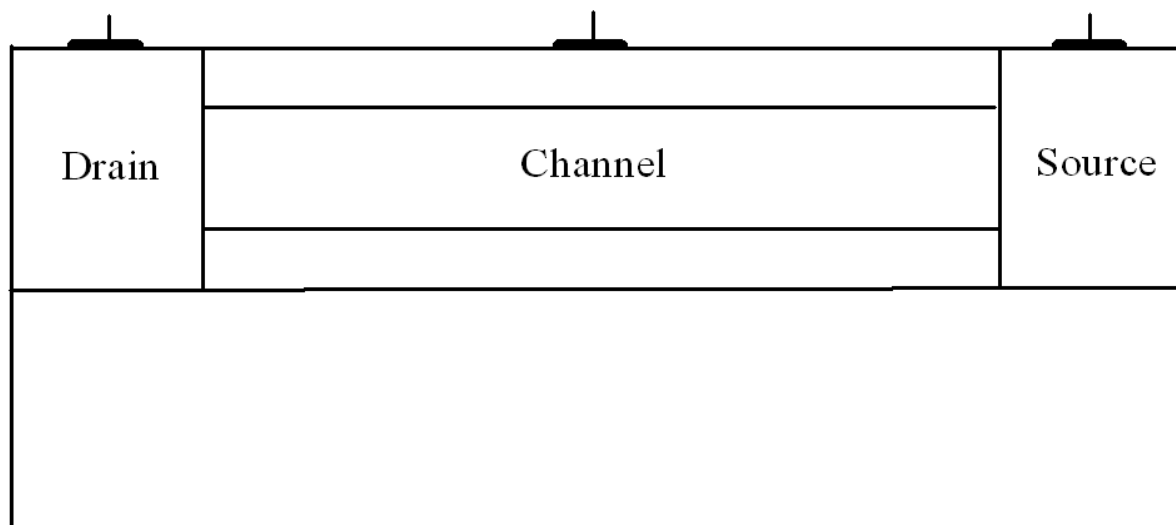


Рис. 1. Рассматриваемая структура полевого гетеротранзистора

Будем считать, что после формирования канала один из его концов легируется с помощью диффузии или ионной имплантации с целью формирования неоднородного профиля легирования. Далее рассматривается микроволновый отжиг примеси и/или радиационных дефектов. Данный тип отжига позволяет прогревать только приповерхностную область для ограничения диффузии вглубь гетероструктуры. После завершения отжига

проводится наращивание канала и формирование затвора. Основной целью данной работы является оптимизация длительности отжига с целью легирования необходимой части канала.

### Методика анализа

Для достижения поставленных целей определим пространственно-временные распределения концентраций примесей. Искомые распределения найдем путем решения второго закона Фика [10,12-14]

$$\frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_c \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_c \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_c \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \quad (1)$$

с граничными и начальным условиями

$$\left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{x=L_y} = 0, \\ \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{x=L_z} = 0, C(x, y, z, 0) = f(x, y, z). \quad (2)$$

В соотношениях (1) и (2) введены следующие обозначения:  $C(x, y, z, t)$  - пространственно-временное распределение концентрации примеси,  $T$  - температура отжига,  $D_c$  - коэффициент диффузии примеси. Величина коэффициента диффузии определяется свойствами материалов в слоях гетероструктуры, скорости прогрева и охлаждения гетероструктуры (в соответствии с законом Аррениуса). Зависимости коэффициента диффузии от параметров могут быть аппроксимированы следующим соотношением [9,15,16]

$$D_c = D_L(x, y, z, T) \left[ 1 + \xi \frac{C^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \left[ 1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right], \quad (3)$$

где  $D_L(x, y, z, T)$  – пространственная (за счет многослойности гетероструктуры) и температурная (по закону Аррениуса) зависимости коэффициента диффузии;

$P(x, y, z, T)$  - предел растворимости примеси; определяемый свойствами материала параметр  $\gamma$  может принимать целые значения в интервале  $\gamma \in [1, 3]$  [15];  $V(x, y, z, t)$  - пространственно-временное распределение концентрации радиационных вакансий;  $V^*$  - равновесное распределение вакансий. Концентрационная зависимость коэффициента диффузии подробно обсуждается в [15]. Следует заметить, что в случае диффузионного легирования радиационные повреждения отсутствуют и  $\zeta_1 = \zeta_2 = 0$ . Пространственно-временные распределения концентраций радиационных дефектов определялись путем решения следующей системы уравнений [9, 16]

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial z} \right] - k_{I,V}(x, y, z, T) I(x, y, z, t) V(x, y, z, t) - \\ & - k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial z} \right] - k_{I,V}(x, y, z, T) I(x, y, z, t) V(x, y, z, t) - \\ & - k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) \end{aligned}$$

с начальными

$$\rho(x, y, z, 0) = f_\rho(x, y, z) \quad (5a)$$

и граничными условиями

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \\ \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0. \end{aligned} \quad (5b)$$

В системе уравнений (4) и условиях (5) используются следующие обозначения:  $\rho = I, V$ ;  $I(x, y, z, t)$  - пространственно-временное распределение концентрации междоузельных атомов;  $D_{\rho}(x, y, z, T)$  - коэффициенты диффузии междоузельных атомов и вакансий; слагаемые  $V^2(x, y, z, t)$  и  $I^2(x, y, z, t)$  соответствуют образованию дивакансий и аналогичных комплексов междоузельных атомов;  $k_{I,V}(x, y, z, T)$ ,  $k_{I,I}(x, y, z, T)$  и  $k_{V,V}(x, y, z, T)$  - соответственно, параметры рекомбинации точечных дефектов и образования комплексов.

Пространственно-временные распределения концентраций дивакансий  $\Phi_V(x, y, z, t)$  и аналогичных комплексов междоузельных атомов  $\Phi_I(x, y, z, t)$  определим с помощью следующей системы уравнений [9,16]

$$\frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) - k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t) \quad (6)$$

$$\frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) - k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, t)$$

с граничными и начальными условиями

$$\left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \\ \left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho}(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0,$$

$$\Phi_I(x, y, z, 0) = f_{\Phi I}(x, y, z), \quad \Phi_V(x, y, z, 0) = f_{\Phi V}(x, y, z). \quad (7)$$

В последних соотношениях введены следующие обозначения:  $D_{\Phi I}(x, y, z, T)$  и  $D_{\Phi V}(x, y, z, T)$  - коэффициенты диффузии комплексов точечных радиационных

дефектов;  $k_I(x,y,z,T)$  и  $k_V(x,y,z,T)$  - параметры распада комплексов точечных дефектов.

Для определения пространственно-временных распределений точечных радиационных дефектов, следуя работам [17-19], представим коэффициенты диффузии точечных дефектов в следующем виде:  $D_{\rho}(x,y,z,T)=D_{0\rho}[1+\varepsilon_{\rho}g_{\rho}(x,y,z,T)]$ , где  $D_{0\rho}$  - средние значения коэффициентов диффузии,  $0\leq\varepsilon_{\rho}<1$ ,  $|g_{\rho}(x,y,z,T)|\leq 1$ ,  $\rho=I,V$ . В аналогичной форме представим и параметры рекомбинации точечных дефектов и генерации их комплексов:  $k_{I,V}(x,y,z,T)=k_{0I,V}[1+\varepsilon_{I,V}g_{I,V}(x,y,z,T)]$ ,  $k_{I,I}(x,y,z,T)=k_{0I,I}[1+\varepsilon_{I,I}g_{I,I}(x,y,z,T)]$  и  $k_{V,V}(x,y,z,T)=k_{0V,V}[1+\varepsilon_{V,V}g_{V,V}(x,y,z,T)]$ , где  $k_{0\rho 1,\rho 2}$  - соответствующие средние значения,  $0\leq\varepsilon_{I,V}<1$ ,  $0\leq\varepsilon_{I,I}<1$ ,  $0\leq\varepsilon_{V,V}<1$ ,  $|g_{I,V}(x,y,z,T)|\leq 1$ ,  $|g_{I,I}(x,y,z,T)|\leq 1$ ,  $|g_{V,V}(x,y,z,T)|\leq 1$ . Введем следующие безразмерные величины:  $\tilde{I}(x,y,z,t)=I(x,y,z,t)/I^*$ ,  $\chi=x/L_x$ ,  $\eta=y/L_y$ ,  $\phi=z/L_z$ ,  $\tilde{V}(x,y,z,t)=V(x,y,z,t)/V^*$ ,  $\vartheta=\sqrt{D_{0I}D_{0V}}t/L^2$ ,  $\omega=L^2k_{0I,V}/\sqrt{D_{0I}D_{0V}}$ ,  $\Omega_{\rho}=L^2k_{0\rho,\rho}/\sqrt{D_{0I}D_{0V}}$ . Такая замена изменяет форму записи уравнений (4) и условий (5)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{I}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \vartheta} &= \frac{D_{0I}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left\{ [1+\varepsilon_I g_I(\chi,\eta,\phi,T)] \frac{\partial \tilde{I}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \chi} \right\} + \frac{D_{0I}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ [1+\varepsilon_I g_I(\chi,\eta,\phi,T)] \frac{\partial \tilde{I}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \eta} \right\} + \frac{D_{0I}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left\{ [1+\varepsilon_I g_I(\chi,\eta,\phi,T)] \times \right. \\ &\times \left. \frac{\partial \tilde{I}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \phi} \right\} - \omega [1+\varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi,\eta,\phi,T)] \tilde{I}(\chi,\eta,\phi,\vartheta) \tilde{V}(\chi,\eta,\phi,\vartheta) - \\ &- \Omega_I \tilde{I}^2(\chi,\eta,\phi,\vartheta) [1+\varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi,\eta,\phi,T)] \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \vartheta} &= \frac{D_{0V}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left\{ [1+\varepsilon_V g_V(\chi,\eta,\phi,T)] \frac{\partial \tilde{V}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \chi} \right\} + \frac{D_{0V}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ [1+\varepsilon_I g_I(\chi,\eta,\phi,T)] \frac{\partial \tilde{V}(\chi,\eta,\phi,\vartheta)}{\partial \eta} \right\} + \frac{D_{0V}}{\sqrt{D_{0I}D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left\{ [1+\varepsilon_I g_I(\chi,\eta,\phi,T)] \times \right. \end{aligned}$$

$$\times \frac{\partial \tilde{V}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \Bigg\} - \omega [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) -$$

$$- \Omega_V \tilde{V}^2(\chi, \eta, \phi, \vartheta) [1 + \varepsilon_{V,V} g_{V,V}(\chi, \eta, \phi, T)]$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \Bigg|_{\chi=0} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \Bigg|_{\chi=1} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \Bigg|_{\eta=0} = 0,$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \Bigg|_{\eta=1} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \Bigg|_{\phi=0} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \Bigg|_{\phi=1} = 0,$$

$$\tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = \frac{f_\rho(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\rho^*}. \quad (9)$$

Решение уравнений (8) с условиями (9) будем искать, следуя [17-19], в виде степенных рядов

$$\tilde{\rho}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon_\rho^i \sum_{j=0}^{\infty} \omega^j \sum_{k=0}^{\infty} \Omega_\rho^k \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta). \quad (10)$$

Подстановка ряда (10) в уравнения (8) и условия (9) позволяет получить уравнения для исходных приближений концентраций точечных дефектов  $\tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$  и  $\tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$  и поправочных функций к ним  $\tilde{I}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$  и  $\tilde{V}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$ ,  $i \geq 1, j \geq 1, k \geq 1$ . Данные уравнения и условия к ним приведены в Приложении. Их решения получены стандартным методом Фурье (см., например, [20,21]). Полученные решения приведены в Приложении.

Далее определим пространственно-временные распределения концентраций комплексов точечных радиационных дефектов. Для этого представим соответствующие коэффициенты диффузии в следующей форме:  $D_{\phi\rho}(x, y, z, T) = D_{0\phi\rho} [1 + \varepsilon_{\phi\rho} g_{\phi\rho}(x, y, z, T)]$ , где  $D_{0\phi\rho}$  - средние значения коэффициентов диффузии. Тогда уравнения (6) преобразуются к следующей форме

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi_I} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_I} g_{\Phi_I}(x, y, z, T)] \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial x} \right\} + D_{0\Phi_I} \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial y} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_I} g_{\Phi_I}(x, y, z, T)] \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial y} \right\} + D_{0\Phi_I} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_I} g_{\Phi_I}(x, y, z, T)] \times \right. \\ &\left. \times \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial z} \right\} + k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) - k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t) \\ \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi_V} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_V} g_{\Phi_V}(x, y, z, T)] \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial x} \right\} + D_{0\Phi_V} \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial y} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_V} g_{\Phi_V}(x, y, z, T)] \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial y} \right\} + D_{0\Phi_V} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ [1 + \varepsilon_{\Phi_V} g_{\Phi_V}(x, y, z, T)] \times \right. \\ &\left. \times \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial z} \right\} + k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) - k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, t) \end{aligned} \right.$$

Будем искать решение данных уравнений в виде степенного ряда

$$\Phi_{\rho}(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon_{\Phi_{\rho}}^i \Phi_{\rho i}(x, y, z, t). \quad (11)$$

Подстановка ряда (11) в уравнения (6) и соответствующие им граничные и начальные условия позволяет получить уравнения для исходных приближений распределений концентраций комплексов радиационных дефектов  $\Phi_{\rho 0}(x, y, z, t)$  и поправочных функций к ним  $\Phi_{\rho i}(x, y, z, t)$ ,  $i \geq 1$ , а также граничных и начальных условий к ним. Данные уравнения и условия приведены в Приложении. Решение данных уравнений получено стандартным методом Фурье [20,21] и приведено в Приложении.

Пространственно-временное распределение концентрации примеси определим аналогично пространственно-временному распределению концентрации радиационных дефектов. В рамках данной методики представим аппроксимацию коэффициента диффузии примеси в виде суммы постоянной и переменной составляющих, т.е.  $D_L(x, y, z, T) = D_{0L} [1 + \varepsilon_L g_L(x, y, z, T)]$ , где  $D_{0L}$  - среднее значение коэффициента диффузии примеси,  $0 \leq \varepsilon_L < 1$ ,  $|g_L(x, y, z, T)| \leq 1$ . Далее будем искать решение уравнения (1) в виде степенного ряда



$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon_L^i \sum_{j=1}^{\infty} \xi^j C_{ij}(x, y, z, t).$$

Подстановка данного ряда в уравнение (1) и условия (2) позволяет получить уравнения для исходного приближения концентрации примеси  $C_{00}(x, y, z, t)$ , поправочных функций к ним  $C_{ij}(x, y, z, t)$  ( $i \geq 1, j \geq 1$ ), граничные и начальные условия к ним. Данные уравнения и условия к ним приведены в Приложении. Их решения получены стандартным методом Фурье (см., например, [20,21]). Решения данных уравнений приведены в Приложении.

Анализ пространственно-временных распределений концентраций примеси и радиационных дефектов проводился аналитически во втором приближении по параметрам, используемым в соответствующем ряде. Данное приближение обычно достаточно для проведения качественного анализа и получения некоторых количественных результатов. Результаты аналитических расчетов проверялись путем их сопоставления с результатами численного моделирования.

### Результаты анализа

В данном разделе с помощью ранее полученных соотношений проведен анализ динамики перераспределения примеси с учетом перераспределения радиационных дефектов. Данные соотношения позволили получить пространственные распределения концентрации примеси. Типичные распределения концентрации примеси в направлении, перпендикулярном направлению канала, приведены на рис. 2. Кривая 1 данного рисунка является типичным распределением концентрации примеси вдоль канала. Из данного рисунка следует, что наличие границы раздела между слоями гетероструктуры позволяет получить более компактное и более равномерное распределение концентрации примеси в направлении, перпендикулярном данной границе. Однако в данном случае необходим выбор длительности отжига, т.к. при малых длительностях отжига примесь не достигает границы раздела между слоями гетероструктуры, а при больших длительностях отжига примесь слишком глубоко проникает в соседние слои. Определим компромиссную длительность

отжига в рамках введенного ранее критерия [17-19]. В рамках данного критерия аппроксимируем реальное распределение концентрации примеси с помощью идеального прямоугольного распределения  $\psi(x,y,z)$ . Далее искомую длительность отжига определим из условия минимума среднеквадратической ошибки

$$U = \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} [C(x, y, z, \Theta) - \psi(x, y, z)]^2 dx dy dz. \quad (12)$$

Зависимости оптимальной длительности отжига приведены на рис. 3. Оптимальная длительность отжига имплантированной примеси принимает меньшие значения, чем оптимальная длительность отжига примеси в случае диффузионного легирования. Причиной такой разницы является необходимость отжига радиационных дефектов.

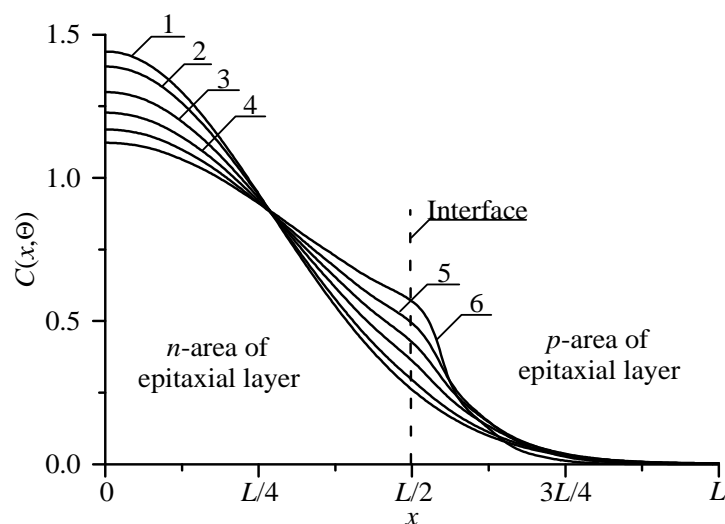


Рис.2а. Распределения концентрации введенной диффузионно примеси в представленной на рис. 1 гетероструктуре в направлении, перпендикулярном границе раздела между подложкой и эпитаксиальными слоями. Увеличение номера кривой соответствует увеличению разницы между значениями коэффициента диффузии примеси в слоях при условии, что коэффициент диффузии примеси в легированной области больше, чем в соседней

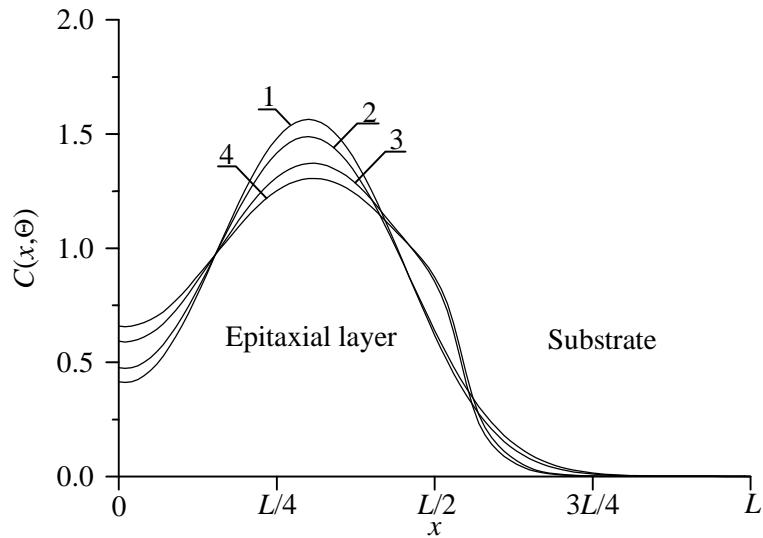


Рис. 2б. Пространственное распределение имплантированной примеси после отжига длительностью  $\Theta=0,0048(L_x^2+L_y^2+L_z^2)/D_0$  (кривые 1 и 3) и  $\Theta=0,0057(L_x^2+L_y^2+L_z^2)/D_0$  (кривые 2 и 4). Кривые 1 и 2 – расчетные распределения в однородной структуре; кривые 3 и 4 - расчетные распределения примеси в двухслойной структуре при условии, что коэффициент диффузии примеси

легированном слое больше, чем в соседнем

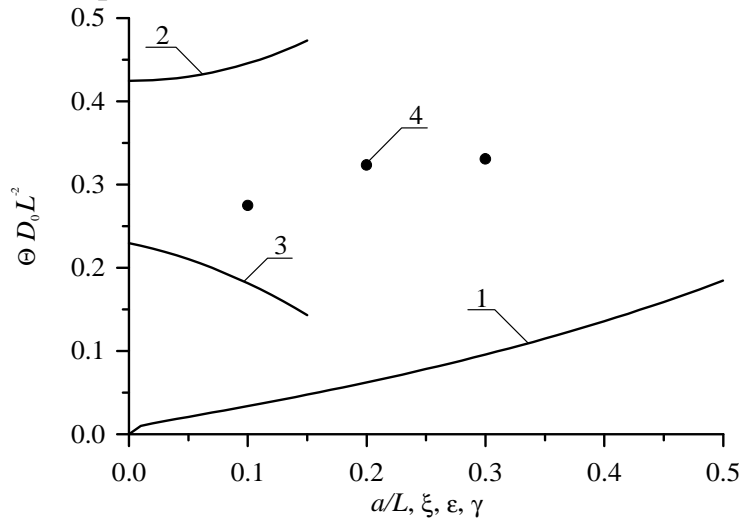


Рис.3а. Зависимости безразмерного оптимального времени отжига введенной диффузионно примеси, полученного из условия минимума среднеквадратической ошибки, от различных параметров гетероструктуры.

Кривая 1 – зависимость времени отжига от отношения  $a/L$  и  $\xi=\gamma=0$  при попарном равенстве коэффициентов диффузии. Кривая 2 - зависимость времени отжига от параметра  $\epsilon$  при  $a/L=1/2$  и  $\xi=\gamma=0$ . Кривая 3 - зависимость времени отжига от параметра  $\xi$  при  $a/L=1/2$  и  $\epsilon=\gamma=0$ . Кривая 4 - зависимость времени отжига от параметра  $\gamma$  при  $a/L=1/2$  и  $\epsilon=\xi=0$

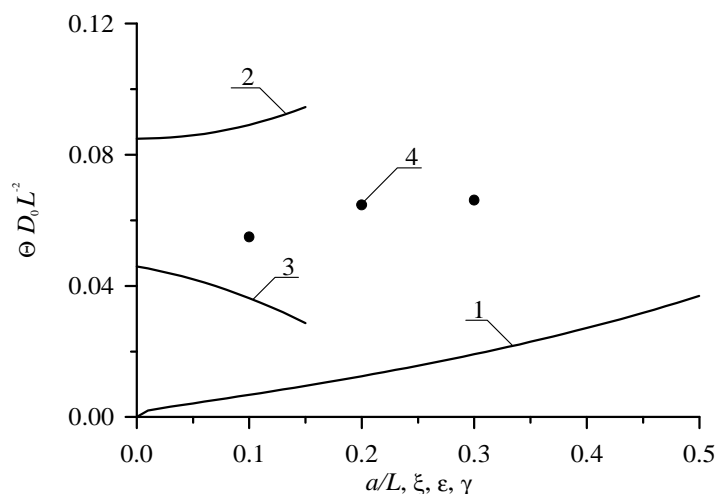


Рис.3б. Зависимости безразмерного оптимального времени отжига введенной с помощью ионной имплантации примеси, полученного из условия минимума среднеквадратической ошибки, от различных параметров гетероструктуры.

Кривая 1 – зависимость времени отжига от отношения  $a/L$  и  $\xi = \gamma = 0$  при попарном равенстве коэффициентов диффузии. Кривая 2 - зависимость времени отжига от параметра  $\varepsilon$  при  $a/L=1/2$  и  $\xi = \gamma = 0$ . Кривая 3 - зависимость времени отжига от параметра  $\xi$  при  $a/L=1/2$  и  $\varepsilon = \gamma = 0$ . Кривая 4 - зависимость времени отжига от параметра  $\gamma$  при  $a/L=1/2$  и  $\varepsilon = \xi = 0$

## Заключение

В данной работе рассматривается аналитическая методика анализа и анализ модели формирования полевого гетеротранзистора. Данная методика позволяет проводить анализ нелинейных массо- и теплопереноса в многослойных структурах с переменными во времени параметрами без сшивки решений на границах раздела между слоями многослойных структур. Данный метод проиллюстрирован на примере анализа формирования полевого транзистора с неоднородно легированным каналом. На основе проведенного анализа сформулированы рекомендации по оптимизации технологического процесса с целью формирования более компактного распределения примеси.

## Благодарности

Работа поддержана стипендией правительства РФ.

## Литература

- [1] Г. Волович. Современная электроника. № 2. С. 10-17 (2006).
- [2] А. Керенцев, В. Ланин. Силовая электроника. Вып. 1. С. 34-38 (2008).
- [3] А.О. Агеев, А.Е. Беляев, Н.С. Болтовец, В.Н. Иванов, Р.В. Конакова, Я.Я. Кудрик, П.М. Литвин, В.В. Миленин, А.В. Саченко. ФТП. **Т. 43** (7). С. 897-903 (2009).
- [4] Н.И. Волокобинская, И.Н. Комаров, Т.В. Матюхина, В.И. Решетников, А.А. Руш, И.В. Фалина, А.С. Ястребов. ФТП. **Т. 35** (8). С. 1013-1017 (2001).
- [5] K.K. Ong, K.L. Pey, P.S. Lee, A.T.S. Wee, X.C. Wang, Y.F. Chong, Appl. Phys. Lett. **89** (17), 172111-172114 (2006).
- [6] H.T. Wang, L.S. Tan, E. F. Chor. J. Appl. Phys. **98** (9), 094901-094905 (2006).
- [7] Ю.В. Быков, А.Г. Еремеев, Н.А. Жарова, И.В. Плотников, К.И. Рыбаков, М.Н. Дроздов, Ю.Н. Дроздов, В.Д. Скупов. Известия вузов. Радиофизика. **Т.43** (3). С. 836-843 (2003).
- [8] В.В. Козловский, *Модификация полупроводников пучками протонов*, Наука, Санкт-Петербург, 2003.
- [9] В.Л. Винецкий, П.А. Холодарь, *Радиационная физика полупроводников*, Наукова Думка, Киев, 1979.
- [10] И.П. Степаненко. *Основы микроэлектроники*. Советское радио, М., 1980.
- [11] M.V. Dunga, L. Chung-Hsun, X. Xuemei, D.D. Lu, A.M. Niknejad, H. Chenming. Modeling Advanced FET Technology in a Compact Model. IEEE Transactions on Electron Devices. **Vol. 53** (9). P. 157-162 (2006).
- [12] В.Г. Гусев, Ю.М. Гусев. *Электроника*, Высшая школа, М., 1991.
- [13] Н.А. Аваев, Ю.Е. Наумов, В.Т. Фролкин. *Основы микроэлектроники*, Радио и связь, М., 1991.
- [14] В.И. Лачин, Н.С. Савелов. *Электроника*, Феникс, Ростов-на-Дону, 2001.
- [15] З.Ю. Готра. *Технология микроэлектронных устройств*, Радио и связь, М., 1991.
- [16] P.M. Fahey, P.V. Griffin, J.D. Plummer. Rev. Mod. Phys. 1989. **V. 61**. № 2. P. 289-388.

- [17] V.L. Vinetskiy, G.A. Kholodar', *Radiative physics of semiconductors*. ("Naukova Dumka", Kiev, 1979, in Russian).
- [18] E.L. Pankratov. *Applied Nanoscience*. **Vol. 2** (1). P. 71-89 (2012).
- [19] E.L. Pankratov, E.A. Bulaeva. *Reviews in Theoretical Science*. **Vol. 1** (1). P. 58-82 (2013).
- [20] E.L. Pankratov, E.A. Bulaeva. *Int. J. Nanoscience*. **Vol. 11** (5). P. 1250028-1--1250028-8 (2012).
- [21] А.Н. Тихонов, А.А. Самарский, *Уравнения математической физики*, Наука, М., 1972.
- [22] H.S. Carslaw, J.C. Jaeger. *Conduction of heat in solids* (Oxford University Press, 1964).

## Приложение

Уравнения для функций  $\tilde{I}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$  и  $\tilde{V}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$ ,  $i \geq 0, j \geq 0, k \geq 0$  и условия

к ним

$$\frac{\partial \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2}$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{I}_{i00}(\chi, \vartheta)}{\partial \vartheta} &= \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] + \\ &+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] + \\ &+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right] \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{i00}(\chi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right], i \geq 1;$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta);$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{I}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [\tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) + \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)] \times$$

$$\times [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)]$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{V}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [\tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) + \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)] \times$$

$$\times [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)];$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = & \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \\ & + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{V}_{000}^2(\chi, \eta, \phi, \vartheta); \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{I}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right] - [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi, \eta, \phi, T)] \times$$

$$\times [\tilde{I}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) + \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)]$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{V}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right] - [1 + \varepsilon_{V,V} g_{V,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \times$$

$$\times [\tilde{V}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) + \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{I}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)];$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{I}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$$



$$\frac{\partial \tilde{V}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{V}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{V,V} g_{V,V}(\chi, \eta, \phi, E)] \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta);$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] \times$$

$$\times \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_I(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right] -$$

$$- [1 + \varepsilon_I g_I(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$$

$$\frac{\partial \tilde{V}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \frac{\partial}{\partial \chi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right] \times$$

$$\times \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ g_V(\chi, \eta, \phi, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right] -$$

$$- [1 + \varepsilon_V g_V(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{100}(\chi, \eta, \phi, \vartheta);$$

$$\frac{\partial \tilde{I}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} = \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \frac{\partial^2 \tilde{I}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times$$

$$\times \frac{\partial^2 \tilde{I}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{I}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) -$$

$$- [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{I}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \vartheta} &= \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \frac{\partial^2 \tilde{V}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta^2} + \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times \\ &\times \frac{\partial^2 \tilde{V}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi^2} - [1 + \varepsilon_{V,V} g_{V,V}(\chi, \eta, \phi, T)] \tilde{V}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) - \\ &- [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(\chi, \eta, \phi, t)] \tilde{I}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) \tilde{V}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta); \\ \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right|_{\chi=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \chi} \right|_{\chi=1} = 0, \quad \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0, \\ \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} &= 0, \quad \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right|_{\phi=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, \vartheta)}{\partial \phi} \right|_{\phi=1} = 0 \quad (i \geq 0, j \geq 0, k \geq 0); \\ \tilde{\rho}_{000}(\chi, \eta, \phi, 0) &= f_\rho(\chi, \eta, \phi) / \rho^*, \quad \tilde{\rho}_{ijk}(\chi, \eta, \phi, 0) = 0 \quad (i \geq 1, j \geq 1, k \geq 1). \end{aligned}$$

Решения данных уравнений с учетом соответствующих граничных и начальных условий представимы в следующей форме

$$\tilde{\rho}_{000}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = \frac{1}{L} + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} F_{n\rho} c(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{n\rho}(\vartheta),$$

где  $F_{n\rho} = \frac{1}{\rho^*} \int_0^1 \cos(\pi n u) \int_0^1 \cos(\pi n v) \int_0^1 \cos(\pi n w) f_{n\rho}(u, v, w) d w d v d u$ ,  $c_n(\chi) = \cos(\pi n \chi)$ ,  
 $e_{nI}(\vartheta) = \exp(-\pi^2 n^2 \vartheta \sqrt{D_{0V}/D_{0I}})$ ,  $e_{nV}(\vartheta) = \exp(-\pi^2 n^2 \vartheta \sqrt{D_{0I}/D_{0V}})$ ;

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) &= -2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^\vartheta e_{nI}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 g_I(u, v, w, T) \times \\ &\times n c_n(w) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^\vartheta e_{nI}(-\tau) \times \\ &\times \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(w) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) \times \\ &\times c(\eta) c(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^\vartheta e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(w) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{i00}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 g_V(u, v, w, T) \times \\ & \times n c_n(w) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \times \\ & \times \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(w) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c(\eta) c(\phi) e_{nV}(\vartheta) \times \\ & \times n \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(w) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau, i \geq 1, \end{aligned}$$

где  $s_n(\chi) = \sin(\pi n \chi)$ ;

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{010}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{n\rho}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{n\rho}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{020}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{n\rho}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{n\rho}(-\tau) \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \times \\ & \times c_n(u) c_n(v) c_n(w) [\tilde{I}_{010}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) + \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{010}(u, v, w, \tau)] d w d v d u d \tau; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{001}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{n\rho}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{n\rho}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times [1 + \varepsilon_{\rho,\rho} g_{\rho,\rho}(u, v, w, T)] \tilde{\rho}_{000}^2(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{002}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{n\rho}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{n\rho}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times [1 + \varepsilon_{\rho,\rho} g_{\rho,\rho}(u, v, w, T)] \tilde{\rho}_{001}(u, v, w, \tau) \tilde{\rho}_{000}(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(u) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(u) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau \times \\
 & \times c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) e_{nI}(\vartheta) c_n(\eta) c_n(\phi) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 [\tilde{I}_{100}(u, v, w, \tau) \times \\
 & \times \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) + \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{100}(u, v, w, \tau)] [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] c_n(v) d w d v d u d \tau \\
 & \tilde{V}_{110}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = -2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(u) \times \\
 & \times g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \times \\
 & \times \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(u) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(u) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{i-100}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau \times \\
 & \times c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 [\tilde{I}_{100}(u, v, w, \tau) \times \\
 & \times \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) + \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{100}(u, v, w, \tau)] [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] c_n(v) d w d v d u d \tau ; \\
 & \tilde{I}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = -2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\
 & \times g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \times \\
 & \times \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(w) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0I}}{D_{0V}}} \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \sum_{n=1}^{\infty} n e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(w) g_I(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{I}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau \times \\ & \times c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \times \\ & \times c_n(u) \tilde{I}_{100}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{101}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 s_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \times \\ & \times \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 s_n(v) \int_0^1 c_n(w) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - 2\pi \sqrt{\frac{D_{0V}}{D_{0I}}} \times \\ & \times \sum_{n=1}^{\infty} n e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 s_n(w) g_V(u, v, w, T) \frac{\partial \tilde{V}_{001}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau \times \\ & \times c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \times \\ & \times c_n(w) [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \tilde{V}_{100}(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nI}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nI}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times \{ [1 + \varepsilon_{I,I} g_{I,I}(u, v, w, T)] \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{I}_{010}(u, v, w, \tau) + [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \times \\ & \times \tilde{I}_{001}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) \} d w d v d u d \tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{011}(\chi, \eta, \phi, \vartheta) = & -2 \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\chi) c_n(\eta) c_n(\phi) e_{nV}(\vartheta) \int_0^{\vartheta} e_{nV}(-\tau) \int_0^1 c_n(u) \int_0^1 c_n(v) \int_0^1 c_n(w) \times \\ & \times \{ [1 + \varepsilon_{V,V} g_{V,V}(u, v, w, T)] \tilde{V}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{010}(u, v, w, \tau) + [1 + \varepsilon_{I,V} g_{I,V}(u, v, w, T)] \times \\ & \times \tilde{I}_{000}(u, v, w, \tau) \tilde{V}_{001}(u, v, w, \tau) \} d w d v d u d \tau . \end{aligned}$$

Уравнения для исходных приближений распределений концентраций

комплексов радиационных дефектов  $\Phi_{\rho 0}(x, y, z, t)$  и поправочных функций к ним  $\Phi_{\rho i}(x, y, z, t)$ ,  $i \geq 1$ , а также граничные и начальные условия к ним имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_{I_0}(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_0}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_0}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \\ &+ D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_0}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) - k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t) \\ \frac{\partial \Phi_{V_0}(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_0}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_0}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \\ &+ D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_0}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) - k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, t); \\ \frac{\partial \Phi_{I_i}(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_i}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_i}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0\Phi I} \frac{\partial^2 \Phi_{I_i}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ &+ D_{0\Phi I} \frac{\partial}{\partial x} \left[ g_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{I_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0\Phi I} \frac{\partial}{\partial y} \left[ g_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{I_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ &+ D_{0\Phi I} \frac{\partial}{\partial z} \left[ g_{\Phi I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{I_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \\ \frac{\partial \Phi_{V_i}(x, y, z, t)}{\partial t} &= D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_i}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_i}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0\Phi V} \frac{\partial^2 \Phi_{V_i}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ &+ D_{0\Phi V} \frac{\partial}{\partial x} \left[ g_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{V_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0\Phi V} \frac{\partial}{\partial y} \left[ g_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{V_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ &+ D_{0\Phi V} \frac{\partial}{\partial z} \left[ g_{\Phi V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{V_{i-1}}(x, y, z, t)}{\partial z} \right], i \geq 1; \\ \left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_{\rho i}(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0, \quad i \geq 0;$$

$$\Phi_{\rho 0}(x, y, z, 0) = f_{\Phi \rho}(x, y, z), \quad \Phi_{\rho i}(x, y, z, 0) = 0, \quad i \geq 1.$$

Решение данных уравнений представимо в следующем виде

$$\begin{aligned} \Phi_{\rho 0}(x, y, z, t) = & \frac{1}{L_x L_y L_z} + \frac{2}{L_x L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} F_{n\Phi_\rho} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{n\Phi_\rho}(t) + \frac{2}{L_{n=1}} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) \times \\ & \times c_n(z) e_{\Phi_{\rho n}}(t) \int_0^t e_{\Phi_{\rho n}}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) [k_{I,I}(u, v, w, T) I^2(u, v, w, \tau) - \\ & - k_I(u, v, w, T) I(u, v, w, \tau)] d w d v d u d \tau, \end{aligned}$$

где  $F_{n\Phi_\rho} = \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) f_{\Phi_\rho}(u, v, w) d w d v d u$ ,  $c_n(x) = \cos(\pi n x / L_x)$ ,

$$e_{n\Phi_\rho}(t) = \exp\left[-\pi^2 n^2 D_{0\Phi_\rho} t (L_x^{-2} + L_y^{-2} + L_z^{-2})\right];$$

$$\begin{aligned} \Phi_{\rho i}(x, y, z, t) = & -\frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{\Phi_{\rho n}}(t) \int_0^t e_{\Phi_{\rho n}}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \times \\ & \times g_{\Phi_\rho}(u, v, w, T) \frac{\partial \Phi_{I_\rho i-1}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y^2 L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{\Phi_{\rho n}}(t) \times \\ & \times \int_0^t e_{\Phi_{\rho n}}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) g_{\Phi_\rho}(u, v, w, T) \frac{\partial \Phi_{I_\rho i-1}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y} \times \\ & \times \frac{1}{L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{\Phi_{\rho n}}(t) \int_0^t e_{\Phi_{\rho n}}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} s_n(w) \frac{\partial \Phi_{I_\rho i-1}(u, v, w, \tau)}{\partial w} \times \\ & \times g_{\Phi_\rho}(u, v, w, T) d w d v d u d \tau, \quad i \geq 1, \end{aligned}$$

где  $s_n(x) = \sin(\pi n x / L_x)$ .

Уравнения для исходного приближения концентрации примеси  $C_{00}(x, t)$ , поправочных функций к ним  $C_{ij}(x, y, z, t)$  ( $i \geq 1, j \geq 1$ ), граничные и начальные условия к ним имеют следующий вид

$$\frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial t} = D_{0L} \frac{\partial^2 C_{00}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{00}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{00}(x, y, z, t)}{\partial z^2};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{i0}(x, y, z, t)}{\partial t} = & D_{0L} \frac{\partial^2 C_{i0}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{i0}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{i0}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial x} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{i-10}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial y} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{i-10}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{i-10}(x, y, z, t)}{\partial z} \right], \quad i \geq 1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial t} = & D_{0L} \frac{\partial^2 C_{01}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{01}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{01}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial z} \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{02}(x, y, z, t)}{\partial t} = & D_{0L} \frac{\partial^2 C_{02}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{02}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{02}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial x} \left[ C_{01}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ C_{01}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \times \right. \\ & \times \left. \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] D_{0L} + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ C_{01}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + D_{0L} \times \\ & \times \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial z} \right]; \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{11}(x, y, z, t)}{\partial t} = & D_{0L} \frac{\partial^2 C_{11}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{11}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_{0L} \frac{\partial^2 C_{11}(x, y, z, t)}{\partial z^2} + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial x} \left[ C_{10}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ C_{10}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \times \right. \\ & \times \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial y} \left. \right] D_{0L} + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ C_{10}(x, y, z, t) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{00}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + D_{0L} \times \\ & \times \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{10}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{10}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{C_{00}^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \frac{\partial C_{10}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial x} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\ & + D_{0L} \frac{\partial}{\partial y} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + D_{0L} \frac{\partial}{\partial z} \left[ g_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_{01}(x, y, z, t)}{\partial z} \right]; \\ \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, & \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = 0, \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \\ \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y=L_y} = 0, & \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \frac{\partial C_{ij}(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=L_z} = 0, \quad i \geq 0, j \geq 0; \end{aligned}$$

$$C_{00}(x, y, z, 0) = f_C(x, y, z), \quad C_{ij}(x, y, z, 0) = 0, \quad i \geq 1, j \geq 1.$$

Решения данных уравнений с учетом соответствующих граничных и начальных условий представимы в следующей форме

$$C_{00}(x, y, z, t) = \frac{1}{L_x L_y L_z} + \frac{2}{L_x L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t),$$

где  $e_{nC}(t) = \exp[-\pi^2 n^2 D_{0C} t (L_x^{-2} + L_y^{-2} + L_z^{-2})]$ ,  $F_{nC} = \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} f_C(u, v, w) \times$   
 $\times c_n(w) dw dv du$ ;

$$\begin{aligned}
 C_{i0}(x, y, z, t) = & -\frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(v) \times \\
 & \times g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{i-10}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y^2 L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \times \\
 & \times \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(v) g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{i-10}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{i-10}(u, v, w, \tau)}{\partial w} \times \\
 & \times s_n(v) d w d v d u d \tau, i \geq 1;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_{01}(x, y, z, t) = & -\frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \times \\
 & \times \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y^2 L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \times \\
 & \times \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial w} \times \\
 & \times s_n(w) d w d v d u d \tau;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_{02}(x, y, z, t) = & -\frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \times \\
 & \times C_{01}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y^2 L_z} \sum_{n=1}^{\infty} F_{nC} c_n(x) c_n(y) \times \\
 & \times n c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} C_{01}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial v} \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times c_n(w) d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \times \\
 & \times \int_0^{L_z} s_n(w) C_{01}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau) \partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial w} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) \times \\
 & \times c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} C_{01}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau) \partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial u} \times \\
 & \times F_{nC} c_n(w) \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \times \\
 & \times F_{nC} \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) C_{01}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau) \partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial v} d w d v d u d \tau - \\
 & - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} s_n(w) C_{01}(u, v, w, \tau) \times \\
 & \times \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau) \partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial w} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \times \\
 & \times F_{nC} \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau) \partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y^2} \times \\
 & \times \frac{1}{L_z} \sum_{n=1}^{\infty} e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau) \partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial v} d w d v d u d \tau \times \\
 & \times n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \times \\
 & \times \int_0^{L_z} s_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau) \partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T) \partial w} d w d v d u d \tau; \\
 C_{11}(x, y, z, t) = & - \frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \times \\
 & \times \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} g_L(u, v, w, T) \frac{\partial C_{01}(u, v, w, \tau)}{\partial w} \times \\
 & \times s_n(w) d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \times \\
 & \times \int_0^{L_z} c_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{10}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) \times \\
 & \times e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{10}(u, v, w, \tau)}{\partial v} d w d v d u d \tau - \frac{2}{L_x} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} \frac{C_{00}^\gamma(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{10}(u, v, w, \tau)}{\partial w} \times \\
 & \times s_n(w) d w d v d u d \tau \frac{\pi}{L_y L_z^2} - \frac{2\pi}{L_x^2 L_y L_z} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} s_n(u) \times \\
 & \times \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} c_n(w) C_{10}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial u} d w d v d u d \tau - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \times \\
 & \times \sum_{n=1}^{\infty} n c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} s_n(v) \int_0^{L_z} \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial v} \times \\
 & \times c_n(w) C_{10}(u, v, w, \tau) d w d v d u d \tau F_{nC} - \frac{2\pi}{L_x L_y L_z^2} \sum_{n=1}^{\infty} n F_{nC} c_n(x) c_n(y) c_n(z) e_{nC}(t) \times \\
 & \times \int_0^t e_{nC}(-\tau) \int_0^{L_x} c_n(u) \int_0^{L_y} c_n(v) \int_0^{L_z} s_n(w) C_{10}(u, v, w, \tau) \frac{C_{00}^{\gamma-1}(u, v, w, \tau)}{P^\gamma(u, v, w, T)} \frac{\partial C_{00}(u, v, w, \tau)}{\partial w} d w d v d u d \tau.
 \end{aligned}$$