

PACS: 68.35.Md, 66.30.Jt

И.М. Давыдова, Т.Н. Мельник, В.М. Юрченко

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ НЕСИММЕТРИЧНОЙ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСИ НА ГРАНИЦАХ ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 14 декабря 2010 года

Рассмотрены особенности сегрегации примеси на границах тонкой пленки, разделяющей два различных твердотельных материала. Проведен теоретический и численный анализ кинетики перераспределения примеси в самой пленке и на ее границах. Получены временные зависимости концентрации на границах и концентрационный профиль в ее толщине. Определены критерии реализации различных вариантов развития процесса в зависимости от температуры и энергии взаимодействия атомов примеси с границами и другими атомами в сегрегационном слое. Проведены оценки времени, необходимого для опустошения слоев примесесодержащего материала, прилегающих к границам, и ширины обедненной зоны.

Ключевые слова: диффузия, сегрегация примеси, слабый раствор, изотерма сегрегации

Введение

Вопрос об особенностях процесса сегрегации примесей из неограниченного и ограниченного объемов материала неоднократно и на протяжении длительного времени рассматривался ранее как в теоретических, так и экспериментальных работах [1–3]. Зачастую при этом отмечалось, что влияние линейного размера зерна или тонкого слоя, содержащего примеси, имеет место далеко не всегда, и в большинстве случаев при рассмотрении процесса сегрегации на той или иной границе раздела можно ограничиться значительно более простой моделью выхода примеси на границу полубесконечной среды. Тем не менее в ряде работ [4,5] было проанализировано именно перераспределение примеси в ограниченном объеме материала с учетом конкретной формы примесесодержащего материала. Но при этом предполагалось, что окружение зерна или пленки, содержащих сегрегирующую примесь, одинаково по всем направлениям, что не всегда соблюдается на практике. В достаточной мере это может быть справедливым для сегрегации примесей на границах зерен в металлах, и само зерно может рассматривать-

ся как сфера или цилиндр в зависимости от индивидуальных особенностей сплава. В настоящее время большой интерес представляют пленочные структуры, где слой материала имеет небольшую (порядка микронной) толщину и по обе стороны пленки находятся разнородные материалы. В данном случае самый простой пример – подложка с одной стороны пленки и свободная поверхность – с другой. Но гораздо чаще образцы имеют многослойную структуру и соответственно процесс выхода примесей на границы раздела слоев обретает новые характеристики.

Существенный интерес представляют процессы массопереноса в тонких металлических пленках, в частности из золота и меди. Это обусловлено активным применением данных пленок в микроэлектронной промышленности. Сегрегация примесей на границах пленок влияет на механические и резистивные свойства данных объектов. В частности, выделение примеси хрома или меди на границе золотая пленка–подложка улучшает адгезию пленки и повышает ее технологические качества [6].

Основные соотношения

Рассмотрим сегрегацию примеси на границах тонкого слоя вещества, разделяющего два разнородных твердотельных материала (рис. 1). Поскольку материалы по обе стороны прослойки разные, выход примеси на границы будет происходить по-разному, в зависимости от энергетических характеристик примеси в объеме тонкого слоя и на его границах. Под энергетическими характеристиками, вообще говоря, следует понимать не только разности энергий атома примеси в глубине материала и в сегрегационных слоях на каждой из границ, но и энергии взаимодействия между примесными атомами

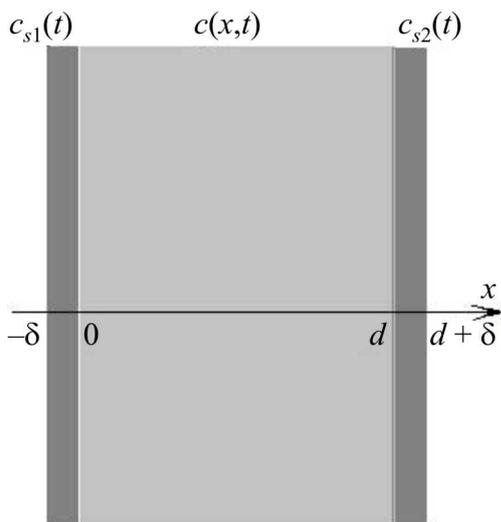


Рис. 1. Схематическое изображение твердотельного слоя, заключенного между двумя разнородными материалами

ми в соответствующих сегрегационных слоях.

От того, какой именно тип взаимодействия из двух возможных (притяжение и отталкивание) реализуется, зависят степень обогащения границы и соответственно кинетика сегрегационного процесса на каждой из границ и перераспределение примеси в образце в целом.

Далее следует учитывать тот факт, что при выходе атома примеси из объема материала на границу раздела число мест в сегрегационном слое, которые способны занять атомы примеси, может быть ограниченным, и будет иметь место «борьба за места», количественно характеризующая

ся «емкостью» сегрегационного слоя, т.е. максимальным числом мест на границе, доступных для примесных атомов. Очевидно, что при наличии разнородных материалов по обе стороны слоя материала, содержащего примеси, свойства границ с большой вероятностью будут отличными как в отношении энергий взаимодействия, так и с точки зрения числа мест на границе.

Перейдем к непосредственному рассмотрению процесса перемещения примесей в вышеописанной системе. Будем предполагать, что толщина тонкого слоя d и на его границах формируется сегрегационный слой толщиной δ (рис. 1). Кроме того, предположим для простоты, что толщина сегрегационного слоя намного меньше толщины слоя материала, в противном случае будет необходимо рассматривать и перемещение примесей внутри сегрегационного слоя. Поэтому разумным будет предположить, что толщина сегрегационного слоя составляет величину порядка межатомного расстояния и соответственно $d \gg \delta$.

Начало координат разместим, к примеру, на левой границе тонкого слоя материала и будем рассматривать одномерную задачу о движении примеси в направлении, перпендикулярном границам слоя.

В данном случае мы полагаем, что для примеси энергетически выгоднее покинуть объем тонкого слоя и сосредоточиться на его границах, как часто бывает в реальности. Поэтому примеси перемещаются к обеим границам, их движение описывается уравнением диффузии

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где $c(x,t)$ – концентрация примеси в слое, D – коэффициент диффузии. Далее, на границах слоя в силу закона сохранения количества примеси в системе объем–сегрегационные слои выполняются соотношения

$$\frac{dc_{s1}(t)}{dt} = \frac{D}{\delta} \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad (2)$$

$$\frac{dc_{s2}(t)}{dt} = \frac{D}{\delta} \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=d}, \quad (3)$$

где $c_{s1}(t)$, $c_{s2}(t)$ – концентрации примеси в сегрегационных слоях при $x = 0$ и $x = d$ соответственно.

Необходимые для решения данной задачи начальные и граничные условия можно сформулировать следующим образом. Положим для простоты, что в начальный момент примеси распределены в объеме равномерно с концентрацией c_0 , а концентрации примесей на границах равны нулю. Достаточно часто в качестве граничных условий при быстром встраивании примеси в границу (время пересечения границы примесью намного меньше времени подвода примеси из объема к границе) используется так называемая

изотерма Фаулера, учитывающая борьбу за места и взаимодействие между атомами примеси в сегрегационном слое [7]:

$$c(0,t) = \frac{c_{s1}(t)}{1-c_{s1}(t)} \frac{1}{K_1(T)} \exp\left(-\frac{z|u_{s1}|}{T} c_{s1}(t)\right),$$

$$c(d,t) = \frac{c_{s2}(t)}{1-c_{s2}(t)} \frac{1}{K_2(T)} \exp\left(-\frac{z|u_{s2}|}{T} c_{s2}(t)\right),$$
(4)

где z – координационное число в поверхностной решетке, которое могут занимать атомы примеси; $K_1(T)$ и $K_2(T)$ – коэффициенты обогащения границ, определяемые величинами энергий взаимодействия примесей с границами:

$$K_1(T) = \exp(|u_1|/T), \quad K_2(T) = \exp(|u_2|/T),$$
(5)

u_1, u_2 – разности энергий атома примеси в глубине материала и в сегрегационном слое на одной из границ, а u_{s1}, u_{s2} – энергии взаимодействия между примесными атомами в соответствующих сегрегационных слоях.

Вышеперечисленные уравнения и соотношения дают возможность описать процесс перераспределения примесей в данной системе. Предварительные характеристики этого процесса можно получить еще до решения системы дифференциальных уравнений в частных производных.

Как неоднократно отмечалось [7,8], концентрация примеси в сегрегационных слоях может быть описана интегральными уравнениями

$$c_{s1}(t) = \frac{1}{\delta} \sqrt{\frac{D}{\pi}} \int_0^t \frac{c_m(t) - c(0, \tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau,$$
(6)

$$c_{s2}(t) = \frac{1}{\delta} \sqrt{\frac{D}{\pi}} \int_0^t \frac{c_m(t) - c(d, \tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau,$$
(7)

где $c_m(t) = c_0 - \frac{\delta}{d}(c_{s1}(t) + c_{s2}(t))$ – средняя концентрация примеси в материале в данный момент времени.

К моменту времени t на левую границу выходят $c_{s1}(t)\delta$ атомов примеси. При этом обедняется прилегающая к границе область материала шириной $\frac{c_{s1}(t)}{c_0} \delta$. На правой границе ситуация аналогична. В определенный момент t^*

может произойти соприкосновение обедняемых областей, которое, однако, не означает окончания процесса сегрегации:

$$\frac{c_{s1}(t^*)}{c_0} \delta = d - \frac{c_{s2}(t^*)}{c_0} \delta,$$
(8)

поскольку концентрации $c_{s1}(t^*)$, $c_{s2}(t^*)$ могут не совпадать с равновесными значениями, определяемыми из системы уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta(c_{s1}^e + c_{s2}^e) + dc_m^e = c_0(d + 2\delta), \\ c_m^e = \frac{c_{s1}^e}{(1 - c_{s1}^e)K_1(T)} \exp\left(-\frac{z|u_{s1}|}{T}c_{s1}^e\right), \\ c_m^e = \frac{c_{s2}^e}{(1 - c_{s2}^e)K_2(T)} \exp\left(-\frac{z|u_{s2}|}{T}c_{s2}^e\right). \end{array} \right. \quad (9)$$

Заслуживает отдельного обсуждения вопрос о степени обеднения слоя материала, который неоднократно рассматривался ранее [5]. В зависимости от того, намного ли отличается равновесное значение концентрации примеси в объеме материала от ее начального значения, слой можно считать «тонким» (не располагающим достаточно большим количеством примеси для заполнения границ без существенного понижения количества примеси в объеме материала) или «толстым», в котором по окончании сегрегационного процесса изменение значения концентрации много меньше ее начального значения. Как правило, толщины слоя порядка 1000 межатомных расстояний было достаточно, чтобы отнести пленку к разряду «толстых» и использовать формулы, полученные при рассмотрении полубесконечной среды. Но по мере появления возможностей получения тонкопленочных материалов становилось очевидным, что такого грубого критерия совершенно недостаточно. Однако чтобы сделать более точный вывод о том, к какому типу следует отнести данный образец слоистого или мелкозернистого материала, необходимо знать не только начальное значение концентрации примеси в объеме и коэффициент обогащения границы примесью, определяемый энергетическими параметрами межатомного взаимодействия и свойствами границы. Большая роль в данном выборе принадлежит такому термодинамическому параметру, как температура, что можно проиллюстрировать следующим образом.

Вместо $|u_1|$ и $|u_{s1}|$ введем новые параметры – критическую температуру $T_{cr} \equiv \frac{z|u_{s1}|}{4}$ и отношение $\gamma \equiv \frac{4|u_1|}{z|u_{s1}|}$. Из экспериментальных данных для типичных примесей, таких как фосфор, сера, олово, в сталях [9] следует, что критическая температура составляет величину порядка нескольких сотен градусов, а коэффициент γ меняется в пределах от 1 до 6. Для определенности в дальнейших вычислениях было принято $\gamma = 4$.

В [8] представлен ряд изотерм $f(c_s)$, соответствующих температурам выше и ниже критической. В ограниченном образце величина $f(c_s)$ определяется выражением

$$f(c_s) = \frac{2\delta}{d}c_s + \frac{c_s}{(1 - c_s)} \exp\left(-\frac{T_{cr}}{T}(\gamma + 4c_s)\right). \quad (10)$$

При одном и том же начальном содержании примеси в объеме материала результат сегрегации, т.е. равновесное значение концентрации примеси в сегрегационном слое, может различаться на порядки. При температурах выше критической равновесное значение концентрации в сегрегационном слое близко к единице, и, следовательно, для его достижения может оказаться необходимым значительно истощить не только прилегающий к границе слой материала, но и все зерно или пленку в целом. При температуре ниже критической подобного истощения может не наблюдаться. Таким образом, в зависимости от температуры протекания процесса сегрегация примеси на границах тонкого слоя примесесодержащего материала может приводить к существенному понижению количества примеси в объеме или же обходиться без такового.

Для получения полуколичественных результатов можно ограничиться использованием вместо изотермы Фаулера линейного закона Генри, когда концентрация примеси в сегрегационном слое прямо пропорциональна концентрации в прилегающем слое материала. Система принимает гораздо более простой вид

$$\begin{cases} \delta(c_{s1}^e + c_{s2}^e) + dc_m^e = c_0(d + 2\delta), \\ c_m^e = \frac{c_{s1}^e}{K_1(T)} = \frac{c_{s2}^e}{K_2(T)}, \end{cases} \quad (11)$$

откуда получаем

$$\begin{aligned} c_{s1}^e &\approx c_0 \frac{d + 2\delta}{\delta} \frac{3(K_1 + K_2) + 4K_1K_2\delta/d}{K_1(1 + 2K_1K_2\delta/d)}, \\ c_{s2}^e &= c_0 \frac{d + 2\delta}{\delta} \frac{3(K_1 + K_2) + 4K_1K_2\delta/d}{K_2(1 + 2K_1K_2\delta/d)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Таким образом, можно приблизительно определить, какую долю примеси оттянет на себя та или другая граница. Например, при $K_1 \gg K_2 \gg d/\delta$, $c_{s1}^e \approx 2c_0(d + 2\delta)/\delta$, $c_{s2}^e \ll 2c_0(d + 2\delta)/\delta$.

«Линия водораздела» $x = b(t)$ между двумя обедняемыми областями определяется из условия

$$\left. \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right|_{x=b(t)} = 0. \quad (13)$$

Возможны следующие варианты развития процесса:

1) примеси достаточно для полного заполнения обоих сегрегационных слоев еще до соприкосновения обедняемых областей;

2) примеси недостаточно для полного заполнения сегрегационных слоев, области обеднения пересекаются, и «водораздел» смещается по направлению к границе с меньшим коэффициентом обогащения.

Какой именно вариант будет реализован на практике, в основном определяет соотношение коэффициентов обогащения. Большую роль в данном случае могут играть и другие параметры, в частности температура протекания процесса.

Если $K_1 \sim K_2 \ll d/\delta$, т.е. коэффициенты обогащения сравнительно невелики, сегрегация происходит практически независимо на обеих границах, и равновесные значения $c_{s1}^e \approx c_0 K_1$, $c_{s2}^e \approx c_0 K_2$. Если же один из коэффициентов значительно превосходит другой: $K_1 \gg K_2 \sim d/\delta \gg 1$, то $c_{s1}^e \sim c_0 d/\delta$, $c_{s2}^e \sim c_0$, и вторая граница практически не обогащается. При близких, но достаточно высоких значениях коэффициентов обогащения $K_1 \sim K_2 \gg d/\delta$, равновесные значения концентраций приближенно равны

$$c_{s1}^e \approx c_0 \frac{d}{\delta} \frac{K_1}{K_1 + K_2}, \quad c_{s2}^e \approx c_0 \frac{d}{\delta} \frac{K_2}{K_1 + K_2}. \quad (14)$$

Времена достижения сегрегаций, близких к равновесным, определяются естественной оценкой $t_1 = \frac{\delta^2}{D} (c_{s1}^e)^2$, $t_2 = \frac{\delta^2}{D} (c_{s2}^e)^2$.

Чтобы наблюдать перемещение примеси в объеме материала между двумя сегрегационными слоями, уравнение диффузии все же необходимо решать. При использовании изотермы Генри концентрационный профиль в пленке описывается формулой

$$c(x, t) = c_0 \left(1 + 2 \frac{d}{\delta} \right) \left(1 - \frac{K_1 + K_2}{K_1 + K_2 + \frac{d}{\delta}} \right) + \sum_{n=0}^{\infty} A_n \exp(-\lambda_n^2 t), \quad (15)$$

где $\lambda_n \approx \pi n$, $n = 1, 2$ – корни характеристического уравнения $\operatorname{tg} \lambda \frac{d}{\delta} = \frac{K_1 \lambda - K_2 \lambda^2}{1 + K_1 K_2 \lambda^3}$,

$$A_n = \frac{2 \left(\frac{\sin(\lambda_n d / \delta)}{\lambda_n} - K_1 + K_1 \cos(\lambda_n d / \delta) \right) (\cos \lambda_n x - K_1 \lambda_n \sin \lambda_n x)}{\frac{1 - K_1^2 \lambda_n^2 / 2}{2 \lambda_n} \sin(2 \lambda_n d / \delta) + K_1 \cos(2 \lambda_n d / \delta) + K_1^2 \lambda_n^2 d / \delta - K_1 + d / \delta}. \quad (16)$$

При условии идентичности обеих границ, т.е. при $K_1 = K_2$, данная формула переходит в результат, полученный в [5]. Максимум концентрационного профиля (13) смещается в толщине пленки по закону

$$b(t) \approx \frac{1}{2} + 4 \frac{A_2}{A_1} \exp(-3\pi^2 t), \quad (17)$$

и A_1, A_2 вычисляются из (16).

Результаты и обсуждение

Перейдем теперь к рассмотрению кинетики сегрегационного процесса. Для расчетов были использованы значения коэффициентов обогащения и величины энергий, характерные для меди, золота и серебра [10]. В этой работе методами молекулярной динамики были вычислены энергии сегрегации на поверхностях раздела в металлах с ГЦК-решеткой. Авторы [10] подтвердили, что именно значения энергий u_1 , u_2 являются ключевыми параметрами, определяющими протекание процесса сегрегации.

Ниже представлены рассчитанные нами с использованием (6) и (7) сегрегационные кривые для серебра в медной и золотой пленках (рис. 2).

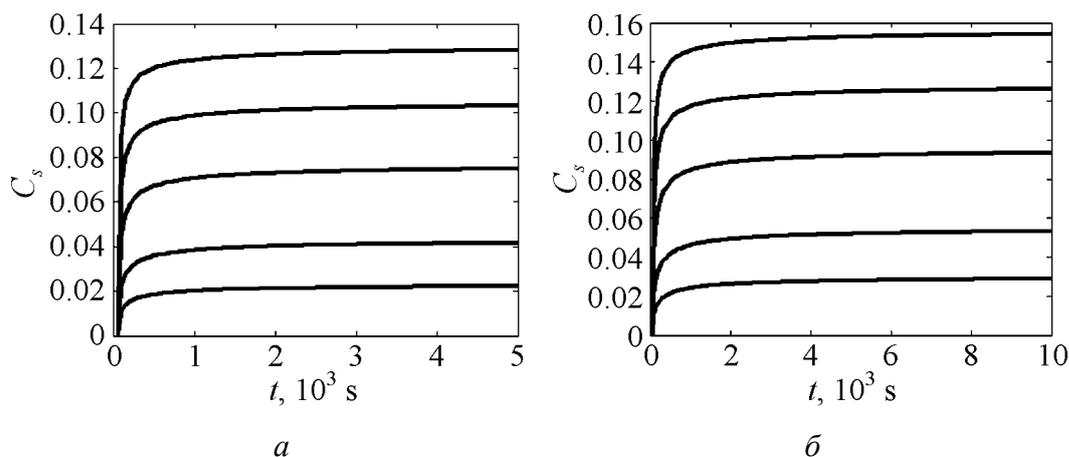


Рис. 2. Сегрегация примеси серебра в медной (а) и золотой (б) пленках на границе пленка–подложка. Значения начальной концентрации $C_0 = 0.005, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$

Общая длительность процесса сегрегации составляет от нескольких часов до суток и для первого, и для второго случая. Она определяется не только величиной коэффициента диффузии, но и количеством примеси, которое необходимо переместить для насыщения сегрегационного слоя, т.е. коэффициентом обогащения.

Теперь перейдем к перемещению примеси в объеме тонкого слоя (рис. 3). При расчете предполагается, что коэффициент обогащения на правой границе в 12 раз превосходит коэффициент обогащения на левой границе. Такая ситуация соответствует структуре подложка–пленка–свободная поверхность, поскольку в большинстве случаев коэффициент обогащения свободной поверхности на 1–2 порядка превосходит коэффициент обогащения внутренней поверхности раздела [11]. Явно видно постепенное смещение максимума концентрационного профиля к границе с меньшим коэффициентом обогащения. Скорость перемещения максимума и общего обеднения пленки примесью определяется величиной коэффициента обогащения границы.

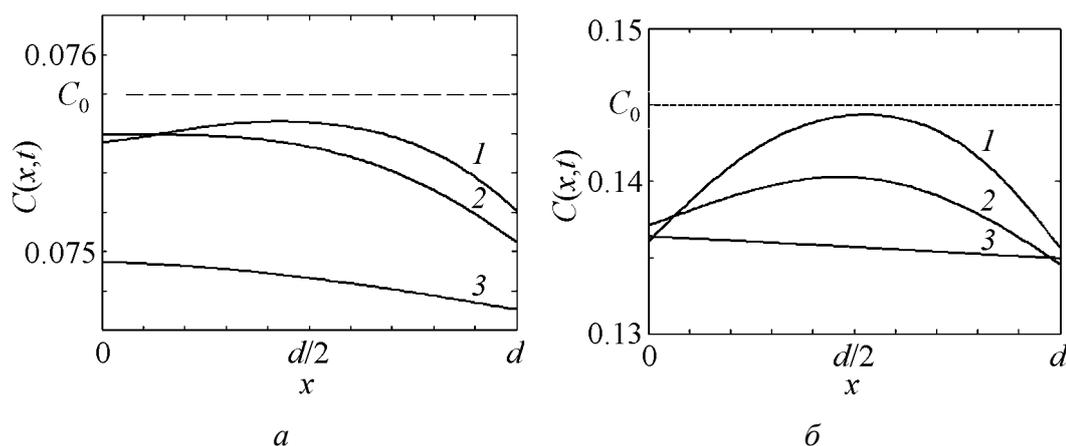


Рис. 3. Концентрационные профили распределения примеси (серебра) в толщине пленки меди (*а*) и золота (*б*): *а* – кривые рассчитаны для времен 4000, 10000, 100000 s; *б* – 3000, 10000, 100000 s соответственно

Различие концентрационных профилей на рис. 3, *а* и *б* состоит в том, что обеднение медной пленки вблизи границы раздела пленка–подложка происходит медленнее, чем в пленке из золота, что обусловлено почти в 2 раза меньшим значением энергии u_{s1} [10] и соответственно в 8 раз меньшим коэффициентом обогащения K_1 . Концентрация примеси в пленке, близкая к равновесной, достигается по прошествии приблизительно одинаковых промежутков времени – порядка 10^5 s, т.е. около 28 h. В данном случае можно говорить о заметном отличии темпов сегрегации в этих материалах и сплавах на основе железа [7], где процесс перераспределения примеси идет гораздо медленнее. Ускоренный ход сегрегации обусловлен в первую очередь более высокими коэффициентами диффузии серебра в меди и золоте, чем коэффициенты диффузии остаточных примесей в железоникелевых сплавах [11]. Кроме того, в тонкопленочных структурах коэффициент диффузии может оказаться выше, чем в макроскопических образцах [12].

Выводы

В данной работе проанализированы особенности сегрегации примесей на границах тонкого слоя вещества, разделяющего два разнородных твердотельных материала, что применимо, в частности, и к случаю, когда одна из границ раздела является внутренней, а другая – свободной. Ввиду того, что материалы по обе стороны прослойки разные, выход примеси на границы происходит с разной скоростью, в зависимости от энергетических характеристик примеси в объеме тонкого слоя и на его границах.

Установлено, что в зависимости от энергий взаимодействия примесных атомов с границами, а также энергий взаимодействия между атомами примеси в сегрегационных слоях и от температуры возможны следующие варианты развития процесса:

а) примеси достаточно для полного заполнения обоих сегрегационных слоев еще до соприкосновения обедняемых областей;

б) примеси недостаточно для полного заполнения сегрегационных слоев, области обеднения пересекаются, и «водораздел» смещается по направлению к границе с меньшим коэффициентом перераспределения.

Проведены оценки времен обеднения областей материала, прилегающих к сегрегационным слоям и ширины обедненной области вблизи границы материала.

Авторы выражают глубокую благодарность Э.П. Фельдману за поддержку и плодотворное обсуждение работы.

1. Б.С. Бокштейн, Ч.В. Конецкий, Л.С. Швиндлерман, Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах, Металлургия, Москва (1986).
2. G. Rowlands, D.P. Woodruff, Phil. Mag. **40**, 459 (1979).
3. Э.П. Фельдман, В.М. Юрченко, Поверхность. Физика, химия, механика № 12, 138 (1990).
4. В.В. Слезов, Л.Н. Давыдов, В.В. Рогожкин, ФТТ **23**, 3565 (1995).
5. Э.П. Фельдман, Т.Н. Фурсова, В.М. Юрченко, Металлофизика **14**, № 4, 28 (1992).
6. Б.С. Лунин, Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия **46**, 220 (2005).
7. Т.Н. Мельник, Э.П. Фельдман, В.М. Юрченко, Металлофиз. новейшие технол. **21**, № 4, 28 (1999).
8. A.V. Krajnikov, V.M. Yurchenko, E.P. Feldman, D.B. Williams, Surface Science **515**, 36 (2002).
9. M.P. Seah, Surface Science **80**, 8 (1979).
10. Jian-Min Zhang, Bo Wang, and Ke-Wei Xu, PRAMANA – journal of physics **69**, 603 (2007).
11. M.P. Seah, C. Lea, Phil. Mag. **31**, 627 (1975).
12. С.И. Богатыренко, Н.Т. Гладких, А.П. Крышталь, А.Л. Самсоник, В.Н. Сухов, ФММ **109**, 276 (2010).

І.М. Давидова, Т.М. Мельник, В.М. Юрченко

ОСОБЛИВОСТІ КІНЕТИКИ НЕСИМЕТРИЧНОЇ СЕГРЕГАЦІЇ ДОМІШКИ НА МЕЖАХ ТОНКИХ МЕТАЛЕВИХ ПЛІВОК

Розглянуто особливості сегрегації домішки на межах тонкої металевої плівки, що розподіляє два різних твердотільних матеріали. Проведено теоретичний і числовий аналіз кінетики перерозподілу домішки в самій плівці та на її межах. Отримано часові залежності концентрації на межах і концентраційний профіль в її товщині. Визначено критерії реалізації різних варіантів розвитку процесу в залежності від температури й енергії взаємодії атомів домішки з межами й іншими атомами в сегрегаційному шарі. Проведено оцінки часу, що необхідний для зрушення прилеглих до межі шарів матеріалу, що містять домішки, та ширини збідненої зони.

Ключові слова: дифузія, сегрегація домішки, слабкий розчин, ізотерма сегрегації

I.M. Davydova, T.N. Melnik, V.M. Yurchenko

PECULIARITIES OF ASYMMETRIC IMPURITY SEGREGATION AT THE BOUNDARIES OF THIN METAL FILMS

Peculiarities of segregation of impurities at the boundaries of a thin film separating two different solid materials are considered. Theoretical and numerical analysis of kinetics of impurity redistribution within a film and at its boundaries has been carried out. Time dependences of impurity concentrations at boundaries of the film and concentration profile within the film were obtained. Subject to the temperature and the energy of impurity atom interaction with the boundaries and with the rest of atoms of segregation layers, the criteria of realization of different variants of process evolution were ascertained. The estimations of time of exhausting of areas of the impurity-containing material adjusting to the boundaries have been carried out as well as the width of the exhausted zone near the boundaries.

Keywords: diffusion, impurity segregation, weak solution, segregation isotherm

Fig. 1. The scheme of the layer of solid located between two different materials

Fig. 2. Segregation of Ag impurity in copper (*a*) and gold (*b*) films at substrate-film boundary. The initial concentration $C_0 = 0.005, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$

Fig. 3. Concentration profiles of impurity distribution (Ag) in the copper (*a*) and gold (*b*) film: *a* – the curves are calculated for the time of 4000, 10000, 100000 s; *b* – 3000, 10000, 100000 s, correspondingly