

УДК 519.63;621.315.592

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УРАВНЕНИЙ ФОККЕРА – ПЛАНКА

В. И. БЕЛЬКО¹⁾, С. В. ЛЕМЕШЕВСКИЙ²⁾, М. М. ЧУЙКО²⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Институт математики НАН Беларуси, ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Беларусь

Рассмотрена модель переноса ионов высоких энергий в твердом теле, основанная на численном решении уравнения Фоккера – Планка, имеющего второй порядок по угловой и энергетической переменным. Построена конечно-разностная схема, аппроксимирующая начально-краевую задачу для уравнения Фоккера – Планка. Показано, что разностная схема удовлетворяет сеточному принципу максимума. Получена оценка устойчивости разностного решения по начальным данным. Приведены результаты вычислительных экспериментов по моделированию процесса переноса ионов висмута и фосфора при ионной имплантации в кремний с начальными энергиями 1 и 50 МэВ. Профили распределения по глубине остановившихся ионов, полученные в рамках данной модели и в рамках модели без учета углового рассеяния, сравниваются с результатами статистического моделирования.

Ключевые слова: высокоэнергетическая ионная имплантация; уравнение Фоккера – Планка; разностные схемы; устойчивость.

Образец цитирования:

Белько В. И., Лемешевский С. В., Чуйко М. М. Численное моделирование высокоэнергетической ионной имплантации с использованием уравнений Фоккера – Планка // Журн. Белорус. гос. ун-та. Математика. Информатика. 2017. № 2. С. 28–36.

For citation:

Belko V. I., Lemeshevsky S. V., Chuiko M. M. Numerical modeling of high-energy ion implantation using Fokker – Planck equations. *J. Belarus. State Univ. Math. Inform.* 2017. No. 2. P. 28–36 (in Russ.).

Авторы:

Виктор Иванович Белько – кандидат физико-математических наук; заведующий кафедрой математического моделирования и управления факультета прикладной математики и информатики.

Сергей Владимирович Лемешевский – кандидат физико-математических наук; заместитель директора.

Михаил Матвеевич Чуйко – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник.

Authors:

Viktor Belko, PhD (physics and mathematics); head of the department of mathematical modeling and control, faculty of applied mathematics and computer sciences.

belko@bsu.by

Sergey Lemeshevsky, PhD (physics and mathematics); deputy director.

svl@im.bas-net.by

Mikhail Chuiko, PhD (physics and mathematics); leading researcher.

chuiko@im.bas-net.by

NUMERICAL MODELING OF HIGH-ENERGY ION IMPLANTATION USING FOKKER – PLANCK EQUATIONS

V. I. BELKO^a, S. V. LEMESHEVSKY^b, M. M. CHUIKO^b

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^bInstitute of Mathematics, National Academy of Sciences of Belarus,
Surhanava Street, 11, 220072, Minsk, Belarus

Corresponding author: V. I. Belko (belko@bsu.by)

The model of transport for high energetic ions in solids based on numerical solving of the boundary value problem for the Fokker – Planck equation is considered. The Fokker – Planck equation has a second order both on energetic and angular variables. We derived the difference scheme approximating the boundary value problem. It was shown, that the difference scheme is satisfied the grid maximum principle. There is estimated the stability of the difference solutions with respect to the initial data. We present the results of computational experiments on modeling of bismuth and phosphorus ion transport under ion implantation into the silicon with the initial energy of 1 and 50 MeV. We compared depth distribution profiles of stopped particles obtained using both the presented model and the model without angular scattering with the data of statistical simulations.

Key words: the high-energy ion implantation; the Fokker – Planck equation; difference schemes; stability.

В настоящее время метод высокоэнергетической ионной имплантации является актуальным в связи с использованием его для создания ряда уникальных приборов микроэлектроники, а также систем многоуровневой электроники, когда задействуется не только приповерхностная область, но и объем кристаллов. Имплантация при высоких энергиях используется для анализа состава и свойств материалов, а также для изучения их устойчивости при воздействии ионизирующих излучений.

Применение высокоэнергетической ионной имплантации при производстве новых приборов микроэлектроники и исследовании материалов требует знания результирующих распределений остановившихся ионов и выделенной в мишень энергии с высокой степенью точности. Теоретические основы процесса переноса заряженных частиц хорошо разработаны: построена модель бинарных столкновений, найдены с удовлетворительной точностью дифференциальные сечения и коэффициенты упругого и неупругого рассеяния частиц [1; 2]. На основе данной модели могут быть найдены требуемые распределения с использованием метода статистических испытаний Монте-Карло [1] или с помощью численного решения линеаризованного интегро-дифференциального уравнения переноса Больцмана [3]. Тем не менее разработка и реализация вычислительных алгоритмов для решения уравнения переноса Больцмана требует значительных усилий. Построение распределений остановившихся частиц методом Монте-Карло с использованием, например, программы *SRIM* [4] приводит – особенно в случае высокоэнергетической имплантации – к неоправданно большому вычислительным затратам.

Физические процессы, характеризующие ионную имплантацию в области высоких энергий, отличаются преобладанием электронного торможения и малой переданной энергией в ядерных взаимодействиях, что обуславливает рассеяние преимущественно на малые углы. Поэтому интегральный оператор, описывающий упругие столкновения, может быть заменен дифференциальным оператором Фоккера – Планка [5], а интегро-дифференциальное уравнение переноса Больцмана – уравнением в частных производных второго порядка. Соответствующие уравнения типа Фоккера – Планка хорошо известны в теории переноса быстрых заряженных частиц в твердом теле [5; 6] и переноса излучения [7], а также в теории взаимодействия ионных пучков с плазмой [8].

Стандартным методом построения дифференциального оператора, аппроксимирующего интегральный, является разложение искомой функции распределения движущихся частиц и дифференциального сечения упругого рассеяния в ряд Тейлора по энергетической и угловой переменным. В зависимости от числа оставляемых членов в тейлоровском разложении могут быть получены различные уравнения в частных производных типа Фоккера – Планка. Так, уравнение Фоккера – Планка, имеющее второй порядок по угловой переменной и первый по энергетической, рассматривается в работе [9]. Для решения соответствующей начально-краевой задачи использовался явный адаптивный одношаговый конечно-разностный метод. В работе [10] предлагается алгоритм численного решения уравнения Фоккера – Планка без учета углового рассеяния, имеющего второй порядок по энергетической переменной.

С одной стороны, поскольку уравнения Фоккера – Планка являются аппроксимациями интегро-дифференциального уравнения переноса, каждое из них применимо лишь в определенном диапазоне энергий и типов ионов и мишеней. С другой стороны, эффективные алгоритмы численного решения

уравнений Фоккера – Планка могут использоваться как составная часть комбинированных алгоритмов [11; 12]. Столкновения с малой переданной энергией описываются в этом случае дифференциальным оператором, а так называемые сильные столкновения – интегральным.

В настоящей работе используется модель переноса ионов высоких энергий в твердом теле, основанная на численном решении уравнения Фоккера – Планка, имеющего второй порядок по угловой и энергетической переменным. Приводится сравнение полученных результатов с результатами статистического моделирования.

Постановка задачи

Рассмотрим постановку начально-краевой задачи для уравнения Фоккера – Планка с диффузионным слагаемым по энергии и с учетом рассеяния по углам, описывающего перенос быстрых заряженных частиц в плоском слое вещества:

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\alpha(E)}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \left((1 - \mu^2) \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right) + \frac{\partial}{\partial E} (\beta(E) \Phi) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} (Q(E) \Phi), \quad (x, E, \mu) \in \Omega, \quad (1)$$

$$\Omega = \{(x, E, \mu): 0 < x < H, E_c < E < E_0, 0 < \mu < 1\},$$

где $\Phi(x, E, \mu)$ – плотность потока ионов на глубине x , имеющих энергию E и косинус μ угла φ между направлением движения и основной осью Ox , расположенной перпендикулярно к поверхности мишени; $0 \leq \varphi < \frac{\pi}{2}$; H – толщина слоя; E_c – энергия срезки (ионы с энергией ниже E_c считаются остановившимися); E_0 – начальная энергия ионов.

В качестве граничного условия при $x = 0$ задается равномерно распределенный по поверхности мишени входящий поток ионов, определяемый функцией $\Phi_0(E, \mu)$:

$$\Phi|_{x=0} = \Phi_0(E, \mu), \quad E_c \leq E < E_0, \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (2)$$

которая в случае широкого моноэнергетического пучка, равномерно распределенного по поверхности мишени, имеет вид

$$\Phi_0(E, \mu) = D \delta(\mu - \mu_0) \delta(E - E_0),$$

где D – доза внедренных ионов; $\mu_0 = \cos \varphi_0$; φ_0 – угол падения ($\varphi_0 = 0$).

Обобщенный поток из области энергий $E > E_0$ равен нулю, следовательно,

$$\beta(E) \Phi + \frac{\partial}{\partial E} (Q(E) \Phi) \Big|_{E=E_0} = 0, \quad 0 < x \leq H, \quad 0 < \mu \leq 1. \quad (3)$$

Отсутствие частиц, проходящих через энергетический порог E_c , задается краевым условием вида

$$\frac{\partial \Phi}{\partial E} \Big|_{E=E_c} = 0, \quad 0 < x \leq H, \quad 0 < \mu \leq 1. \quad (4)$$

Будем считать, что отклонение частиц на углы $\varphi > \frac{\pi}{2}$ является невозможным, поэтому

$$\Phi|_{\mu=0} = 0, \quad 0 \leq x \leq H, \quad E_c \leq E \leq E_0. \quad (5)$$

Непосредственно из уравнения может быть получено условие при $\mu = 1$:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} + 2\alpha(E) \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} - \frac{\partial}{\partial E} (\beta(E) \Phi) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} (Q(E) \Phi) \right) \Big|_{\mu=1} = 0. \quad (6)$$

Коэффициенты уравнения могут быть найдены исходя из дифференциального сечения упругого рассеяния [5; 9]. В настоящей работе для вычисления коэффициентов будем использовать «универсальное» сечение рассеяния из [1].

Пусть M_1, Z_1, M_2, Z_2 – атомные массы и номера иона и атома мишени соответственно; E – кинетическая энергия иона; T – энергия, переданная при упругом столкновении с ядрами атомов мишени. Тогда коэффициент ядерного торможения $S_n(E)$, определяющий средние потери энергии на единицу длины пути в мишени из-за упругих столкновений, задается следующей формулой:

$$S_n(E) = N \int_0^{\gamma E} T d\sigma = \frac{N\pi A_E^2}{2} \int_0^{\gamma E} T f(t^{1/2}) \frac{dt}{t^{3/2}} = \frac{N\pi A_E^2}{2\delta_1 E} \int_0^{\delta_1 \gamma E^2} t^{-1/2} f(t^{1/2}) dt,$$

где N – атомная плотность мишени; $d\sigma$ – дифференциальное сечение рассеяния по переданной энергии; $A_E = \frac{0,4685}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}}$ – постоянная экранирования; $\gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}$ – кинематическая постоянная; константа $\delta_1 = \frac{M_2 A_E^2}{4M_1 Z_1^2 Z_2^2 (e^2)^2}$, $e^2 = 0,0144$ кэВ/Å; переменная $t = \delta_1 T E$.

Функция f приводится в [1] и задает «универсальное» сечение упругого рассеяния. Диффузионный коэффициент перераспределения по энергии $Q(E)$ имеет вид

$$Q(E) = N \int_0^{\gamma E} T^2 d\sigma = \frac{N\pi A_E^2}{2} \int_0^{\gamma E} T^2 f(t^{1/2}) \frac{dt}{t^{3/2}} = \frac{N\pi A_E^2}{2\delta_1^2 E^2} \int_0^{\delta_1 \gamma E^2} t^{1/2} f(t^{1/2}) dt,$$

а диффузионный коэффициент перераспределения по углам $\alpha(E)$ –

$$\alpha(E) = N \int_0^{\gamma E} (1 - \cos \Theta_L(E, T)) d\sigma = \frac{N\pi A_E^2}{2} \int_0^{\delta_1 \gamma E^2} \left(1 - \cos \Theta_L\left(E, \frac{t}{\delta_1 E}\right)\right) f(t^{1/2}) \frac{dt}{t^{3/2}}.$$

В последней формуле Θ_L – угол рассеяния в лабораторной системе координат, который может быть найден по следующей формуле:

$$\cos \Theta_L(E, T) = 0,5 \left((1 - \tau)^{1/2} + \frac{1 - \mu\tau}{(1 - \tau)^{1/2}} \right),$$

где $\mu = \frac{M_2}{M_1}$; $\tau = \frac{T}{E}$.

В формуле для коэффициента $\beta(E)$ слагаемое $S_e(E)$ – коэффициент электронного торможения, который был получен из программы SRIM [4]:

$$\beta(E) = S_n(E) + S_e(E).$$

Для приближенного вычисления коэффициентов использовались методы численного интегрирования в нерегулярном случае [13, с. 186–187].

На основании найденной плотности потока ионов определяется профиль распределения по глубине остановившихся частиц по формуле

$$W(x) = -\frac{d}{dx} \int_{E_c}^{E_0} dE \int_0^1 \mu \Phi(x, E, \mu) d\mu.$$

Вычислительный алгоритм

Для численного решения начально-краевой задачи (1)–(6) в области Ω введем равномерную сетку

$$E_i = E_c + i\Delta E, i = 0, \dots, N_E, \Delta E = \frac{E_0 - E_c}{N_E}; \mu_j = j\Delta\mu, j = 0, \dots, N_\mu, \Delta\mu = \frac{1}{N_\mu};$$

$$x^{n+1} = x^n + \Delta x_n, n = 0, \dots, N_x, x^0 = 0.$$

Запишем уравнение (1) в виде

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\alpha(E)}{2} \frac{\partial F_\mu}{\partial \mu} + \frac{\partial F_E}{\partial E}, \quad (7)$$

где

$$F_\mu = (1 - \mu^2) \frac{\partial \Phi}{\partial \mu}; \quad F_E = \tilde{\beta}(E) \Phi + \frac{Q(E)}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial E}, \quad \tilde{\beta}(E) = \beta(E) + \frac{1}{2} \frac{\partial Q(E)}{\partial E}.$$

На введенной в области Ω разностной сетке аппроксимируем уравнение (7) неявной консервативной разностной схемой

$$\mu_j \frac{\Phi_{i,j}^{n+1} - \Phi_{i,j}^n}{\Delta x_n} = \frac{\alpha_i}{2} \frac{F_{\mu,i,j+1/2}^{n+1} - F_{\mu,i,j-1/2}^{n+1}}{\Delta \mu} + \frac{F_{E,i+1/2,j}^{n+1} - F_{E,i-1/2,j}^{n+1}}{\Delta E}, \quad (8)$$

$$i = 1, 2, \dots, N_E - 1, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu - 1,$$

где

$$F_{\mu,i,j+1/2}^{n+1} = (1 - \mu_{j+1/2}^2) \frac{\Phi_{i,j+1}^{n+1} - \Phi_{i,j}^{n+1}}{\Delta \mu};$$

$$F_{E,i+1/2,j}^{n+1} = 0,5 \tilde{\beta}_{i+1/2} (\Phi_{i+1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j}^{n+1}) + (1 + \rho_{i+1/2}) \frac{Q_{i+1/2}}{2} \frac{\Phi_{i+1,j}^{n+1} - \Phi_{i,j}^{n+1}}{\Delta E},$$

$$\tilde{\beta}_{i+1/2} = 0,5 (\beta_{i+1} + \beta_i) + \frac{1}{2} \frac{Q_{i+1} - Q_i}{\Delta E}.$$

Для обеспечения монотонности разностной схемы и сохранения второго порядка аппроксимации аналогично, как и в работе [10], при аппроксимации потока $F_{E,i+1/2,j}^{n+1}$ применен регуляризатор

$$\rho_{i+1/2} = \eta P_{i+1/2}^2, \quad P_{i+1/2} = \frac{|\tilde{\beta}_{i+1/2}| \Delta E}{Q_{i+1/2}}, \quad \eta > \frac{1}{4}.$$

При аппроксимации краевых условий (3), (4) и (6) используем исходное уравнение (1):

$$\mu_j \frac{\Phi_{N_E,j}^{n+1} - \Phi_{N_E,j}^n}{\Delta x_n} = \frac{\alpha_{N_E}}{2} \frac{F_{\mu,N_E,j+1/2}^{n+1} - F_{\mu,N_E,j-1/2}^{n+1}}{\Delta \mu} - \frac{2F_{E,N_E-1/2,j}^{n+1}}{\Delta E}, \quad (9)$$

$$\mu_j \frac{\Phi_{0,j}^{n+1} - \Phi_{0,j}^n}{\Delta x_n} = \frac{\alpha_0}{2} \frac{F_{\mu,0,j+1/2}^{n+1} - F_{\mu,0,j-1/2}^{n+1}}{\Delta \mu} + \frac{2(F_{E,1/2,j}^{n+1} - F_{E,0,j}^{n+1})}{\Delta E}, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu - 1; \quad (10)$$

$$\frac{\Phi_{i,N_\mu}^{n+1} - \Phi_{i,N_\mu}^n}{\Delta x_n} = -\alpha_i \frac{F_{\mu,i,N_\mu-1/2}^{n+1}}{\Delta \mu} + \frac{F_{E,i+1/2,N_\mu}^{n+1} - F_{E,i-1/2,N_\mu}^{n+1}}{\Delta E}, \quad i = 1, 2, \dots, N_E - 1, \quad (11)$$

где

$$F_{E,0,j}^{n+1} = \left(\beta_0 + \frac{1}{2} \frac{Q_1 - Q_0}{\Delta E} \right) \Phi_{0,j}^{n+1}. \quad (12)$$

Условие (2) аппроксимируется следующим образом:

$$\Phi_{i,j}^0 = D \Delta(E_i - E_0) \Delta(\mu_j - \mu_0), \quad (13)$$

где $\Delta(E_i - E_0) \Delta(\mu_j - \mu_0)$ – кусочно-линейная аппроксимация двумерной δ -функции.

По значениям сеточной функции $\Phi_{i,j}^n$ и $\Phi_{i,j}^{n+1}$ вычисляется сеточная функция $W^{n+1} = \frac{I^n - I^{n+1}}{\Delta x_n}$, где I^n – интегральная сумма для $\int_{E_c}^{E_0} dE \int_0^1 \mu \Phi(x^n, E, \mu) d\mu$.

Проведем анализ предложенной разностной схемы (8)–(13), которую можно трактовать как аппроксимацию нестационарной задачи конвекции – диффузии с конвективным слагаемым в дивергентном виде для функции $\Phi(x, E, \mu)$, если под временной переменной понимать x , а в качестве пространственных выступают угловая и энергетическая переменные. В целях исследования устойчивости такого вида задач можно использовать принцип максимума в варианте диагонального преобладания по столбцам [14]. Для таких задач наиболее естественно получить оценки устойчивости в пространстве сеточных функций L_1 , снабженном нормой $\|u\|_1 = \sum_{i=1}^{N_\mu-1} \sum_{j=1}^{N_E-1} |u_{ij}| \Delta \mu \Delta E$.

Уравнение (8) в узлах с индексами $i = 1, 2, \dots, N_E - 1, j = 1, 2, \dots, N_\mu - 1$ запишем в виде

$$C_{ij} \Phi_{ij}^{n+1} - A_{1ij} \Phi_{i-1j}^{n+1} - B_{1ij} \Phi_{i+1j}^{n+1} - A_{2ij} \Phi_{ij-1}^{n+1} - B_{2ij} \Phi_{ij+1}^{n+1} = G_{ij}. \quad (14)$$

Соответственно, граничные условия (9) и (10) по энергетической переменной в узлах $j = 1, 2, \dots, N_\mu - 1, i = 0$ и $i = N_E$, можно записать следующим образом:

$$C_{0j} \Phi_{0j}^{n+1} - B_{10j} \Phi_{1j}^{n+1} - A_{20j} \Phi_{0j-1}^{n+1} - B_{20j} \Phi_{0j+1}^{n+1} = G_{0j}; \quad (15)$$

$$C_{N_E j} \Phi_{N_E j}^{n+1} - A_{1N_E j} \Phi_{N_E-1j}^{n+1} - A_{2N_E j} \Phi_{N_E j-1}^{n+1} - B_{2N_E j} \Phi_{N_E j+1}^{n+1} = G_{N_E j}, \quad (16)$$

а граничные условия по угловой переменной в узлах $i = 1, 2, \dots, N_E - 1, j = 0$ и $j = N_\mu$ принимают следующий вид:

$$\Phi_{i0}^{n+1} = 0, \quad (17)$$

$$C_{iN_\mu} \Phi_{iN_\mu}^{n+1} - A_{1iN_\mu} \Phi_{i-1N_\mu}^{n+1} - B_{1iN_\mu} \Phi_{i+1N_\mu}^{n+1} - A_{2iN_\mu} \Phi_{iN_\mu-1}^{n+1} = G_{iN_\mu}.$$

Коэффициенты в (14)–(17) удовлетворяют следующим соотношениям:

$$A_{1ij} = -\frac{\tilde{\beta}_{i-1/2}}{2\Delta E} + \frac{(1 + \rho_{i-1/2}) \mathcal{Q}_{i-1/2}}{2\Delta E^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N_E - 1, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu; \quad (18)$$

$$A_{1N_E j} = -\frac{\tilde{\beta}_{N_E-1/2}}{\Delta E} + \frac{(1 + \rho_{N_E-1/2}) \mathcal{Q}_{N_E-1/2}}{\Delta E^2}, \quad i = N_E, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu;$$

$$B_{1ij} = \frac{\tilde{\beta}_{i-1/2}}{2\Delta E} + \frac{(1 + \rho_{i+1/2}) \mathcal{Q}_{i+1/2}}{2\Delta E^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N_E - 1, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu; \quad (19)$$

$$B_{10j} = \frac{\tilde{\beta}_{1/2}}{\Delta E} + \frac{(1 + \rho_{1/2}) \mathcal{Q}_{1/2}}{\Delta E^2}, \quad i = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu;$$

$$A_{2ij} = \frac{\alpha_i (1 - \mu_{j-1/2})}{2\Delta \mu^2}, \quad i = 0, 1, \dots, N_E, \quad j = 1, 2, \dots, N_\mu; \quad (20)$$

$$B_{2ij} = \frac{\alpha_i (1 - \mu_{j+1/2})}{2\Delta \mu^2}, \quad i = 0, 1, \dots, N_E, \quad j = 0, 1, \dots, N_\mu - 1.$$

При этом для коэффициентов C_{ij} имеют место следующие равенства:

$$\begin{aligned} C_{ij} &= \frac{\mu_j}{\Delta x_n} + A_{1i+1j} + B_{1i-1j} + A_{2ij+1} + B_{2ij-1}, \quad i = 1, \dots, N_E - 1, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{0j} &= \frac{\mu_j}{\Delta x_n} + A_{11j} + A_{20j+1} + B_{20j-1}, \quad i = 0, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{N_E j} &= \frac{\mu_j}{\Delta x_n} + B_{1N_E-1j} + A_{2N_E j+1} + B_{2N_E j-1}, \quad i = N_E, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{iN_\mu} &= \frac{\mu_{N_\mu}}{\Delta x_n} + A_{1i+1N_\mu} + B_{1i-1N_\mu} + B_{2iN_\mu-1}, \quad i = 1, \dots, N_E - 1, \quad j = N_\mu. \end{aligned} \quad (21)$$

Правые части уравнений (14)–(17) имеют вид

$$G_{ij} = \frac{\mu_j}{\Delta x_n} \Phi_{ij}^n, \quad i = 0, \dots, N_E, \quad j = 1, \dots, N_\mu.$$

Кроме того, (14)–(17) дополняется начальным условием (13).

Запись разностной схемы (8)–(13) в виде (14)–(17) соответствует системе линейных алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей. В [14] получены условия монотонности и основанные на них оценки устойчивости разностной схемы в сеточной норме L_1 . При этом под монотонностью схемы понимается выполнение принципа максимума для разностной схемы. Условия монотонности имеют вид

$$\begin{aligned} C_{ij} - A_{1i+1j} - B_{1i-1j} - A_{2ij+1} - B_{2ij-1} &> 0, \quad i = 1, \dots, N_E - 1, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{0j} - A_{11j} - A_{20j+1} - B_{20j-1} &> 0, \quad i = 0, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{N_E j} - B_{1N_E-1j} - A_{2N_E j+1} - B_{2N_E j-1} &> 0, \quad i = N_E, \quad j = 1, \dots, N_\mu - 1; \\ C_{iN_\mu} - A_{1i+1N_\mu} - B_{1i-1N_\mu} - B_{2iN_\mu-1} &> 0, \quad i = 1, \dots, N_E - 1, \quad j = N_\mu; \\ A_{kij} > 0, B_{kij} > 0 &\text{ для всех } i, j, k = 1, 2. \end{aligned} \quad (22)$$

Из выражений для коэффициентов (18)–(21) с учетом выбора регуляризатора нетрудно показать, что для разностной схемы (14)–(21) выполнены условия (22). Таким образом, для разностной схемы (14)–(18) выполнены условия принципа максимума [15, теорема 2.19] и теоремы сравнения [15, теорема 2.20], на основе которых для решения разностной схемы (18)–(21) нетрудно получить следующую оценку устойчивости по начальным данным:

$$\|\Phi^{n+1}\|_1 \leq M \|\Phi^0\|_1.$$

Отметим, что условия (22) связаны с условием диагонального преобладания по столбцам матрицы системы линейных уравнений при естественной нумерации узлов разностного решения. Следовательно, используемый нами для решения системы линейных алгебраических уравнений с 5-диагональной матрицей модифицированный сильнонеявный метод *MSIM* Шнейдера и Зедана [15] будет сходиться.

Результаты моделирования

В вычислительных экспериментах наряду с уравнением (1) применялось уравнение Фоккера – Планка без учета углового рассеяния [10], которое может быть получено из (1), если положить $\mu = 1$ и $\alpha(E) \equiv 0$. Модель переноса ускоренных ионов в полупроводниковой мишени, основанную на уравнении Фоккера – Планка без учета рассеяния по углам, далее будем называть ФП-1, а модель с учетом углового рассеяния, основанную на уравнении (1), – ФП-2.

Вычислительные эксперименты были проведены для ионов фосфора и висмута с начальными энергиями $E_0 = 1$ МэВ и $E_0 = 50$ МэВ с использованием моделей ФП-1 и ФП-2. В обеих моделях учитывалась диффузия ионов по энергии.

Во всех экспериментах полагалось, что плоскопараллельный моноэнергетический пучок ионов направлен перпендикулярно к поверхности мишени, доза $D = 1$, энергия срезки $E_c = 1$ эВ. Шаг дискретизации по энергии для начально-краевой задачи (1)–(6) составлял $\Delta E = 200$ эВ, шаг разностной сетки по угловой переменной – $\Delta \mu = 0,01$ в случае учета углового рассеяния.

Шаг интегрирования по переменной x варьировался в зависимости от числа итераций s , необходимых для достижения заданной точности для метода *MSIM* [15]. Если $s > 6$, то шаг уменьшался на 50 %, а если на протяжении 100 шагов по x заданная точность достигалась за одну-две итерации, то шаг увеличивался на 5 %. Начальное значение шага задавалось $\Delta x_0 = 0,1 \text{ \AA}$. Максимальное значение шага ограничивалось величиной $\Delta x_{\max} = 1000 \text{ \AA}$. Для пространственной переменной x в расчетах были использованы следующие пределы изменения: для ионов фосфора с начальными энергиями 1 и 50 МэВ – 18 000 и 200 000 $\text{\AA}$ соответственно; для ионов висмута с начальными энергиями 1 и 50 МэВ – 5000 и 120 000 $\text{\AA}$ соответственно.

На рис. 1 и 2 приведены профили распределения по глубине остановившихся ионов при имплантации их в кремниевую подложку, полученные с помощью статистического моделирования (см. рис. 1 и 2, кривая 1), а также в рамках моделей ФП-1 (см. рис. 1 и 2, кривая 3) и ФП-2 (см. рис. 1 и 2, кривая 2).

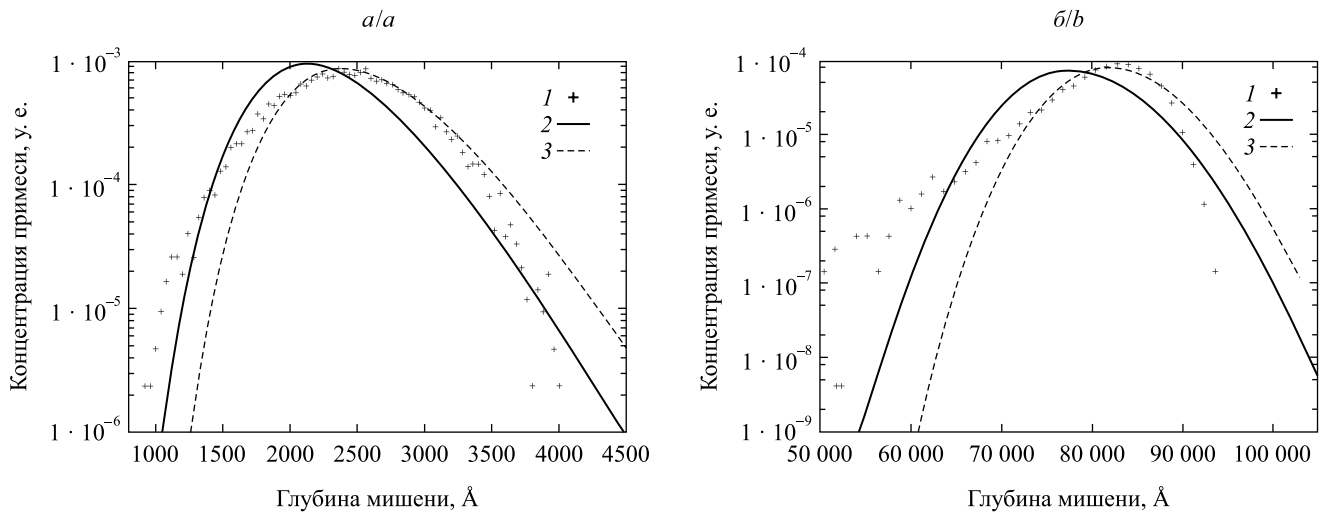


Рис. 1. Профили распределения по глубине остановившихся ионов висмута: а – 1 МэВ; б – 50 МэВ

Fig. 1. Depth distribution profiles of stopped bismuth ions: а – 1 MeV; б – 50 MeV

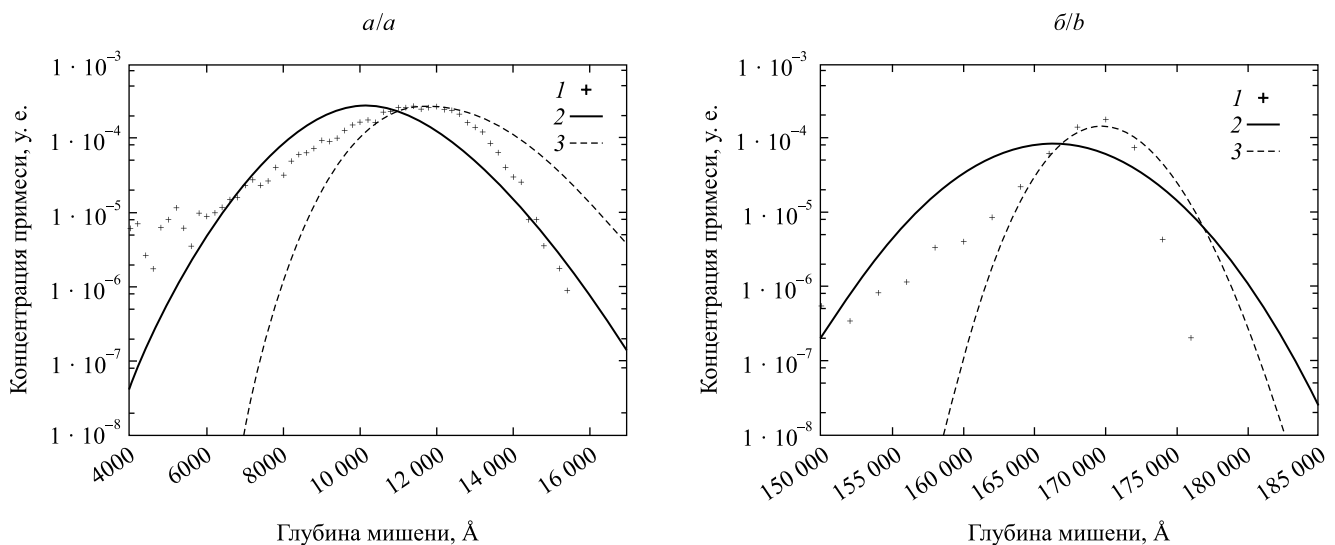


Рис. 2. Профили распределения по глубине остановившихся ионов фосфора: а – 1 МэВ; б – 50 МэВ

Fig. 2. Depth distribution profiles of stopped phosphorus ions: а – 1 MeV; б – 50 MeV

В случае имплантации ионов висмута и фосфора с начальной энергией 1 МэВ профили, полученные в рамках модели ФП-2, и результаты статистического моделирования хорошо согласуются между собой на всех глубинах за исключением области спада кривых после максимума. В то же время для профилей модели ФП-1 (без учета углового рассеяния) наблюдается заметное смещение области остановившихся ионов вглубь мишени по сравнению с данными статистического моделирования.

При имплантации ионов висмута с начальной энергией 50 МэВ профили распределения по глубине остановившихся частиц модели ФП-2 несколько смещены в глубь мишени по сравнению с результатами статистического моделирования, а профили, полученные в рамках модели ФП-1, смещены еще глубже.

Для ионов фосфора с начальной энергией 50 МэВ профиль распределения остановившихся частиц модели ФП-2 заметно шире, чем найденный путем статистического моделирования. И только в этом случае (из всех рассмотренных) профиль модели ФП-1 точнее соответствует данным статистического моделирования. Тем не менее наблюдается сдвиг названного профиля в глубь мишени и недооценка концентрации в области приповерхностного хвоста.

Таким образом, во всех вычислительных экспериментах в случае использования модели ФП-2 ширина зоны остановившихся ионов и ее положение для модели хорошо согласуются с результатами статистического моделирования. В то же время при использовании модели ФП-1 имеет место заметное смещение области остановившихся ионов в глубь мишени.

Библиографические ссылки

1. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Stopping and ranges of ions in solids. New York, 1985.
2. Комаров Ф. Ф., Буренков А. Ф., Новиков А. П. Ионная имплантация. Минск, 1994.
3. Burenkov A. F., Komarov F. F., Temkin M. M., et al. Ion range distribution calculation based on a numerical solution of the Boltzmann transport equation // *Radiat. Eff.* 1984. Vol. 86. P. 161–167.
4. SRIM – The stopping and range of ions in matter [Electronic resource]. URL: <http://srim.org/#SRIM/> (date of access: 14.04.2017).
5. Ремизович В. С., Rogozkin Д. Б., Рязанов М. И. Флуктуации пробегов заряженных частиц. М., 1988.
6. Pompaning G. C. The Fokker – Planck operator as an asymptotic limit // *Math. Models Methods Appl. Sci.* 1992. Vol. 2. P. 21–36.
7. Kim A. D., Tranquilli P. Numerical solution of the Fokker – Planck equation with variable coefficients // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2008. Vol. 109. P. 727–740.
8. Przybylski K., Ligou J. Numerical analysis of the Boltzmann equation including Fokker – Planck terms // *Nucl. Sci. Eng.* 1982. Vol. 81. P. 92–109.
9. Komarov F. F., Mozolevski I. E., Matus P. P., et al. Distribution of implanted impurities and deposited energy in high-energy ion implantation // *Nucl. Instr. Meth. Phys.* 1997. Vol. 124. P. 478–483.
10. Mozolevski I. E., Matus P. P., Malafei D. A. The Fokker – Planck approximation of boundary value problems for the straight-ahead Boltzmann transport equation // *FDS-2000 : proc. of the conf.* (Palanga, 1–4 Sept., 2000). Palanga, 2000. P. 163–171.
11. Mozolevski I., Grande P. L. On the use of the backward Fokker – Planck equation to calculate range profiles // *Nucl. Instr. Meth. Phys.* 2000. Vol. 170. P. 45–52.
12. Mozolevski I. Modeling of high energy ion implantation based on splitting of the Boltzmann transport equation // *Comput. Mater. Sci.* 2002. Vol. 25. P. 435–446.
13. Бахвалов Н. С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М., 1974.
14. Самарский А. А., Вабичевич П. Н. Численные методы решения задач конвекции – диффузии. М., 1997.
15. Schneider G. E., Zedan M. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems // *Numer. Heat Transf.* 1981. Vol. 4. P. 1–19.

References

1. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Stopping and ranges of ions in solids. New York, 1985.
2. Komarov F. F., Burenkov A. F., Novikov A. P. [Ion implantation]. Minsk, 1994 (in Russ.).
3. Burenkov A. F., Komarov F. F., Temkin M. M., et al. Ion range distribution calculation based on a numerical solution of the Boltzmann transport equation. *Radiat. Eff.* 1984. Vol. 86. P. 161–167.
4. SRIM – The stopping and range of ions in matter [Electronic resource]. URL: <http://srim.org/#SRIM/> (date of access: 14.04.2017).
5. Remizovich V. S., Rogozkin D. B., Ryazanov M. I. [Range fluctuations of charged particles]. Moscow, 1988 (in Russ.).
6. Pompaning G. C. The Fokker – Planck operator as an asymptotic limit. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 1992. Vol. 2. P. 21–36.
7. Kim A. D., Tranquilli P. Numerical solution of the Fokker – Planck equation with variable coefficients. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2008. Vol. 109. P. 727–740.
8. Przybylski K., Ligou J. Numerical analysis of the Boltzmann equation including Fokker – Planck terms. *Nucl. Sci. Eng.* 1982. Vol. 81. P. 92–109.
9. Komarov F. F., Mozolevski I. E., Matus P. P., et al. Distribution of implanted impurities and deposited energy in high-energy ion implantation. *Nucl. Instr. Meth. Phys.* 1997. Vol. 124. P. 478–483.
10. Mozolevski I. E., Matus P. P., Malafei D. A. The Fokker – Planck approximation of boundary value problems for the straight-ahead Boltzmann transport equation. *FDS-2000 : proc. of the conf.* (Palanga, 1–4 Sept., 2000). Palanga, 2000. P. 163–171.
11. Mozolevski I., Grande P. L. On the use of the backward Fokker – Planck equation to calculate range profiles. *Nucl. Instr. Meth. Phys.* 2000. Vol. 170. P. 45–52.
12. Mozolevski I. Modeling of high energy ion implantation based on splitting of the Boltzmann transport equation. *Comput. Mater. Sci.* 2002. Vol. 25. P. 435–446.
13. Bakhvalov N. S. [Numerical methods (analysis, algebra, ordinary differential equations)]. Moscow, 1974 (in Russ.).
14. Samarskiy A. A., Vabishchevich P. N. [Numerical methods for solving the convection-diffusion problems]. Moscow, 1997 (in Russ.).
15. Schneider G. E., Zedan M. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems. *Numer. Heat Transf.* 1981. Vol. 4. P. 1–19.