https://doi.org/10.17721/1812-5409.2023/1.16

УДК 537.6

Андреєв В.О., *к.ф.-м.н., доц.*
Чолій Я.В., *начальник сектору*
Макарець М.В., *д.ф.-м.н., проф.*

РОЗРАХУНОК КУМУЛЯНТІВ І ПАРАМЕТРІВ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ТА ІЗ РІВНЯННЯ ДЛЯ НЕЇ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, Володимирська, 64/13,
e-mail: volodymyr.andreev@knu.ua

V.O. Andreyev, *Ph.D., Associate Professor*
Ya.V. Choliy, *Head of sector*
M.V. Makarets, *Dr. of Sci.,Prof.*

CUMULANTS AND PARAMETERS CALCULATION OF DISTRIBUTION FUNCTION BY MONTE CARLO AND FROM THE EQUATION FOR IT

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13.
e-mail: volodymyr.andreev@knu.ua

Проаналізовано результати розрахунку моментів, центральних моментів, кумулянтів та параметрів функції розподілу пучка іонів імплантованих у тверде тіло. Для аналізу відмінностей між результатами моделювання цього процесу методом Монте-Карло, який широко використовується для практично важливих мішеней, та результатами розв'язку інтегродиференціальних рівнянь, які його описують аналітично, розглянуто випадок осьової симетрії пучка іонів, коли всі моменти непарного порядку по поперечній декартовій координаті рівні нулю в силу симетрії задачі. Показано, що ці ж самі моменти, отримані методом Монте-Карло повільно спадають до нуля із збільшенням кількості іонів, як і передбачається статистикою, і залишаються приблизно сталими.

Ключові слова: моменти розподілу, енергетичні іони, тверде тіло, метод Монте-Карло.

Calculations results of the moments, central moments, cumulants and parameters of the distribution function of a beam of ions implanted in a solid body were analyzed. To analyze the differences between the results of modeling this process by the Monte Carlo method, which is widely used for practically important targets, and the results of the solution of the corresponding integrodifferential equations that describe ions distribution analytically, in the simple case of axial symmetry of the ion beam, when all moments of odd order along the transverse Cartesian coordinate is considered equal to zero due to the symmetry of the problem. It is shown that the same moments obtained by the Monte Carlo method is not exactly equal to zero, but slowly decrease with an increase in the number of ions, as predicted by statistics, and then remain approximately constant. Increasing the number of ions for Monte Carlo simulation reduces the statistical component of this error, but does not affect on the component arising from the application of a simplified model of ion-atom collisions.

Key words: moments of distribution, energetical ions, solid body, Monte Carlo method.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

1. Вступ

Функції розподілу відіграють важливу роль у статистичній фізиці [1] як для класичних так і для статистичних систем. Для низки прикладних задач вони залишаються невідомими, оскільки формуються процесами, які термалізують первинно нерівноважну систему.

В роботі розглянуто просторовий розподіл швидких іонів, які проникаючи у тверде тіло втрачають енергію і зупиняються. Якщо пучок енергетичних іонів, які стартують в ізотропній нескінченній мішені має осьову симетрію, то і їх розподіл після зупинки матиме цю ж симетрію, а його просторові моменти непарного порядку по поперечній декартовій координаті будуть рівні нулю. Наприклад, якщо іони стартують вздовж осі Oz, то їх поздовжній пробіг буде відмінний від нуля, але поперечні відхилення вздовж осей Ox та Oy будуть рівними нулю. Цей очевидний результат дають і рівняння для моментів [2].

У моделюванні проникнення іона у мішень методом Монте-Карло розігруються випадкові умови зіткнення іона із атомом мішені, зокрема, прицільна відстань і взаємне положення цих партнерів всередині мішені [3, 4]. Після кожної події енергія іона зменшується залежно від її умов і після досягнення ним енергії порядку кількох десятків еВ іон вважається нерухомим, а його траєкторія запам'ятовується. Якщо вибірка іонів достатньо велика – десятки і сотні тисяч, то тоді можна побудувати гістограми функції просторового розподілу іонів у твердому тілі, за якими можна знайти її моменти, центральні моменти, кумулянти і параметри (скісності, ексцеси і т.д.). При цьому очікується, що просторові моменти непарного порядку по поперечній декартовій координаті повинні бути малими і прямувати до нуля при збільшенні виборки.

Задача цієї роботи з'ясувати як виконується ця умова і яку точність мають вищі параметри

© Андреєв В.О., Чолій Я.В.,Макарець М.В., 2023

функції розподілу отримані методом Монте-Карло.

2. Основні рівняння і припущення

Просторовий розподіл іонів, імплантованих у тверде тіло, задається рівнянням [2]:

$$\Pi(\vec{r},E)=\int_0^{\infty}\int_{T_{\min}}^{T_{\max}}\int_0^{2\pi}\Pi(\vec{r}',E')f_1 dl\frac{d\sigma_n}{\sigma_n}\frac{d\varphi}{2\pi} \qquad (1)$$

де $\Pi(\vec{r},E)$ – функція просторового розподілу іонів у точці $\vec{r}$, які стартували з енергією E вздовж $\vec{k}$ з початку координат, $\vec{r}'=\hat{A}(\vec{r}-\vec{k}l)$ – координата точки зупинки іона у системі координат, зміщеній на вектор $\vec{k}l$ відносно точки старту і повернутій на кути φ навколо осі Oz і θ навколо осі Oy, $\hat{A}(\theta,\varphi)$ – матриця цих поворотів, $d\sigma_n\left(E-T_e,T_n\right)$ – диференціальний переріз пружного розсіяння іона з енергією $E-T_e$ на атомі мішені, у якому він втрачає енергію T_n, а T_e – втрати енергії іона у неперервних зіткненнях з електронним газом на шляху l до першого пружного зіткнення.

Аналітичний розв'язок (1) не вдається знайти, а кілька спроб його числового інтегрування і визначення $\Pi(\vec{r},E)$ проведені лише для частинних випадків.

Проте із (1) можна отримати рівняння для моментів функції розподілу, а також різних їх комбінацій: центральних моментів, кумулянтів, параметрів, зокрема скісностей і ексцесів. Окрім цього моделювання руху іона у твердому тілі вдається провести методом Монте-Карло, який дає всю траєкторію іона до його зупинки у твердому тілі.

Обидва ці два підходи мають важливе практичне значення, оскільки дають достатньо точні величин, які вимірюються на експерименті і які мають просту інтерпретацію. А саме: розподіл зупинених іонів середніх енергій (приблизно від десятків до сотень кеВ) близький до гаусового, а його невеликі відхилення задаються скісністю та ексцесом.

Після низки перетворень (1) у [3-5] були отримані рівняння для кумулянтів до шостого порядку включно. Тут наведено кілька перших, найменш громіздких рівнянь для так званих арзацкумулянтів 1-3–го порядку $\chi_{kl}\left(\varepsilon\right)$, які є такими лінійних комбінаціями традиційних кумулянтів, що перетворюють систему інтегральних рівнянь у їх ланцюжок:

$$\begin{aligned}
&\frac{\chi_{01}-\chi'_{01}}{\lambda_1}-\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''_{01}P_1\right\}d\tau=1,\\
&\frac{\chi_{02}-\chi'_{02}}{\lambda_1}-\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''_{02}P_2\right\}d\tau=\frac{\tilde{\chi}'^{\,2}_{01}-\chi^2_{01}}{\lambda_1}+\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''^2_{01}P_2+2\lambda_1\chi''_{01}P_1\right\}d\tau,\\
&\frac{\chi_{20}-\chi'_{20}}{\lambda_1}-\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''_{20}\right\}d\tau=\frac{\tilde{\chi}'^{\,2}_{01}-\chi^2_{01}}{\lambda_1}+\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''^2_{01}+2\lambda_1\chi''_{01}P_1\right\}d\tau,\\
&\frac{\chi_{03}-\chi'_{03}}{\lambda_1}-\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''_{03}P_3\right\}d\tau=\frac{\tilde{\chi}'^{\,3}_{01}-\chi^3_{01}+3\tilde{\chi}'_{01}\chi'_{02}-3\chi_{02}\chi_{01}}{\lambda_1}+\\
&\qquad+\frac{1}{\gamma}\int_0^{\gamma\varepsilon'}\tilde{\sigma}_n\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\chi''_{01}\left(\chi''^2_{01}+3\chi''_{02}\right)P_3+3\left(\chi''^2_{01}+\chi''_{02}\right)\lambda_1P_2+3\chi''_{01}\lambda_1^2P_1\right\}d\tau,
\end{aligned} \qquad (2)$$

Рівняння (2) інтегральні, неоднорідні, а права частина кожного із них, починаючи із другого, виражається через розв`язки попередніх, тому вони утворюють не систему, а ланцюжок рівнянь, у якому наступне рівняння розв'язується після розв'язку всіх попередніх. Перший доданок у їх лівих частинах при $l\to 0$ (нескінченно малий пробіг між пружними зіткненнями) дає похідну від ерзацкумулянта $\chi_{kl}\left(\varepsilon\right)$ по безрозмірній енергії ε [5].

Ланцюжок аналогічних рівнянь для перших 15-и ерзацкумулянтів по 6-ий порядок включно, утворених із просторових моментів (їх 83), розв'язувався чисельно, а із загальновідомих виразів [7], знаходили моменти функції розподілу та її параметри: скісності і ексцеси до другого порядку, як описано у [5, 6]. Оскільки (2) отримані для осьової симетрії пучка, то просторові моменти непарні по поперечній декартовій координаті тотожно рівні нулю. Для визначення точності знайдених розв'язків змінювали параметри чисельної схеми, наприклад кількість

її вузлів, і шукали різницю отриманих результатів. Було встановлено, що відносне відхилення було не вище четвертого порядку малості. На підставі цих оцінок вважали, що саме результати розв`язку ланцюжка рівнянь (2) можна використати для оцінки точності результатів моделювання методом Монте-Карло.

В методі Монте-Карло [4] використовується низка фізичних наближень [3] для опису двох механізмів сповільнення швидких іонів у твердому тілі, а саме: а) у електронному газі мішені іон гальмується неперервно, втрачає енергію і не змінює напрям руху; б) з атомними ядрами він випадково стикається пружно і близько, змінює напрям руху і передає частину енергії атомному ядру; в) на шляху l між пружними зіткненнями іон лише гальмується в електронному газі. Ці ж самі припущення прийняті і при виведенні рівнянь (2).

Саме випадкові пружні зіткнення моделюються методом Монте-Карло, у якому задаються три випадкові величини: а) прицільна відстань зіткнення (вона має верхню межу – міжатомну відстань у мішені); б) два кути орієнтації підлітної вітки траєкторії іона відносно положення атома у твердому тілі. Після випадкового задання цих трьох параметрів, траєкторія іона розраховується як у задачі двох тіл і вважається, що іон після зіткнення рухається по асимптоті цієї задачі з відомим напрямом. Варто підкреслити, що спрощений розгляд іон-атомних зіткнень може бути причиною виникнення систематичних помилок, які спотворять фізичний результат. Зокрема, припущення, що іон відділяється від атома вздовж асимптоти розсіяння, передбачає, що відстань між ними вже достатньо велика, і їх взаємодією можна знехтувати. Але ця відстань може перевищувати міжатомну, особливо при зіткненнях коли прицільна відстань близька до міжатомної. Тому це припущення завищує кут розсіяння іона на атомі і робить розподіл більш широким. Інша помилка має статистичне походження, бо залежить від величини виборки N, тобто від кількості розіграних траєкторій. З теорії ймовірностей [8] відомо, що статистичне відхилення результатів моделювання від їх середніх значень при $N \to \infty$, спадає як $1/\sqrt{N}$, тому можуть мати відносне значення порядку кількох процентів при $N \le 10000$. Але і точність експериментальних даних також має такий же порядок, тому для моделювання потрібно брати достатньо велику кількість іонів.

3. Порівняння результатів розрахунку та моделювання.

В роботі були проведені розрахунки моментів просторового розподілу зупинених іонів для комбінацій іон-мішень із відношеннями їх мас рівними: 1) $\mu \triangleq M_1/M_2 \approx 6.53*10^{-2}$ для C→W – легкий іон і важкий атом мішені; 2) $\mu \approx 1.07$ для As→Ga – співрозмірні маси іона і атома мішені; 3) $\mu \approx 5.91$ для Er→Si – важкий іон і легкий атом мішені.

Потім порівнювали між собою результати цих розрахунків отримані числовим методом із (2) та при моделюванні методом Монте-Карло 40 тисяч траєкторій.

В першу чергу аналізували ті моменти, які потенційно рівні нулю в силу осьової симетрії задачі, оскільки при моделювання вони всі виявляються відмінними від нуля.

Нас цікавило питання як швидко ці моменти спадають до нуля із ростом кількості іонів у вибірці. Для цього із повної вибірки траєкторій іона брали менші вибірки, зокрема по 1-ій і по 10 тисяч іонів і розраховували всі моменти їх розподілу. Виявилося, що зі збільшенням вибірки у 4 і у 36 разів, значення потенційно нульових моментів спадають за величиною, як і повинно бути згідно законів статистики. Проте зменшення обернено пропорційне квадратному кореню із числа іонів, якщо припустити, що випадкові відхилення від нуля мають малу складову, що не залежить від кількості іонів у вибірці.

Однією із причин появи такого доданку, на нашу думку може бути використання наближення парних зіткнень при моделюванні, коли вважається, що іон і атом мішені до і після зіткнення рухаються по асимптотах задачі двох тіл. Це відрізняється від дійсної траєкторії іона у твердому тілі, де атоми мішені розміщені настільки щільно, що вихід іона на асимптоту після першого зіткнення ще не відбувається до початку наступного зіткнення. Тобто парність зіткнень порушується. Це повинно бути помітним при низькій енергії легкого іона, коли колективний потенціал ядер і електронів остова не дозволяє близьких парних зіткнень. Для важких іонів високої енергії кути відхилення малі, а тому пружні зіткнення достатньо віддалені одне від одного і тому помилка від використання асимптотичних траєкторій буде малою.

Кут розсіяння іона після виходу на асимптоту задачі двох тіл максимальний і тому його використання робить пучок іонів ширшим ніж він є насправді. Це відбуваються тому, що середнє значення вибірки випадкових кутів, наприклад, в межах від - π до π більше як сума випадкових чисел більшої амплітуди. Це підтверджує моделювання розподілу іонів для трьох значень відношення їх маси до маси атома мішені. Для легкого іона (випадок C→W) розподіл у

поперечному напрямі ширший ніж дає розв'язок рівняння (2), а для важкого іона у легку мішень (випадок Er→Si), їх відношення протилежне.

4. Висновки

Порівняння результатів розв'язків рівнянь (2) та моделювання траєкторій іонів методом Монте-Карло показали, що:

а) точність моментів розподілу, отриманих методом Монте-Карло спадає із ростом порядку моменту від першого до шостого від приблизно 0.1% до 30-50%;

б) моменти розподілу непарного порядку по поперечній координаті, які рівні нулю в силу симетрії функції розподілу, виявляються відмінними від нуля при моделюванні методом Монте-Карло і можуть досягати 50% від значення ненульових вищих моментів;

в) асиметрія розподілу відносно його двох моментного, нормального наближення, яка описується так званою скісністю, отримана при моделюванні розподілу зупинених швидких іонів у твердому тілі методом Монте-Карло, має точність до десятків процентів;

г) збільшення кількості іонів для моделювання методом Монте-Карло зменшує статистичну складову цієї помилки, проте не впливає на складову, яка виникає внаслідок застосування спрощеної моделі іон-атомних зіткнень.

Список використаних джерел

1. *Ландау Л.Д.* Теоретическая физика: Т.V: Статистическая физика: Ч.1./ Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука. - 1976.-584 с.
2. *Макарець М.В., Юхименко О.* Рівняння для функції розподілу імплантованих іонів та його кумулянтів. (2011) // Вісник Київського університету. Сер. Фізика. 2011, №12, с. 34-40.
3. *Ziegler J.E. (1999) //* The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter // *Appl. Phys. Rev. J. Appl. Phys.-1999.-Vol.85.- p. 1249-1272.*
4. http://www.srim.org/ James F. Ziegler. The Stopping and Range of Ions in Matter // Software. SRIM-2013
5. *Ilyina V.V., Makarets M.V. (2010) //* Distribution of energy losses by fast ions along their propagation paths in solids. // Ukr. J. Phys. 2010, v.55, N2, p.235-242.
6. *Чолій Я.В., Макарець М.В.* Рівняння для кумулянтів просторового розподілу імплантованих іонів. // Вісник Київського університету. Сер. фізико-математичні науки. 2013, 4, с. 255-259.
7. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по высшей математике (для научных работников и инженеров) // М.: Наука. - 1974. - 832 с.

References

1. LANDAU L.D., LIFSHITS E.M. (1976) Statistical physics: Part 1.M.: Nauka.

2. MAKARETS M.V., YUKHYMENKO O. (2011) Equations for the distribution function of implanted ions and their cumulants. (2011) // Bulletin of Kyiv University. Ser. Physics., No. 12, p. 34-40.
3. ZIEGLER J.E. (1999) // The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter // Appl. Phys. Rev. J. Appl. Phys.-1999.-Vol.85.- p. 1249-1272.
4. http://www.srim.org/ JAMES F. ZIEGLER. The Stopping and Range of Ions in Matter // Software. SRIM-2013
5. ILYINA V.V., MAKARETS M.V. (2010) Distribution of energy losses by fast ions along their propagation paths in solids. Ukrainian J.Phys., v.55, N2, p.235-242.
6. CHOLII Y.V., MAKARETS M.V. (2013) The equation for the cumulants of the spatial distribution of implantedions. Bulletin of Kyiv University. Ser. physical and mathematical sciences., 4, p. 255-259.

7. KORN G., KORN T. (1974) Mathematical Handbook (for scientists and engineers), M.: Nauka.

Надійшла до редакції 2.06.2023