Раздел II. Математическое моделирование физических процессов

УДК 517.958

Ю.Ф. Блинов, А.Г. Клово, П.В. Серба

СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ АТОМОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА

Рассматривается вывод кинетического уравнения, описывающего миграцию атомов под действием облучения. В качестве исходного уравнения использовалось уравнение Лиувилля, которое описывает поведение системы “налетающие ионы – атомы материала мишени – атомы примеси”. С использованием метода Боголюбова уравнение Лиувилля приводилось к системе кинетических уравнений типа Больцмана. При этом интеграл столкновений использовался в форме Больцмана и Власова. Использование функции Грина позволило рассматривать отдельно движение налетающих ионов и движение атомов примеси.

Кинетическое уравнение; интеграл столкновений; уравнение Больцмана; уравнение Власова; метод Боголюбова.

Yu.F. Blinov, A.G. Klovo, P.V. Serba

THE STATISTICAL APPROACH TO THE DESCRIPTION OF ATOMS MIGRATION BY RADIATION BASED ON THE BOGOLYUBOV EQUATIONS

The derivation of a kinetic equation describing the atoms migration under the influence of radiation was considered. Liouville equation which describes the behavior of the system "colliding ions – atoms of the target material – the impurity atoms" was used as the original equation. Liouville equation led to a system of Boltzmann type kinetic equations using Bogolyubov method. The collision integral was used in Boltzmann-Vlasov form. Using of the Green's function allowed to consider separately the motion of the incident ions and the movement of impurity atoms.

Transport equation; collision integral; Boltzman equation; Vlasov equation.

Прохождение ускоренных частиц через вещество сопровождается их упругими и неупругими соударениями с атомами последнего. В процессе упругого столкновения атомы вещества приобретают энергию, достаточную для осуществления миграции.

Движение атомов в кристалле при ионном облучении описывается уравнением Лиувилля [1]–[3}

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\hat{H}, \rho \right], \tag{1}$$

где $\rho(r_1, r_2, ..., r_n; p_1, p_2, ..., p_n) dr_1 dr_2 ... dr_n dp_1 dp_2 ... dp_n$ – n-частичная функция распределения; $[A, B]$ – скобки Пуассона; $\hat{H}$ – гамильтониан кристалла. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T}_R + T_I + U_{RI} + \sum_i \hat{U}_{Ri} + \sum_i \left(T_i + \sum_i \hat{U}_{ij} \right), \tag{2}$$

где $\hat{T}_I$ – оператор кинетической энергии ионов; $\hat{T}_R$ – оператор кинетической энергии атомов примеси; $\hat{T}_i$ – оператор кинетической энергии собственных атомов кристалла; $\hat{U}_{RI}$ – оператор потенциальной энергии взаимодействия налетающих ионов с атомами примеси; $\hat{U}_{Ri}$ – оператор потенциальной энергии взаимодействия налетающих ионов с собственными атомами кристалла; $\hat{U}_{ij}$ – оператор потенциальной энергии взаимодействия собственных атомов кристалла между собой.

Используя метод Боголюбова, введем a_1, a_2, a_3 – частичную функцию распределения [1] ($a_1 = 1,2,...$; $a_2 = 1,2,...$; $a_3 = 1,2,...$, где a_1 – число ионов, a_3 – число атомов примеси, a_2 – число атомов кристалла)

$$F_{a_1 a_2 a_3} = \frac{N}{V} \int dx_{a_{s+1}} ... dx_N \rho . \tag{3}$$

Здесь $x_i = \{r_i, p_i\}$ обозначает совокупность координат и импульсов i-й частицы; $a_s = a_1 + a_2 + a_3$. Интегрируя (1) по $x_{s+1}, ..., x_N$ и умножая на $\frac{N}{V}$, получаем цепочку уравнений Боголюбова

$$\frac{\partial F_{a_1 a_2 a_3}}{\partial t} = [H_{a_1 a_2 a_3}; F_{a_1 a_2 a_3}] + \frac{N}{V} \sum \int [H_{a_s+1}; F_{a_s+1}] dx_{s+1} . \tag{4}$$

Выпишем первые из уравнений цепочки Боголюбова

$$\frac{\partial F_{100}}{\partial t} = [T_{100}, F_{100}] + \frac{N}{V} \int [U_1; F_{110}] dx_2 , \tag{5}$$

$$\frac{\partial F_{001}}{\partial t} = [T_{001}; F_{001}] + \frac{N}{V} \int [U_{ij}; F_{001}] dx_2 + \frac{N}{V} \int [U; F_{101}] dx_3 . \tag{6}$$

Уравнение (5) описывает движение налетающих ионов, уравнение (6) – движение атомов примеси. Перепишем уравнения (5) и (6) в виде

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{p}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial r} = \sum_j J(j,i), \tag{7}$$

здесь $f_1 = F_{100}$, $f_2 = F_{010}$, $f_3 = F_{001}$ – одночастичные функции распределения ($i = 1$ соответствует налетающим ионам, $i = 3$ – атомам примеси, $i = 2$ – атомам материала кристалла); $J(j,i)$ – интеграл столкновений, равный

$$J(j,i) = \frac{N}{V} \int [U_{ij}; f_2] dx_j ; \tag{8}$$

F_2 – двухчастичная функция распределения. Введем функцию Грина [4], описывающую распределение атомов примеси по импульсам на глубине, если на глубине находится источник, испускающий атомы с импульсом p. Функция Грина определяется из уравнения

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial G}{\partial r} = J(2{,}3)\cdot \qquad (9)$$

–Представим решение уравнения (7) для атомов примеси, используя функцию Грина, полученную из решения (9):

$$f_3(r',v',t) = \int_0^t J(3{,}1)G(r,v;r',v',t-\tau)drd\tau\,. \qquad (10)$$

Представим функцию распределения атомов примеси в виде суммы равновесной и неравновесной составляющих:

$$f_3(r,v,t) = f_0(r,v) + \Delta f(r,v,t)\,. \qquad (11)$$

Причем доля атомов примеси, находящихся в равновесии, превышает долю атомов, находящихся в движении

$$\int_v f_0(r,v)dv >> \int_v \Delta f(r,v,t)dv\,. \qquad (12)$$

Интегрируя (10) по скоростям с использованием интеграла столкновений для парных соударений в форме Больцмана

$$J(j,i) = \iiint [f_1(v')f_3(v_{**}') - f_1(v)f_3(v_*)]V\sigma(v,v_* \mid v',v_*')dv'dv_*dv_*' \qquad (13)$$

и учитывая (11), получим уравнение для распределения концентрации атомов примеси по глубине

$$N_3(r,t) = \int_0^t \int_r \int_{v''} v'' f_1(v'')N_3(r',\tau)\sigma(v,v_* \mid v',v_*')G(r'',v_*;r,v'',t-\tau)dv''dr'd\tau\,. \qquad (14)$$

Дифференцируя (14) по времени, получим кинетическое уравнение с памятью

$$\frac{\partial N_3(r,t)}{\partial t} = \int_0^t \int_v [\chi(r',r,t-\tau)N_3(r',\tau) + \chi(r',r,t-\tau)N_3(r,\tau)]drd\tau\,, \qquad (15)$$

где функция памяти определяется из соотношения

$$\chi(r,r',t) = \frac{\partial}{\partial t}\int_v \int_{v'} vf_1(r,v,t)\sigma(v \Rightarrow v')G(r,r',v',t)dv'dv\,. \qquad (16)$$

Анализ динамики изменения концентрации атомов примеси во времени показал, что когда

$$\frac{1}{I\sigma_n} >> \tau_0\,, \qquad (17)$$

где I – интенсивность облучения; σ_n – полное сечение соударения налетающих частиц с атомами примеси; τ_0 – характерное время достижения стационарного состояния для функции Грина, вместо уравнения (15) можно использовать кинетическое уравнение

$$\frac{\partial N_3(r,t)}{\partial t} = \int_V L(r,r')N_3(r',t)dr' - N_3(r,t)\int_V L(r,r')dr'\,, \qquad (18)$$

где $L(r,r')$ – функция атомного смещения, определяемая из выражения

$$L(r,r') = \int_v \int_{v'} vf_1(r,v,t)\sigma(v \Rightarrow v')G(r,r',v',t)dv'dv\,. \qquad (19)$$

Таким образом, полученные уравнения (15) и (18) описывают миграцию атомов при баллистическом механизме переноса.

При использовании интеграла столкновений в форме Власова, который описывает взаимодействие налетающих частиц с атомами примеси, кинетическое уравнение, описывающее движение примесных атомов, записывается в виде

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + v\frac{\partial f_3}{\partial \vec{r}} = \int \left[V_{13} f_1(x_1) f_3(x_3)\right] dx_1 + J(f_3, f_2). \quad (20)$$

Проинтегрировав по x_i, перепишем (20) в виде

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + v\frac{\partial f_3}{\partial \vec{r}} = -\frac{1}{m}\frac{\partial f_3}{\partial v} + J(f_3, f_2). \quad (21)$$

Здесь внешнее поле U определяется из выражения

$$U = \int dr V_{13} \int dv \frac{\varphi_1(r, v)}{v} \quad (22)$$

и представляет собой поле, создаваемое потоком ионов. Такое представление допустимо в случае, когда время взаимодействия между частицами мало.

Далее, как и при выводе уравнения (15), для вывода кинетического уравнения используется функция Грина, определяемая из решения уравнения (9). В этом случае уравнение (22) будет иметь вид

$$f_3 = -\int_0^t \int_V \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial f_3}{\partial v} G(t-\tau, v)\, d\tau d\xi \cdot \quad (23)$$

Дифференцируя (23) по времени, получим

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} = -\int_0^t \int_V \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial f_3}{\partial v}\frac{\partial G(t-\tau, x-\xi, v)}{\partial t}\, d\tau d\xi. \quad (24)$$

Когда характерное время торможения ускоренных атомов примеси мало, как и в случае (17), уравнение (24) можно переписать в виде

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} = -\int_V \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial f_3}{\partial v} G(x-\xi, v)\, d\xi. \quad (25)$$

Представляя функцию распределения f_3 в виде

$$f_3(x, v) = N_3(x)\delta(v) \quad (26)$$

и интегрируя (25) по скоростям, получим

$$\frac{\partial N_3(x,t)}{\partial t} = -\int_V \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial r} N_3(\xi, t)\delta'(v) G(x-\xi, v)\, d\xi. \quad (27)$$

Учитывая свойства δ-функции, (27) можно переписать в виде

$$\frac{\partial N_3(x,t)}{\partial t} = -\int_V \frac{1}{m}\frac{\partial U}{\partial r} N_3(\xi, t) \lim_{v\to 0} G(x-\xi, v)\, d\xi. \quad (28)$$

В пределе малых скоростей функция Грина может быть представлена в виде

$$\lim_{v\to 0} G(x-\xi, v) \approx \delta(x-\xi-v\tau), \quad (29)$$

где τ – время, необходимое для совершения диффузионного перескока на одно межатомное расстояние. Учитывая (29) и интегрируя по ξ, (28) будет иметь вид

$$\frac{\partial N_3(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\tau}{m}\frac{\partial U}{\partial x}N_3\right]. \tag{30}$$

Учитывая, что отношение $\frac{\tau}{m} = \frac{D}{kT}$ [2], уравнение (30) может быть записано в виде

$$\frac{\partial N_3(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{kT}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial U}{\partial x}N_3\right]. \tag{31}$$

Уравнение (31) описывает процесс миграции в случае, когда при взаимодействии налетающих частиц с атомами примеси не успевают проявиться соударения, сопровождающиеся сближением частиц до расстояний, на которых между частицами возникают большие силы, т.е. в случае слабых дальнодействующих изменений.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.)* Введение в квантовую статистическую механику. – М.: Наука, 1984. – 394 с.
2. *Куни Ф.М.* Статистическая физика и термодинамика. – М.: Наука, 1981. – 352 с.
3. *Боголюбов Н.Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике / Избранные труды. Т. 2. – Киев: Наукова думка. 1969. – 522 с.
4. *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир, 1978. – 495 с.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор А.А. Лаврентьев.

Серба Павел Викторович – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет»; e-mail: serba@sfedu.ru; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 88634371706; кафедра высшей математики; д.ф.-м.н.; зав. кафедрой.

Клово Александр Георгиевич – кафедра высшей математики; к.ф.-м.н.

Блинов Юрий Федорович – тел.: 88634371940; кафедра технологии микро- и наноэлектронной аппаратуры; к.т.н.; доцент.

Serba Pavel Viktorovich – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”; e-mail: serba@sfedu.ru; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia; phone: +78634371706; the department of higher mathematics; dr. of phis.-math. sc.; head the department.

Klovo Alexander Georgievich – the department of higher mathematics; cand. of phis.-math. sc.;

Blinov Yuri Fedorovich – phone: +78634371940; the department of micro- and nano-electronic devices; cand. of eng. sc.; associate professor.