

УДК: 51-73:004.942

## Применение метода конечных элементов для моделирования эволюционных процессов теплопроводности в облученных электронными пучками полярных диэлектриках

А. Г. Масловская<sup>а</sup>, А. В. Сивунов

Амурский государственный университет,  
Россия, 675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21

E-mail: <sup>а</sup> maslovskayaag@mail.ru

Получено 15 октября 2012 г.

Представлены результаты компьютерного моделирования нестационарных температурных полей, возникающих в полярных диэлектриках, облученных сфокусированными электронными пучками средних энергий, при исследовании с помощью методик растровой электронной микроскопии. Математическая модель основана на решении многомерного эволюционного уравнения теплопроводности численным конечно-элементным методом. Аппроксимация теплового источника проведена с учетом оценки области взаимодействия электронов с веществом на основе симуляции электронных траекторий методом Монте-Карло. Разработано программное приложение в ППП Matlab, реализующее данную модель. Приведены геометрические интерпретации и результаты расчётов, демонстрирующие особенности температурного нагрева модельных образцов электронным зондом, при заданных параметрах эксперимента и принятой аппроксимации источника.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод конечных элементов, электронное облучение, полярный диэлектрик, процесс теплопроводности

### The use of finite element method for simulation of heat conductivity processes in polar dielectrics irradiated by electron bunches

A. G. Maslovskaya, A. V. Sivunov

*Amur State University, 21, Ignatyevskoe Shosse, Blagoveshchensk, 675027, Amur region, Russia*

**Abstract.** — The paper describes the results of computer simulation of time-dependent temperature fields arising in polar dielectrics irradiated by focused electron bunches with average electron energy when analyzing with electron microscopy techniques. The mathematical model was based on solving several-dimensional nonstationary heat conduction equation with use of numerical finite element method. The approximation of thermal source was performed taking into account the estimation of initial electron distribution determined by Monte-Carlo simulation of electron trajectories. The simulation program was designed in Matlab. The geometrical modeling and calculation results demonstrated the main features of model sample heating by electron beam were presented at the given experimental parameters as well as source approximation.

Keywords: simulation, finite element method, electron irradiation, polar dielectric, thermal conductivity process

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2012, vol. 4, no. 4, pp. 767–780 (Russian).

## Введение

Растровый электронный микроскоп (РЭМ) широко используется для исследования и анализа микроструктурных характеристик твердых тел [Гоулдстейн и др., 1984]. Одними из приоритетных направлений в растровой электронной микроскопии являются задачи исследования влияния пучков электронов на изучаемые образцы, а также изучение и обоснование основных законов и механизмов взаимодействия электронного зонда с материалами. Использование методик растровой электронной микроскопии позволяет всесторонне исследовать полярные диэлектрики, обладающие высокой чувствительностью к внешним воздействиям. Необходимость исследования различных аспектов взаимодействия электронных пучков с поверхностью полярных материалов возникает в задачах электронной литографии, формирования изображения геометрического рельефа, а также визуализации доменных структур образцов. Однако в подобных исследованиях, для построения карты сопутствующих тепловых, зарядовых и иных эффектов, требуется учитывать изменения, которые могут происходить в исследуемых образцах при воздействии электронного пучка, что требует дополнительных знаний относительно характеристик локальной области взаимодействия пучка электронов с образцом.

Сфокусированный электронный луч РЭМ является не только пассивным индикатором поверхности материалов, но и источником теплового воздействия на образец, учет которого необходим при исследовании механизмов формирования контраста изображения. Напыление (нанесение) проводящего покрытия на поверхность материала может привести к искажению формы теплового поля, а значит повлиять и на видеосигнал, снимаемый с образца. Изучению теплового воздействия электронного зонда на образец посвящен целый ряд работ как экспериментального, так и теоретического характера. Экспериментальные исследования позволяют в некоторых случаях получить значения температур перегрева облучаемых поверхностей (например, путем введения напыляемых термопар), однако подобный анализ носит лишь качественный характер и получаемые оценки являются приближенными. Поэтому на практике прибегают к использованию средств и методов математического моделирования, основанных на решении стационарного и нестационарного уравнений теплопроводности [Филиппов, 1993; Бакалейников и др., 2001].

Оценка тепловых эффектов воздействия электронного зонда РЭМ на диэлектрические материалы с учетом применения метода источников представлена в [Масловская, 2007], конечно-разностное решение тепловой задачи при электронном облучении кристаллов с нанесенными на грани металлическими электродами приведено в [Масловская, 2010], в работе [Масловская, Сивунов 2011] рассмотрено динамическое моделирование тепловых процессов с использованием возможностей пакета COMSOL Multiphysics в сегнетоэлектриках при воздействии непрерывным и пульсирующим зондом. Целью настоящей работы является применение алгоритма метода конечных элементов для решения задачи нестационарной теплопроводности, моделирующей тепловые процессы взаимодействия электронных пучков средних энергий (2–40 кэВ) с полярными материалами, с учетом определения функции источника на основе стохастического моделирования транспорта электронов в веществе.

## Физико-математическая постановка задачи моделирования нестационарного теплового процесса

В методе растровой электронной микроскопии поток электронов представляет собой сосредоточенное воздействие [Гоулдстейн и др., 1984] и при оценках тепловых нагрузок на исследуемый образец электронный зонд РЭМ можно рассматривать как сфокусированный тепловой источник.

Полная мощность электронного зонда определяется выражением вида

$$W = I \cdot U, \quad (1)$$

где  $I$  — ток зонда, А;  $U$  — напряжение, В.

В оценках теплового воздействия электронного зонда на твердотельную мишень учетом процессов излучения можно пренебречь, т.к. соответствующий эффект достигается при температурных значениях, вызывающих тепловое повреждение образца. Будем также считать, что «включение» теплового источника в объеме происходит мгновенно, так как согласно теоретическим оценкам, время замедления электронов зонда до тепловых скоростей составляет величину на несколько порядков меньшую характерного времени Фурье ( $10^{-12}$  с) [Филиппов, 1993].

Численные оценки температурного перегрева исследуемого образца электронным зондом требуют аппроксимации области взаимодействия электронного пучка с облучаемой мишенью. Выбор конфигурации теплового источника часто определяется методом построения и реализации задачи теплопроводности, а также режимами сканирования поверхности. Верхнюю границу и, соответственно, максимальное значение температурного перегрева, дает решение стационарной задачи теплопроводности. В этом случае, особенно при построении аналитических решений задачи, для аппроксимации внутреннего источника используют полусферу [Филиппов, 1993] или полуэллипсоид [Бакалейников и др., 2001]. Для режимов низковольтных РЭМ глубина инжекции становится много меньшей по сравнению с размером «пятна» на поверхности и наиболее адекватным оказывается цилиндрическое приближение. Объемная плотность мощности теплового источника может быть задана как постоянная величина, либо определена с помощью прямого моделирования транспорта электронов в веществе методом Монте-Карло [Narchan E., 1992]. В данной работе область распределения электронов будем аппроксимировать полусферой или полуэллипсоидом (в зависимости от дозы облучения и химического состава материала), центры которых расположены на поверхности образца в точке пересечения оси электронного зонда с плоскостью поверхности, а для задания функции объемной плотности мощности теплового источника воспользуемся результатом стохастического моделирования электронных траекторий в образце, при заданных параметрах экспериментального наблюдения, методом Монте-Карло в специализированном пакете программ CASINO [Drouin D. et. al., 2007]. Такой подход позволяет учитывать и потери части энергии, обусловленные вторично-эмиссионными эффектами.

Методики экспериментальных исследований полярных диэлектриков, применяемые для исследования геометрического и потенциального контрастов поверхности, предполагают как использование режимов на открытой поверхности образца, так и нанесение металлических проводящих покрытий (в качестве электродов используют, как правило, серебро, золото или медь, нанесенные методом вакуумного напыления). В модельном представлении, таким образом, следует предусмотреть возможность решения тепловой задачи для составного твердого тела.

Геометрия взаимного расположения модельного образца и теплового источника показана на рис. 1.

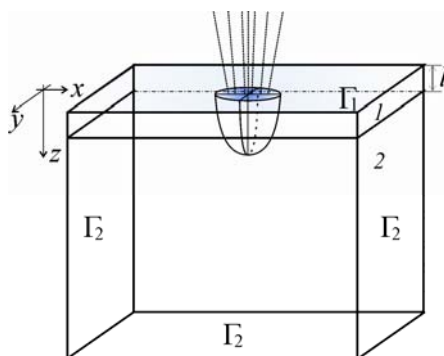


Рис. 1. Схематическое изображение модельного образца и аппроксимации теплового источника

Сформулируем математическую постановку задачи теплопроводности. Будем считать, что на исследуемый образец, моделируемый изотропной сплошной средой, с нанесенным на верхнюю грань металлическим электродом действует сфокусированный тепловой источник задан-

ной конфигурации. Объемная плотность мощности представляется как функция координат с распределением  $f(x, y, z)$ . Для построения модели необходимо определить теплофизические параметры кристалла и металлического электрода, а также параметры эксперимента, соответствующие характеристикам РЭМ и режимам сканирования. Если решение задачи строится в линейном приближении (теплофизические характеристики сред не зависят от температуры), то рассмотрение модели ограничивается температурным диапазоном, в котором не происходит фазовых переходов. В общем же случае полярные диэлектрические материалы, и сегнетоэлектрики в частности, являются нелинейными средами и характеризуются нелинейными зависимостями теплофизических характеристик от температуры, имеющими ярко выраженные особенности вблизи температуры Кюри [Лайнс, 1981].

Замкнутая математическая постановка краевой эволюционной задачи включает уравнения теплопроводности, начальное условие, краевые условия и условие на границе раздела двух сред, которое означает равенство температур и непрерывность тепловых потоков:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T_i}{\partial t} = a_i^2 \left( \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} \right) + \frac{f(x, y, z)}{\rho_i c_i}, \\ T_i(x, y, z, t_0) = T_0, \\ T_i|_{\Gamma_2} = T_0, \quad i = \overline{1, 2}, \\ k_1 \frac{\partial T_1(M, t)}{\partial z} \Big|_{z=l} = k_2 \frac{\partial T_2(M, t)}{\partial z} \Big|_{z=l}, \quad T_1|_{z=l} = T_2|_{z=l}, \\ \frac{\partial T_1(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{\Gamma_1} = 0, \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $T_1$  — температура в металлическом слое, К;  $T_2$  — температура в основном материале, К;  $k_i$  — коэффициент теплопроводности  $i$ -го слоя, Вт/(м·К);  $a_i^2$  — коэффициент температуропроводности  $i$ -го слоя, м<sup>2</sup>/с;  $\rho_i$  — плотность  $i$ -го слоя, кг/м<sup>3</sup>;  $c_i$  — удельная теплоемкость  $i$ -го слоя, Дж/(кг·К);  $l$  — толщина металлического электрода, м;  $f$  — объемная плотность мощности источника, Вт/м<sup>3</sup>.

## Алгоритм решения прикладной задачи

В нестационарных задачах математической физики искомая функция зависит не только от пространственных переменных, но и от времени. Для построения численного алгоритма решения многомерной эволюционной задачи математической физики используем комбинированный метод [Сегерлинд, 1979], согласно которому дифференциальный оператор по времени аппроксимируется конечно-разностным оператором, а пространственные операторы — конечно-элементным методом Галеркина.

Представим основное уравнение задачи (4), записанное для одной из сред, в следующем виде (второе уравнение будем аппроксимировать аналогично и решать далее совместно с первым):

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k_T \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = f(x, y, z). \quad (3)$$

Для аппроксимации функции  $T$  в нумерованных узлах области  $\Omega$  с границей  $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$  (рис. 2) выбирается система базисных функций  $N_m$ ,  $m = \overline{1, M}$ , с помощью которых строится

приближенное решение

$$T \approx \bar{T} = \sum_{m=1}^M T_m \cdot N_m. \tag{4}$$

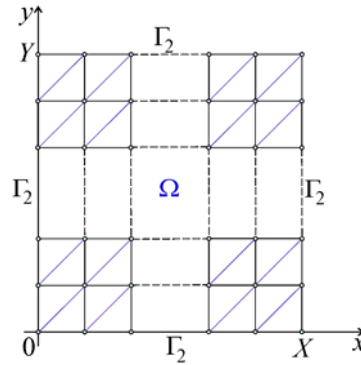


Рис. 2. Разбиение области, срез по z

В трёхмерном случае в качестве конечных элементов принимаются тетраэдры с номерными узлами  $i, j, k, l$  в вершинах. Тетраэдр является линейным конечным элементом, поскольку число номерных узлов на единицу больше размерности пространства  $R^3$ . Для облегчения задачи разбиения расчётной области на конечные элементы соединим 6 видов тетраэдров в параллелепипед и заполним все прямоугольные области такими группами тетраэдров.

Если расчётная область  $\bar{\Omega}$  разбита на тетраэдры, то базисные функции, ассоциируемые с каждым номерным узлом конечного элемента  $\Omega^e$ , формируются в виде линейных функций переменных  $x, y, z$ , удовлетворяющих условиям равенства единице в узлах, для которых они определены, и нулю — в остальных узлах. Для узла  $i$ , например, базисная функция имеет вид

$$N_i^e(x, y, z) = a_i^e + b_i^e x + c_i^e y + d_i^e z. \tag{5}$$

Аналогично определяются базисные функции в узлах  $j, k, l$ . С учётом этих требований формируется следующая СЛАУ для определения коэффициентов  $a_i^e, b_i^e, c_i^e, d_i^e$  базисной функции  $N_i^e(x, y, z)$ :

$$a_i^e = \frac{\Delta_a^e}{6V^e}, b_i^e = \frac{\Delta_b^e}{6V^e}, c_i^e = \frac{\Delta_c^e}{6V^e}, d_i^e = \frac{\Delta_d^e}{6V^e},$$

где  $V^e$  — объём элемента, а числители дробей:

$$\Delta_b^e = - \begin{vmatrix} 1 & y_j & z_j \\ 1 & y_k & z_k \\ 1 & y_l & z_l \end{vmatrix}, \Delta_c^e = - \begin{vmatrix} 1 & x_j & z_j \\ 1 & x_k & z_k \\ 1 & x_l & z_l \end{vmatrix}, \Delta_d^e = - \begin{vmatrix} 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \\ 1 & x_l & y_l \end{vmatrix}.$$

Вектор базисных функций для элемента задается как  $N = [N_i \ N_j \ N_k \ N_l]$ . Если узловые значения искомой функции  $T_m, m = i, j, k, l$  станут известными, то значения искомой функции  $T(x, y, z)$  во внутренних точках конечного элемента  $\Omega^e$  определяются с помощью следующей функции элемента:  $\bar{T}^e = T_i^e \cdot N_i^e + T_j^e \cdot N_j^e + T_k^e \cdot N_k^e + T_l^e \cdot N_l^e$ . Если подставить приближенное решение (4) в (3), то результатом подстановки будет не тождественный нуль,

а некоторая функциональная невязка  $R_\Omega(x, y, z)$  по расчётной области  $\Omega$  и невязка  $R_\Gamma(x, y, z)$  по границе  $\Gamma$ :

$$R_\Omega(x, y, z) = \rho c \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - k_T \left( \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} \right) - f(x, y, z), R_\Gamma(x, y, z) = k \frac{\partial \bar{T}}{\partial n} \Big|_\Gamma. \quad (6)$$

В соответствии с методом взвешенных невязок [Формалев, Ревизников, 2006] потребуем ортогональности этих функциональных невязок и специальным образом подобранных весовых функций  $W_s(x, y, z)$ ,  $s = \overline{1, M}$  для невязки  $R_\Omega(x, y, z)$  и  $\bar{W}_s(x, y, z)$ ,  $s = \overline{1, M}$  — для невязки  $R_\Gamma(x, y, z)$ . Для непрерывных функций  $R_\Omega(x, y, z)$ ,  $R_\Gamma(x, y, z)$  это означает равенство нулю скалярных произведений  $(R_\Omega, W_s) = 0$  и  $(R_\Gamma, \bar{W}_s) = 0$ ,  $s = \overline{1, M}$ , что приводит к равенству нулю суммы тройного и криволинейного интегралов соответственно по области и границе:

$$(R_\Omega, W_s) + (R_\Gamma, \bar{W}_s) = \iiint_\Omega \left[ \rho c \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - k_T \left( \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} \right) - f(x, y, z) \right] \cdot W_s(x, y, z) dx dy dz + \int_\Gamma \left[ k \frac{\partial \bar{T}}{\partial n} \Big|_\Gamma \right] \bar{W}_s d\Gamma = 0, \quad s = \overline{1, M}, \quad (7)$$

где  $W_s(x, y, z)$  — весовые функции для внутренних узлов расчётной области, а  $\bar{W}_s(x, y, z)$  — весовые функции для граничных узлов расчётной области,  $s = \overline{1, M}$ .

В соответствии с методом Галеркина взвешенных невязок весовые функции равны базисным:  $W_s = N_s$ ,  $\bar{W}_s = \bar{N}_s$ . Тогда, подставляя в (7) решение (4), учитывая, что граничные условия задачи обращают соответствующие слагаемые в 0, и, применяя к полученному выражению первую формулу Грина, получим слабую формулировку конечно-элементного метода Галеркина:

$$\sum_{m=1}^M T_m \left\{ \int_V \rho c \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} N_s N_m dV + \int_V \left( \frac{\partial N_s}{\partial x} \left( k_T \frac{\partial N_m}{\partial x} \right) + \frac{\partial N_s}{\partial y} \left( k_T \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) + \frac{\partial N_s}{\partial z} \left( k_T \frac{\partial N_m}{\partial z} \right) \right) dV \right\} = \int_V f(x, y, z) N_s dV, \quad s = \overline{1, M}. \quad (8)$$

Система (8) является неоднородной системой линейных алгебраических уравнений (глобальной СЛАУ), которую можно представить в векторно-матричной форме:

$$C \frac{\partial T}{\partial t} - KT = F, \quad (9)$$

где  $C$  — есть матрица демпфирования, отвечающая за зависимость температуры от времени,  $K$  — матрица жесткости, отвечающая за характеристики материала;  $F$  — матрица нагрузки, отвечающая за нагрев от источника тепла.

Для отдельного конечного элемента  $e$  можно построить локальную СЛАУ

$$C^e \frac{\partial T^e}{\partial t} - K^e T^e = F^e.$$

Матрицы  $C$ ,  $K$ ,  $F$  для каждого элемента будут иметь вид

$$[C^e] = \rho \cdot c \cdot \int_V [N]^T [N] dV, \quad [K^e] = k \cdot \int_V B^T B dV,$$

где  $B$  — матрица, полученная дифференцированием базисных функций по координатам:

$$B = \frac{1}{6V} \begin{bmatrix} b_i & b_j & b_k & b_l \\ c_i & c_j & c_k & c_l \\ d_i & d_j & d_k & d_l \end{bmatrix}, \quad [F^e] = \int_V f \cdot [N]^T dV.$$

Для построения глобальных матриц  $C, K, F$  необходимо локальным номерам узлов  $i, j, k, l$  каждого элемента поставить в соответствие глобальные номера узлов  $m, m = \overline{1, M}$ . Расширенные таким образом матрицы складываются, и в результате ансамблирования получаются глобальные матрицы.

Далее аппроксимируем первую производную по времени  $\partial T / \partial t$  с помощью правой разности первого порядка точности. Тогда с учетом дискретизации по времени для  $p$ -го временного узла запишем

$$\frac{\partial T^p}{\partial t} = \frac{T^{p+1} - T^p}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad p = 1, 2, \dots \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), получим:

$$C \frac{T^{p+1} - T^p}{\Delta t} + K T^{p+1} = F.$$

Для получения явной расчетной схемы преобразуем последнее к виду

$$\left( \frac{C}{\Delta t} + K \right) T^{p+1} = \frac{C}{\Delta t} T^p + F.$$

Тогда значение температуры на новом временном слое можно выразить в следующем виде:

$$T^{p+1} = A^{-1} (P T^p + F). \quad (11)$$

Таким образом, следуя общей методологии применения метода конечных элементов к решению нестационарных задач математической физики, на каждом временном слое происходит обращение к одной и той же последовательности действий, дающей конечно-элементную аппроксимацию решения. На границе сопряжения сред потребуем выполнение граничных условий, определенных в (4). Кроме того, при программной реализации была использована модифицированная схема алгоритма метода конечных элементов, в которой для оптимизации вычислительных затрат, проводимых на каждом временном шаге, зона динамического нагрева в объеме материала покрывалась сеткой элементов меньшего размера по сравнению с остальной расчетной областью.

## Инициализация параметров моделирования

### Задание функции источника

Для проведения вычислительного эксперимента с помощью вышеописанного алгоритма вычислений значений температуры необходимо определить объемную плотность мощности сфокусированного теплового источника и задать его геометрическую конфигурацию в образце. Данная подзадача была решена с помощью возможностей среды визуального моделирования CASINO 2.42 [Drouin D. et. al., 2007]. Программный комплекс CASINO предназначен для моделирования траекторий движения электронов средних энергий в твердотельной мишени. В осно-

ве математической формализации транспорта электронов положен метод случайных блужданий или метод Монте-Карло. Пакет позволяет симулировать электронные траектории в образце и экспортировать основные характеристики взаимодействия при заданных параметрах материала и режимах эксперимента (число симулируемых электронов, стартовая энергия пучка, геометрический размер «пятна», создаваемого электронным зондом на поверхности).

Графическое изображение симулированного распределения траекторий электронов в модельном сегнетоэлектрическом кристалле ниобате лития  $\text{LiNbO}_3$  представлено на рис. 3.

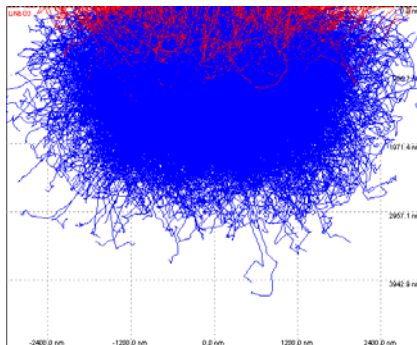


Рис. 3. Симуляция электронных траекторий в образце ниобата лития (стартовая энергия пучка  $E = 25$  кэВ, энергия останова  $E_{th} = 0.5$  кэВ, радиус зонда  $R = 2$  мкм,  $N = 10\,000$  историй электронов)

Данный модельный случай соответствует экспериментальному режиму наблюдения в РЭМ на открытой поверхности образца. При использовании проводящего покрытия, для моделирования транспорта электронов в симуляторе CASINO, необходимо ввести в рассмотрение еще один слой. Однако, как показал вычислительный эксперимент, нанесение тонкого проводящего покрытия (до 1 мкм) незначительно влияет как на глубину инжекции электронов в материал, так и на конфигурацию внутреннего источника.

Из анализа графика можно заключить, что область взаимодействия пучка электронов можно условно описать полусферой с радиусом  $\sigma = 2.5$  мкм.

При токе зонда  $I = 10^{-9}$  А и ускоряющем напряжении  $U = 25$  кВ мощность теплового зонда в объекте согласно (1) будет равна  $W = 2.5 \cdot 10^{-5}$  Вт. Объем внутреннего источника можно оценить как  $V = \frac{2}{3} \pi \sigma^3 = 32.7 \cdot 10^{-18}$  м<sup>3</sup>. Тогда объемная плотность мощности теплового источника

составляет величину  $f_0 = \frac{W}{V} = 7.6 \cdot 10^{11}$  Вт/м<sup>3</sup>. Анализируя график радиального распределения нормированной плотности мощности источника, можно ввести в рассмотрение следующие виды функциональной зависимости для  $f(x, y, z)$ :

1) аппроксимация с помощью распределения Гаусса (рисунок 4а):

$$f(x, y, z) = f_0 \cdot \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{\sigma^2}\right);$$

2) аппроксимация с помощью рэлеевского распределения (рисунок 4б):

$$f(x, y, z) = f_0 \cdot \frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{\sigma \cdot \exp(-0.5)} \cdot \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2 \cdot \sigma^2}\right).$$

Можно заметить, что в зависимости от химического состава исследуемого материала область взаимодействия может быть отлична от полусферической. Так, например, для сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата (ТГС) получим следующий график симуляции транспорта электронов, представленный на рис. 5.



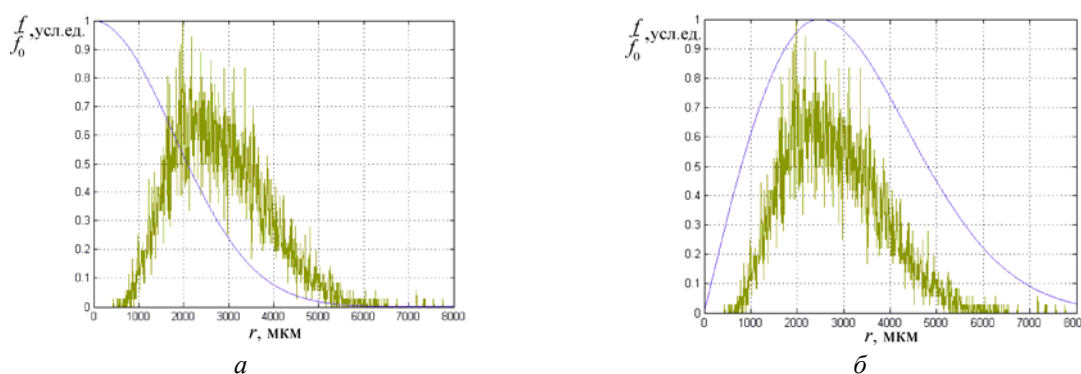


Рис. 4. Графическое представление функциональной зависимости объемной плотности мощности источника  $f(x, y, z)$

В этом случае можно принять полуэллиптическую аппроксимацию внутреннего источника с параметрами:  $\sigma_x = \sigma_y = 5$  мкм,  $\sigma_z = 10$  мкм.

При значении объемной плотности мощности  $f_0 = \frac{W}{V} \approx 0.5 \cdot 10^{11}$  Вт/м<sup>3</sup> функциональная зависимость для  $f(x, y, z)$  может быть определена с помощью распределения Гаусса:

$$f(x, y, z) = f_0 \cdot \exp\left(-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)\right).$$

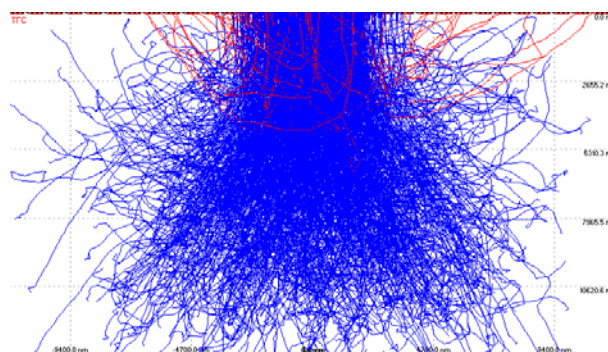


Рис. 5. Симуляция электронных траекторий в образце ТГС (стартовая энергия пучка  $E = 25$  кэВ, энергия останова  $E_{th} = 0.5$  кэВ, радиус зонда  $R = 2$  мкм,  $N = 10\,000$  историй электронов)

### **Определение теплофизических характеристик сред и параметров вычислительного эксперимента**

В качестве модельного образца, для которого проводился расчет тепловой нагрузки, были выбраны кристаллы типичных сегнетоэлектриков: ниобат лития, ТГС с нанесенными на грани металлическими электродами (золото, серебро). Теплофизические параметры сред [Кикоин, 1976] приведены в таблице 1.

В общем случае теплофизические и электрические характеристики сегнетоэлектриков носят нелинейный характер, т. е. их свойства зависят от температуры. В области, соответствующей температуре фазового перехода, теплофизические характеристики, соответствующие типичным сегнетоэлектрическим кристаллам, испытывают резкие изменения. При моделировании допускался учет нелинейного характера зависимости теплофизических характеристик кристалла от температуры: величины  $a^2(T)$ ,  $c(T)$  были аппроксимированы непрерывными зависимостями, повторяющими основные особенности экспериментальных данных.

Таблица 1. Теплофизические параметры образцов и электродов

Материал	Удельная теплоемкость, Дж/(кг·К)	Коэффициент теплопроводности, Вт/(кг·м)	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
LiNbO <sub>3</sub>	$c = 0.628 \cdot 10^3$	$k_T = 5.6$	$\rho = 4.644 \cdot 10^3$
ТГС	$c = 1.600 \cdot 10^3$	$k_T = 0.8$	$\rho = 1.600 \cdot 10^3$
Au	$c = 0.129 \cdot 10^3$	$k_T = 320$	$\rho = 19.3 \cdot 10^3$
Ag	$c = 0.240 \cdot 10^3$	$k_T = 419$	$\rho = 10.490 \cdot 10^3$

Образец представлялся в виде параллелепипеда, имеющего следующие линейные размеры:  $5 \cdot 10^{-3} \times 5 \cdot 10^{-3} \times 1 \cdot 10^{-3}$  м, ( $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$  — соответственно). Толщина металлического электрода варьировалась в пределах  $10^{-5}$ – $10^{-6}$  м.

Для определения характерного времени вычислительного эксперимента (времени действия источника) воспользуемся критерием Фурье [Мартисон, Малов, 1996]:

$$Fo = \frac{a^2 \cdot t}{x^2}. \quad (12)$$

В качестве характерного размера примем линейный размер теплового источника  $\sigma$ . Времена Фурье в нашем случае составляли величины порядка  $t \approx 1$  мкс. Наблюдение температурного распределения происходит в момент времени, равный времени действия источника.

Начальная температура образца и окружающей среды соответствовала комнатной температуре  $T_0 = 300$  К.

Значения ускоряющего напряжения и тока зонда выбирались соответствующими режимам экспериментального наблюдения в высоковольтных РЭМ ( $I \sim 10^{-10} \div 10^{-9}$  А,  $U \sim 5 \div 40$  кВ).

## Имитационное моделирование

Численная реализация конечно-элементного алгоритма и вычислительные эксперименты были проведены с использованием среды программирования Matlab 7.11. ППП Matlab оптимизирован для быстрого выполнения операций с векторами и матрицами, а также обладает всеми необходимыми средствами для работы с ними, в том числе возможностью построения графиков. Для решения прикладной задачи о расчете теплового воздействия РЭМ на твердые тела было проведено проектирование и реализация программного комплекса. Для начала работы приложения и актуализации вычислений необходимо заполнить исходные данные эксперимента: геометрические размеры модельного образца, теплофизические параметры сред, функцию объемной плотности мощности теплового источника, начальную температуру тела, время работы источника, расчетный шаг по времени, количество узлов по каждой оси, на которые будет разбит объект. Приложение обладает также возможностями управления графическим выводом результатов моделирования: визуализация температурного распределения в различных сечениях координатными плоскостями; изменение количества слоёв для приближения графиков; вывод температурных кривых для указанной точки из нескольких экспериментов одновременно; вывод температурных кривых (координатных представлений) в различные моменты времени.

С целью верификации работы программного приложения было проведено тестирование программы на эталонных моделях, для которых известны температурные оценки, полученные другими авторами. Кроме того, переход к стационарному режиму при задании достаточно длительного времени облучения (по сравнению с оцененным для каждого случая отдельно временем Фурье) позволил проверить адекватность численных расчетов путем сравнения с известными аналитическими решениями, полученными методом источников [Карслоу, Егер, 1964].

### Вычислительный эксперимент № 1

В качестве исходных данных инициализируем следующие значения. Модельный образец: кристалл ниобата лития. Время воздействия источника и последний момент времени наблюдения —  $t^* = 5 \cdot 10^{-6}$  с. Ток зонда  $I = 10^{-9}$  А, ускоряющее напряжение  $U = 25$  кВ, стартовая энергия пучка составила  $E_0 = 25$  кэВ, диаметр зонда  $d = 4$  мкм. Плотность мощности теплового источника аппроксимирована с помощью рэлеевского распределения. Вид температурного распределения  $\Delta T = T(x, y) - T_0$  для плоскости, представляющей собой грань кристалла  $Z = 0$ , в момент времени  $t^*$ , представлен на рис. 6.

Из анализа температурного хода кривой на рисунке 6б можно заключить, что в рассматриваемый промежуток времени максимальная температура перегрева электронным зондом кристалла  $\text{LiNbO}_3$  составляет величину порядка 0.35 К. Время установления этого температурного значения сравнимо с временем Фурье (12) для кристалла ниобата лития:  $t_{Fo} = \frac{x^2}{a^2} \approx 3.3 \cdot 10^{-6}$  с (коэффициент тепловой диффузии  $a^2 = 1.9 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с, характерный масштабный параметр расстояния —  $x = \sigma$ ).

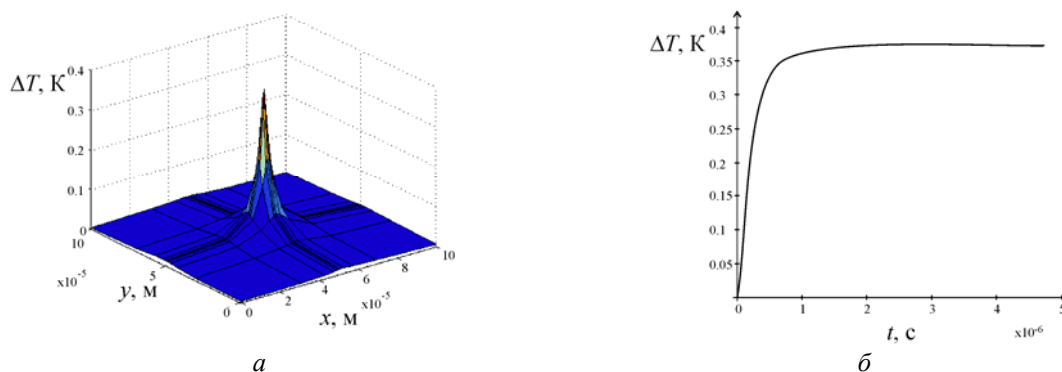


Рис. 6. Температурные зависимости: *a* — уровень перегрева  $\Delta T(x, y)$  (сечение плоскостью  $Z = 0$ ) в момент времени  $t^*$ , *б* — температурная динамика в точке падения зонда

### Вычислительный эксперимент № 2

В качестве исходных данных инициализируем следующие значения. Модельный образец: кристалл ТГС. Время воздействия источника и последний момент времени наблюдения —  $t^* = 5 \cdot 10^{-6}$  с, ток зонда —  $I = 10^{-9}$  А, ускоряющее напряжение —  $U = 25$  кВ, стартовая энергия пучка —  $E_0 = 25$  кэВ, диаметр зонда —  $d = 4$  мкм.

Вид температурного распределения  $T(x, y)$  (сечение плоскостью  $Y = 0$ ) в момент времени  $t^*$  представлен на рис. 7а. Из анализа данных можно сделать вывод, что перегрев достигает значения  $\Delta T = 0.6$  К. Такое значение перегрева не приведет к тепловому повреждению образца. Однако наличие температурного градиента может инициировать пироэффект — появление дополнительной компоненты тока, обусловленной локальным изменением температуры. Вклад этой компоненты может оказаться существенным при формировании видеосигнала за счет отклика кристалла на воздействие зонда.

Сравним значение температурного перегрева для случая экспериментальных режимов РЭМ, использующих облучение открытой поверхности образца и режимов с нанесенными на грань металлическими электродами. Результат работы программного приложения представлен на рис. 7б. Видно, что нанесение проводящего покрытия снижает тепловую нагрузку на кристалла, что обусловлено значениями теплофизических параметров составной среды.

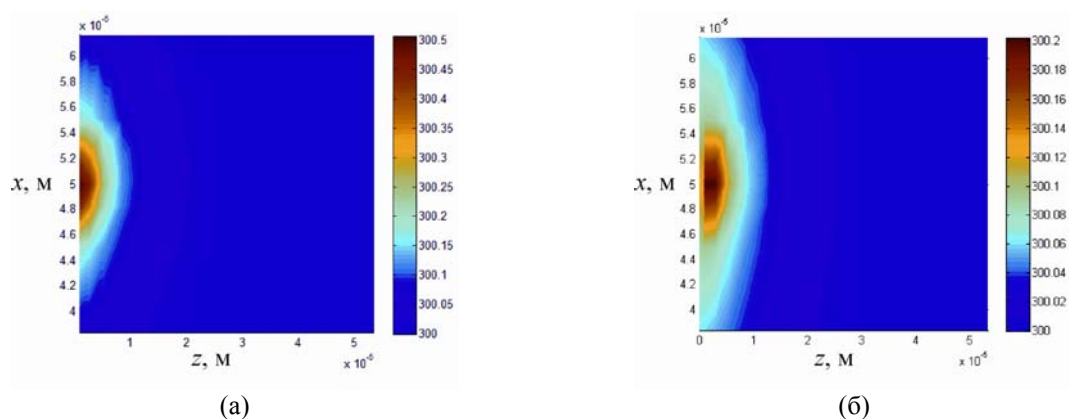


Рис. 7. Температурные зависимости: проекция значений  $T(x, y)$  на плоскость  $OXZ$ : модельный эксперимент для ТГС (а), для ТГС с нанесенным на грань золотым электродом (б)

Для дальнейшего анализа температурных конфигураций ограничим представление результатов моделирования координатными зависимостями.

На рисунке 8а представлено сопоставление температурных конфигураций, полученных при воздействии электронного зонда на однородный кристалл ТГС и на кристалл с нанесенным на верхнюю грань серебряным электродом. Ход температурной кривой по глубине образца характеризуется плавным возрастанием на расстояниях порядка толщины серебряного покрытия и пиком на расстояниях, сравнимых с линейным размером источника. Такое поведение обусловлено значительной разницей в величинах, определяющих теплофизические свойства сред. Результаты моделирования сравнения температурных динамик для открытой поверхности кристалла ТГС и с нанесенными на грань серебряным и золотым электродами представлены на рисунке 8б. Можно отметить, что выбор материала электрода не оказывает существенного влияния на распределение теплового поля в кристалле.

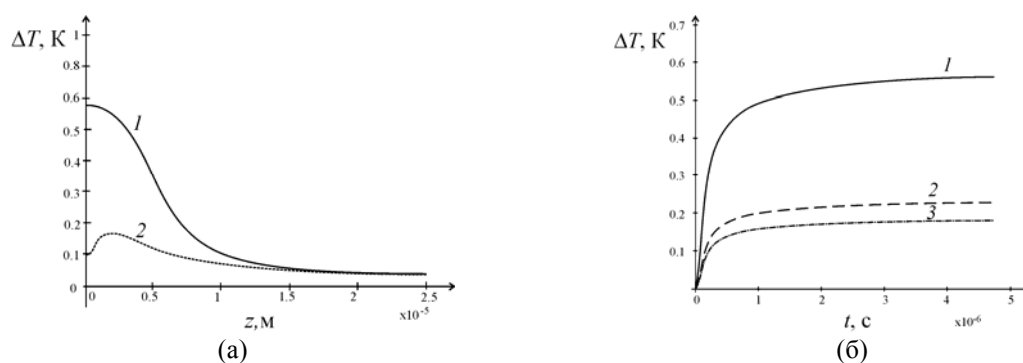


Рис. 8. Температурные профили (1 — для ТГС, 2 — ТГС с серебряным электродом) (а); температурная динамика в точке падения зонда (модельный эксперимент для ТГС — 1, ТГС с золотым электродом — 2, ТГС с серебряным электродом — 3) (б)

Исследование влияния нелинейности кристаллов на форму теплового отклика представляет отдельную подзадачу. Как показал вычислительный эксперимент, использование линейного приближения для режимов высоковольтных РЭМ вполне оправдано: перегрев не превышает нескольких градусов Кельвина. Однако, исследование тепловых эффектов в низковольтных режимах требует учета нелинейных зависимостей теплофизических характеристик от температуры. Так, максимальная температура перегрева образцов в низковольтных РЭМ достигает больших значений, чем в высоковольтных, что в целом обусловлено характеристиками зонда. Например, для сегнетоэлектрического кристалла ТГС при использовании режимов низковольтных РЭМ перегрев оказывается значительным (по сравнению с температурой Кюри) —  $\Delta T \approx 40$  К, и в образце могут происходить необратимые фазовые превращения.

Таким образом, расчет величины температурного перегрева зонда РЭМ можно проводить различными способами в зависимости от целей и условий эксперимента. При использовании режимов медленного сканирования вероятно установление стационарного температурного распределения, и величину перегрева можно рассчитать, решая стационарное уравнение теплопроводности, которое дает верхние оценки. Такой же численный результат даст предельный режим для нестационарной задачи, для реализации которого необходимо задать время воздействия источника превышающим характерное время Фурье:  $t^* \gg t_{Fo}$ . При исследовании образцов в высоковольтных РЭМ при диаметре зонда  $d_0 = 4$  мкм длительность экспозиции одного элемента составляет  $t_3 = 0.25$  мкс, что для многих материалов соизмеримо с временем Фурье, поэтому для оценок перегрева необходим учет результатов моделирования нестационарных тепловых полей.

## Заключение

Таким образом, проведены исследования тепловых эффектов воздействия электронных пучков растрового электронного микроскопа на полярные материалы на основе применения средств и методов компьютерного моделирования. Реализация поставленных задач проводилась в рамках теории теплопроводности с использованием численного конечно-элементного метода, предназначенного для решения эволюционных задач математической физики. Разработанное программное приложение в ППП Matlab 7.11 позволяет проследить динамику распределения температуры при локальном воздействии электронного зонда, а также оценить величину перегрева при определенных параметрах исследуемого образца и характеристиках экспериментального наблюдения. Численные оценки тепловой нагрузки при воздействии электронного зонда на образец являются необходимым условием выбора оптимальных режимов сканирования в растровой электронной микроскопии и рентгеноспектральном микроанализе.

## Список литературы

- Бакалейников Л. А., Галактионов Е. В., Третьяков В. В., Трон Э. А. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия // ФТТ, 2001. — Т. 43, № 5. — С. 779–785.
- Голдстейн Дж., Ньюбери Д., Эчлин П. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. — М.: Мир, 1984. — 348 с.
- Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. — М.: Наука, 1964. — 490 с.
- Кикоин И. К. Таблицы физических величин. — М.: Атомиздат, 1976. — 1008 с.
- Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. — М.: Мир, 1981. — 725 с.
- Мартисон Л. К., Малов Ю. И. Дифференциальные уравнения математической физики. — М.: МГТУ им. Баумана, 1996. — 350 с.
- Масловская А. Г. Анализ тепловых эффектов, возникающих при взаимодействии электронных пучков с сегнетоэлектрическими кристаллами // Известия вузов. Физика, 2010. — №1. — С. 34–40.
- Масловская А. Г. Моделирование теплового воздействия электронного зонда в растровой электронной микроскопии // Информатика и системы управления, 2007. — №2(14). — С. 40–51.
- Масловская А. Г., Сивунов А. В. Расчет тепловой нагрузки на кристалл ниобата лития при электронном облучении // Известия вузов. Физика, 2011. — №1(2). — С. 80–86.
- Сегерлинд Л. Дж. Применение метода конечных элементов. — М.: Мир, 1979. — 388 с.

- Филиппов М. Н.* Оценка теплового воздействия электронного зонда в растровой электронной микроскопии рентгеноспектральном анализе // Изв. РАН. Сер. физич. — 1993. — №8. — С. 163–171.
- Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л.* Численные методы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 400 с.
- Drouin D., Couture A., Joly D., Tastet X., Aimez V., Gauvin R.* CASINO V2.42 — A Fast and Easy-to-use Modeling Tool for Scanning Electron Microscopy and Microanalysis Users // Scanning, 2007. — V. 29. — P. 92–101.
- Napchan E.* Monte Carlo Simulation of Electron Trajectory // European Microscopy and Analysis. 1992. — V. 2. — P. 21–23.