

УДК: 519.688:004.942

## Численное моделирование процессов зарядки при диагностике сегнетоэлектриков методами растровой электронной микроскопии

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

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

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

Получено 3 июля 2013 г.,  
после доработки 31 января 2014 г.

Предложен алгоритм решения прикладной задачи расчета электрических характеристик полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках при электронном облучении, основанный на реализации детерминированной модели методом конечных элементов с учетом результатов моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло. Разработано программное приложение для проведения вычислительного эксперимента.

Ключевые слова: математическая модель, алгоритм, сегнетоэлектрик, электронное облучение, процесс зарядки, метод конечных элементов, метод Монте-Карло

## Numerical simulation of charging processes at ferroelectric diagnostics with scanning electron microscopy techniques

A. V. Sivunov, A. G. Maslovskaya

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

**Abstract.** — An algorithm of applied problem solving was described to calculate electrical characteristics of electrical field effects in ferroelectrics electron-beam charged. The algorithm was based on implementation of the deterministic model using finite element method as well as taking into account Monte-Carlo simulation results of electron transport. The program application was developed to perform computing experiments.

Keywords: mathematical model, algorithm, ferroelectric, electron irradiation, charging processes, finite element method, Monte-Carlo method

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 1, pp. 107–118 (Russian).

## Введение

Применение математических методов для описания трудноформализуемых физических систем позволяет конструировать вычислительные алгоритмы реализации математических моделей таких систем, а также исследовать закономерности наблюдаемых процессов и явлений на основе анализа результатов вычислительных экспериментов. Одним из эффектов, подлежащих изучению методами математического моделирования в задачах растровой электронной микроскопии, является взаимодействие электронного пучка с облучаемой мишенью. При использовании методик растровой электронной микроскопии (РЭМ) для исследования и модификации свойств полярных материалов требуется учитывать изменения, которые могут происходить в исследуемых образцах при электронном облучении [He et al., 2003; Molina et al., 2009; Масловская, Копылова, 2009]. В диэлектриках и высокоомных полупроводниках носители тока, захваченные объемными ловушками, создают собственный объемный заряд. Таким образом, при отсутствии утечек в хороших диэлектриках при любых увеличениях и любых реальных токах зонда возникает эффект зарядки. Результаты исследований вопросов проводимости и эффектов зарядки методами математического моделирования представлены в работах ряда авторов [Suga, 1998; Кортов, Звонарёв, 2009; Сивунов, Масловская, 2013]. При этом для определения объемного распределения зарядов авторы чаще всего используют аппроксимирующие функции либо метод Монте-Карло.

Одним из математических подходов, использование которого возможно для формализации процессов зарядки в образце диэлектрика при электронном облучении, является диффузионно-дрейфовый подход. В статье рассматривается возможность модификации базовой математической модели зарядовых эффектов воздействия электронных пучков средних энергий на образец сегнетоэлектрика на основе учета процессов собственной радиационно-стимулированной проводимости материала и данных стохастического моделирования транспорта электронов в веществе [Масловская, 2013].

Целью работы является построение алгоритма численной реализации модели зарядки для стационарного режима на основе метода конечных элементов, а также проведение, интерпретация и анализ результатов вычислительного эксперимента с использованием разработанного программного приложения.

## Физико-математическая постановка задачи моделирования

В основе математической модели лежит обобщенная физическая модель, описывающая процесс зарядки полярных диэлектриков и основанная на совместном решении уравнения непрерывности и локально-мгновенного уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = G - \operatorname{div} \mathbf{j}, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\rho$  — объемная плотность распределения зарядов, Кл/м<sup>3</sup>;  $\mathbf{j}$  — плотность тока, А/м<sup>2</sup>;  $\mathbf{E}$  — напряженность поля, В/м;  $\varepsilon$  — удельная диэлектрическая проницаемость среды, 1;  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая постоянная, Кл/(В·м);  $G$  — генерационное слагаемое, Кл/(м<sup>3</sup>·с).

Для моделирования процессов зарядки полярных материалов можно ввести в рассмотрение модификацию базовой модели (1) на основе следующих положений [Масловская, 2013]. Плотность тока проводимости представляется суммой диффузионного и дрейфового токов:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^{dif} + \mathbf{j}^{dr}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{j}^{dr} = \sigma \mathbf{E}$  и  $\mathbf{j}^{dif} = -D \operatorname{grad} \rho$  — дрейфовая и диффузионная составляющие плотности тока электронов соответственно;  $\sigma = \mu_n \cdot \rho$  — собственная радиационно-стимулированная прово-

димось образца, Кл/(В·с·м);  $D = \mu_n \frac{kT}{e}$  — коэффициент диффузии электронов, м<sup>2</sup>/с;  $\mu_n = \mathbf{v}_{dr} / \mathbf{E} = e \cdot \bar{l} / (m \cdot \bar{v})$  — дрейфовая подвижность электронов, м<sup>2</sup>/(В·с);  $\mathbf{v}_{dr}$  — дрейфовая скорость электронов, м/с;  $\bar{l}$  — средняя длина свободного пробега, м;  $\bar{v}$  — средняя тепловая скорость, м/с;  $m$  — масса электрона, кг;  $k$  — константа Больцмана, Дж/К;  $T$  — температура, К;  $e$  — заряд электрона, Кл.

Будем считать, что сфокусированный пучок электронов начинает действовать в момент времени  $t = 0$  в плоскости  $z = 0$  и перпендикулярно поверхности образца. Тогда, учитывая, что  $\text{div } \mathbf{j} = \sigma \text{ div } \mathbf{E} + \mathbf{E} \text{ grad } \sigma - D \Delta \rho$ , итоговая система, формализующая математическую постановку задачи, описывается уравнениями в частных производных с учетом цилиндрической симметрии задачи [Масловская, 2013]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = G - \frac{\mu_n}{\epsilon \epsilon_0} \cdot \rho^2 - \mu_n \cdot \left( E_r \frac{\partial \rho}{\partial r} + E_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + D \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \phi, \end{cases} \quad (3)$$

где  $0 \leq r \leq R$ ,  $0 \leq z \leq Z$ ,  $0 \leq t \leq T$ .

Для замыкания математической формулировки диффузионное уравнение и уравнение Пуассона, выраженные системой (3), необходимо дополнить начальным  $\rho(r, z, t_0) = \rho^0(r, z)$  и соответственно граничными условиями

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial n} \right|_{r=0; z=0} = 0, \quad \rho|_{r=R; z=Z} = 0, \quad \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{r=0; z=0} = 0, \quad \phi|_{r=R; z=Z} = 0. \quad (4)$$

Если облучение поддерживается достаточно длительное время, в некотором приближении можно считать, что реализуется стационарный режим процесса. Сформулируем математическую постановку стационарной подзадачи численного решения нахождения потенциала электрического поля, создаваемого заданным распределением электрических зарядов  $\rho(r, z)$ , в виде системы

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho(r, z)}{\epsilon \epsilon_0}, \quad 0 \leq r \leq R, \quad 0 \leq z \leq Z, \\ \mathbf{E} = -\text{grad } \phi, \end{cases} \quad (5)$$

дополненной граничными условиями

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{r=0; z=0} = 0, \quad \phi|_{r=R; z=Z} = 0. \quad (6)$$

## Алгоритм численной реализации модели

Вычислительный алгоритм реализации модели процесса зарядки электронным зондом в постановке (5)–(6) состоит из следующих этапов.

**Этап I.** Определение модельного представления функции объемного источника зарядов на основе результатов расчета области взаимодействия пучка электронов с облучаемой мишенью методом Монте-Карло [Сивунов, Масловская, 2013].

Алгоритм динамической 3D-модели электронных траекторий в твердых телах при облучении электронными пучками средних энергий построен на основе физической модели однократных взаимодействий электронов с веществом.

В вычислительной схеме предполагалось, что электрон с энергией старта  $E_0$  падает перпендикулярно плоскости поверхности образца в некоторую точку  $P_0$  под углом  $90^\circ$ , как показано на рисунке 1.

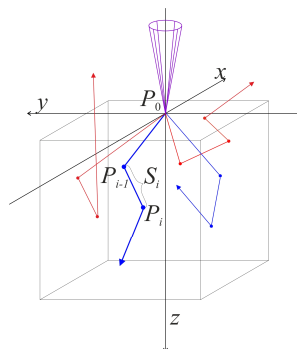


Рис. 1. Схема трехмерной модели траекторий движения электронов

Позиция электрона в точке  $P_i$  определяется значением углов рассеяния:  $\omega_i$  — азимутальный угол,  $\phi_i$  — угол отклонения. Значения углов и вид взаимодействия (упругое и неупругое) определяются с помощью генератора псевдослучайных чисел. Электрон между случайными событиями рассеяния проходит в образце путь длиной  $S_i$  с энергией  $E_i$ :

$$S = -\lambda \ln(\xi), \quad \lambda = \frac{1}{N_0 \cdot \rho} \sum_{k=1}^M \frac{\omega_k \cdot A_k}{\sigma_k},$$

где  $\xi \in (0,1)$  — равномерно распределенная случайная величина;  $A_k$  — атомный вес, г/моль;  $\sigma_k$  — сечение рассеяния,  $\text{см}^2$ ;  $\omega_k$  — массовая концентрация  $k$ -го элемента;  $M$  — число элементов, входящих в состав вещества;  $N_0$  — число Авогадро,  $\text{моль}^{-1}$ ;  $\rho$  — плотность,  $\text{г/см}^3$ . Для полного сечения рассеяния  $\sigma_k$  использовано модельное сечение Мотта [Czyzewski et al., 1990].

Предложена следующая методика расчета изменения траектории движения электрона в трехмерной модели. Текущая траектория электрона определяется единичным вектором  $\vec{r}$  с направляющими косинусами  $\cos \alpha = \vec{r} \cdot \vec{i}$ ,  $\cos \beta = \vec{r} \cdot \vec{j}$ ,  $\cos \gamma = \vec{r} \cdot \vec{k}$ . Первоначально положение электрона задается координатами  $(x^i, y^i, z^i)$  и траектория определена значениями направляющих косинусов  $(0, 0, -1)$ . Новое положение электрона рассчитывается по соотношениям:  $x^{i+1} = x^i + \cos \alpha \cdot S$ ,  $y^{i+1} = y^i + \cos \beta \cdot S$ ,  $z^{i+1} = z^i + \cos \gamma \cdot S$ . Для дальнейшего расчета направляющих косинусов использованы соотношения, полученные с помощью преобразований системы координат в пространстве и определения значений направляющих косинусов «нового» вектора  $\vec{r}_i$  движения электрона относительно введенной глобальной системы координат (рис. 2).

Таким образом, при формализации алгоритма можно положить:  $\cos \alpha^{i+1} = \cos \omega \cdot \sin \phi$ ,  $\cos \beta^{i+1} = \sin \omega \cdot \sin \phi$ ,  $\cos \gamma^{i+1} = \frac{\cos \phi \cdot \cos \gamma^i}{|\cos \gamma^i|}$ , если  $|\cos \gamma^{i+1}| > 0.9999$ .

В остальных случаях  $\cos \alpha^{i+1} = \frac{\sin \phi}{\sin \gamma^i} (\cos \alpha^i \cdot \cos \gamma^i \cdot \cos \omega - \cos \beta^i \cdot \sin \omega) + \cos \alpha^i \cdot \cos \phi$ ,

$$\cos \beta^{i+1} = \frac{\sin \phi}{\sin \gamma^i} (\cos \beta^i \cdot \cos \gamma^i \cdot \cos \omega - \cos \alpha^i \cdot \sin \omega) + \cos \beta^i \cdot \cos \phi,$$

$$\cos \gamma^{i+1} = -\sin \phi \cdot \cos \omega \cdot \sin \gamma^i + \cos \gamma^i \cdot \cos \phi.$$

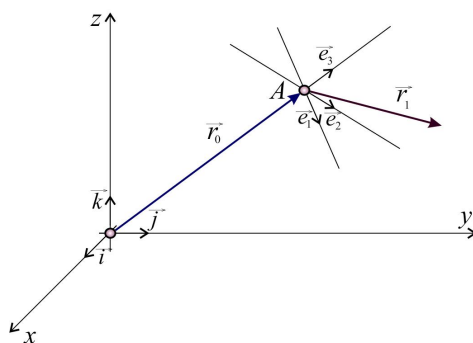


Рис. 2.  $\vec{r}_0$  — «старое» и  $\vec{r}_1$  — «новое» направления электронной траектории

Для определения изменения энергии при неупругом рассеянии электронов использован модифицированным законом Бете для многокомпонентных материалов [Жоу, 1995]:

$$\frac{dE}{ds} = -75800 \frac{\rho}{E} \cdot \sum_{k=1}^M \omega_k \frac{Z_k}{A_k} \ln \left( \frac{1.166(E + 0.8J_k)}{J_k} \right), \text{ кэВ/см}, \quad (7)$$

где  $J_k = (9.76Z_k + 58.5Z_k^{-0.19}) \cdot 10^{-3}$  — эффективный потенциал ионизации  $k$ -го элемента (соотношение Бергера–Слетзера), кэВ.

Дополнение уравнения (7) начальным условием приводит к необходимости решения задачи Коши для ОДУ. Данная подзадача решалась численно с использованием метода Рунге–Кутты IV-го порядка точности. Расчет траектории и потерь энергии для каждого электрона проводится до тех пор, пока величина его энергии вследствие неупругого рассеяния не уменьшится до некоторого порогового значения ( $E_{th} \sim 0.5\text{кэВ}$ ). Моделирование проводится для  $N$  историй электронов, количество которых должно быть достаточным для статистически верного описания процесса рассеяния при выбранных моделях рассеяния электронов и потерь энергии электронов.

Для аналитического описания области взаимодействия электронного пучка с облучаемой мишенью необходимо задать геометрию пространственного распределения на основе имитационного моделирования электронных траекторий методом Монте-Карло, а также инициализировать функциональную зависимость распределения выделенной энергии:

$$I = I_0 \cdot \exp \left( -\frac{(r - r_{\max})^2}{2 \cdot (r_{\max})^2} \right), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (8)$$

где  $I_0$  — нормировочный коэффициент (имеющий соответствующую физическую размерность);  $r_{\max}$  — абсцисса максимума энерговыделения, м.

**Этап II.** Организация процедуры численного решения уравнения Пуассона в (5) с граничными условиями (6) методом конечных элементов [Сегерлинд, 1979; Young, Bang, 1996].

Разобьем расчетную область  $\Omega$  на треугольные подобласти. Обозначим границу, на которой заданы условия Дирихле, —  $\Gamma_\phi$ , а границу с условиями Неймана —  $\Gamma_q$ . Аппроксимацию для неизвестной функции  $\phi$  будем искать в виде линейной комбинации базисных функций  $N_m$ , коэффициентами которой являются значения искомой функции  $\phi_m$  в нумерованных узлах:

$$\phi(r, z) \approx \tilde{\phi}(r, z) = \sum_{m=1}^M \phi_m N_m(r, z), \quad (9)$$

где  $M$  — число нумерованных узлов.

Подставив приближенное решение (9) в задачу (5), получим некоторую функциональную невязку  $R_\Omega(r, z)$  по расчетной области  $\Omega$  и невязку  $R_{\Gamma_q}(r, z)$  по границе  $\Gamma_q$ :

$$R_\Omega(r, z) = \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial r} + \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial z^2} + \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad R_{\Gamma_q}(r, z) = \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial n}. \quad (10)$$

Согласно методу взвешенных невязок [Сегерлинд, 1979], для непрерывных функций  $R_\Omega(r, z)$  и  $R_{\Gamma_q}(r, z)$  должно выполняться условие равенства нулю скалярных произведений:

$$(R_\Omega, W_l) = 0, \quad (R_{\Gamma_q}, \bar{W}_l) = 0 \quad \text{или} \quad (R_\Omega, W_l) + (R_{\Gamma_q}, \bar{W}_l) = 0, \quad l = 1, \dots, M, \quad (11)$$

где  $W_l(r, z)$  — весовые функции для внутренних узлов расчетной области,  $\bar{W}_l(r, z)$  — весовые функции для граничных узлов расчетной области,  $l = 1, \dots, M$ .

В соответствии с методом Галеркина весовые функции выбирались равными базисным:  $W_l = N_l$ ,  $\bar{W}_l = \bar{N}_l$ . Используя первую формулу Грина, ослабим формулировку задачи. Тогда получим выражение вида

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^M \phi_m \left\{ - \int_{\Omega} \left( \frac{\partial N_l}{\partial r} \cdot \frac{\partial N_m}{\partial r} + \frac{\partial N_l}{\partial z} \cdot \frac{\partial N_m}{\partial z} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \left( N_l \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial N_l}{\partial r} \right) d\Omega \right\} = \\ & = - \int_{\Omega} \frac{\rho(r, z)}{\varepsilon \varepsilon_0} \cdot N_l d\Omega - \int_{\Gamma_q} \left( N_l \cdot \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial n} \right) d\Gamma, \quad l = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (12)$$

Выражение (12) представляет неоднородную СЛАУ порядка  $M$ , которая в векторно-матричной форме имеет вид

$$K\phi = f, \quad (13)$$

где компоненты матрицы  $K$  и правых частей  $f$  образованы суммированием вкладов отдельных конечных элементов:  $k_{lm} = \sum_{e=1}^E k_{lm}^e$ ,  $f = \sum_{e=1}^E f_l^e$ . Таким образом, получаем компоненты матрицы  $K$  и вектора правых частей  $f$ :

$$k_{lm}^e = \int_{\Omega^e} \left( \frac{\partial N_l^e}{\partial r} \cdot \frac{\partial N_m^e}{\partial r} + \frac{\partial N_l^e}{\partial z} \cdot \frac{\partial N_m^e}{\partial z} \right) dr dz - \int_{\Omega^e} \left( N_l^e \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial N_l^e}{\partial r} \right) dr, \quad (14)$$

$$f_l^e = \int_{\Omega^e} \frac{\rho(r, z)}{\varepsilon \varepsilon_0} \cdot N_l^e dr dz + \int_{\Gamma_q^e} \left( N_l^e \cdot \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial n} \right) d\Gamma. \quad (15)$$

Интерполяционная формула для функции  $\phi$  на треугольном линейном элементе  $e$  имеет вид  $\phi^e = \alpha + \beta r + \gamma z$ , где  $\alpha, \beta, \gamma$  — константы, подлежащие определению. Вычисляя обратную матрицу, получим функцию элемента:

$$\phi^e = N_1^e(r, z)\phi_1^e + N_2^e(r, z)\phi_2^e + N_3^e(r, z)\phi_3^e, \quad (16)$$

где  $N_1^e = \frac{1}{2\Delta^e} [(r_2 z_3 - r_3 z_2) + (z_2 - z_3)r + (r_3 - r_2)z]$ ;  $N_2^e = \frac{1}{2\Delta^e} [(r_3 z_1 - r_1 z_3) + (z_3 - z_1)r + (r_1 - r_3)z]$ ;

$N_3^e = \frac{1}{2\Delta^e} [(r_1 z_2 - r_2 z_1) + (z_1 - z_2)r + (r_2 - r_1)z]$ ;  $\Delta = \frac{1}{2} \det \begin{bmatrix} 1 & r_1 & z_1 \\ 1 & r_2 & z_2 \\ 1 & r_3 & z_3 \end{bmatrix}$  — площадь треугольного

элемента.

Используя полученные базисные функции, их производные и теорему о среднем, подставляя их в (14) и (15), получим коэффициенты локальной матрицы жесткости  $K^e$  и локального вектора нагрузок  $f^e$ . Ансамблирование конечных элементов дает глобальную СЛАУ, позволяющую рассчитать значения функции  $\phi$  во всех узлах расчетной области. Учитывая специфику моделируемых процессов, для вычисления была использована модифицированная расчетная схема, использующая сетку конечных элементов меньшего размера, покрывающих область зоны инжекции.

**Этап III.** Расчет координатных зависимостей вектора напряженности и индуцируемой электронным зондом компоненты вектора поляризации.

В отличие от потенциала  $\phi$  напряженность электрического поля  $\mathbf{E}$  является векторной функцией, которая в каждой точке пространства характеризуется величиной поля и направлением. Связь между напряженностью и потенциалом  $\mathbf{E} = -\text{grad}\phi$  и применение соответствующей встроенной функции математического пакета прикладных программ для вычисления градиента позволяют определить компоненты  $(E_r, E_z)$  и значение модуля вектора напряженности

$$|\mathbf{E}| = \sqrt{(E_r)^2 + (E_z)^2}.$$

В диэлектриках внешнее электрическое поле способно смещать связанные заряды, перераспределяя плотность зарядов в объеме и создавая поляризованное состояние образца. Для количественного описания степени поляризации диэлектрика, индуцируемой инжекцией электронного пучка, используется вектор поляризации  $\mathbf{P}$ , для вычисления которого используем связь между вектором напряженности и вектором поляризации:

$$\mathbf{P} = (\varepsilon - 1)\varepsilon_0\mathbf{E}. \quad (17)$$

## Назначение и структура программного приложения

Для проведения вычислительного эксперимента по моделированию основных характеристик полевых эффектов инжектированных зарядов разработано программное приложение в пакете прикладных программ Matlab 7.0 [Young, Bang, 1996]. Программное приложение позволяет проводить расчет и визуализировать основные характеристики процесса зарядки: распределения потенциала, напряженности и поляризации в образце при заданных параметрах вычислительного эксперимента, соответствующих геометрическим размерам и диэлектрическим характеристикам модельного образца и режимам сканирования в РЭМ.

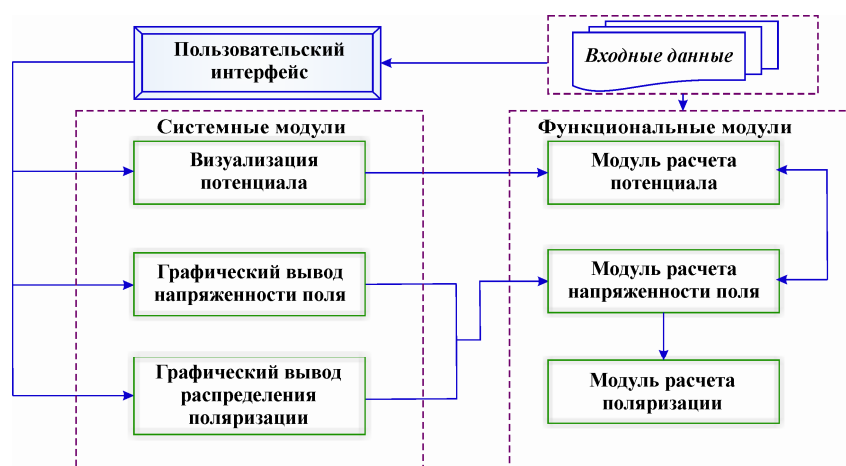


Рис. 3. Структура программного приложения

Обобщенная структура программного приложения показана на рисунке 3. В программном комплексе реализован пользовательский интерфейс, взаимодействующий с системными моду-

лями: 1) главной формой, предназначенной для удобства ввода входных параметров моделирования (с учетом результата расчета области взаимодействия пучка с мишенью методом Монте-Карло (этап I алгоритма) и аппроксимации согласно (8)) и графического представления потенциала; 2) формой для наглядного графического представления напряженности электрического поля; 3) формой для наглядного графического представления поляризации. Указанные системные модули взаимодействуют со следующими функциональными модулями: 1) модулями, предназначенными для расчета значений потенциала (этап II алгоритма); 2) модулем для расчета напряженности поля и поляризации (этап III алгоритма).

## Вычислительный эксперимент

*Инициализация параметров модели.* Для проведения вычислительного эксперимента необходимо определить первоначальное распределение зарядов, задать константы и характерные параметры, входящие в аналитическое описание математической модели. В качестве примера, интерпретирующего результаты моделирования, рассмотрим процесс переключения поляризации сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата под действием сфокусированного пучка электронов (параметры вычислительного эксперимента соответствуют данным физического эксперимента по переключению поляризации кристалла ТГС под действием электронного облучения [Масловская, Копылова, 2010]). Подзадача аппроксимации области взаимодействия пучка с облучаемой мишенью и первоначального распределения зарядов (этап I алгоритма) была решена с помощью возможностей программного приложения, разработанного для моделирования транспорта электронов в облучаемой мишени методом Монте-Карло. Графическое изображение потерь энергии электронов в модельном образце приведено на рисунке 4.

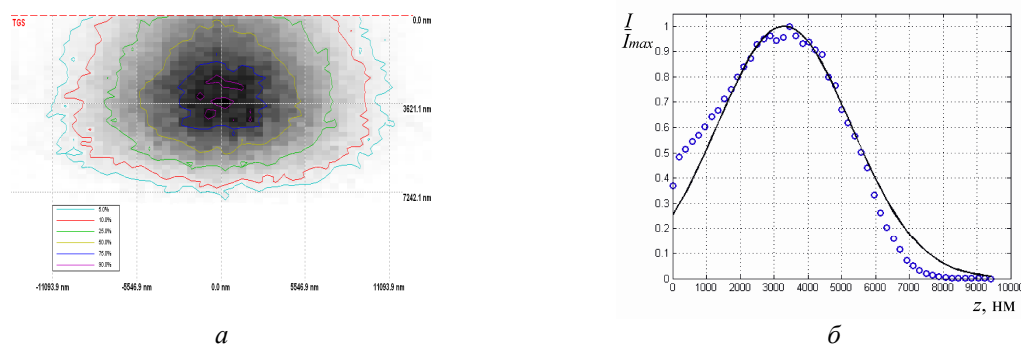


Рис. 4. а) Распределение потерь энергии электронов в модельном образце кристалла ТГС, б) аппроксимация (сплошная кривая) профиля распределения интенсивности внутреннего источника. Дискретный ряд значений (рис. б) получен с помощью обработки методом наименьших квадратов расчетных данных, показанных на рисунке а. Стартовая энергия пучка  $E_0 = 25$  кэВ, значение пороговой энергии  $E_s = 500$  эВ,  $N = 5000$  историй электронов, диаметр зонда  $d = 10$  мкм

Распределение начальной плотности накопленного заряда можно описать с помощью распределения Гаусса для локальной области согласно (8). При этом параметр  $z_{\max}$ , соответствующий максимуму интенсивности, можно положить равным 3.4 мкм. Для вычисления значения  $\rho_0$  необходимо оценить характерные экспериментальные параметры. Будем считать, что доза облучения соответствует значению поверхностной плотности инжектированного заряда  $\sigma_{surf} = 30$  мкКл/см<sup>2</sup> (при токе зонда  $I = 1$  нА). Численная оценка объема внутреннего источника, аппроксимируемого полуэллипсоидом с параметрами  $\delta_r, \delta_z$ , с помощью полученной геометрической визуализации (рис. 2) дает значение  $V \approx 1465$  мкм<sup>3</sup>. Прямой расчет количества набитого заряда в единицу объема с учетом знака позволяет принять  $\rho_0 = 2.05 \cdot 10^4$  Кл/м<sup>3</sup>.

Для организации вычислительного эксперимента необходимо определить значения параметров моделирования. Для этого были заданы физические константы и проведен расчет физи-



ческих параметров для кристалла ТГС: диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon = 50$ , коэффициент диффузии  $D = 0.1547 \text{ м}^2/\text{с}$ . Геометрические размеры модельного образца соответствовали значениям  $Z = 1 \text{ мм}$ ,  $R = 3 \text{ мм}$ , для оптимизации вычислительных процедур расчет и вывод результатов актуализированы для области, сравнимой с размерами зоны инжекции пучка.

Для определения соотношения между характерными величинами, имеющими размерности расстояний и времени, используем оценку масштаба времени  $\Delta t_{scale}$  по следующему безразмерному критерию:  $\Delta t_{scale} = (\delta_{scale})^2 / D$ , где  $\delta_{scale}$  — характерный масштаб расстояния, равный, например, глубине проникновения электронов в образец, м. Таким образом, для параметров данной модели получим, что размерное время, соответствующее безразмерному, будет величиной порядка  $\Delta t_{scale} \sim 10^{-10} \text{ с}$ . Однако для многих экспериментальных методик время воздействия составляет единицы секунд. Тогда в некотором приближении можно считать, что реализуется стационарный режим процесса зарядки диэлектрических образцов электронным зондом.

*Расчет основных характеристик процесса зарядки.* На рисунке 5 представлены результаты симуляции значения потенциала поля, созданного накопленным зарядом в модельном образце.

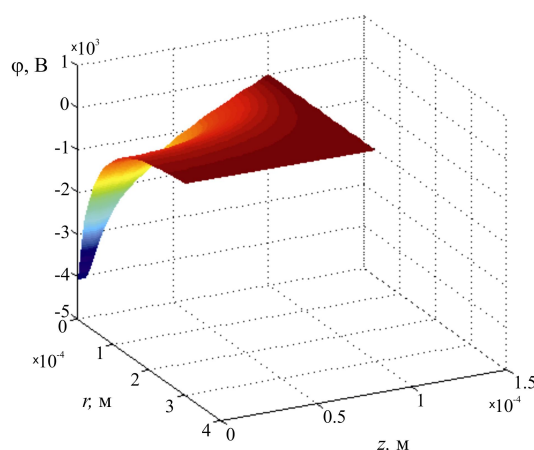


Рис. 5. Результаты моделирования пространственного распределения потенциала в образце кристалла ТГС ( $E_0 = 25 \text{ кэВ}$ ,  $\sigma_{surf} = 30 \text{ мкКл/см}^2$ )

Рисунок 6 иллюстрирует результат вычислений значений модуля напряженности поля, созданного в образце инжектированными зарядами.

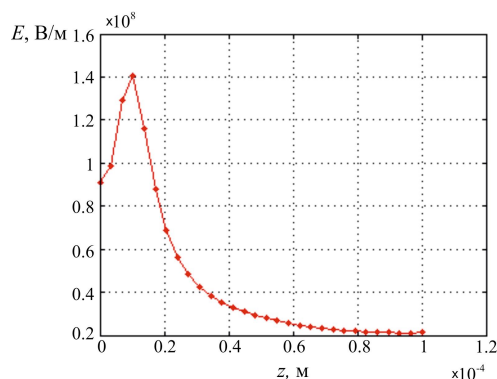


Рис. 6. Результат расчета профиля распределения абсолютного значения напряженности электрического поля, наведенного электронным облучением, по глубине кристалла ТГС ( $E_0 = 25 \text{ кэВ}$ ,  $\sigma_{surf} = 30 \text{ мкКл/см}^2$ )

Оценка рассчитываемых величин не может быть проведена с использованием прямых экспериментальных измерений, позволяющих наблюдать и одновременно регистрировать процесс

переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов в режиме токов электронно-стимулированной поляризации [Масловская, Копылова, 2010]. Для расчета полей, созданных инжектированными зарядами, в указанной методике был использован упрощенный подход, состоящий в применении выражения для напряженности поля заряженной бесконечной плоскости [Масловская, Копылова, 2009]:

$$E = \frac{\sigma_{surf}(L-l)}{\varepsilon\varepsilon_0 L}, \quad (18)$$

где  $l$  — глубина залегания заряда, рассчитываемая из эмпирического соотношения  $l = 6.4 \cdot 10^{-2} \rho^{-1} E_0^{1.7}$ , где  $E_0$  выражается в кВ,  $\rho$  — в г/см<sup>3</sup>.

Использование выражения (18) дает величину поля облученной части кристалла  $E \sim 5 \cdot 10^8$  В/м при данных значениях параметров эксперимента.

Предложенная математическая модель позволяет проводить моделирование электрических характеристик кристалла с использованием более адекватного подхода, состоящего в оценке геометрических параметров зоны инжекции с использованием прямого расчета транспорта электронов методом Монте-Карло и последующих вычислений потенциала и напряженности поля на основе фундаментальных представлений. Кроме того, проведение вычислительных экспериментов дает возможность определить параметры зондирования (тока зонда, энергии ускоряющего напряжения), при которых значение напряженности электрического поля в необлученной части кристалла достигает значения коэрцитивного поля и, как следствие, инициирует процессы переполяризации. Так, значение напряженности поля, созданного электронным пучком в зоне инжекции (рис. 6), сравнимо со значениями деполяризующих полей для монокристаллов ТГС ( $\sim 10^8$  В/м), при этом значения напряженности поля на границе с необлученной частью кристалла превышает значение коэрцитивного поля ( $\sim 2 \cdot 10^4$  В/м). Это означает, что при заданных параметрах эксперимента инжекция пучка электронов в образец приводит к накоплению заряда, поле которого способно инициировать интенсивные поляризационные процессы в ориентированных против поля доменах. Представленную модель также потенциально можно использовать для построения модели формирования поляризационного отклика кристалла в режиме инжекции электронов.

На рисунке 7 показан график зависимости  $|E_{max}|$  от энергии падающих электронов  $E_0$  для кристалла триглицинсульфата. При проведении вычислительного эксперимента значение поверхностной плотности зарядов  $\sigma_{surf}$  варьировалось ( $\sigma_{surf}$  определяет величину набитого заряда  $\Delta q$  в образец, что в свою очередь, контролируется в эксперименте величиной тока зонда  $I$ , временем облучения и площадью пятна на облучаемой поверхности).

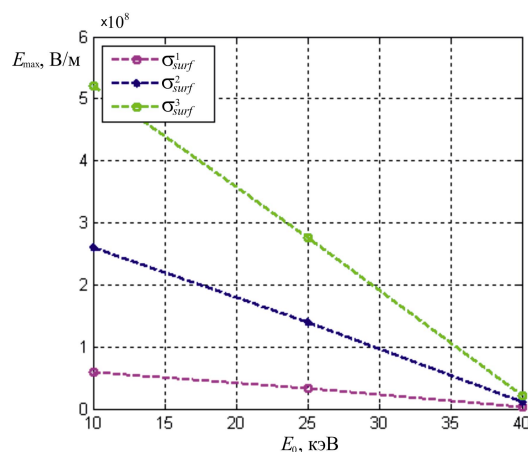


Рис. 7. График зависимости модуля максимального значения напряженности поля от энергии падающего излучения  $E_0$  для кристалла ТГС при значениях поверхностной плотности заряда  $\sigma_{surf}^1 = 7$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $\sigma_{surf}^2 = 30$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $\sigma_{surf}^3 = 60$  мкКл/см<sup>2</sup>

С увеличением значения энергии падающего излучения  $E_0$  уровни предельных значений величины  $E_{\max}$  уменьшаются. При увеличении значения  $E_0$  происходит увеличение геометрических размеров области инжекции пучка в образец (по данным симуляции транспорта электронов методом Монте-Карло) и, как следствие, увеличение объема внутреннего источника заряда  $\Delta V$ . Таким образом, перейти к контролируемым значениям характеристик зарядки можно, варьируя следующие параметры эксперимента: ток зонда  $I$ , определяющий величину «набитого» заряда  $\Delta q$  в образец и значение поверхностной плотности  $\sigma_{surf}$ , а также величину ускоряющего напряжения  $U$ , определяющую энергию падающего излучения  $E_0$  и, как следствие, объем внутреннего источника  $\Delta V$ .

## Заключение

Таким образом, предложенный вычислительный алгоритм реализации математической модели зарядки диэлектрика при электронном облучении позволяет проводить вычислительный эксперимент по исследованию основных закономерностей изменения электрических характеристик образцов при заданных параметрах экспериментального наблюдения.

Построенная схема численного решения задачи основана на комбинированном подходе, использующем стохастическое моделирование транспорта электронов методом Монте-Карло и конечно-элементный метод решения краевой задачи для уравнения с частными производными эллиптического типа. Программная реализация модели, соответствующей установившемуся режиму, предоставляет возможность оценки объемного распределения потенциала, напряженности электрического поля, поляризации облученного материала.

Проведение вычислительного эксперимента показало, что электронный зонд способен стимулировать процесс переполаризации необлученной части сегнетоэлектрического образца, что принципиально позволяет решать обратную модельную задачу: исследовать условия (подбирать оптимальные режимы зондирования полярных диэлектриков), при которых возможно переключение поляризации, индуцированное электронным зондом. Следует также отметить, что детальное исследование динамических характеристик процесса зарядки требует решения задачи в общей, нестационарной постановке с привлечением численных методов решения эволюционных задач математической физики.

Работа выполнена при финансовой поддержке выполнения государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания Амурскому государственному университету. Проект № 1158.2014 «Исследование электрических и тепловых процессов в неоднородных диэлектрических структурах».

## Список литературы

- Кортон В. С., Звонарёв С. В. Моделирование методом Монте-Карло транспорта электронов в заряженных при облучении кристаллических диэлектриков // Математическое моделирование. — 2009. — Т. 20, № 6. — С. 79–85.
- Масловская А. Г. Физико-математическое моделирование индуцированной электронным зондом зарядки сегнетоэлектриков в процессе переключения доменной структуры // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2013. — № 7. — С. 84–88.
- Масловская А. Г., Копылова И. Б. Взаимодействие электронных пучков средних энергий с сегнетоэлектрическими материалами. — Владивосток: Изд-во «Дальнаука», 2010. — 204 с.
- Масловская А. Г., Копылова И. Б. Исследование процесса переполаризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2009. — Т. 136, Вып. 1(7). — С. 105–109.

- Сегерлинд Л. Дж.* Применение метода конечных элементов. — М.: Мир, 1979. — 388 с.
- Сивунов А. В., Масловская А. Г.* Компьютерное моделирование области взаимодействия пучков электронов с облученными сегнетоэлектрическими материалами // Вестник Иркутского государственного технического университета. — 2013. — № 3. — С. 73–79.
- Czyzewski Z., MacCallum D. O., Roming A., Joy D. C.* Calculations of Mott scattering cross section // J. Appl. Phys. — 1990. — Vol. 68. — P. 3066–3072.
- He J., Tang S. H., Qin Y. Q., Dong P., Zhang H. Z., Kang C. H., Sun W. X., Shen Z. X.* Two-dimensional structures of ferroelectric domain inversion in LiNbO<sub>3</sub> by direct electron beam lithography // J. Appl. Phys. — 2003. — Vol. 93. — P. 9943–9947.
- Joy D.C.* Monte-Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis. — New York: Oxford University Press, 1995. — 198 p.
- Molina P., Ramírez M. O., García-Sole J., Bausá L. E.* Effect of electron beam writing parameters for ferroelectric domain structuring LiNbO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> // Optical Materials. — 2009. — Vol. 31. — P. 1777–1780.
- Suga H., Tadokoro H., Kotera M.* A simulation of electron beam induced charging-up of insulators // Electron microscopy. — 1998. — Vol. 1. — P. 177–178.
- Young W. K., Bang H.* Finite Element Method Using MATLAB (Mechanical Engineering) // CRC-Press. — 1996. — 544 p.