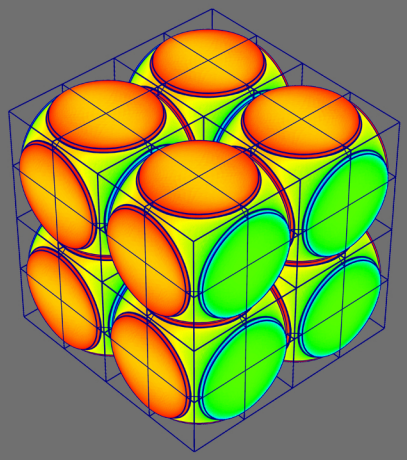
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Павельчук А.В., Масловская А.Г. Численное стохастическое моделирование транспорта электронов в облученных сегнетоэлектрических материалах. Математическое моделирование и численные методы, 2018, № 2, с. 3–20.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/160/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.217.22
18.11.2026 12:59:48

УДК 519.245:004.942

Численное стохастическое моделирование транспорта электронов в облученных сегнетоэлектрических материалах

© А.В. Павельчук, А.Г. Масловская

Амурский государственный университет, Благовещенск, 675027, Россия

В статье представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования, предназначенной для анализа характеристик процессов инжекции электронов при диагностике и модификации сегнетоэлектриков методами растровой электронной микроскопии. Дискретно-стохастическая модель электронных траекторий основана на физической модели однократных взаимодействий. Вычислительная схема реализации математической модели сконструирована с использованием концепции метода Монте-Карло. Предложено программное приложение, которое позволяет проводить оценку характеристик инжекционных эффектов электронных пучков в типичных сегнетоэлектриках. На основе данных вычислительных экспериментов представлены спецификация геометрических параметров области взаимодействия электронного пучка с мишенью и аналитическое выражение для распределения потерь энергии электронов. Установлены соотношения параметров модели, которые требуется учитывать для управления полевыми эффектами инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках.

Ключевые слова: *система имитационного моделирования, метод Монте-Карло, электронное облучение, сегнетоэлектрик, транспорт электронов, вычислительный эксперимент, характеристики процесса инжекции.*

Введение. Моделирование на основе метода Монте-Карло занимает одну из ведущих позиций в теории и практике математической формализации стохастических систем, отклик которых можно предсказать только в вероятностном смысле. В настоящее время известен широкий ряд математических моделей сложных физических систем, для реализации которых успешно применяют метод статистических испытаний [1-2].

Одной из актуальных прикладных задач, использующих численное стохастическое моделирование методом Монте-Карло, является компьютерная симуляция электронных траекторий и расчет потерь энергии электронов в облученном материале, диагностируемом с помощью аналитических методов растровой электронной микроскопии (РЭМ). Использование режимов РЭМ для исследования и модификации свойств различных функциональных материалов предполагает регистрацию отклика, который является результатом воздействия пучка электронов средних энергий (1-40 кэВ) на объект. Основу для регистрации различного рода сигналов при взаимодействии сфокусированного или расфо-

кусированного электронного зонда с твердотельной мишенью составляет большое число сопутствующих явлений: вторичные и отраженные электроны, характеристическое и тормозное рентгеновское излучение, Оже-электроны, колебания решетки (фононы), электронные колебания, электронно-дырочные пары, катодолюминесценция [3].

Проводя математическое моделирование транспорта электронов методом статистических испытаний можно получить оценки характеристик указанных процессов: геометрия области взаимодействия пучка с мишенью, глубина инжекции, коэффициент вторичной электронной эмиссии, координатные зависимости функции потерь энергии электронами и др. Внимание различных исследователей к компьютерному моделированию случайных блужданий электронов связано со бурным развитием математического и программного обеспечения вычислительных систем. Усовершенствование характеристик микропроцессоров и увеличение объемов оперативной памяти позволяют реализовывать трехмерные модели транспорта электронов, анализировать механизмы процесса рассеяния электронов, прогнозировать эффекты последействия электронного облучения на материалы различного предназначения.

На сегодняшний день известен широкий ряд научных работ, посвященных разработкам, программным реализациям и практическому применению метода Монте-Карло для моделирования транспорта электронов в конденсированных средах с учетом специфики исследуемых объектов, режимов экспериментального наблюдения, симметрии и размерности задачи, теоретических основ, лежащих в основе физических моделей процессов, а также модификаций алгоритмов метода Монте-Карло [4-9]. Для моделирования траекторий электронов и анализа процессов инжекции в твердотельных средах исследователи различных направлений предлагают программные комплексы, как например, NISTMonte, WinXRay, CASINO [10], Penelope [11], MC-SET [12] и др.

Одним из важнейших производных эффектов, вызванных инжекцией электронного пучка в диэлектриках, является явление зарядки [13]. Следует заметить, что долгое время эффект зарядки при исследовании полярных диэлектриков методами РЭМ считался «паразитным» и для снижения его влияния использовали пониженные ускоряющие напряжения, островковые покрытия граней кристалла, предварительную обработку поверхности образца, импульсный режим облучения и др. Однако, именно эффект зарядки был положен в основу управляемого переключения поляризации доменов сегнетоэлектриков под действием электронного зонда РЭМ [14-17]. Особую актуальность данная задача приобрела в связи с одним из направлений доменной инженерии – необходимостью создания и стабилизации доменных структур микро-, субмикро- и наноразмерных масштабов. Одной из пионерских работ в этом направлении считается работа автора [14], который предложил

применить электронный луч РЭМ для управляемого электронно-индуцированного переключения поляризации в сегнетоэлектрике – ниобате лития. В последствии ряд авторов использовали эту концепцию для различных кристаллов, способов визуализации доменов и условий электронного зондирования [15-17].

Для анализа полевых эффектов инжектированных зарядов и исследования условий электронно-стимулированного переключения поляризации в сегнетоэлектриках требуется информация относительно аналитического задания геометрии и функции внутреннего источника, действующего в объекте в результате инжекции электронного пучка [18-19]. Серия авторских работ посвящена моделированию полевых эффектов, индуцированных электронным облучением в сегнетоэлектриках (например, [19]). Решение подобных задач обуславливает специфику предметной области и требует создания программного обеспечения, позволяющего проводить расчет транспорта электронов в облученных сегнетоэлектрических материалах. Поэтому данная работа направлена на разработку системы компьютерного моделирования и применение технологии вычислительного эксперимента для анализа инжекционных эффектов в сегнетоэлектрических материалах в условиях электронно-стимулированного переключения поляризации.

Постановка задачи и методика стохастического моделирования транспорта электронов в облученном материале.

В основе математической модели, формализующей процесс формирования электронных траекторий в облученных твердотельных мишенях, лежат принципы физической модели однократных взаимодействий электронов с образцом. Методика численного стохастического моделирования транспорта электронов представляет один из вариантов реализации метода Монте-Карло.

Пусть электрон, обладающий некоторой энергией старта E_0, падает перпендикулярно плоскости поверхности образца в некоторую точку P_0 облучаемой области, как показано на рис. 1.

Облучаемое пятно на верхней грани образца определяется окружностью с диаметром d. Положение электрона в точке P_i задается с использованием значений углов рассеяния: ω_i – азимутального угла и φ_i – угла отклонения. Электрон может испытывать упругие или неупругие соударения и может быть отражен обратно из образца. Взаимодействие упругого типа вызывает изменение направления движения электрона без изменения его энергии, неупругого – приводит к уменьшению энергии при незначительном изменении траектории.

Тип взаимодействия определим не равновероятно после каждого акта рассеяния с помощью равномерно распределенных случайных чисел R. Принимая во внимание закономерности упругого и неупругого рассеяния электронов в приповерхностной части кристалла и в

основном объеме образца [4-5] весь объем образца разделим на две части плоскостью, параллельной плоскости z=0. Для организации случайных блужданий в верхней части, соответствующей 5 % объема образца, расширим доверительный интервал для неупругого взаимодействия, принимая $R \in (0.2;1)$. Соответственно для упругого взаимодействия $R \in (0;0.2)$. При расчете траектории электрона в нижней части (95 % объема) увеличим вероятность упругого взаимодействия, расширив интервал аналогичным образом.

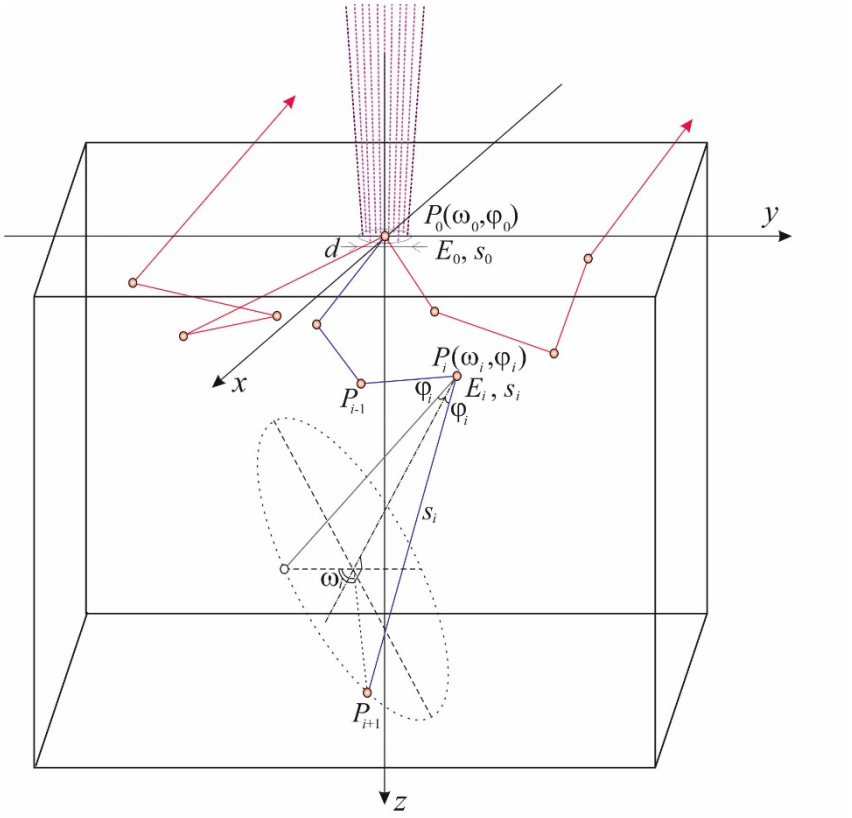


Рис. 1. Схематическое представление траекторий движения электронов.

Расчет углов при изменении траектории электронов также основан на схеме случайного выбора. Зафиксируем диапазон варьирования значений угла отклонения φ при упругом взаимодействии – $[2°,30°]$. В расчетной схеме примем, что углы отклонения генерируются в диапазоне $[2°,10°]$ с большей вероятностью (равной 0.8), а углы из диапазона $(10°,30°]$ – с меньшей (соответственно равной 0.2). При неупругом взаимодействии отклонение электрона происходит на малый

угол φ, устанавливаемый из диапазона $[0°, 2°]$. Азимутальный угол ω также вычислим, используя равномерно распределенное случайное число R: $\omega = 2\pi R$.

Длину отрезка пути s_i, проходимого электроном с энергией E_i между актами рассеяния, можно оценить согласно известному выражению [4]:

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

где $\xi \in (0,1)$ – равномерно распределенная случайная величина; A_k – атомный вес, г/моль; σ_k – сечение рассеяния, см^2; ω_k – массовая концентрация k-го элемента; M – число элементов, входящих в состав вещества; N_0 – число Авогадро, моль$^{-1}$; ρ – плотность, г/см^3.

Полное сечение рассеяния σ_k рассчитывается согласно формуле модельного сечения Мотта [6]:

$$\sigma_k^{Mott} = \frac{a_1 \left(Z_k^{1,33} + a_2 Z_k^2 \right)}{\left(E + a_3 Z_k^{1,33} E^{0,5} \right) \left(1 - a_4 Z_k^{0,3} \exp\left(-u_k^2 \right) \right)}, \text{ см}^2, \tag{2}$$

где Z_k – атомный номер k-го элемента; эмпирические коэффициенты: $a_2 = 0,032$, $a_4 = 0,02$, $u_k = \lg\left(a_5 \cdot E \cdot Z_k^{-1.33} \right)$, $a_1 = 4,7 \cdot 10^{-18}$ в см^2·кэВ, $a_3 = 0,0155$ в (кэВ)^{0,5} и $a_5 = 8$ (кэВ)$^{-1}$; E выражается в кэВ.

Расчет траектории электрона в трехмерной модели основан на следующем алгоритме. Пусть текущая позиция электрона задается координатами $\left(x^i, y^i, z^i \right)$, а направление определяется единичным вектором $\vec{r}^{\,i} \left(\cos\alpha^i, \cos\beta^i, \cos\gamma^i \right)$. В начальный момент времени траектория электрона соответствует значению $\vec{r}^{\,0} \left(0, 0, -1 \right)$. Новую позицию электрона определим в соответствии с выражением:

$$\begin{cases} x^{i+1} = x^i + \cos\alpha^{i+1} \cdot s, \\ y^{i+1} = y^i + \cos\beta^{i+1} \cdot s, \\ z^{i+1} = z^i + \cos\gamma^{i+1} \cdot s, \end{cases} \tag{3}$$

где s – длина пути, проходимого электроном между соударениями, (1).

Значения направляющих косинусов измененного направления

движения электрона $\vec{r}^{\,i+1}\left(\cos\alpha^{i+1},\cos\beta^{i+1},\cos\gamma^{i+1}\right)$ можно выразить через предшествующие значения направляющих косинусов, значений угла отклонения φ и азимутального угла ω с использованием процедуры преобразования координат в пространстве при изменении базиса. После ряда преобразований получим: если $\left|\cos\gamma^{i+1}\right|>0.9999$, то $\cos\alpha^{i+1}=\cos\omega\cdot\sin\varphi$, $\cos\beta^{i+1}=\sin\omega\cdot\sin\varphi$, $\cos\gamma^{i+1}=\dfrac{\cos\varphi\cdot\cos\gamma^{i}}{\left|\cos\gamma^{i}\right|}$, во всех остальных случаях:

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

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

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

Изменение энергии электронов *E* на пути *s* при неупругом рассеянии вычислялось с использованием закона Бете, модифицированного к случаю многокомпонентных материалов [5]:

$$\frac{dE}{ds}=-C\cdot\frac{\rho}{E}\cdot\sum_{k=1}^{M}\omega_k\frac{Z_k}{A_k}\ln\left(\frac{b_1\left(E+b_2\cdot J_k\right)}{J_k}\right),\ \text{кэВ/см},\qquad(4)$$

где $J_k=\left(9,76\,Z_k+58,5Z_k^{\,-0,19}\right)\cdot10^{-3}$ – эмпирическое соотношение для оценки эффективного потенциала ионизации *k*-го элемента (соотношение Бергера-Слетзера) в кэВ; $C=78.5\cdot10^{3}$ – комплекс констант, имеющий общую размерность (кэВ)^2(см)^2/моль; $b_1=1{,}166$, $b_1=0{,}8$ – безразмерные параметры.

Уравнение (4), дополненное начальным условием (предыдущее значение энергии электрона), решалось численно с использованием метода Рунге-Кутты IV порядка. Расчет траектории и потерь энергии для каждого электрона проводится, пока величина его энергии не уменьшится до порогового значения (E_{th}~0.05 кэВ), при которой моделируемые процессы не проявляются. Компьютерная модель реализуется для статистически большого числа *N* историй электронов, достаточного для представления области взаимодействия пучка с мишенью. Как правило, прослеживается от 1000 до 10000 историй электронов [10-12]. С целью экономии вычислительных затрат визуализации может подлежать меньшее число электронов $\tilde{N}$ (число *N* кратно числу

$\tilde{N}$).

Аналитическое описание геометрии области и аппроксимация функции потерь энергии электронами в образце. Результаты моделирования области взаимодействия электронного зонда с веществом, полученные с помощью метода Монте-Карло, могут быть использованы в качестве исходных данных для расчета характеристик полевых процессов воздействия электронных пучков на исследуемые материалы [18-19]. Определение пространственного распределения внутреннего источника требует задания геометрии области взаимодействия электронного пучка с облучаемой мишенью. Для оценки потерь энергии электронами расчетная область покрывалась равномерной сеткой. Далее проводился расчет среднего значения энергии всех электронов, которые в результате случайных блужданий оказались в области пространства, ограниченного каждым кластером сетки:

$$E_l^{av} = \sum_{i=1}^{n} E_i \Big/ n, \tag{5}$$

где n – количество электронов, приходящихся на один кластер; E_i – значения их энергий в результате рассеяния, кэВ.

Решение полевых задач может строиться с использованием двух вариантов численных схем представления внутреннего источника в объекте: использовать прямой численный расчет потерь энергии в объекте (хранение структуры данных), либо использовать аналитическое представление для накопленной дозы облучения. В последнем случае требуется ввести пространственное распределение потерь энергии электронами в веществе на основе некоторых аппроксимирующих функциональных зависимостей. При этом следует учесть, что максимум электронной плотности приходится не на точку падения зонда. Рассмотрим аппроксимацию выделенной энергии с помощью нормального распределения:

$$I = I_0\left(1-\eta\right)\exp\left(-\frac{\left(\bar{r}-\delta_1\right)^2}{2\cdot\delta_2{}^2}\right),\ \bar{r} = \sqrt{x^2+y^2+z^2}\ , \tag{6}$$

где I_0 – нормировочный множитель, имеющий физическую размерность, соответствующую полевой задаче; δ_1, δ_2 – параметры, вычисленные с помощью обработки данных методом наименьших квадратов, в единицах размерности $\bar{r}$; η – коэффициент вторичной

электронной эмиссии (ВЭЭ), рассчитываемый как отношение числа покинувших образец электронов к общему числу падающих электронов.

Программное приложение для имитационного моделирования процессов инжекции в облученных электронами полярных диэлектриках. Представим формальное описание приведенного выше алгоритма стохастического моделирования транспорта электронов в облученной твердотельной мишени в виде блок-схемы, как показано на рис. 2.

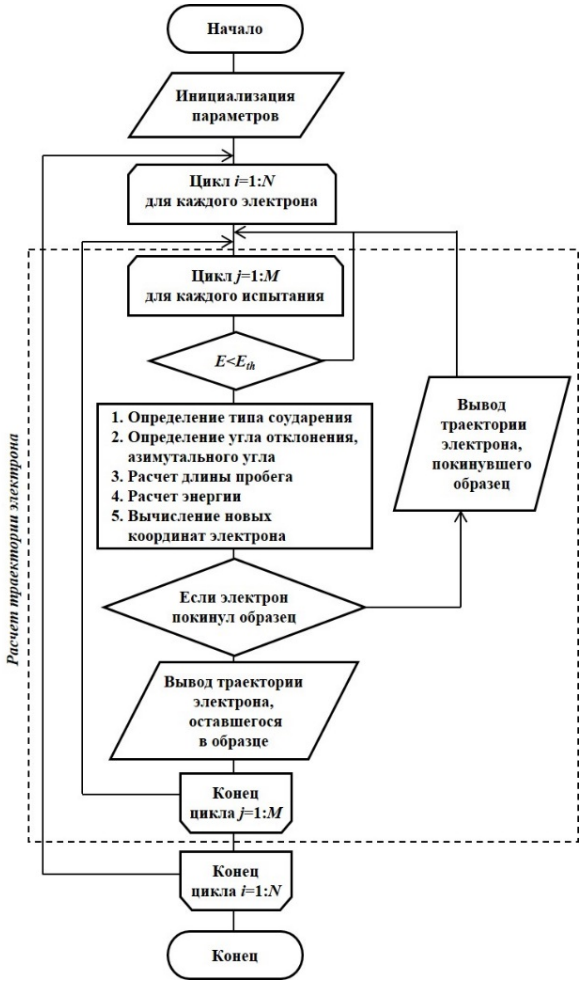


Рис. 2. Блок-схема алгоритма расчета траекторий электронов

Для компьютерного моделирования характеристик процессов инжекции электронов в облученных сегнетоэлектриках разработано программное приложение, в основе которого лежит реализация сконструированного алгоритма расчета транспорта электронов методом Монте-Карло. Программное приложение реализовано в среде

Matlab R2014b и является функциональным модулем комплекса программ расчета инжекционных и полевых эффектов взаимодействия электронных пучков средних энергий с полярными диэлектриками. Общий вид главной оконной формы приложения показан на рис. 3.

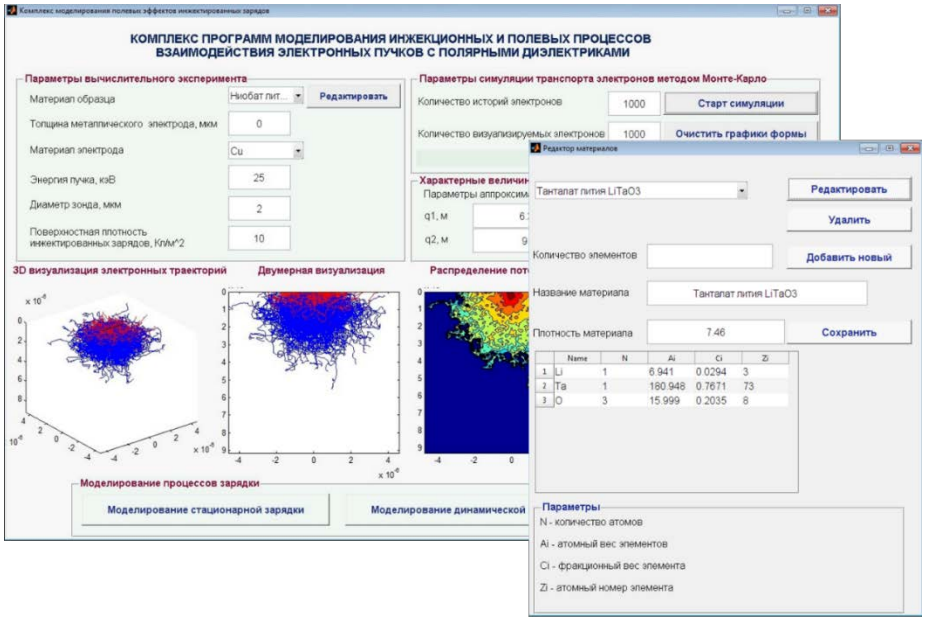


Рис. 3. Общий вид главного окна интерфейса комплекса программ

Программный модуль позволяет визуализировать область взаимодействия электронного пучка с мишенью (в 3D-формате и в виде выбранных двумерных проекций) и осуществлять аппроксимацию нормированной функции потерь энергии электронами при заданных параметрах вычислительного эксперимента, соответствующих режимам сканирования в РЭМ, геометрическим размерам и физическим характеристикам модельного образца с возможностями добавления, редактирования и удаления материалов из созданной базы. Программный комплекс обладает дружественным интерфейсом, возможностью гибкой настройки режимов вычислительного эксперимента и необходимым функционалом для решения рассматриваемого класса задач.

Как известно, что как в свободно-распространяемом программном обеспечении (например, в программах моделирования транспорта электронов CASINO [10], PENELOPE [11]), так и в коммерческом (например, в программе MC-SET [12]) программный код скрыт от пользователя. Это лишает исследователя возможности управления процессом вычислений и ограничивает расширение функционала программ для анализа эффектов последействия электронного облучения на исследуемые объекты. Программный модуль несколько уступает

известным продуктам в плане универсальности, поскольку те, в свою очередь, ориентированы на широкий класс задач, включают обширные банки данных материалов и предлагают выбор различных модельных сечений. Разработанный комплекс программ ориентирован на диагностику сегнетоэлектриков и обладает преимуществом авторского программного обеспечения, поскольку позволяет решать задачи интеграции отдельных модулей, основанных на реализации гибридных вычислительных схем дискретно-стохастического моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло и непрерывно-детерминированного моделирования полевых эффектов инжектированных зарядов на основе сеточных методов. Проверка адекватности результатов моделирования проведена путем сопоставления данных вычислительных экспериментов, проведенных с помощью авторского приложения, с данными литературного источника [5] и с данными, полученными с помощью программ CASINO [10] и PENELOPE [11] для тестовых объектов (серебро и золото). В нашем случае указанные металлы представляют проводящие покрытия (электроды) и их характеристики также присутствуют в базе материалов.

Вычислительные эксперименты и анализ результатов. В качестве объектов для проведения и интерпретации результатов вычислительных экспериментов выбраны типичные сегнетоэлектрические материалы: ниобат лития $LiNbO_3$ и танталат лития $LiTaO_3$, как одни из наиболее известных представителей класса полярных диэлектриков, имеющих перспективные приложения в микроэлектронике и оптике. Выбор также обусловлен известной практикой применения методик РЭМ для исследования и модификации их свойств. Для определенности будем считать, что образцы сегнетоэлектриков действует сфокусированный пучок электронов; параметры зондирования соответствуют данным физического эксперимента по исследованию управляемого переключения в кристаллах ниобата и танталата лития [14-17]. Схематическое представление инверсии полярной структуры в экспериментальных методиках показано на рис. 4 (направление векторов спонтанной поляризации в частях кристалла **Ps** и компоненты напряженности поля **E** показаны стрелками). Ниобат лития и танталат лития имеют 180° доменную структуру. Электронный пучок, проникая на некоторую глубину, создает в объекте объемный заряд, неравновесная концентрация которого приводит к появлению поля в облученной части кристалла $\mathbf{E}_1$, которое, в свою очередь, инициирует поляризационные процессы в основном объеме сегнетоэлектрика. Домен, с ориентацией вектора спонтанной поляризации “tail-to-beam” – «хвост-к-лучу», оказавшийся в зоне поля $\mathbf{E}_2$, переориентируется по направлению этого поля. Таким образом, управляемое локальное переключение доменов за счет зарядки электронным зондом позволяет

создавать периодические доменные структуры.

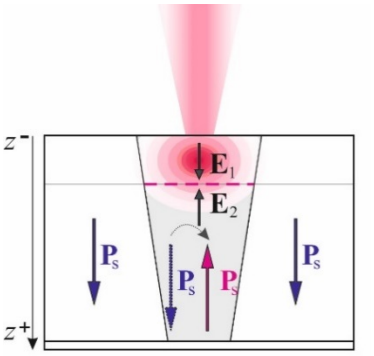


Рис. 4. Схематическое представление процесса электронно-индуцированного переключения доменов в $LiNbO_3$ и $LiTaO_3$

Основные параметры и их базовые значения, подлежащие инициализации для проведения вычислительных экспериментов по моделированию транспорта электронов, обобщены в табл. 1. На рис. 5 представлен результат компьютерного моделирования электронных траекторий методом Монте-Карло для кристалла $LiTaO_3$ при стартовой энергии пучка E_0=25 кэВ. Анализ вычислительных экспериментов, проведенных для типичных сегнетоэлектриков при значениях начальной энергии электронных пучков E_0=5-30 кэВ, показывает, что область взаимодействия пучка с образцами может быть аппроксимирована половиной эллипсоида с характерными геометрическими параметрами – δ_x, δ_y, δ_z.

Таблица 1

Основные параметры имитационного моделирования

Наименование параметра	Обозначение	Единица измерения	Значения параметра для модельных объектов	
			$LiNbO_3$	$LiTaO_3$
Параметры зондирования				
Энергия падающего излучения	E_0	кэВ	5-30	
Ток зонда	I	нА	0,1-1	
Диаметр зонда	d	мкм	1-5	
Поверхностная плотность заряда	σ_{surf}	Кл/м^2	1-20	
Физические параметры объектов				
Плотность материала	ρ	г/см^3	4,65	7,46
Диэлектрическая проницаемость	ε		30	44
Толщина металлического электрода	d_s	мкм	0,001-1	
Параметры управления вычислительным процессом				
Пороговая энергия	E_{th}	кэВ	0,05	
Количество симулируемых электронов	N	ед.	1000-10000	
Количество электронов для визуализации	$\tilde{N}$	ед.	100-1000	

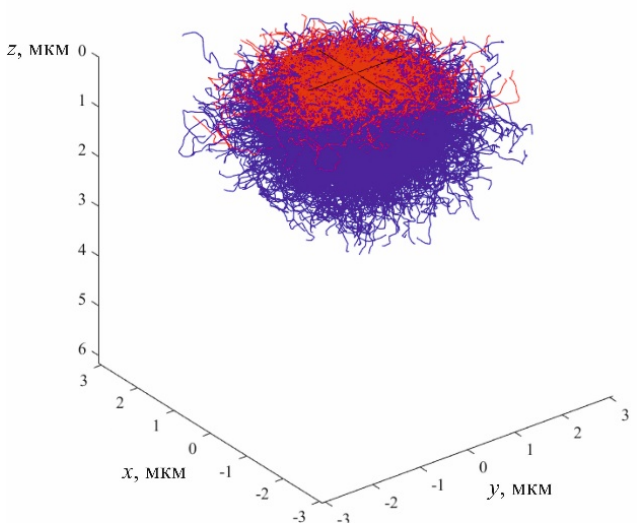


Рис. 5. Распределение траекторий электронов в танталате лития $LiTaO_3$ (E_0=25 кэВ, d=2 мкм, N=10000, $\tilde{N} = 5000$)

Вычислительный эксперимент по расчету транспорта электронов в двуслойной среде «металл-сегнетоэлектрик» моделирует инжекционные эффекты при исследовании объектов с помощью экспериментальных методик, предполагающих нанесение на верхнюю грань кристалла проводящего покрытия. В качестве металлических электродов чаще всего используют серебро, золото или алюминий. Компьютерное моделирование позволяет установить максимальное значение для толщины проводящего покрытия. В этом случае, при толщине покрытия d_s<0,5 мкм металлический электрод можно считать «прозрачным» – его наличие не меняет распределение электронных траекторий и, следовательно, не будет оказывать влияние на стимулированные электронным облучением процессы переключения поляризации в сегнетоэлектрике.

Параметры геометрической аппроксимации области взаимодействия для нескольких вычислительных экспериментов при вариации значения стартовой энергии пучка приведены в табл. 2.

Для сравнения представлены данные оценки средней глубины проникновения электронов по эмпирическому соотношению, предложенному в работе [20]:

$$R_{cp} = \nu \cdot \frac{E_0^{1.45}}{\rho^{0.91}}, \text{ нм.} \qquad (7)$$

где ρ – плотность, г/см^3; E_0 – энергия электронов, кэВ; $v = 93.4$ – константа аппроксимации (эмпирический коэффициент).

Таблица 2

Характеристики процесса инжекции электронов в образцы сегнетоэлектриков ниобата и танталата лития

Характеристика	Образец при стартовой энергии пучка электронов			
	$LiNbO_3$		$LiTaO_3$	
	E_0 = 10 кэВ	E_0 = 30 кэВ	E_0 = 10 кэВ	E_0 = 30 кэВ
Параметры аппроксимации $\delta_x = \delta_y$, мкм	0,96	2,40	0,80	1,75
Параметр аппроксимации δ_z, мкм	0,60	3,50	0,35	2,50
Оценка глубины инжекции электронов R_{cp} по формуле (7), мкм	0,6501	3,1974	0,4228	2,0796
Коэффициент ВЭЭ, η	0,217	0,251	0,342	0,392

Для аналитического представления функции потерь энергии на основе соотношения (6) (без учета коэффициента ВЭЭ) проведем аппроксимацию полученного профиля функции потерь энергии электронов с помощью метода наименьших квадратов. Модельное представление нормированной зависимости распределения дозы облучения для танталата лития показано на рис.6.

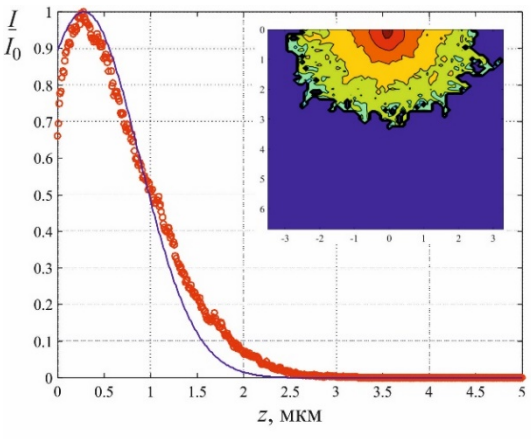


Рис. 6. Нормированное распределение по глубине функции потерь энергии электронами в образце $LiTaO_3$ (на вставке – двумерное представление) при параметрах: E_0=25 кэВ, $N = \tilde{N} = 5000$, d=2 мкм

Параметры аппроксимации соответствуют значениям: δ_1=0,282 мкм, δ_2=0,595 мкм, а значение глубины, на которой наблюда-

ется максимум энерговыделения – z_{max}≈0,3 мкм. Величина среднеквадратичного отклонения составила 0,024.

Задача управления параметрами в режимах электронно-индуцируемого переключения поляризации сегнетоэлектриков вызывает необходимость контролировать полевые эффекты инжектированных зарядов. При оценке объемной плотности внутреннего источника зарядов $\rho_0 = \Delta Q/\Delta V$, Кл/м^3, величина полного инжектированного заряда ΔQ будет зависеть от поверхностной плотности зарядов σ_{surf} и объема внутреннего источника, который будет увеличиваться с ростом стартовой энергии пучка. Первый параметр можно варьировать за счет изменения тока зонда I или времени облучения Δt, второй – контролируя значения ускоряющих напряжений. В данном рассмотрении ограничимся упрощенной оценкой полевых характеристик инжектированных зарядов в предположении использования пучка электронов достаточно большого диаметра (d>10 мкм). Данное приближение оправдано тем фактом, что глубина проникновения электронов не зависит от диаметра пятна на поверхности. Абсолютное значение напряженности поля, созданного системой заряженных плоскостей, может быть оценена согласно выражению:

$$E = -\frac{\sigma_{surf}}{\varepsilon\varepsilon_0}\frac{\delta_z}{L}, \qquad (8)$$

где δ_z – глубина проникновения заряда, м; L – толщина кристалла, м; ε_0 – диэлектрическая постоянная, Ф/м; ε – диэлектрическая проницаемость материала.

Вычислим абсолютные значения напряженности поля, созданного в необлученной части кристалла, при следующих параметрах: ускоряющие напряжения U=25 кВ (соответственно, энергия старта E_0=25 кэВ), ток зонда I=10^{-9} А (поверхностная плотность зарядов σ_{surf}=20 Кл/м^2, толщина кристалла L=1 мм). Получим для кристалла ниобата лития значение напряженности поля E=2,1·10^8 В/м, для танталата лития – E=0,92·10^8 В/м, что на порядок превышает значения коэрцитивных полей для этих кристаллов E_{coer}≈2·10^7 В/м. Заметим, что более адекватное описание полевых эффектов при инжекции электронного зонда требует решения полевой задачи на основе сеточных методов [19]. Тем не менее, приведенный пример наглядно демонстрирует, что процессы инжекции электронов при определенных условиях способны инициировать инверсию доменов в необлученной части сегнетоэлектрика. Результаты моделирования характеристик инжекции электронных пучков способствуют оптимальному выбору управляю-

щих параметров при использовании методик электронно-стимулированной модификации доменной структуры сегнетоэлектриков.

Заключение. Таким образом, в работе представлены результаты разработки специализированного программного обеспечения, предназначенного для компьютерного моделирования характеристик процессов инжекции электронов при диагностике и модификации сегнетоэлектриков методами растровой электронной микроскопии. Программный модуль позволяет визуализировать область взаимодействия электронного пучка с мишенью и осуществлять аппроксимацию нормированной функции потерь энергии электронов при наборе параметров, отвечающих условиям эксперимента. Вычислительные эксперименты продемонстрированы на примере кристаллов ниобата и танталата лития при параметрах, отвечающих условиям электронно-индуцированной инверсии полярной структуры. Установлены геометрические параметры области взаимодействия пучка с мишенью, проведена аппроксимация функции потерь энергии электронами в объектах, указаны соотношения управляющих параметров моделирования, которые требуется учитывать для контроля полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Applications of Monte Carlo method in science and engineering*. Edit-ed by S. Mordechai, InTech Publ., 2011. – 964 p.

[2] Краснов И.К., Мозжорина Т.Ю., Джус Д.В. Численное статистическое моделирование процесса обтекания летательных аппаратов потоком разреженного газа. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 3 (15), С. 71-82.

[3] *Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применение*. Под ред. У. Жу, Ж.Л. Уанга. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 600 с.

[4] Аккерман А.Ф. *Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе*. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 200 с.

[5] Joy D.C. *Monte-Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis*. – New York: Oxford University Press, 1995. – 216 p.

[6] Czyzewski Z., MacCallum D.O., Roming A., Joy D.C. Calculations of Mo scattering cross section. *J. Appl. Phys.*, 1990, v. 68, p. 3066-3072.

[7] Zhang H. Monte Carlo study on electron emission from dielectric materials. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 2017, v. 46, p. 330-345.

[8] Кортов В.С., Звонарев С.В. Моделирование методом Монте-Карло транспорта электронов в заряженных при облучении кристаллических диэлектриков. *Математическое моделирование*, 2008, Т. 20, № 6, С. 79-85.

[9] Жуплев А.С., Прохоров И.В., Яровенко И.П. Статистическое моделирование транспорта электронов в задачах визуализации неоднородных сред. *Дальневосточный математический журнал*, 2014, т. 14, № 2, с. 217-230.

[10] Demers H., Poirier-Demers N., Couture A.R., Joly D., Guilmain M., de Jonge N., Drouin D. Three-dimensional electron microscopy simulation with the CASINO Monte Carlo software. *Scanning*, 2011, v. 33, no 3, p. 135-181.

[11] *pyPENELOPE* [электронный ресурс], URL: http://pypenelope. source-forge.net/index.html (дата обращения 17.01.2018).
[12] *MC-SET simulation web site* [электронный ресурс], URL: http://www.mc-set.com> (дата обращения 17.01.2018).
[13] Cazaux J. About the mechanisms of charging in EPMA, SEM, and ESEM with their time evolution. *Microscopy and Microanalysis*, 2004, v. 10, no 6, p. 670-680.
[14] 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 LiNbO3 by direct electron beam lithography. *J. Appl. Phys*., 2003, v. 93, p. 9943-9947.
[15] Mateos L., Bausa L.E., Ramırez M.O. Two dimensional ferroelectric domain patterns in Yb3+ optically active LiNbO3 fabricated by direct electron beam writing. *Applied Physics Letters*, 2013, v. 102, p. 042910 (5).
[16] Mailis S., Sones C.L., Eason R.W. Micro-structuring and ferroelectric domain engineering of single crystal lithium niobate. *In: Ferroelectric crystals for photonic applications*. Edited by Ferraro P., Grilli S., De Natale P., Berlin, Heidelberg: Springer Series in Materials Science, 2014, v. 91, p. 3-19.
[17] Коханчик Л.С., Иржак Д.В. Формирование регулярных доменных структур и особенности переключения спонтанной поляризации в кристаллах танталата лития при дискретном облучении электронами. *ФТТ*, 2010, т. 52, № 2, с. 285-289.
[18] Nouiri A. Thermal effects behavior of materials under scanning electron microscopy. Monte Carlo and molecular dynamics hybrid model. *Research and reviews: Journal of material science*, 2014, v. 2, no 4, p. 1-9.
[19] Pavelchuk A.V., Maslovskaya A.G. Simulation of internal charge dis-tribution and spatial charge characteristics of ferroelectrics irradiated by focused electron beam. *In: Proc. SPIE* 10176, 2016, p. 101760P (12).
[20] Fitting H.-J., Touzin M. Secondary electron emission and self-consistent charge transport in semi-insulting samples. *J. Appl. Phys.*, 2011, v. 110, no 4, p. 044111 (12).

Статья поступила 12.04.2018

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Павельчук А.В., Масловская А.Г. Численное стохастическое моделирование транспорта электронов в облученных сегнетоэлектрических материалах. *Математическое моделирование и численные методы*, 2018, № 2, с. 3–20.

Павельчук Анна Владимировна – аспирант кафедры «Математический анализ и моделирование» Амурского государственного университета. Автор 8 статей в рецензируемых журналах. Область научных интересов: математическое моделирование характеристик процесса зарядки функциональных диэлектрических материалов электронными пучками средних энергий. e-mail: ap.9.04@mail.ru

Масловская Анна Геннадьевна – д-р физ.-мат. наук, доцент, процессор кафедры «Математический анализ и моделирование» Амурского государственного университета. Автор более 50 работ в российских и зарубежных рецензируемых научных журналах. Область научных интересов: математическое моделирование сложных физических систем, находящихся в неравновесных внешних условиях. e-mail: maslovskayaag@mail.ru

Numerical stochastic simulation of electron transport in irradiated ferroelectrics

© A.V. Pavelchuk, A.G. Maslovskaya

Amur State University, Blagoveshchensk, 675027, Russia

The article presents 3D-simulation system designed to analyze the characteristics of electron injection processes at diagnostics and modification of ferroelectrics with the scanning electron microscope techniques. The discrete stochastic model of electron trajectories was based on physical model of single interactions. The computational scheme was constructed with use of Monte Carlo simulation. The software application was suggested in order to perform the estimations of characteristics of electron injection effects in typical ferroelectrics. The characteristics specification of electron beam interaction area with irradiated target as well as the analytical expression for electron energy losses distribution were also descried with use of computing experiments data. The relationship of principal simulation parameters were indicated to control the field effects of the injected charges in ferroelectrics under electron irradiation.

Keywords: *computer simulation system, Monte-Carlo simulation, electron irradiation, ferroelectric, electron transport, computing experiment, characteris-tics of injection process.*

REFERENCES

[1] *Applications of Monte Carlo method in science and engineering*. Edited by S. Mordechai, InTech Publ., 2011. – 964 p.

[2] Krasnov I.K., Mozzhorina T.Yu., Dzhus D.V. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye menody – Mathematical Modeling and Numerical Methods*, 2017, no 3 (15), p. 71-82.

[3] *Raster electron microscopy for nanotechnology. Methods and applica-tion.* Ed. W. Zhu, J.L. Uanga – Moscow: BINOM. Laboratory of Knowledge, 2014. – 600 p.

[4] Akkerman A.F. *Modeling the trajectories of charged particles in matter*. Moscow: Energoatomizdat, 1991. – 200 p.

[5] Joy D.C. *Monte-Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis.* – New York: Oxford University Press, 1995. – 216 p.

[6] Czyzewski Z., MacCallum D.O., Roming A., Joy D.C. Calculations of Mo scattering cross section. *J. Appl. Phys.*, 1990, v. 68, p. 3066-3072.

[7] Zhang H. Monte Carlo study on electron emission from dielectric materials. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 2017, v. 46, p. 330-345.

[8] Kortov V.S., Zvonarev S.V. *Matematicheskoe modelirovanie – Mathematical Modeling*, 2008, v. 20, no. 6, p. 79-85.

[9] Zhuplev A.S., Prokhorov I.V., Yarovenko I.P. *Dalnevostochny matematicheskiy zhurnal – Far-Eastern Mathematical Journal*, 2014, v. 14, no. 2, p. 217-230.

[10] Demers H., Poirier-Demers N., Couture A.R., Joly D., Guilmain M., de Jonge N., Drouin D. Three-dimensional electron microscopy simulation with the CASINO Monte Carlo software. *Scanning*, 2011, v. 33, no 3, p. 135-181.

[11] *pyPENELOPE* [electronic resource], URL: http://pypenelope. source-forge.net/index.html (accessed date 17.01.2018).

[12] *MC-SET simulation web site [electronic resource]*, URL: http://www.mc-set.com> (accessed date 17.01.2018).

[13] Cazaux J. About the mechanisms of charging in EPMA, SEM, and ESEM with their time evolution. *Microscopy and Microanalysis*, 2004, v. 10, no 6, p. 670-680.
[14] 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 in-version in LiNbO3 by direct electron beam lithography. *J. Appl. Phys.*, 2003, v. 93, p. 9943-9947.
[15] Mateos L., Bausa L.E., Ramırez M.O. Two dimensional ferroelectric domain patterns in Yb3+ optically active LiNbO3 fabricated by direct electron beam writing. *Applied Physics Letters*, 2013, v. 102, p. 042910 (5).
[16] Mailis S., Sones C.L., Eason R.W. Micro-structuring and ferroelectric domain engineering of single crystal lithium niobate. *In: Ferroelectric crystals for photonic applications*. Edited by Ferraro P., Grilli S., De Natale P., Berlin, Heidelberg: Springer Series in Materials Science, 2014, v. 91, p. 3-19.
[17] Kokhanchik L.S., Irzhak D.V. *FTT*, 2010, v. 52, No. 2, p. 285-289.
[18] Nouiri A. Thermal effects behavior of materials under scanning elec-tron microscopy. Monte Carlo and molecular dynamics hybrid model. *Research and reviews: Journal of material science*, 2014, v. 2, no 4, p. 1-9.
[19] Pavelchuk A.V., Maslovskaya A.G. Simulation of internal charge dis-tribution and spatial charge characteristics of ferroelectrics irradiated by focused electron beam. *In: Proc. SPIE* 10176, 2016, p. 101760P (12).
[20] Fitting H.-J., Touzin M. Secondary electron emission and self-consistent charge transport in semi-insulting samples. *J. Appl. Phys.*, 2011, v. 110, no 4, p. 044111 (12).

Pavelchuk A.V., postgraduate student of the Mathematical Analysis and Simulation Department at Amur State University. Author of 8 articles published in peerreviewed scientific journals. The research interests: mathematical simulation of charging effects in functional dielectric materials exposed to elec-tron beams with average energies. e-mail: ap.9.04@mail.ru

Maslovskaya A.G., Dr. Sci. (Phys.-Math.), professor of the Mathemati-cal Analysis and Simulation Department at Amur State University. Author of more than 50 research articles. The research interests: mathematical simulation of complex physical systems under nonequilibrium external conditions. e-mail: maslovskayaag@mail.ru