

## ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ЗАРЯДКИ ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ ЭЛЕКТРОННЫМИ ПУЧКАМИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ

А.Г. Масловская

Амурский государственный университет, Игнатьевское шоссе, 21, Благовещенск, Россия, 675027, тел. (416-2) 39-45-01, e-mail: [maslovskayaag@mail.ru](mailto:maslovskayaag@mail.ru)

Представлены результаты моделирования процесса зарядки, возникающего в процессе облучения полярных диэлектриков электронными пучками средних энергий. Предложена математическая модель зарядовых эффектов взаимодействия электронного зонда с полярными диэлектриками. Реализация модели основана на совместном решении уравнения непрерывности и уравнения Пуассона сеточными методами. Численное моделирование проведено в ППП Matlab на основе метода дробных шагов и метода конечных элементов. Выполнен расчет распределения плотности зарядов и потенциала электрического поля, создаваемого накопленным в процессе облучения зарядом.

### Введение

В настоящее время методики растровой электронной микроскопии (РЭМ) активно применяются в качестве аналитических методов исследования и технологической обработки различных полярных материалов. Это обусловлено широким спектром эффектов, возникающих при воздействии электронных пучков на полярные диэлектрики, а также высокой чувствительностью этих материалов к электрическим и тепловым воздействиям электронного зонда, что позволяет получать отклик и создавать способы формирования изображения и исследования электрических свойств образцов [1].

При электронной бомбардировке диэлектрического образца на его поверхности и в объеме поглощенные электроны могут образовывать локальные заряженные области, которые могут нерегулярным образом отклонять первичный пучок. Эффект зарядки возникает при любых увеличениях РЭМ и любых реальных токах зонда. Исследованию вопроса зарядки диэлектрических материалов при изучении методами РЭМ посвящен широкий ряд работ как теоретического, так и экспериментального характера [2-7]. При этом все чаще в практике подобных исследований применяются средства и методы математического моделирования. Так, в [4-5] предложено использование метода Монте-Карло для определения объемного распределения зарядов в образце. Активно применяются и детерминированные модели, описывающие явление зарядки диэлектриков [5-7].

Однако многие аспекты изучения процессов накопления и релаксации зарядов в диэлектрических материалах остаются неизученными. Целью данной работы является разработка, построение схемы численного решения и программная реализация математической модели, описывающей эффект зарядки, возникающий в процессе облучения полярных диэлектриков электронными пучками средних энергий.

### Физико-математическая модель

В основе математической модели лежит обобщенная физическая модель, описывающая процесс зарядки полярных диэлектриков и основанная на совместном решении уравнения не-

прерывности и локально-мгновенного уравнения Пуассона:

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

где  $\rho$  – объемная плотность распределения зарядов, Кл/м<sup>3</sup>;  $\mathbf{j}$  – плотность тока, А/м<sup>3</sup>;  $\sigma$  – удельная электрическая проводимость, 1/(Ом·м);  $E$  – поле, В/м;  $\varepsilon$  – удельная диэлектрическая проницаемость среды, 1;  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная, Кл/(В·м);  $G$  – генерационное слагаемое.

Пучок электронов, проникая на некоторую глубину в образец, создает отрицательный объемный заряд, вследствие чего возникает диффузионный ток:

$$\mathbf{j}^{\text{диф}} = -D \text{grad} \rho,$$

где  $D = \mu_n \frac{kT}{e}$  – коэффициент диффузии электронов, м<sup>2</sup>/с;  $\mu_n = \mathbf{v}_{\text{др}} / \mathbf{E} = e \cdot \bar{l} / (m \cdot \bar{v})$  – дрейфовая подвижность электронов, м<sup>2</sup>/(В·с);  $\mathbf{E}$  – напряженность электрического поля, В/м;  $\mathbf{v}_{\text{др}}$  – дрейфовая скорость электрона, 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.

Если облучение поддерживается достаточно длительное время, то электроны, участвующие в диффузионном токе, создают объемные заряды, поле которых противодействует диффузии. Дрейфовую плотность тока электронов можно выразить через собственную радиационно-стимулированную проводимость  $\sigma$  и электрическое поле  $E$ , создаваемое зарядом:  $\mathbf{j}^{\text{др}} = \sigma \mathbf{E}$ . Таким образом, плотность тока проводимости представляется суммой диффузионного и дрейфового токов  $\mathbf{j} = \mathbf{j}^{\text{диф}} + \mathbf{j}^{\text{др}}$ .

На рис. 1 показана схема взаимного расположения модельного образца, обладающего цилиндрической симметрией, и электронного зонда. Предположим, что в плоскости  $z = 0$  в момент времени  $t = 0$  действует сфокусированный пучок электронов.

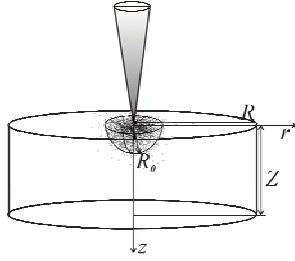


Рис. 1. Геометрия модельного образца

Поскольку уравнение Пуассона носит локально-мгновенный характер, с его помощью можно определить распределение потенциала  $\varphi$  в зависимости от мгновенных положений зарядов. Принимая во внимание цилиндрическую симметрию задачи и, 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 совокупностью соотношений

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathbf{G} - \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \cdot \rho^2 - \mu_n \cdot \left( \mathbf{E}_r \frac{\partial \rho}{\partial r} + \mathbf{E}_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + \\ + D \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = - \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad \mathbf{E} = \text{grad} \varphi. \end{cases} \quad (2)$$

Для замыкания математической формулировки диффузионное уравнение и уравнение Пуассона, выраженные системой (2), необходимо дополнить начальным  $\rho(r, z, t_0) = \rho^0(r, z)$  и граничными условиями

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho}{\partial r} \right|_{r=z=0} &= 0, \\ \rho|_{z=Z, r=R} &= 0, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right|_{r=z=0} = 0, \quad \varphi|_{z=Z, r=R} = 0. \end{aligned}$$

### Схема численного решения задачи. Программная реализация модели

Для решения многомерной краевой эволюционной задачи, описываемой системой уравнений в частных производных, были использованы сеточные методы решения нестационарных задач.

Численное решение задачи нахождения распределения плотности заряда проведено методом конечных разностей с использованием алгоритма дробных шагов Яненко [8]. Суть метода дробных шагов заключается в расщеплении исходного уравнения на два, зависящих соответственно только от одной координаты, при этом полная аппроксимация достигается на последнем дробном шаге.

Решение уравнения Пуассона для интересующего момента позволяет рассчитать поверхность распределения потенциала по объему исследуемого образца. Реализация последней задачи проведена на основе метода конечных элементов. Вся расчетная область разбивалась на линейные треугольные элементы. Каждому нумерованному узлу приписывается базисная функция в виде линейного многочлена. Тогда аппроксима-

ция конечными элементами представляется в виде линейной комбинации базисных функций, коэффициентами которой являются значения искомой функции в нумерованных узлах [9]. Далее составляется уравнение метода взвешенных невязок, определяются весовые функции по методу Галеркина, и, с использованием ослабленной формулировки задачи, получается неоднородная система линейных алгебраических уравнений, численное решение которой дает значения потенциала в узлах расчетной области.

Кроме того, использование известного соотношения  $\mathbf{P} = (\varepsilon - 1)\varepsilon_0 \mathbf{E}$  (Кл/м<sup>2</sup>) позволяет провести численный расчет компонент вектора поляризации в образце.

Для запуска указанных вычислительных алгоритмов необходимо определить первоначальное распределение зарядов. Данная подзадача была решена с помощью возможностей среды визуального моделирования CASINO 2.42. Данный пакет предназначен для моделирования траекторий движения электронов методом Монте-Карло [10]. Расчет проведен по отношению к модельному сегнетоэлектрическому кристаллу ниобату лития. Графическое изображение симулированного распределения траекторий электронов в образце представлено на рис. 2.

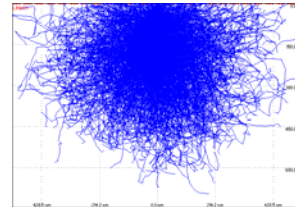


Рис. 2. Распределение траекторий электронов в модельном кристалле LiNbO<sub>3</sub> (стартовая энергия пучка E<sub>0</sub>=10кэВ, значение пороговой энергии  $\hat{E}$ =2кэВ, N = 1000 историй электронов)

Распределение начальной плотности накопленного заряда можно описать с помощью распределения Гаусса для локальной области:

$$\rho = \rho_0 \exp(-r^2 / \delta^2), \quad (3)$$

где  $\rho_0$  – объемная плотность накопленного заряда, Кл/м<sup>3</sup>;  $r$  – длина радиус-вектора, проведенного в данную точку пространства из начала координат, м.

Параметры  $\rho_0$ ,  $\delta$  в (3) определяются путем прямой аппроксимации найденного с помощью метода статистических испытаний распределения.

Программная реализация модели проведена в ППП Matlab. Для проведения модельного расчета рассмотрим простейший случай – процесс релаксации заряда (в этом случае функция источника в диффузионном уравнении системы (2) отсутствует).

Для организации вычислительного эксперимента необходимо инициализировать значения параметров моделирования. Для этого были заданы физические константы, используемые в модели, а также рассчитаны физические пара-

метры среды.

Результатом моделирования является поверхность плотности распределения зарядов, график которой представлен на рис. 3 (для фиксированного момента времени  $t = 10^{-12}$  с).

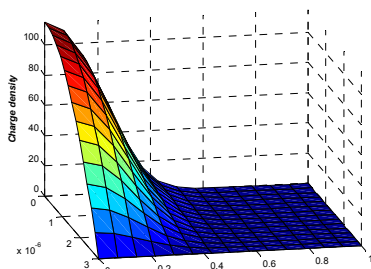


Рис. 3. Расчетные значения распределения плотности зарядов в образце модельного кристалла

Кроме того, программное приложение позволяет визуализировать векторные поля напряженности и поляризации, пространственное распределение и карту линий уровней потенциала. На рис. 4 показано изменение значений компоненты поляризации для ниобата лития по всей расчетной области в последний момент времени наблюдения.

### Заключение

Таким образом, модифицированная математическая модель распределения зарядов в диэлектрическом образце при электронном облучении позволяет исследовать динамику процесса зарядки, а также оценить поверхностное значение потенциала и провести расчет поляризации в облученном образце при заданных параметрах экспериментального наблюдения.

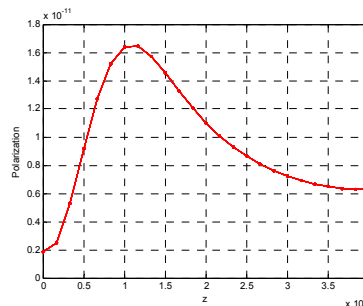


Рис. 4. Профиль распределения поляризации по глубине для  $\text{LiNbO}_3$  при  $r = 0$

### Список литературы

1. Sogr A.A., Maslovskaya A.G., Kopylova I.B. // *Ferroelectrics*. – 2006. – 341. – P. 29.
2. Cazaux J. // *Journal of electron spectroscopy and Related Phenomena*. – 1999. – 105. – P. 155.
3. Рау Э.И., Евстафьева Е.Н., Андрианов М.В. // *ФТТ*. – 2008. – Т. 50. – 4. – С. 599.
4. Кортов В.С., Звонарев С.В. // *Математическое моделирование*. – 2009. – Т. 20. – 6. – С. 79-85.
5. Борисов С.С., Грачев Е.А., Негуляев Н.Н., Черемухин Е.А. // *Прикладная физика*. – 2004. – 1. – С. 118.
6. Chan DSH, Sim KS, Phang JCH. // *Scanning microscopy*. – 1993. – 7. – P. 847.
7. Suga H, Tadokoro H., Kotera M. // *Electron microscopy*. – 1998. – 1. – P. 177.
8. Яненко Н.Н. *Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики* – Новосибирск: Наука, 1967. – 197 с.
9. Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л. *Численные методы* – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 400 с.
10. Drouin D., Coutre A.R., Joly D., Tastet X., Aimez V., Gauvin R. // *Scanning*. – 2007. – 29. – P. 92.

## DYNAMIC SIMULATION OF CHARGING PROCESSES IN POLAR DIELECTRICS IRRADIATED BY THE ELECTRON BUNCHES OF MIDDLE LEVEL ENERGY

A.G. Maslovskaya

Amur State University, 21, Ignatyevskoe Shosse, Blagoveshchensk, 675027, Russia,  
Phone: +7 (4162) 394655, e-mail: [maslovskayaag@mail.ru](mailto:maslovskayaag@mail.ru)

Nowadays the scanning electron microscopy techniques are widely used practically in condenser matter physics to study properties and structure of solids. The electron probe of scanning electron microscope is not merely a passive indicator of the geometrical or potential profile of the sample surface, but also the source producing ionizing, electric and thermal action on the sample. The application of raster electron methods to polar materials, responding to electric and heat exposures of the electron bunches allows us to get a response and create new modes of image formation.

Let assume, that a sample surface of dielectric is irradiated by thin focused electron bunches of middle level energy (with order 1÷50 keV). When electrons bombard the dielectric sample the accumulation of absorbed electrons occurs. As a result generated charged areas can irregular drift the initial bunches. Charging effect occurs at any magnifications and any actual probe current. This work considers the results of dynamic simulation of charging process in polar dielectrics under the investigation with the scanning electron microscope. The purpose of present study is design and model implementation of three-dimensional dynamic model of charge relaxation in polar materials irradiated by electron bunches of middle level energy.

The mathematical problem definition is given by the system of the continuity equation and Poisson equation. Final system of equations was modified in terms of intrinsic radiation-induced conductivity in sample as well as cylindrical symmetry of the problem. The simulation is based on numerical method solving of boundary problem for partial derivative equation system. In addition the initial electron distribution is determined by Monte-Carlo method using the programming implementation. To solve this problem we used the computational methods of solution of nonstationary mathematical physics problem such as finite difference method and finite element method realized with Matlab 7.0. The mathematical model of the charging process in ferroelectrics enables us to investigate the dynamics of charging process, and also to estimate the potential distribution at the given experimental parameters.