

И н ф о р м а т и к а и с и с т е м ы у п р а в л е н и я

УДК 519.688:004.94

А.В. Сивунов, А.Г. Масловская

КОМПЛЕКСНАЯ СИСТЕМА ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ МАТЕРИАЛАМИ

Представлены результаты проектирования и реализации комплексной системы компьютерного моделирования динамических процессов, наблюдаемых в диэлектриках при диагностике методами растровой электронной микроскопии. Комплекс программ имеет модульную структуру, интегрирует отдельные функциональные блоки моделирования инжекционных, тепловых и зарядовых процессов и позволяет проводить вычислительные эксперименты.

Ключевые слова: имитационная система моделирования, алгоритм, математическая модель, динамические процессы, электронное облучение, диэлектрики.

INTEGRATED SIMULATION SYSTEM FOR DYNAMIC PROCESSES OF ELECTRON BEAM INTERACTION WITH DIELECTRIC MATERIALS

The results of integrated simulation system design and implementation were presented to describe dynamic processes arising in dielectrics analyzed with scanning electron microscopy techniques. The modular structured program system combines functional blocks of simulation of injection, thermal as well as charging processes and also permits computing experiments to be performed.

Key words: simulation system, algorithm, mathematical model, dynamic processes, electron irradiation, dielectrics.

Введение

В последнее время для изучения структуры и свойств диэлектрических материалов активно применяются методы растровой электронной микроскопии. Процессы взаимодействия электронных пучков с такими средами носят сложный характер и подлежат исследованию экспериментальными и теоретическими методами. Специфика отдельных аспектов подобного взаимодействия требует привлечения методов математического моделирования, которые применяются как на теоретическом (для теоретического описания и математической формализации процессов и механизмов, определяющих природу взаимодействия пучка с мишенью), так и на эмпирическом (для интерпретации явлений на основе анализа данных вычислительного эксперимента) уровнях. При этом следует отметить, что ряд эффектов, подлежащих исследованию с помощью методов математического моделирования и технологии вычислительного эксперимента, не поддается изучению прямыми экспериментальными методами. Такими процессами являются динамика электронных траекторий в объекте [1-3]; распределение температуры в объекте в процессе нагрева образца электронным зондом [4-6]; распределение потенциала поля, созданного инжектированными электронами [7-10].

Развитие методов математического моделирования трудноформализуемых физических процессов и разработка вычислительных алгоритмов для их реализации предоставляют возможности теоретического описания и аналитического обоснования механизмов воздействия электронного облучения на диэлектрические материалы. Кроме того, создание систем компьютерного моделирования с использованием современного программного обеспечения и постановка вычислительных экспериментов позволяют проводить проблемно-ориентированные исследования и прогнозировать закономерности поведения системы в условиях натурального эксперимента.

Современные подходы к математическому моделированию динамических процессов взаимодействия электронного облучения с твердотельной мишенью используют широкий арсенал методов. Математические схемы моделирования инжекционных и тепловых процессов воздействия пучка электронов на диэлектрики можно отнести к двум классификационным категориям: дискретно-стохастическим и непрерывно-детерминированным. Первая группа моделей физических систем представлена методом Монте-Карло, используемым для стохастического расчета транспорта электронов в твердотельной мишени, вторая – аналитическими и численными методами реализации моделей, применяемыми для решения полевых задач.

Задачи системно-комплексного анализа процессов взаимодействия электронных пучков средних энергий с диэлектрическими материалами приводят к необходимости развивать методы моделирования формирования отклика исследуемых систем в неравновесных условиях электронного облучения. В работе [3] представлены результаты развития алгоритмического подхода и программной реализации на основе метода Монте-Карло трехмерной стохастической модели транспорта электронов в твердых телах при электронном облучении. Работы [6, 9-10] посвящены исследованиям и программной реализации алгоритмов конечно-элементного численного моделирования тепловых эффектов [6] и процессов зарядки [9-10] при воздействии электронных пучков на диэлектрические материалы. Однако специфика решаемых проблем требует разработки интегрированной системы компьютерного моделирования применительно к прикладным задачам моделирования динамических процессов при диагностике диэлектриков методами растровой электронной микроскопии.

Поэтому настоящая работа посвящена синтезу алгоритмов и разработке гибридной системы компьютерного моделирования динамики инжекционных и тепловых процессов, интегрирующей возможности программных приложений по моделированию транспорта электронов, тепловых полей и характеристик зарядки облученных электронами диэлектриков.

Концептуальная постановка задачи

При использовании методик растровой электронной микроскопии для исследования различных диэлектрических материалов воздействие электронного зонда, сканирующего поверхность, приводит к инжекции пучка электронов в глубь облученного материала, нагреву образца и зарядке диэлектрика. При моделировании динамики инжекционных и тепловых процессов воздействия электронного облучения на диэлектрики примем систему следующих основных физических допущений:

будем считать, что исследуемый образец облучается сфокусированным пучком электронов средних энергий (1-40 кэВ);

в качестве модельных объектов рассмотрим образцы некоторых функциональных диэлектрических материалов (Al_2O_3 , SiO_2 , ПММА, тефлон, ТГС, $LiNbO_3$);

построение моделей и алгоритмов их реализации требуется проводить с учетом возможных режимов сканирования в растровом электронном микроскопе: на открытой поверхности образца и в режиме, использующем нанесенные на грани металлические электроды;

среди многочисленных эффектов воздействия электронных пучков на диэлектрические материалы исследованию методами математического моделирования подлежат процессы: транспорта электронов, теплопроводности и зарядки;

при решении полевых задач будем считать, что включение внутреннего источника (тепла и зарядов) в объекте происходит мгновенно;

геометрия модельных образов будет выбираться таким образом, чтобы краевые эффекты не играли существенной роли при решении задач;

кристаллические материалы моделируются сплошными изотропными средами, для которых по данным литературных источников инициализированы общие физические и химические параметры (плотность, атомные и номера веса входящих элементов), теплофизические (коэффициент тепловой диффузии, теплоемкость) и электрические характеристики (диэлектрическая проницаемость);

среди возможных варьируемых параметров эксперимента выделим следующие: стартовая энергия пучка (и соответственно ускоряющее напряжение зонда), ток зонда, доза облучения, размер облучаемого пятна на поверхности, время эксперимента.

Концептуальную постановку задачи моделирования сформулируем в следующем виде: требуется провести проектирование и программную реализацию интегрированной системы имитационного моделирования транспорта электронов в облученной мишени, процессов нагрева и зарядки образцов электронным зондом, при этом комплекс потенциально должен решать следующие задачи:

1) расчет транспорта электронов в диэлектрических материалах при облучении электронными пучками (глубина проникновения, форма области взаимодействия пучка с мишенью, аппроксимация функции потерь энергии электронов в веществе);

2) моделирование динамики термической нагрузки на диэлектрики при электронном облучении (расчет пространственных и временных температурных конфигураций);

3) расчет характеристик зарядки диэлектрических материалов при электронном облучении (моделирование пространственного распределения потенциала, векторного поля напряженности, электронно-стимулированной поляризации в образце).

Реализуемые модели и используемые подходы к построению вычислительных схем

Представим краткое описание вычислительных схем и разработанных для решения поставленных прикладных задач методик.

1. Стохастическая трехмерная математическая модель электронных траекторий в твердых телах при облучении электронными пучками средних энергий основана на следующих базовых положениях [1-3].

Для моделирования транспорта электронов использован метод Монте-Карло. В вычислительной схеме предполагалось, что электрон с энергией старта падает перпендикулярно плоскости поверхности образца в некоторую точку с определенной координатой. Позиция электрона определяется значением углов рассеяния, которые, как и вид взаимодействия (упругое и неупругое), определяются с помощью генератора псевдослучайных чисел.

Для расчета длины свободного пробега использовано модельное сечение Мотта. Расчет изменения траектории движения электрона для трехмерной модели проведен на основе авторской вычислительной схемы [3].

Для определения изменения энергии при неупругом рассеянии электронов использован модифицированный закон Бете для многокомпонентных материалов.

Расчет траектории и потерь энергии для каждого электрона проводится до тех пор, пока величина энергии не уменьшится до некоторого порогового значения, при которой электрон уже не может вызывать ионизацию ($E_{th} \sim 0.5 \text{кэВ}$). Согласно концепции метода Монте-Карло моделирование проводится для статистической совокупности достаточно большого числа N историй электронов.

2. Моделирование полевых эффектов, вызванных инжекцией электронов в облученных диэлектрических материалах, включает следующие шаги.

Формулируется система допущений, принятых при математической формализации, с учетом специфики предметной области: режимов сканирования, геометрии образца и внутреннего источника, теплофизических характеристик объекта, условий экспериментального наблюдения [6]. Для аппроксимации геометрии и выбора аналитической функции внутреннего источника в объекте используются результаты стохастического моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло [3]. Математическая постановка модели формулируется в виде нестационарной многомерной задачи теплопроводности для двухслойной среды.

Вычислительный алгоритм строится комбинированным сеточным методом: дифференциальный оператор по времени аппроксимируется конечно-разностным оператором, пространственные операторы – конечно-элементным методом Галеркина. В качестве конечных элементов принимаются тетраэдры с нумерованными узлами в вершинах. Применяя метод взвешенных невязок и используя слабую формулировку конечно-элементного метода Галеркина конструируется глобальная система линейных алгебраических уравнений, полученная ансамблированием отдельных конечных элементов. Применение безусловно устойчивой центрально-разностной схемы Кранка-Николсона позволяет получить значение температуры на каждом временном слое. Система решается итерационным методом для каждого временного слоя.

3. Одной из важнейших величин, характеризующих зарядку диэлектрика, является потенциал электрического поля, создаваемый накопленным зарядом. Решение уравнения Пуассона позволяет рассчитать распределения потенциала по объему исследуемого образца в зависимости от положений инжектированных зарядов [9-10]. Математическая постановка модели процесса зарядки, соответствующего установившемуся режиму, формулируется в виде уравнения Пуассона с источником специального вида и с учетом цилиндрической симметрии задачи. Численная реализация стационарной задачи моделирования основана на решении уравнения Пуассона методом конечных элементов. Использована аппроксимация расчетной области треугольными конечными элементами. Применение метода взвешенных невязок, выбор весовых функций по Галеркину и использование ослабленной формулировки задачи позволяют рассчитать значения функции распределения потенциала во всех узлах расчетной области. Учитывая специфику моделируемых процессов, для вычисления была применена модифицированная расчетная схема, использующая сетку конечных элементов меньшего размера, покрывающих область зоны инъекции.

Модель позволяет оценить компоненты и значение модуля вектора напряженности, а также поляризации диэлектрика, индуцируемой инъекцией электронного пучка.

Реализация интегрированной системы моделирования в виде комплекса программ

С целью разработки программной поддержки для комплексного исследования процессов взаимодействия электронных пучков средних энергий с диэлектриками и проведения вычислительных экспериментов на основе разработанных математических и имитационных моделей требуются проектирование и программная реализация интегрированной системы компьютерного моделирования.

В качестве среды программной реализации использован пакет прикладных программ Matlab, являющийся современным международным стандартом программного обеспечения в области математического моделирования. Основные достоинства этого пакета заключаются в возможности совместного применения алгоритмических основ программирования, встроенного инструментария для решения частных математических задач и среды разработки графического интерфейса пользователя, что позволяет создавать, модифицировать и интегрировать в комплексы проблемно-ориентированных программ отдельные функциональные и системные модули, ориентированные на решение поставленных научных задач. Комплекс программ имеет сложную модульную архитектуру, его структура представлена на рис. 1.



Рис. 1. Структура программного комплекса моделирования динамики инжекционных и тепловых процессов взаимодействия электронных пучков с диэлектрическими материалами.

Для управления параметрами моделирования необходим пользовательский интерфейс с возможностью настройки параметров вычислительных экспериментов и графического представления полученных данных. Визуальное представление результатов моделирования каждой части программного комплекса должно быть понятным и давать возможность проводить необходимый анализ полученных данных.

Для разработки проблемно-ориентированного программного обеспечения оформлена стандартная спецификация, которая включает следующие разделы.

1. Название задачи и системные требования

Название программного комплекса – «Комплексная система имитационного моделирования динамических процессов взаимодействия электронных пучков с диэлектрическими материалами». Рекомендуемые системные требования: операционная система: Microsoft Windows XP/Vista/7; процессор: Intel Pentium Core 2 Duo E6400 2.0 ГГц или Athlon II X2 240 2/8 ГГц; оперативная память: не менее 2 Гб; видеокарта: 512 Мб, совместимая с DirectX 9/0с, с поддержкой технологии трехмерного ускорения; 1 Гб свободного места на жестком диске; клавиатура и мышь.

2. Описание

Программный комплекс предназначен для динамического трехмерного моделирования транспорта электронов в облучаемой электронными пучками средних энергий твердотельной мишени; для трехмерного динамического моделирования процессов нагрева образцов электронным зондом; для расчета характеристик процесса зарядки. Краткое описание основных моделей и используемых численных методов приведено выше.

3. Управление режимами работы программы

Для управления режимами работы программы разработан интерфейс с использованием меню, диалоговых окон, полей ввода данных, функциональных кнопок, предусматривающий возможность экспорта результатов в файлы данных. На рис. 2 изображен общий вид программы моделирования

электронных траекторий, который имеет несколько основных групп элементов управления расчетами и просмотра результатов работы программы. Основная группа – это область вывода графиков и настроек. Интерфейс каждой из трех вкладок «Моделирование транспорта электронов», «Моделирование тепловой нагрузки», «Моделирование процесса зарядки» настроен на реализацию функционального предназначения каждой из моделей. Панель инициализации параметров моделирования предназначена для всех трех блоков, локальные панели инициализации специальных параметров также предусмотрены для каждого модуля. Кроме того, в каждой вкладке предусмотрена специальная панель, предоставляющая возможности вариации режимов вывода данных.

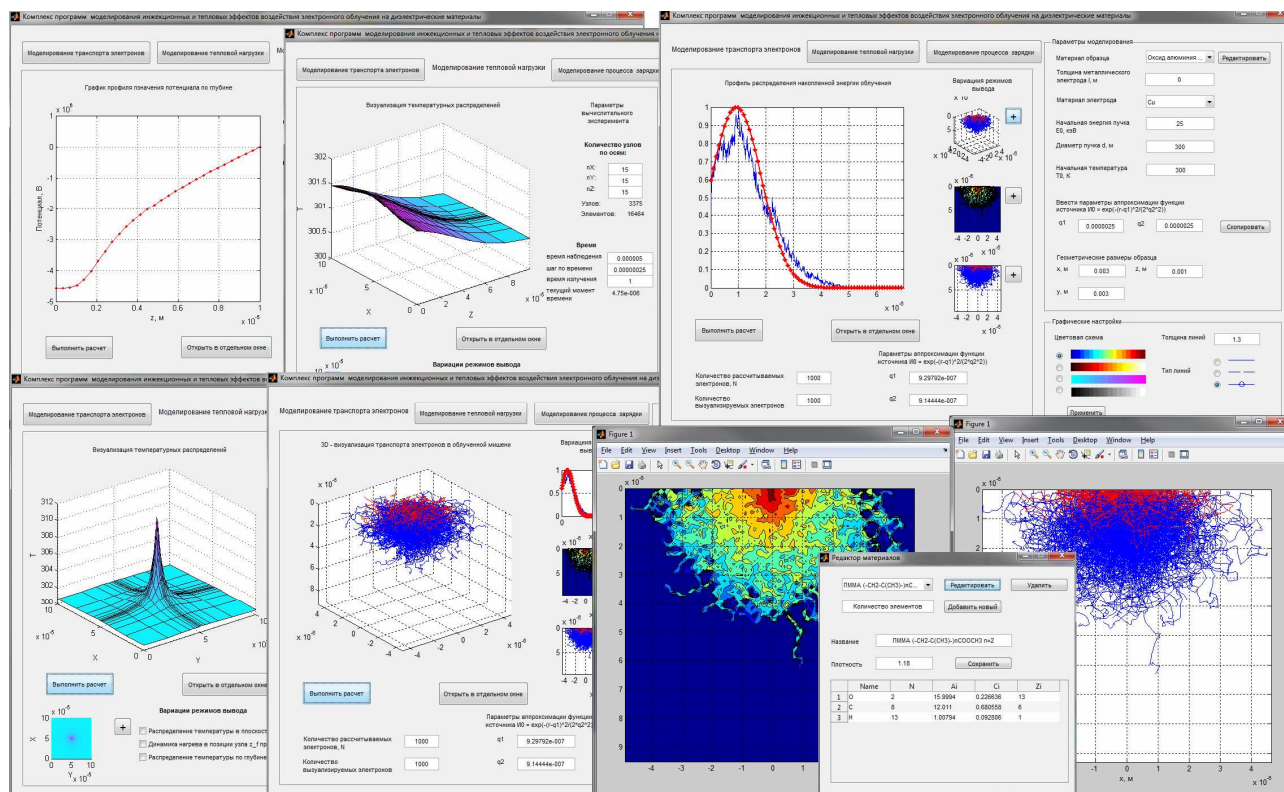


Рис. 2. Общий вид диалоговых окон комплекса программ.

4. Входные данные

Входные данные, предназначенные для всех модулей.

Физические константы, характеристики сред и параметры эксперимента:

вид материала образца и электрода (выбор из набора данных материалов, которые традиционно используются в качестве металлических электродов) для проведения вычислительного эксперимента из набора данных (с автоматической инициализацией параметров в программном модуле: плотность, г/см^3 ; атомный вес элементов, г/моль ; порядковый номер элементов, удельной теплоемкости, $\text{Дж/(кг}\cdot\text{K)}$; плотность, кг/м^3 ; коэффициент теплопроводности, $\text{Вт/(м}\cdot\text{K)}$; коэффициент тепловой диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$; диэлектрическая проницаемость среды; учет возможности задания нелинейных зависимостей от температуры для теплоемкости и коэффициента теплопроводности); отдельное диалоговое окно предусматривает возможности «редактирования материалов» (изменение элементного состава, параметров и пр.);

толщина металлического электрода, м.

значение диаметра электронного зонда, м;

значение стартовой энергии электронного пучка, кэВ (значение энергии выбирается из диапазона 1-50кэВ);

мощность теплового источника в объекте, Вт;

параметры аппроксимации источника, м;

геометрические размеры образца, м.

Функциональный модуль «Моделирование методом Монте-Карло транспорта электронов в облученной мишени»

Параметры для управления вычислительным процессом:

количество симулируемых электронов (для статистической достоверности значение не должно быть меньше 100);

количество электронов, траектории которых будут построены в графической области.

Функциональный модуль «Моделирование температурной нагрузки на твердые тела при электронном облучении»

Параметры для управления вычислительным процессом:

размеры расчетной сетки для вывода данных;

переключение способа графического представления результатов.

Функциональный модуль «Расчет характеристик процесса зарядки»

распределение плотности зарядов в начальный момент времени, Кл/м³.

5. Выходные данные

Результатом работы программного приложения являются: геометрия области взаимодействия пучка электронов с образцом и соответствующие двумерные проекции, распределение потерь энергии электронов в веществе и функциональная зависимость распределения потерь энергии по глубине; двумерные и трехмерные визуализации температурных полей (и соответствующих координатных сечений) в исследуемых материалах, созданных сфокусированным тепловым источником при вариации объектов и режимов наблюдения; двумерные и трехмерные визуализации основных электрических характеристик зарядки: распределение потенциала, векторное поле и абсолютные значения напряженности, компонента индуцированной электронным облучением вектора поляризации.

6. *Верификация результатов* проводится с использованием эталонных моделей и известных распределений, построенных на основе аналитических решений для линейных режимов и однокомпонентных материалах, эмпирические оценки, приводимые в известных литературных данных.

Заключение

Таким образом, представлены результаты разработки системы имитационного моделирования, предназначенной для проведения вычислительных экспериментов и исследования на их основе трудноформализуемых динамических процессов, протекающих в функциональных диэлектрических материалах, находящихся в неравновесных условиях электронного облучения. Комплекс интегрирует возможности отдельных программных приложений и реализует алгоритм гибридной модели, представляющей формализацию стохастического процесса транспорта электронов в облученной мишени и полевых эффектов инжектированных зарядов.

1. Аккерман, А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 200 с.

2. Akarsu, M., Ozba,s O. Monte Carlo simulation for electron dynamics in semiconductor devices // Mathematical and Computational Applications. – 2005. – V. 10, № 1. – P. 19 – 26.

3. Масловская, А.Г., Сивунов, А.В. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло электронных траекторий в полярных диэлектриках при воздействии электронными пучками средних энергий // Вестник Саратовского государственного технического университета. – 2012. – № 2. – С. 53-58.

4. Бакалейников, Л.А., Галактионов, Е.В., Третьяков, В.В., Троп, Э.А. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия // Физика твердого тела. – 2001. – № 5. – С. 779 – 785.

5. Филиппов, М.Н. Оценка теплового воздействия электронного зонда в растровой электронной микроскопии и рентгеноспектральном анализе // Известия РАН, сер. физ. – 1993. – Т. 57, № 8. – С. 163 – 171.
6. Масловская, А.Г., Сивунов, А.В. Применение метода конечных элементов для моделирования эволюционных процессов теплопроводности в облученных электронными пучками полярных диэлектриках // Компьютерные исследования и моделирование. – 2012. – № 4. – С. 767 – 181.
7. Suga, H.A., Tadokoro, H., Kotera, M. Simulation of electron beam induced charging-up of insulators // Electron microscopy. – 1998. – V. 1. – P. 177 – 178.
8. Борисов, С.С., Грачев, Е.А., Негуляев, Н.Н., Черемухин, Е.А., Зайцев, С.И. Моделирование поляризации диэлектрика в процессе облучения электронным пучком // Прикладная физика. – 2004. – № 1. – С. 113 – 121.
9. Maslovskaya, A.G., Sivunov, A.V. Simulation of electron injection and charging processes in ferroelectrics modified with the SEM-techniques // Solid State Phenomena. – 2014. – V. 213. – P. 119 – 124.
10. Сивунов, А.В., Масловская, А.Г. Численное моделирование процессов зарядки при диагностике сегнетоэлектриков методами растровой электронной микроскопии // Компьютерные исследования и моделирование. 2014. – Т. 6, № 1. – С. 107 – 119.