

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ТРАЕКТОРИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В статье представлены результаты компьютерного моделирования транспорта электронов в материалах при облучении электронными пучками средних энергий. Алгоритм реализован с помощью метода Монте-Карло в ППП Matlab. Представлены результаты расчетов распределений энергии и числа электронов по глубине. Приведено обоснование использования технологии параллельного программирования для оптимизации вычислительных затрат.

The paper discusses the results of computer simulation of electron transport in materials irradiated by electron bunches with average energy. The algorithm was implemented by Monte-Carlo method in Matlab. Calculation results of energy distribution and the electron penetration depth were performed. The substantiation of the use of parallel programming was presented to optimize the calculations.

Введение

Методики, использующие растровый электронный микроскоп (РЭМ), обладают информативностью, простотой изготовления объектов для исследования, высокой степенью автоматизации анализа изображений и обработки результатов. В РЭМ исследуемый материал облучается сфокусированным пучком электронов, при взаимодействии которого с твердой мишенью возникает большое число явлений, которые служат основой для формирования различного рода сигналов и используются для измерения многих характеристик образца (состав, топография поверхности, кристаллографическая ориентация и т.д.) [1].

Имитационное моделирование на ЭВМ методом Монте-Карло случайных процессов рассеяния и потерь энергии электронов в твердом теле позволяет получить подробную информацию о характерных процессах. 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 сред, режимов экспериментального наблюдения, симметрии и размерности задачи, теоретических основ, лежащих в основе физических моделей процессов.

1 Алгоритм моделирования случайных электронных блужданий в облучаемой мишени

Будем считать, что электрон первоначально попадает в точку A , под углом 90° к осям x и y и под углом 180° к оси z . В этой точке электрон сначала отклоняется на угол φ от первоначального направления, а затем поворачивается на азимутальный угол ω , как это схематически показано на рис. 1. В результате электрон получит новое направление и окажется в точке B . Упругое рассеяние происходит в результате столкновения электронов с ядрами атомов, частично экранированных связными электронами. В работе [2] представлена стохастическая модель 3D-расчета электронных траекторий в облучаемых диэлектриках. Целью данной работы являлась оптимизация приложения

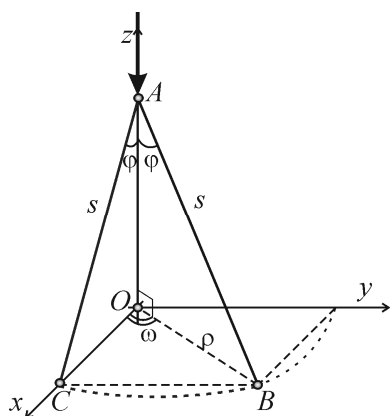


Рис. 1. Схема изменения траектории электрона.

по моделированию транспорта электронов в твердых телах с использованием технологии параллельного программирования.

Электрон отклоняется от направления падения на угол φ_Y , который может принимать значения от 0° до 180° , но его типичное значение $\sim 10^\circ$. Значение φ_Y определяется генерацией случайного числа из диапазона $\left[\frac{\pi}{90}, \frac{\pi}{6}\right]$. При неупругом взаимодействии происходит отклонение электрона на угол φ_N , причем $\varphi_N \ll \varphi_Y$. Положим $0^\circ < \varphi_N < 2^\circ$. Азимутальный угол ω рассчитывается по формуле: $\omega = 2\pi R$, где R – случайное число [2].

Между взаимодействиями электрон проходит расстояние, которое можно вычислить по формуле:

$$s = -\lambda \ln(\xi),$$

где $\xi \in (0,1)$ – равномерно распределенная случайная величина.

Средняя длина свободного пробега в формуле (1) может быть вычислена как:

$$\lambda = \frac{1}{N_0 \cdot \rho} \sum_{i=1}^M \frac{A_i \cdot C_i}{\sigma},$$

где A_i – атомный вес i -го элемента, г/моль; C_i – массовая концентрация i -го элемента; M – число элементов, входящих в состав вещества; $N_0 = 6.022 \cdot 10^{23}$ – число Авогадро, моль $^{-1}$); ρ – плотность, г/см 3 ; σ – сечение рассеяния, см 2 .

Для определения полного сечения рассеяния использована формула сечения Мотта:

$$\sigma_{Mott} = \frac{4.7 \cdot 10^{-18} (Z^{1.33} + 0.032Z^2)}{(E + 0.0155Z^{1.33}E^{0.5})(1 - 0.02Z^{0.3} \exp(-u^2))}, \text{ см}^2, \quad u = \log_{10}(8EZ^{-1.33}),$$

где E выражается в кэВ.

Изменение энергии можно описать с помощью непрерывной функции. Для многокомпонентного вещества дифференциальные ионизационные потери энергии выражаются модифицированным законом Бете [3]:

$$\frac{dE_m}{dx} = -2\pi e^4 N_0 \frac{\rho}{E_m} \cdot \sum_{i=1}^M C_i \frac{Z_i}{A_i} \ln \left(\frac{1.166(E_m + 0.8J_i)}{J_i} \right), \text{ кэВ/см}, \quad (2)$$

где Z_i – атомный номер i -го элемента мишени; A_i – атомный вес i -го элемента, г/моль; C_i – массовая концентрация i -го элемента; M – число элементов, входящих в состав вещества; J_i – эффективный потенциал ионизации i -го элемента, кэВ.

Средний потенциал ионизации, которым является средняя потеря энергии на взаимодействие при учете всех возможных процессов потери энергии, дается эмпирическим соотношением Бергера –Слетзера [4]:

$$J = (9.76 \cdot Z_i + 58.5 \cdot Z_i^{-0.19}) \cdot 10^{-3}, \text{ кэВ}.$$

Для каждого электрона производится расчет траектории и потерь энергии на ее длине до тех пор, пока величина его энергии вследствие неупругого рассеяния не уменьшится до энергии электронов в твердом теле или до произвольной пороговой энергии, которая обычно инициализируется как энергия, при которой симулируемые процессы не проявляются (~ 500 эВ).

2. Результаты имитационного моделирования

Алгоритм симуляции транспорта электронов методом Монте-Карло реализован в ППП Matlab в виде программного комплекса, в результате работы которого могут быть получены: геометрическая 3D-визуализация области взаимодействия электронов с веществом (рис. 2а), соответствующие двумерные проекции (рис. 2б), графическое представление потерь энергии электронов в веществе (рис. 3а) и числа электронов по глубине в исследуемом объекте (рис. 3б).

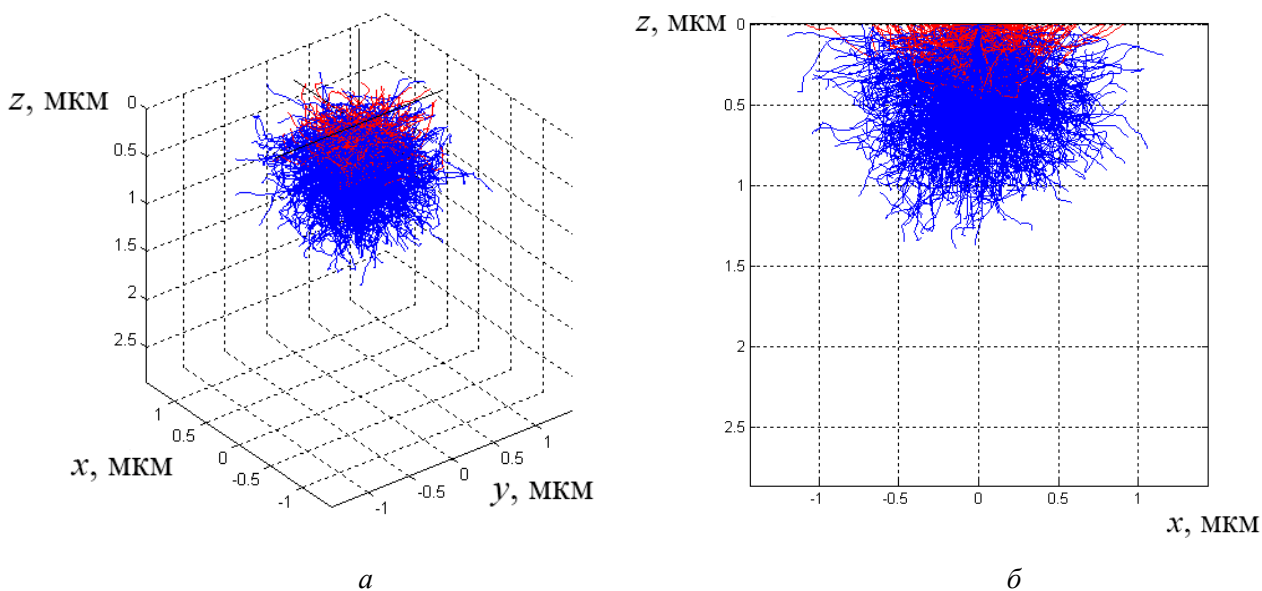


Рис. 2. Результат расчета электронных траекторий в модельном образце LiNbO_3 : а – 3D-изображение, б – 2D-проекция (электронные пучки с энергией старта $E_0=10$ кэВ, $N=1000$ историй электронов, диаметр зонда $d=0.2$ мкм).

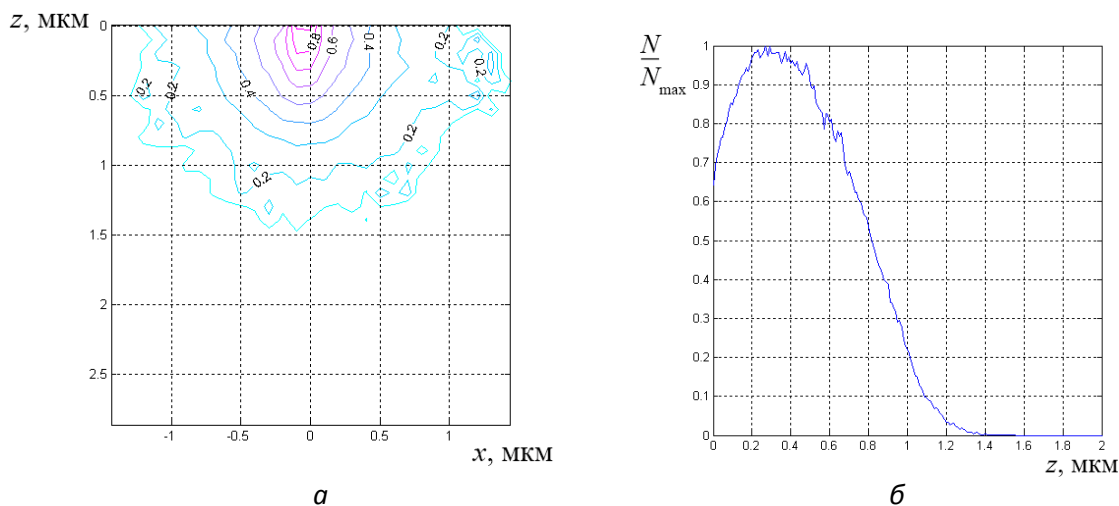


Рис. 3. Графическое распределение потерь энергии – а; проникновение электронов по глубине – б (кристалл LiNbO_3 , $d=0.2$ мкм, $E_0=25$ кэВ, $N=10000$).

3. Использование технологии параллельных вычислений

Алгоритмы моделирования, основанные на модификациях метода Монте-Карло, имеют большое число независимых вычислительных ветвей. В то же время такие алгоритмы требуют огромного объема арифметических вычислений. Эти обстоятельства определяют высокую пригодность подобного рода алгоритмов для реализации на многопроцессорных компьютерах [5].

Рассмотренный алгоритм расчета транспорта электронов обладает высокой степенью однородности и в силу независимости траекторий частиц, что позволяет проводить расчеты, используя несколько параллельных потоков.

Применение метода Монте-Карло для моделирования электронных траекторий в материалах требует значительных вычислительных ресурсов и предполагает использование многопроцессорных компьютеров.

Независимость моделирования траекторий электронов позволяет проводить серию расчетов одновременно. При этом в каждый момент времени разные расчеты серии находятся на разных этапах.

Для тестирования программы использовался кластер из двух компьютеров на базе процессоров Intel Core i7 с 8 Гб оперативной памяти каждый. Процессоры компьютеров содержат по 4 ядра, что суммарно дает 8 физических ядер или 16 логических благодаря технологии Hyper-threading. Передача данных между компьютерами осуществлялась по локальной сети с пропускной способностью 1 Гб/с. При такой скорости передачи данных и объеме передаваемой информации временные потери при обмене между узлами кластера незначительны и не влияют на результаты эксперимента.

Для анализа характеристик оптимизации с использованием технологии параллельного программирования проведена серия вычислений на кластере. Обработка полученных данных осуществлена с помощью метода наименьших квадратов.

На рис. 4 показана зависимость времени расчета от количества используемых ядер процессоров. Анализируя полученные данные, можно утверждать, что при увеличении числа ядер, участвующих в расчетах, время моделирования экспоненциально уменьшается.

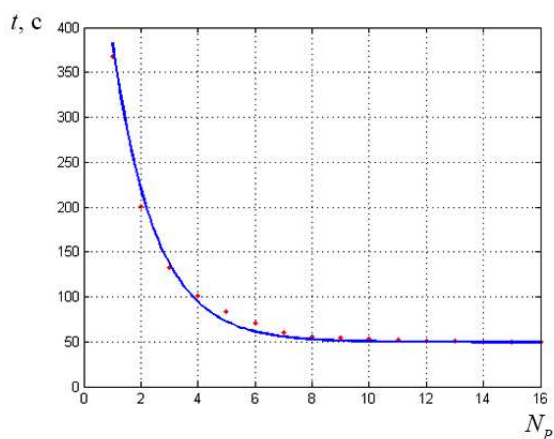


Рис. 4. Зависимость времени расчета (t) от количества используемых ядер процессора (N_p) (кристалл LiNbO_3 , $E_0 = 25$ кэВ, количество электронов = 10000).

Заключение

Разработаны эффективные алгоритмы математического моделирования транспорта электронов с использованием параллельных технологий. Эти алгоритмы построены с учетом особенностей проведения вычислений на многопроцессорных компьютерах. Реализовано программное приложение, рассчитывающее трехмерную геометрическую визуализацию области взаимодействия электронов с веществом, соответствующие двумерные проекции, графическое представление потерь энергии электронов в веществе.

1. Гоулдстейн, Дж., Ньюбери, Д., Эчлин, П. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. – М.: Мир, 1984. – 348с.

2. Масловская, А.Г. Сивунов, А.В. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло электронных траекторий в полярных диэлектриках при воздействии электронными пучками средних энергий // Вестник СГТУ. – 2012. – № 2 (65). – С. 53-58.

3. Molina, P., Ramírez, M.O., García-Sole, J., Bausá, L.E. Effect of electron beam writing parameters for ferroelectric domain structuring $\text{LiNbO}_3:\text{Nd}^{3+}$ // Optical Materials. – 2009. – V.31. – P. 1777-1780.

4. Аккерман, А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 200 с.
5. Жуковский, М.Е., Усков, Р.В. Математическое моделирование радиационной эмиссии электронов на гибридных суперкомпьютерах // Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13. – С. 271-279.