

4. Троицкий, В.А., Карманов, М.Н., Троицкая, Н.В. Неразрушающий контроль качества композиционных материалов // Техническая диагностика и неразрушающий контроль. – 2014. – № 3. – С. 29-33.
5. Бойцов, Б.В., Васильев, С.Л., Громашев, А.Г., Юргенсон, С.А. Методы неразрушающего контроля, применяемые для конструкций из перспективных композиционных материалов [Электронный ресурс] // Труды МАИ (Электронный журнал). – 2011. – № 49. Режим доступа: http://mai.ru/upload/iblock/3c1/metody-nerazrushayushchego-kontrolya_-primenyaemye-dlya-konstruktsiy-iz-perspektivnykh-kompozitsionnykh-materialov.pdf
6. Неразрушающий контроль: Справочник: В 7 т. – Т. 3. Ультразвуковой контроль / И.Н. Ермолов, Ю.В. Ланге; под общ. ред. В.В. Клюева. – М.: Машиностроение, 2004. – 864 с.
7. Бреховских, Л.М. Волны в слоистых средах. – М.: Наука, 1973. – 343 с.
8. Зинченко, В.Ф., Негреева, С.Н. Исследование взаимосвязей между некоторыми показателями структуры и физико-механических свойств органо- и углепластиков. // Методы и средства диагностики несущей способности изделий из композитов. – Рига: «Зинатне», 1983. – С. 158-165.

УДК 537.533.9:537.226.4

А.Г. Масловская, А.В. Павельчук

ОЦЕНКА ПОЛЕВЫХ ЭФФЕКТОВ ИНЖЕКТИРОВАННЫХ ЗАРЯДОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ, ОБЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫМИ ПУЧКАМИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ

В работе представлены результаты моделирования полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектрических материалах при исследовании методами растровой электронной микроскопии. Физико-математическая модель основана на диффузионно-дрейфовом подходе, который включает гибридную схему расчета транспорта электронов в облученной мишени и алгоритм вычисления динамических характеристик процесса зарядки. Приведены данные вычислительного эксперимента по оценке характеристик электронно-индуцированной зарядки на примере сегнетоэлектрического кристалла танталата лития.

Ключевые слова: электронное облучение, растровый электронный микроскоп, сегнетоэлектрик, процесс зарядки диэлектриков, модель динамической зарядки, вычислительный эксперимент.

ESTIMATION OF INJECTED CHARGE FIELD EFFECTS IN FERROELECTRICS IRRADIATED BY AVERAGE ENERGY ELECTRON BEAMS

The paper presents results of simulation of injected charge field effects in ferroelectrics at diagnostics with scanning electron microscope techniques. The physicomathematical model is based on drift-diffusion approach which includes a hybrid computational scheme of electron transport in the irradiated target and an algorithm of calculation of dynamic charging process characteristics. Data of a computing experiment were proposed to estimate of electron beam-induced charging characteristics on the example of lithium tantalate ferroelectric crystal.

Key words: electron irradiation, scanning electron microscope, ferroelectric, process of dielectric charging, model of dynamic charging, computing experiment.

Введение

В настоящее время одним из известных способов диагностики и модификации электрических свойств различных сегнетоактивных материалов является метод растровой электронной микроскопии. Это связано с высокой чувствительностью сегнетоэлектриков по отношению к воздействиям электронного зонда, что позволяет анализировать свойства изучаемых образцов, получать отклик, создавать способы формирования изображения доменных структур и др. При электронной бомбардировке сегнетоэлектрика на его поверхности и в объеме поглощенные электроны могут образовывать локальные заряженные области. Эффект зарядки возникает при любых увеличениях РЭМ и любых реальных токах зонда [1-2]. Исследованию вопроса зарядки диэлектрических материалов при изучении методами РЭМ посвящен широкий ряд работ как теоретического, так и экспериментального характера. В частности, эффект локальной зарядки сегнетоэлектриков положен в основу экспериментальных методов создания периодических доменных структур под действием электронных пучков [3].

Одним из математических подходов, используемых для формализации процессов зарядки в образце диэлектрика, является диффузионно-дрейфовый подход [4-6]. В серии предшествующих работ была предложена математическая модель эффектов зарядки сегнетоэлектриков при электронном облучении на основе учета процессов собственной радиационно-стимулированной проводимости материала и данных стохастического моделирования транспорта электронов в веществе [6-8]. Целью данной работы является оценка полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках в процессе переориентации доменной структуры, индуцированной электронным облучением, на основе данных вычислительного эксперимента по моделированию динамических характеристик электронно-стимулированной зарядки образцов.

Базовая математическая модель процесса зарядки и основные концепции вычислительной схемы реализации модели

В основе модели процесса динамической зарядки сегнетоэлектриков лежит обобщенный подход, основанный на совместном решении уравнения непрерывности и локально-мгновенного уравнения Пуассона. Модифицированная математическая модель [6-8] включает диффузионно-реакционно-дрейфовое уравнение, уравнение Пуассона и уравнение, обеспечивающее связь между потенциалом и напряженностью поля, созданного инжектированными зарядами:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = I - \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \cdot \rho^2 - \mu_n \cdot (\mathbf{E}, \text{grad } \rho) + D \Delta \rho, \\ \Delta \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \phi, \end{cases} \quad (1)$$

где ρ – объемная плотность распределения зарядов, Кл/м³; ϕ – распределение потенциала, В; \mathbf{E} – напряженность поля, В/м; ε – удельная диэлектрическая проницаемость среды; ε_0 – диэлектрическая постоянная, Ф/м; D – коэффициент диффузии электронов, м²/с; μ_n – подвижность электронов, м²/(В·с); I – генерационное слагаемое, Кл/(м³·с).

Постановка задачи (1) требует задания начального и граничных условий [8]. Для численной реализации модели необходимо также определить геометрию модельной среды и взаимного положения электронного зонда, физические характеристики образца, параметры сканирования и функцию источника I с использованием данных моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло [9].

Вычислительная схема решения уравнений с частными производными (1) строилась с использованием конечно-разностного метода переменных направлений. Схема характеризуется быстрой сходимостью и абсолютной устойчивостью решения. Для решения данного класса прикладных задач

разработано программное приложение в среде ППП Matlab, которое позволяет проводить расчет транспорта электронов в облученных диэлектриках и, как следствие, дает возможность оценить глубину проникновения, форму области взаимодействия пучка с мишенью и ввести аппроксимацию функции потерь энергии электронов в веществе. Функционал приложения дает возможность проводить расчет характеристик процесса зарядки при электронном облучении: пространственного распределения потенциала, векторного поля напряженности, электронно-стимулированной поляризации в образце.

Вычислительный эксперимент и результаты моделирования

Вычислительный эксперимент проводился по отношению к сегнетоэлектрическому кристаллу танталату лития (LiTaO_3). Выбрана цилиндрическая геометрия образца, размеры которого соответствовали значениям $Z=1$ мм, $R=3$ мм; вывод результатов актуализирован для градиентной зоны. Для расчета начальной плотности распределения зарядов были установлены следующие параметры: стартовая энергия пучка $E_0=25$ кэВ, поверхностная плотность инжектированных зарядов $\sigma_{surf}=10$ К/м² при токе зонда $I_{pr}=100$ пА и площади облучаемого пятна $S=4$ мкм². В этом случае генерационное слагаемое в (1) равно нулю и расчету подлежат характеристики процесса релаксации инжектированных зарядов. Аппроксимация $\rho_0(r, z, t_0)$ проводилась с помощью распределения Гаусса:

$$\rho_0(r, z, t_0) = (1 - \eta) \frac{\sigma_{surf} \cdot S}{\Delta V} \exp\left(-\frac{(\bar{r} - \delta_1)^2}{2\delta_2^2}\right), \quad \bar{r} = \sqrt{r^2 + z^2}, \quad (2)$$

где $\delta_1 = 0.475$ мкм, $\delta_2 = 0.384$ мкм – параметры, устанавливаемые из приближения данных функции потерь энергии электронами в веществе методом наименьших квадратов; ΔV – объем внутреннего источника зарядов, описываемый половиной эллипсоида с полуосями $\delta_r = 1.2$ мкм, $\delta_z = 1.8$ мкм; $\eta = 0.376$ – коэффициент вторичной электронной эмиссии (все параметры определены по данным моделирования электронных траекторий методом Монте-Карло, число симулируемых траекторий $N=5000$).

Для моделирования динамических характеристик процесса релаксации заряда инициализированы следующие параметры образца: диэлектрическая проницаемость, коэффициент диффузии и подвижность электронов. На рис. 1 приведены: модельное распределение потенциала и распределение абсолютного значения напряженности поля по глубине в начальные моменты времени.

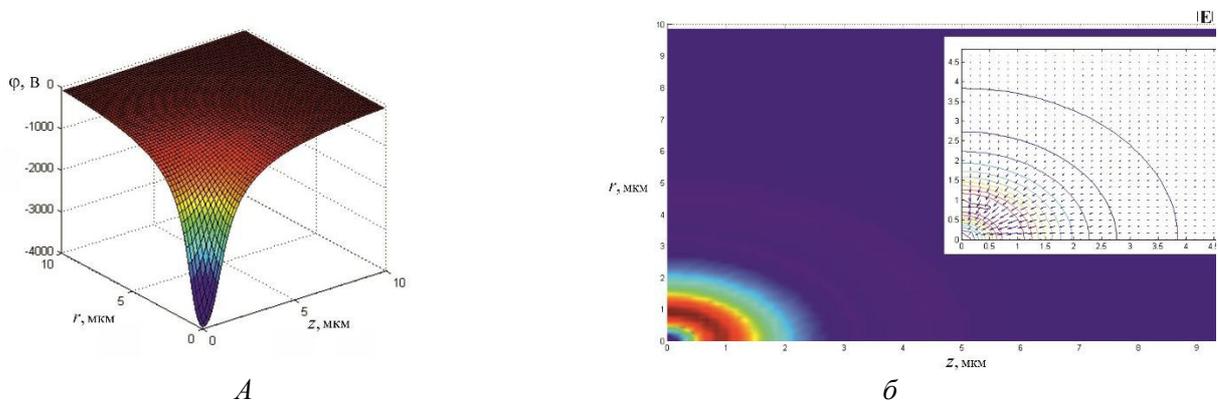


Рис. 1. Пространственное распределение потенциала – а; абсолютное значение электронно-индуцируемой напряженности поля и соответствующее векторное поле на вставке – б в кристалле LiTaO_3 .

Поле на границе зоны инжекции превышает коэрцитивное поле для танталата лития ($2.1 \cdot 10^7$ В/м). Это означает, что инжекция пучка электронов в образец приводит к накоплению заряда, поле которого способно инициировать интенсивные поляризационные процессы в доменах, ориентированных

«хвост-к-лучу». Вычислительный эксперимент позволяет варьировать значения поверхностной плотности инжектированных зарядов σ_{surf} и стартовой энергии зонда E_0 . Как показали расчеты, зависимости значений напряженности поля (измеренные на фиксированном расстоянии от инжекционной зоны) не являются линейными функциями σ_{surf} и E_0 . Так, при значении $\sigma_{surf}=1 \text{ К/м}^2$ поле инжектируемых зарядов не способно стимулировать поляризационные процессы в LiTaO_3 .

1. Cazaux, J. Mechanisms of charging in electron spectroscopy // Journal of electron spectroscopy. – 1999. – V. 105. – P. 155-185.
2. Sessler, G.M., West, J.E. Charging of polymer foils with monoenergetic low-energy electron beams // Appl. phys. lett. – 1970. – V. 17, № 12. – P. 507-509.
3. 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_3 by direct electron beam lithography // J. Appl. Phys. – 2003. – V. 93. – P. 9943-9947.
4. Suga, H., Tadokoro, H., Kotera, M. A simulation of electron beam induced charging-up of insulators // Electron microscopy. – 1998. – V. 1. – P. 177-178.
5. Raftari, B., Budko, N.V., Vuik, C. Self-consistence drift-diffusion-reaction model for the electron beam interaction with dielectric samples // J. Appl. Phys. – 2015. – V. 118. – P. 204101 (17).
6. 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.
7. Maslovskaya, A., Pavelchuk, A. Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM // Ferroelectrics. – 2015. – V. 476. – P. 157-167.
8. Pavelchuk, A.V., Maslovskaya, A.G. Simulation of internal charge distribution and spatial charge characteristics of ferroelectrics irradiated by focused electron beam // Proc. SPIE 10176, Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics, 2016. – P. 101760P(12); doi:10.1117/12.2268165.
9. Сивунов, А.В., Масловская, А.Г. Компьютерное моделирование области взаимодействия пучков электронов с облученными сегнетоэлектрическими материалами // Вестник Иркутского гос. технического ун-та. – 2013. – № 3. – С. 73-79.

УДК 666.96:549.67

С.В. Ланкин

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПИСАНИЕ ПЕРЕНОСА ВЛАГИ И ТЕПЛА В ПОРИСТОМ МАТЕРИАЛЕ ТИПА КЛИНОПТИЛОЛИТА

В статье приведено теоретическое описание переноса влаги и тепла в микропористых изотропных цеолитах типа клиноптилолита для устойчивого стационарного состояния.

Ключевые слова: клиноптилолит, массоперенос, водяной пар, жидкая вода в порах, адсорбционная вода, уравнения тепло-влаги-переноса, изотермы сорбции.

A QUANTITATIVE DESCRIPTION OF THE TRANSPORT OF MOISTURE AND HEAT IN A POROUS MATERIAL SUCH AS CLINOPTILOLITE

The paper presents a theoretical description of the transport of moisture and heat in microporous isotropic zeolites of the clinoptilolite type for a stable stationary state.

Key words: clinoptilolite, mass transfer, water vapor, liquid water in pores, adsorption water, heat-moisture transfer equations, sorption isotherms.