

0.1. Павельчук А.В., Черняк Е.А., Масловская А.Г. Решение полевых задач воздействия электронного облучения на полярные диэлектрические материалы: гибридные вычислительные схемы и приложения

В настоящее время актуальным направлений функциональной диагностики и модификации свойств материалов является применение аналитических возможностей растровой электронной микроскопии. Интенсивное развитие экспериментальных методик растровой электронной микроскопии во многом базируется на обосновании и интерпретации законов и механизмов воздействия электронного облучения на облучаемую мишень. Исследование динамических процессов, протекающих в объектах в неравновесных условиях электронного облучения, можно проводить на основе математического моделирования [1], [2]. Одними из важнейших полевых эффектов полевого воздействия электронных пучков на диэлектрические материалы являются нагрев и зарядка образцов. Настоящая работа представляет результаты построения вычислительных схем, предназначенных для реализации модели эволюционных инжекционных, тепловых и зарядовых процессов, возникающих в полярных диэлектриках.

Моделирование транспорта электронов в облученной мишени проводилось на основе метода Монте-Карло. Результат позволяет описать геометрию области взаимодействия зонда с исследуемыми материалами, а также ввести в рассмотрение функцию внутреннего источника. С помощью вычислительного эксперимента определены для режимов с нанесенными на грань металлическими электродами критические значения толщины покрытия. Модели теплопроводности и зарядки сформулированы в детерминированных постановках. Реализация моделей основана на построении гибридных схем, включающих стохастическое моделирование транспорта электронов и решение эволюционных многомерных уравнений параболического типа сеточными методами.

В математической постановке тепловой задачи учтена возможность реализации нелинейного температурного режима для полярных материалов и использования металлических электродов. Вычислительная схема решения задачи теплопроводности строилась комбинированным сеточным методом, включающим конечно-разностную схему Кранка-Николсона и конечно-элементный метод Галеркина. Модель процесса зарядки полярного диэлектрика электронным зондом включает уравнение Пуассона и уравнение непрерывности, построенного с учетом собственной радиационно-стимулированной проводимости образца. Алгоритм решения уравнения непрерывности (уравнения типа «реакция-диффузия») построен с помощью неявной схе-

мы расщепления и реализован методом прогонки. Решение уравнения Пуассона проведено конечно-элементным методом.

На основе программной реализации конструируемых вычислительных схем проведены модельные эксперименты по исследованию тепловой нагрузки электронного зонда на исследуемые материалы и расчету характеристик зарядки при заданных наборах входных параметров.

Список литературы

- [1] MASLOVSKAYA A. PAVELCHUK A. Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM // *Ferroelectrics* — , 2015. — Vol. 476. — P.157-167.
- [2] MASLOVSKAYA A., PAVELCHUK A. Simulation of heat conductivity and charging processes in polar dielectrics induced by electron beam exposure // In: *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* , 2015. — Vol. 77. — P. 012119(6).