

На правах рукописи



Павельчук Анна Владимировна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ ЗАРЯДКИ ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ
В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Комсомольск-на-Амуре – 2018

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Амурский государственный университет»

Научный руководитель: **Масловская Анна Геннадьевна,**
доктор физико-математических наук,
доцент, профессор кафедры
«Математический анализ и моделирование».
ФГБОУ ВО «Амурский государственный
университет», г. Благовещенск

Официальные оппоненты: **Нефедев Константин Валентинович,**
доктор физико-математических наук,
доцент, профессор кафедры компьютерных
систем. Федеральное государственное
автономное образовательное учреждение
высшего образования «Дальневосточный
федеральный университет», г. Владивосток

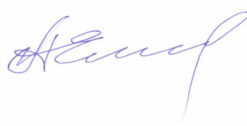
Прохоров Игорь Васильевич,
доктор физико-математических наук,
заместитель директора по научной работе.
Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт прикладной ма-
тематики Дальневосточного отделения
Российской академии наук, г. Владивосток

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение
высшего образования «Тихоокеанский
государственный университет», г. Хабаровск

Защита диссертации состоится «31» мая 2018 г. в 13⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 999.055.04 при Комсомольском-на-Амуре государственном университете (ФГБОУ ВО «КНАГУ») по адресу: 681013, г. Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, д. 27, корп. 3, ауд. 201/3.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Комсомольского-на-Амуре государственного университета: <https://sovet.knastu.ru>
Автореферат разослан «__» _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д-р техн. наук, профессор



Евстигнеев
Алексей Иванович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Методы математического моделирования и разработка систем компьютерного моделирования – обязательные составляющие в широком спектре научных исследований, в том числе при изучении условий модификации перспективных материалов внешними потоками энергии. Одна из приоритетных в этом направлении – проблема изучения и обоснования основных законов и механизмов воздействия электронного облучения на функциональные диэлектрики в связи с применением методов растровой электронной микроскопии для диагностики и модификации свойств таких материалов. Несмотря на значительный прогресс в развитии экспериментальных методик, анализ многих важных эффектов взаимодействия электронного облучения с диэлектриками по-прежнему представляет собой сложную экспериментальную задачу, поэтому информацию о поведении физических систем зачастую получают на основе математических моделей.

Современные подходы к математическому моделированию динамических процессов взаимодействия электронных пучков с диэлектриками основываются на обширном арсенале методов. Основными классами математических моделей, применяемых для решения такого рода прикладных задач, как правило, являются дискретно-стохастические модели, описывающие транспорт электронов, и непрерывно-детерминированные модели, позволяющие проводить расчет полевых эффектов инжектированных зарядов. Методики расчета и программные реализации моделей транспорта и эмиссии электронов в наноструктурных и объемных функциональных материалах представлены в исследованиях D.C. Joy, A.Ф. Аккермана, R. Renoud, D. Drouin, M. Akarsu, O. Ozbaz, E. Napchan, B.C. Кортова, H. Zhang и др. Для математического моделирования основных характеристик процесса зарядки диэлектриков на практике часто применяют детерминированный подход (J. Cazaux, G.M. Sesler, K. Ohya, A. Melchiger, D.S.H. Chan, M.B. Андрианов, С.С. Борисов и др.), в том числе сеточные методы реализации диффузионно-дрейфовых моделей (H. Suga, H. Tadokoro, M. Kotera, С.В. Поляков, B. Raftari и др.). Вычислительные схемы для решения многомерных эволюционных задач математической физики могут быть построены на базе экономичных методов расщепления, концепции которых были сформулированы Г.И. Марчуком, Н.Н. Яненко, Д. Писменом, Г. Рэчфордом, А.А. Самарским, В.М. Ковеня, С.К. Годуновым, Дж. Дугласом. Основы сеточных методов моделирования конвективно-диффузионных систем приводятся в базовых обзорах А.А. Самарского, S.V. Patankar, K.W. Morton, W. Hundsdorfer, развиты в трудах П.Н. Вабищевича, В.Г. Зверева, Tony W.H. Sheu, Z. Buckova и др. Теоретический базис конечно-разностных методов решения функционально-дифференциальных уравнений с частными производными заложен в работах В. Zubik-Kowal, P.J. Van Der Houwen, X.Lu, C.R. Jin, A.B. Кима, C.V. Pao, В.Г. Пименова, А.Д. Мышкиса и адаптирован для решения уравнений параболического типа с запаздыванием в работах Y.F. Jin, J.A. Ferreira, Z.B. Zhang, L. Turyn, D. Li, A.B. Лекмцева, P. Garcia, J.A. Martin и др.

Однако многие вопросы, касающиеся интегрированных математических моделей, вычислительных алгоритмов и систем моделирования неравновесных процессов в полярных диэлектриках, облученных электронами, до сих пор остаются открытыми. Специфика рассматриваемых проблем вызывает необходимость развития

подходов к математическому и компьютерному моделированию корпоративных эффектов инжекции электронов и зарядки полярных диэлектриков, их адаптации для прогнозирования свойств материалов. В частности, дальнейшего анализа требует математическая модель электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков, которая включает уравнения с частными производными, допускающие нелинейные режимы и запаздывание по времени, специально заданные граничные условия и функцию внутреннего источника, соответствующую физическому процессу.

Объектом нашего исследования являются математические модели динамических диффузионно-реакционно-дрейфовых процессов в открытых физических системах, **предметом** исследования – математическая модель динамической зарядки полярных диэлектриков в условиях электронного облучения.

Цель диссертационной работы – разработка специального математического, алгоритмического и программного обеспечения для моделирования и последующего анализа динамики процесса зарядки в полярных диэлектриках при электронном облучении.

Для достижения поставленной цели был сформулирован и решен ряд научных **задач**:

1. Развитие подхода к численному моделированию нестационарного процесса электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков на основе конструирования эффективной вычислительной схемы реализации математической модели.
2. Разработка модифицированной математической модели эволюционного процесса зарядки полярных диэлектриков с учетом эффекта запаздывания по времени и конструирование вычислительного алгоритма для ее реализации.
3. Синтез алгоритмов стохастического моделирования транспорта электронов в облученной мишени и расчета характеристик процесса зарядки полярных диэлектриков.
4. Разработка интегрированного комплекса программ для компьютерного моделирования полевых эффектов в диэлектриках на основе реализации гибридной вычислительной схемы.
5. Проведение с помощью разработанной системы компьютерного моделирования вычислительных экспериментов по комплексному исследованию закономерностей процесса зарядки типичных сегнетоэлектриков, находящихся в неравновесных условиях электронного облучения.

Методы и средства решения научных задач. В работе использована общая методология математического и компьютерного моделирования. Вычислительные схемы решения многомерных начально-граничных и краевых задач математической физики строились с применением метода расщепления. Для оценок области взаимодействия пучка с мишенью и аппроксимации функции источника использованы метод Монте-Карло и метод наименьших квадратов. Для создания комплекса программ на основе разработанных алгоритмов применена среда программирования Matlab. Верификация отдельных результатов моделирования проведена на платформе COMSOL Multiphysics.

Новизна исследования определяется следующими его результатами:

1. Предложена гибридная вычислительная схема реализации математической модели нестационарного процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков, основанная на расчете методом Монте-Карло транспорта электронов

в облученной мишени и конструировании процесса решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с использованием модификации экономичного метода переменных направлений.

2. Предложены авторская математическая модель динамической зарядки диэлектриков в присутствии эффекта запаздывания и вычислительный алгоритм для реализации модели, построенный с использованием эффективной схемы расщепления.

3. Проведен синтез вычислительных алгоритмов для реализации комплексной системы дискретно-стохастического моделирования процессов инжекции электронов и непрерывно-детерминированного моделирования зарядки диэлектриков.

4. Разработан программный комплекс, интегрирующий модули расчета электронных траекторий и характеристик процесса зарядки. Разработанное программное приложение предоставляет возможности для автоматизации проводимых вычислений, экспорта данных, обработки результатов с одновременной трехмерной визуализацией характеристик процесса в установившемся и динамическом режимах.

5. С использованием технологии математического моделирования и на основе вычислительных экспериментов впервые проведены комплексные исследования характеристик процесса зарядки (распределение потенциала, напряженности поля и поляризации) для ряда сегнетоэлектриков при параметрах, соответствующих режимам управляемого переключения под действием электронного зонда.

Теоретическая и практическая значимость. Решение поставленных в диссертации задач имеет важное значение для развития системно-комплексного подхода в задачах математического моделирования рассматриваемых физических систем, включающего набор взаимосвязанных этапов (формулировка физической модели и математическая постановка задачи моделирования; алгоритмизация и синтез вычислительных схем дискретно-стохастической модели транспорта электронов и непрерывно-детерминированной модели полевых эффектов инжектированных зарядов; программная реализация интегрированной системы моделирования; верификация и анализ результатов вычислительного эксперимента, нацеленного на всесторонний учет специфических откликов моделируемых систем).

Разработанные в диссертационной работе алгоритмы, вычислительные средства и система компьютерного моделирования позволяют проводить комплексный анализ динамики инжекционных эффектов в полярных диэлектриках и могут стать основой для прогнозирования закономерностей поведения исследуемых систем по данным вычислительного эксперимента. В частности, полученные результаты способствуют решению задач идентификации процессов и интерпретации откликов, наблюдаемых в методиках доменной инженерии – при управляемом формировании полярного состояния сегнетоэлектриков под действием электронного луча.

Математические модели и программные средства, разработанные в диссертации, используются в учебном процессе ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет» при выполнении научно-исследовательских работ, в курсовом проектировании, при написании выпускных квалификационных работ студентами, обучающимися по направлениям подготовки «Прикладная математика и информатика» (уровни бакалавриата и магистратуры).

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Математическая модель процесса зарядки диэлектриков при электронном облучении может быть эффективно реализована на основе гибридной вычислительной

схемы, предполагающей дискретно-стохастический расчет транспорта электронов и численное решение дифференциальной задачи с использованием предложенной модификации метода переменных направлений.

2. Сформулированная математическая модель предоставляет возможность формализации процесса зарядки диэлектриков в присутствии эффекта запаздывания. Сконструированный вычислительный алгоритм, базирующийся на сеточном решении функционального диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения, служит основой реализации математической модели и разработки комплексной системы компьютерного моделирования процессов зарядки.

3. Разработанный программный комплекс, интегрирующий приложения по компьютерному моделированию транспорта электронов и характеристик зарядки, позволяет с применением технологии вычислительного эксперимента проводить исследования закономерностей полевых эффектов в полярных диэлектриках с учетом вариации режимов и условий электронного зондирования.

Достоверность и обоснованность результатов. Достоверность полученных результатов подтверждается использованием фундаментальных принципов при построении математических моделей физических процессов, корректными физико-математическими постановками задач, обоснованностью принятых ограничений, применением современных апробированных численных методов и средств компьютерного моделирования, согласованием полученных результатов с частными результатами других авторов и с решениями эталонных задач для предельных режимов.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на следующих научных мероприятиях: XIV Международной научной конференции им. А.Ф. Терпугова «Информационные технологии и математическое моделирование» (Томск, 2015 г.); Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics, (Хабаровск, 2016 г.); Всероссийской молодежной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» (Благовещенск, 2014 г., 2017 г.); XXVIII Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-28» (Саратов, 2016 г.); XVII региональной научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее» (Благовещенск, 2016 г.); Всероссийской заочной научно-практической конференции «Математическое и экспериментальное моделирование физических процессов» (Биробиджан, 2015-2017 гг.); 7-й научно-практической Internet-конференции «Междисциплинарные исследования в области математического моделирования и информатики» (Ульяновск, 2016 г.); XXV Международной научно-технической конференции «Прикладные задачи математики» (Севастополь, 2017 г.); Международной молодежной научно-практической конференции «Моделирование. Фундаментальные исследования, теория, методы и средства» (Новочеркасск, 2017 г.). Результаты работы неоднократно докладывались и обсуждались на научно-методических семинарах кафедры «Математический анализ и моделирование» Амурского государственного университета.

Связь работы с научными темами и программами. Основные результаты диссертационной работы были получены автором при проведении исследований, выполнявшихся в 2014-2017 гг. в рамках научных тем: проект НИР № 1158/2014 «Исследование электрических и тепловых процессов в неоднородных диэлектрических системах» – выполнение государственной работы «Проведение научно-

исследовательских работ (фундаментальных научных исследований, прикладных научных исследований и экспериментальных разработок)» в рамках базовой части государственного задания вузу на 2014-2016 гг. (№ гос. рег. НИР: 114030440030); инициативная НИР ФГБОУ ВО «АмГУ» «Разработка численных алгоритмов исследования и компьютерное моделирование физических систем» (№ гос. рег. НИР 01201251796) в 2014-2015 гг.; инициативная НИР ФГБОУ ВО «АмГУ» «Разработка систем компьютерного моделирования процессов неравновесного воздействия концентрированных потоков энергии на функциональные материалы» (№ гос. рег. НИР АААА-А16-116033010062-3) в 2016-2018 гг., а также по темам, поддержанным грантами «Исследовательский проект» ФГБОУ ВО АмГУ в 2016-2017 гг.

Публикации и личный вклад автора. По материалам диссертации опубликованы 24 работы, в том числе 4 статьи в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ (одна из которых входит в ядро Web of Science: Science Citation Index Expanded (база по естественным наукам)); 4 статьи в реферируемых изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus; 4 статьи в региональных изданиях; 12 материалов докладов в сборниках международных, всероссийских и региональных конференций. Получены два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Все результаты, изложенные в диссертации, получены автором лично или в соавторстве, при его непосредственном участии. Выбор направлений исследования, постановка прикладных задач и формализация математических моделей, анализ результатов моделирования осуществлены совместно с научным руководителем. Разработка вычислительных схем и алгоритмов, проектирование и программная реализация системы компьютерного моделирования, постановка и проведение вычислительных экспериментов проведены автором самостоятельно. Совместные работы опубликованы при определяющем вкладе соискателя в представленные исследования. В статье [3] И.А. Ковальскому принадлежит часть работы по разработке программного модуля; в публикации [6] Т.К. Барабаш принадлежит модель формирования тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в условиях электронного облучения; в работе [24] А.В. Сивунову принадлежит методика расчета тепловых эффектов воздействия электронного зонда на полярные материалы; соавторы других публикаций принимали участие в проведении отдельных расчетов, тестировании комплекса программ, частичной обработке результатов.

Соответствие паспорту специальности. Научные результаты, полученные в рамках диссертации, соответствуют трем пунктам паспорта специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (физико-математические науки).

П.4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента – в части разработки и реализации гибридной вычислительной схемы для математической модели процесса зарядки, основанной на расчете транспорта электронов методом Монте-Карло и численном решении диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с запаздыванием модифицированным методом переменных направлений, в виде комплекса программ, предназначенного для постановки и проведения вычислительных экспериментов.

П.5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента – в части аналитических исследований и прогнозирования на основе данных вычислительных экспериментов характеристик процесса электронно-индуцированной зарядки типичных сегнетоэлектриков при значениях управляющих параметров модели, соответствующих методикам растровой электронной микроскопии.

П.8. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования – в части разработки интегрированной системы компьютерного 3D-моделирования инжекционных и полевых эффектов воздействия электронного облучения на полярные диэлектрики.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографического списка. Рукопись диссертации содержит 181 машинописную страницу основного текста, 37 рисунков, перечень литературы из 201 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении даны краткое обоснование актуальности работы и ее общая характеристика, сформулированы цель и задачи, указаны методы исследования, представлены основные положения, выносимые на защиту, показаны научная новизна и практическая значимость работы, описана структура работы и функциональные связи между отдельными главами.

Первая глава («Теоретическое описание и методы математического моделирования процессов воздействия электронного облучения на полярные диэлектрики») представляет собой аналитический обзор литературных данных по фундаментальным основам и прикладным аспектам предметной области – математическому моделированию инжекционных и полевых эффектов в полярных материалах при электронном облучении.

Представлены теоретические основы для формализации процесса транспорта электронов в облученной мишени и математического моделирования эффекта электронно-индуцированной зарядки полярных материалов. Проведен анализ работ, посвященных описанию классических методов и средств математического моделирования динамического отклика сплошных сред на сосредоточенные энергетические воздействия, в части использования метода конечных разностей. Особое внимание уделено вопросам численного моделирования систем типа «конвекция-реакция-диффузия». Описаны базовые подходы для моделирования систем с запаздыванием по времени в постановке многомерных эволюционных задач математической физики.

В целом показано, что различным аспектам построения и реализации математическим моделями полевых эффектов, вызванных инжекцией электронов в облученных диэлектриках, посвящен достаточно широкий круг работ, тем не менее целый ряд вопросов остается далеким от полного разрешения. Разработанные математические модели либо описывают стационарные процессы зарядки, либо не учитывают специфику воздействия электронного облучения на полярные диэлектрики. В частности, модификация модели при радиационно-стимулированной проводимости объекта требует развития подходов к математическому моделированию диффузионно-реакционно-дрейфовых систем. Расширение теоретического базиса, с учетом эффекта запаздыва-

ния, приводит к необходимости разработки методов численного моделирования систем с запаздыванием для анализа и прогнозирования эффектов инжекции и зарядки по данным вычислительных экспериментов.

В заключительном разделе первой главы на основе анализа и обобщения информации перечисляются вопросы, подлежащие изучению, указываются этапы полного цикла построения и реализации математической модели неравновесной физической системы. Общая концепция научного исследования формулируется как развитие программно-целевого подхода к численному моделированию процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков на основе построения эффективных вычислительных методик и разработки проблемно-ориентированного программного обеспечения.

Во второй главе («Математическое обеспечение для системы моделирования процесса электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков») приведена постановка физико-математической модели процесса электронно-стимулированной зарядки диэлектриков и модификация модели с учетом эффекта запаздывания.

В разделе 2.1 формулируется концептуальная постановка задачи – провести математическое моделирование процессов стационарной и динамической зарядки диэлектриков при облучении электронными пучками средних энергий (в том числе с учетом явления запаздывания); формализовать алгоритм на основе эффективных вычислительных схем; разработать систему компьютерного моделирования; с использованием результатов вычислительного эксперимента провести анализ и установить закономерности процесса электронно-стимулированной зарядки типичных сегнетоэлектриков. Сформулирована система допущений, принятых при формализации модели, с учетом специфики предметной области: режимов сканирования, геометрии образца и внутреннего источника, физических характеристик объекта, условий экспериментального наблюдения.

В разделе 2.2 представлены различные подходы к построению последовательно усложняющихся математических моделей процесса зарядки диэлектриков на основе базовых соотношений математической физики.

В разделе 2.3 описываются схема построения стохастической модели транспорта электронов в облученной мишени и способ аналитического задания функции внутреннего источника.

Математическая модель транспорта электронов основана на физической модели однократных взаимодействий электронов с веществом. Метод моделирования электронных траекторий представляет собой вариацию метода Монте-Карло. Вычислительная схема включает следующие шаги. Электрон, обладающий некоторой энергией старта E_0 , падает перпендикулярно плоскости поверхности образца в некоторую точку P_0 с координатами $(0,0,0)$ (рис. 1). Диаметр пучка электронов определен значением d . Положение электрона в точке P_i задается с использованием значений углов рассеяния: ω_i – азимутальным углом, ϕ_i – углом отклонения. В результате взаимодействия с мишенью электрон может испытывать упругие или неупругие соударения или может быть отражен обратно из образца. Значения углов и вид взаимодействия (упругое и неупругое) после каждого акта рассеяния рассчитываются из соответствующих распределений с помощью случайных чисел.

Электрон между случайными событиями рассеяния проходит в образце путь длиной s_i с энергией E_i :

$$s = -\lambda \ln(\xi), \lambda = \frac{1}{N_0 \cdot \rho} \sum_{k=1}^M \frac{\omega_k \cdot A_k}{\sigma_k}, \quad (1)$$

где $\xi \in (0,1)$ – равномерно распределенная случайная величина; A_k – атомный вес, г/моль; σ_k – сечение рассеяния, см²; ω_k – массовая концентрация k -го элемента; M – число элементов, входящих в состав вещества; N_0 – число Авогадро, моль⁻¹; ρ – плотность, г/см³.

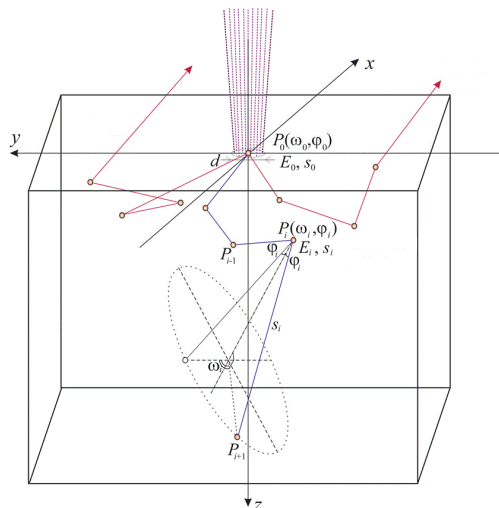


Рис. 1. Геометрическая схема для стохастической модели транспорта электронов.

Для полного сечения рассеяния использовано модельное сечение Мотта:

$$\sigma_k^{Mott} = \frac{4.7 \cdot 10^{-18} (Z_k^{1.33} + 0.032 Z_k^2)}{(E + 0.0155 Z_k^{1.33} \cdot E^{0.5}) (1 - 0.02 Z_k^{0.3} \cdot \exp(-u_k^2))}, \text{ cm}^2, \quad (2)$$

$$u_k = \lg(8E \cdot Z_k^{-1.33}),$$

где Z_k – атомный номер k -го элемента; E выражается в кэВ.

Для многокомпонентного вещества изменение энергии при неупругом рассеянии электронов выражается модифицированным законом Бете:

$$\frac{dE}{ds} = -75800 \frac{\rho}{E} \cdot \sum_{k=1}^M \omega_k \frac{Z_k}{A_k} \ln \left(\frac{1.166(E + 0.8J_k)}{J_k} \right), \text{ КэВ/см}, \quad (3)$$

где $J_k = (9.76Z_k + 58.5Z_k^{-0.19}) \cdot 10^{-3}$ – эффективный потенциал ионизации k -го элемента (соотношение Бергера-Слетзера), кэВ; Z_k – атомный номер k -го элемента.

Решение уравнения (3) при прохождении электроном расстояния (1) для каждой его позиции строилось численно с использованием метода Рунге-Кутты IV порядка. Расчет траектории и потерь энергии для каждой истории электрона проводится до тех пор, пока величина его энергии вследствие неупругого рассеяния не уменьшится до пороговой энергии $E_{th} \sim 0.05$ кэВ, при которой моделируемые процессы не проявляются. Имитационная модель реализуется для достаточно большого числа N_e историй электронов ($N_e \approx 1000-10000$), статистическая совокупность которых является достаточной для описания области взаимодействия пучка с мишенью.

С целью определения функциональной зависимости потерь энергии электронами объект покрывался сеткой с одинаковыми значениями шага по координатным осям. Далее следовал расчет среднего значения энергии всех электронов, которые в результате организованных методом Монте-Карло случайных блужданий оказались в

области пространства, ограниченного каждым кластером сетки: $E_l^{av} = \sum_{i=1}^n E_i / n$, где n – количество электронов, приходящихся на один кластер; E_i – значения их энергий в результате рассеяния. Аппроксимация пространственного распределения потерь энергии электронов в веществе строилась с помощью распределения Гаусса:

$$I_1 = I_0 (1 - \eta) \exp \left(-\frac{(\bar{r} - \delta_1)^2}{2 \cdot \delta_2^2} \right), \quad \bar{r} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (4)$$

где I_0 – нормировочный множитель с соответствующей физической размерностью; δ_1 и δ_2 – параметры, численно оцениваемые с помощью обработки данных методом наименьших квадратов, измеряемые в единицах размерности длины; η – коэффициент вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ).

В разделе 2.4 описывается математическая постановка задачи моделирования зарядки диэлектриков электронным зондом с учетом собственной радиационно-стимулированной проводимости материала. При математическом моделировании рассматривался случай высоковольтных РЭМ, что позволяет свести число независимых пространственных координат к двум – радиусу r и высоте z , при этом задача обладает цилиндрической симметрией, как показано на рис. 2.

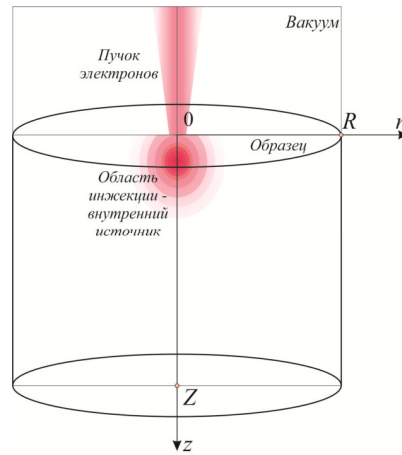


Рис. 2. Геометрия объекта и источника для математической модели процесса зарядки.

Будем считать, что сфокусированный пучок электронов начинает действовать в момент времени $t=0$ в плоскости $z=0$ и перпендикулярно поверхности образца. Тогда математическая модель представляется в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = D \Delta \rho - \mu_n \left(E_r \frac{\partial \rho}{\partial r} + E_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) - \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho^2 + G(r, z), \\ \Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \varphi, \end{cases} \quad (5)$$

где $0 < r < R$, $0 < z < Z$, $0 < t \leq T$;

$$\Delta = \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, & \text{при } r \neq 0 \\ 2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, & \text{при } r = 0 \end{cases}; \quad \rho(r, z, t) - \text{объемная плотность заряда, Кл/м}^3; R, Z -$$

геометрические размеры объекта, м; ε – диэлектрическая проницаемость материала.

ла; ε_0 – электрическая постоянная, Ф/м; $G(r, z)$ – функция внутреннего источника, Кл/(м³·с); φ – потенциал, В; E – напряженность поля, В/м; $D = \mu_n \frac{kT}{e}$ – коэффициент диффузии электронов, м²/с; μ_n – дрейфовая подвижность электронов, м²/(В·с); k – константа Больцмана, Дж/К; T – температура, К; e – заряд электрона, Кл.

Для замыкания математической формулировки диффузионно-реакционно-дрейфовое уравнение и уравнение Пуассона необходимо дополнить начальными условиями в момент времени $t_0 = 0$, при $0 \leq r \leq R$, $0 \leq z \leq Z$

$$\rho(r, z, t_0) = \rho^0(r, z), \quad E(r, z, t_0) = E^0(r, z), \quad \varphi(r, z, t_0) = \varphi^0(r, z) \quad (6)$$

и соответствующими физическому смыслу задачи граничными условиями

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \rho|_{z=Z} = 0, \quad \rho|_{r=R} = 0, \quad \text{при } t \in (0, T], \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \varphi|_{z=Z} = 0, \quad \varphi|_{r=R} = 0 \quad \text{при } t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (7)$$

Раздел 2.5 посвящен разработке модификации математической модели эволюционного процесса зарядки полярных диэлектриков с учетом эффекта запаздывания по времени. Принимая во внимание физические законы и механизмы, определяющие диффузионный характер модели процесса зарядки, можно предположить, что эффект запаздывания реакции системы на внешнее воздействие может быть учтен в соответствующем соотношении математической постановки задачи. В модификации модели примем, что система реагирует на изменение градиента плотности инжектированных зарядов изменением диффузионного тока не мгновенно, а с некоторым временным лагом t^* . Модифицируем представление плотности диффузионного тока с учетом временного запаздывания ('single-phase-lag' model): $\mathbf{j}^{dif}(r, z, t + t^*) = -D \cdot \text{grad} \rho(r, z, t)$. Последнее преобразуем к обобщенному виду, выражая плотность диффузионного тока относительно момента времени t . Для этого учтем вклад диффузионной составляющей в изменение плотности тока в текущий момент времени и момент времени «в прошлом»:

$$\mathbf{j}^{dif}(r, z, t) = -D \cdot \text{grad} \rho(r, z, t) - \bar{D} \cdot \text{grad} \rho(r, z, t - t^*), \quad (8)$$

где $\bar{D} = \gamma D$ – соответствующий коэффициент диффузии; $0 \leq \gamma \leq 1$ – константа.

Время запаздывания t^* введем в выражение для дивергенции плотности диффузионного тока. Уравнение непрерывности, с учетом суперпозиции вкладов диффузионного и дрейфового токов, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(r, z, t)}{\partial t} = D \Delta \rho(r, z, t) + \bar{D} \Delta \rho(r, z, t - t^*) - \frac{\mu_n}{e \varepsilon_0} \cdot \rho^2(r, z, t) - \\ - \mu_n \left(E_r \frac{\partial \rho(r, z, t)}{\partial r} + E_z \frac{\partial \rho(r, z, t)}{\partial z} \right) + G(r, z), \end{aligned} \quad (9)$$

где оператор Лапласа задается аналогично (5).

Тогда модифицированная постановка задачи моделирования будет представлять начально-граничную задачу для системы уравнений: функционально-дифференциального уравнения параболического типа (9), уравнения Пуассона и вы-

ражения, связывающего напряженность с потенциалом, определенных аналогично системе (5). При этом начальное условие (6) модифицируется с учетом задания предыстории процесса:

$$\rho(r, z, t) = \rho^0(r, z, t) \text{ при } -t^* \leq t \leq 0, \quad 0 \leq r \leq R, \quad 0 \leq z \leq Z. \quad (10)$$

Поскольку размеры градиентной зоны намного меньше характерных размеров объекта, при реализации модели в целях сокращения вычислительных затрат размеры расчетной области актуализированы для градиентной зоны с учетом требования выполнимости граничных условий.

В разделе 2.6 в соответствии с общей методологией моделирования приведены контрольные проверки корректности математической модели.

В третьей главе («Вычислительные схемы и алгоритмы расчета характеристик процесса динамической зарядки полярных диэлектриков в условиях электронного облучения») строится гибридная вычислительная схема для реализации математической модели зарядки полярных диэлектриков, основанная на синтезе алгоритма стохастического моделирования транспорта электронов в облученной мишени и конечно-разностной схемы решения задачи математической физики.

В разделе 3.1 приведено формальное представление алгоритма моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло, а также отмечены аспекты аналитического описания функции источника зарядов. Математическое моделирование транспорта электронов позволяет задать начальное распределение плотности зарядов в образце $\rho^0(r, z, t)$ при решении задачи моделирования релаксационных процессов или функцию, определяющую функцию источника $G(r, z)$, – для задачи моделирования динамики накопления заряда. Для описания зоны взаимодействия электронного пучка с объектом вводится аппроксимация геометрии области энерговыделения с помощью половины эллипсоида с характерными параметрами δ_r, δ_z .

В разделе 3.2 конструируется вычислительная схема решения полевой задачи. Для решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения предложена вычислительная методика, основанная на модификации метода переменных направлений. Вводится пространственно-временная сетка с шагами h_1, h_2 и τ соответственно по переменным r, z, t : $\omega_{h_1, h_2}^\tau = \{r_i = ih_1, i = \overline{1, N}, z_j = jh_2, j = \overline{1, M}, t^k = k\tau, k = 1, 2, \dots\}$ и на этой сетке аппроксимируется первое уравнение из (5) на верхнем временном слое $t^{k+1} = (k+1)\tau$. Конечно-разностный аналог уравнения непрерывности расщепляется на два, зависящих только от одной координаты. Для аппроксимации производной по времени и диффузионной компоненты используется схема Писмена-Рэчфорда, для аппроксимации дрейфового слагаемого на текущем временном подслое вводится схема Роберта-Вейсса, а для аппроксимации дрейфового слагаемого на предыдущем временном подслое – центрально-симметричная конечно-разностная аппроксимация. На $k+1/2$ и $k+1$ слоях будем соответственно иметь:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{ij}^{k+1/2} - \rho_{ij}^k}{\tau} = & \frac{1}{2} G_{ij}^{k+1/2} - \frac{\mu_n}{2\epsilon\epsilon_0} \cdot (\rho_{ij}^k)^2 - \\ & - \frac{\mu_n}{2} \left(E_r \frac{\rho_{ij}^{k+1/2} - \rho_{i-1j}^{k+1/2} + \rho_{i+1j}^k - \rho_{ij}^k}{2h_1} + E_z \frac{\rho_{ij+1}^k - \rho_{ij-1}^k}{2h_2} \right) + \end{aligned}$$

$$+\frac{D}{2}\left(\frac{\rho_{i+1j}^{k+1/2}-2\rho_{ij}^{k+1/2}+\rho_{i-1j}^{k+1/2}}{h_1^2}+\frac{1}{r_i}\frac{\rho_{i+1j}^{k+1/2}-\rho_{i-1j}^{k+1/2}}{2h_1}+\frac{\rho_{ij+1}^k-2\rho_{ij}^k+\rho_{ij-1}^k}{h_2^2}\right). \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{ij}^{k+1}-\rho_{ij}^{k+1/2}}{\tau} &= \frac{1}{2}G_{ij}^{k+1/2}-\frac{\mu_n}{2\varepsilon\varepsilon_0}\cdot\rho_{ij}^k\cdot\rho_{ij}^{k+1}- \\ &-\frac{\mu_n}{2}\left(E_r\frac{\rho_{i+1j}^{k+1/2}-\rho_{i-1j}^{k+1/2}}{2h_1}+E_z\frac{\rho_{ij}^{k+1}-\rho_{ij-1}^{k+1}+\rho_{ij+1}^{k+1/2}-\rho_{ij}^{k+1/2}}{2h_2}\right)+ \\ &+\frac{D}{2}\left(\frac{\rho_{i+1j}^{k+1/2}-2\rho_{ij}^{k+1/2}+\rho_{i-1j}^{k+1/2}}{h_1^2}+\frac{1}{r_i}\frac{\rho_{i+1j}^{k+1/2}-\rho_{i-1j}^{k+1/2}}{2h_1}+\frac{\rho_{ij+1}^{k+1}-2\rho_{ij}^{k+1}+\rho_{ij-1}^{k+1}}{h_2^2}\right). \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнения (11), (12) определены для внутренних узлов расчетной сетки. Начальное условие аппроксимируется в виде $\rho(r_i, z_j, t_1) = \rho_{i,j}^0$. Подсхема (11) дополняется конечно-разностной аппроксимацией граничных условий I рода: $\rho_{N,j}^{k+1/2} = 0$, $\rho_{i,M}^{k+1/2} = 0$. Аналогично для подсхемы (12): $\rho_{N,j}^{k+1} = 0$, $\rho_{i,M}^{k+1} = 0$. Граничные условия II рода автоматически учитываются в модифицированных разностных уравнениях с использованием дополнительных слоев по координатам с фиктивными узлами и аппроксимации второго порядка: $\frac{\rho_{0,j}^{k+1/2}-\rho_{2,j}^{k+1/2}}{2h_1} = 0$, $\frac{\rho_{i,0}^{k+1}-\rho_{i,2}^{k+1}}{2h_2} = 0$.

Итоговые системы на каждом временном подслое решаются методом прогонки. При конструировании подсхемы (12) для аппроксимации реакционного слагаемого использован принцип замороженных коэффициентов: $k\rho^{k+1} = k(\rho^k)\rho^{k+1}$, $k = \mu_n/\varepsilon\varepsilon_0$, где выражение в скобках – константа, которая вычисляется на k -м шаге по времени и явно подставляется в схему (12).

Решение уравнения Пуассона на каждом временном слое строится на основе метода переменных направлений в концепции схемы установления. В этом случае при организации вычислительного процесса вводится шаг по фиктивному времени τ на каждой итерации. В условиях решаемой задачи для сохранения масштабов размерностей необходимо, чтобы удовлетворялось требование $\tau \sim h^2$. Расчет итераций происходит по схеме метода переменных направлений, пока итерационный процесс не сойдется с заданной точностью δ : $\|\varphi^{k+1} - \varphi^k\| \leq \delta$.

В данном разделе представлены также соотношения для расчета компонент векторов напряженности и поляризации. Вычисление градиента позволяет определить компоненты (E_r, E_z) и значение модуля напряженности $|\mathbf{E}| = \sqrt{(E_r)^2 + (E_z)^2}$. Для вычисления вектора поляризации используется выражение $\mathbf{P} = (\varepsilon - 1)\varepsilon_0 \mathbf{E}$.

В разделе 3.2 проводится теоретический анализ сконструированной вычислительной схемы: определяется порядок аппроксимации, проводится анализ устойчивости и монотонности, делается вывод о сходимости вычислительной схемы. Показано, что вычислительная схема (11)-(12) имеет глобальный порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h_1^2 + h_2^2)$. С использованием достаточного принципа максимума показана аб-

солютная устойчивость вычислительной схемы (11)-(12) по начальным данным. Из аппроксимации и устойчивости следует сходимость вычислительной схемы. Предложенная методика, основанная на модификации схемы переменных направлений с аппроксимацией дрейфового слагаемого по схеме Роберта-Вейсса на текущем временном подслое (при решении уравнения неразрывности), обеспечивает выполнение требования монотонности для всей сконструированной вычислительной схемы.

В разделе 3.3 для конструирования вычислительной схемы реализации математической модели зарядки, с учетом запаздывания, в постановке (5)-(7) при модификации (11)-(12) был использован аналог схемы метода переменных направлений.

Следует заметить, что алгоритмической особенностью решения уравнения с запаздыванием является использование для расчета значений искомой функции на временном слое $k+1$ значений этой функции для слоя $k-q$. Это приводит к необходимости хранить значения функции на q предыдущих временных слоев в динамической структуре – структуре «окна запаздывания», которая перезаписывается на каждом временном слое. В целом такой процесс обуславливает ресурсоемкость решения задачи с запаздыванием. В остальном процедура повторяет схему расчета модели без учета запаздывания. Правые части подсхем (11) и (12) в соответствии с аппроксимацией для диффузионного слагаемого, учитывающего запаздывание в (9), дополняются конечно-разностными соотношениями:

$$\frac{\bar{D}}{2} \left(\frac{\rho_{i+1j}^{k-q} - 2\rho_{ij}^{k-q} + \rho_{i-1j}^{k-q}}{h_1^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\rho_{i+1j}^{k-q} - \rho_{i-1j}^{k-q}}{2h_1} + \frac{\rho_{ij+1}^{k-q} - 2\rho_{ij}^{k-q} + \rho_{ij-1}^{k-q}}{h_2^2} \right). \quad (13)$$

С использованием принципа максимума показана безусловная устойчивость модифицированной схемы. Схема, как и ее аналог без учета запаздывания, имеет второй порядок аппроксимации по координатам и времени и монотонна.

В разделе 3.4 приведена формализация алгоритма вычислительной схемы для расчета характеристик процесса электронно-стимулированной зарядки.

В четвертой главе («Комплекс программ компьютерного моделирования процессов инжекции и зарядки в облученных электронами полярных диэлектриках и результаты вычислительных экспериментов») представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования, проведены проверка адекватности результатов моделирования, интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов.

В разделе 4.1 описаны спецификация требований программного обеспечения, структура и режимы работы программного комплекса. Отмечено, что комплекс программ имеет модульную структуру и решает следующие задачи: стохастическое моделирование транспорта электронов; расчет характеристик процессов стационарной и нестационарной зарядки диэлектриков. Структурная программа комплекса приведена на рис. 3.

Для управления режимами работы программы разработан пользовательский интерфейс с возможностью настройки параметров вычислительных экспериментов и графического представления полученных данных (рис. 4). Разработанный интерфейс обеспечивает выбор и настройку всех параметров моделирования, включает библиотеку материалов, с возможностью редактирования, удаления и добавления.

Разработанный комплекс программ ориентирован на вычислительную диагностику сегнетоэлектриков и обладает преимуществом авторского программного

обеспечения, поскольку позволяет решать задачи интеграции отдельных модулей и управлять вычислительным процессом.



Рис. 3. Структурная схема программного комплекса.

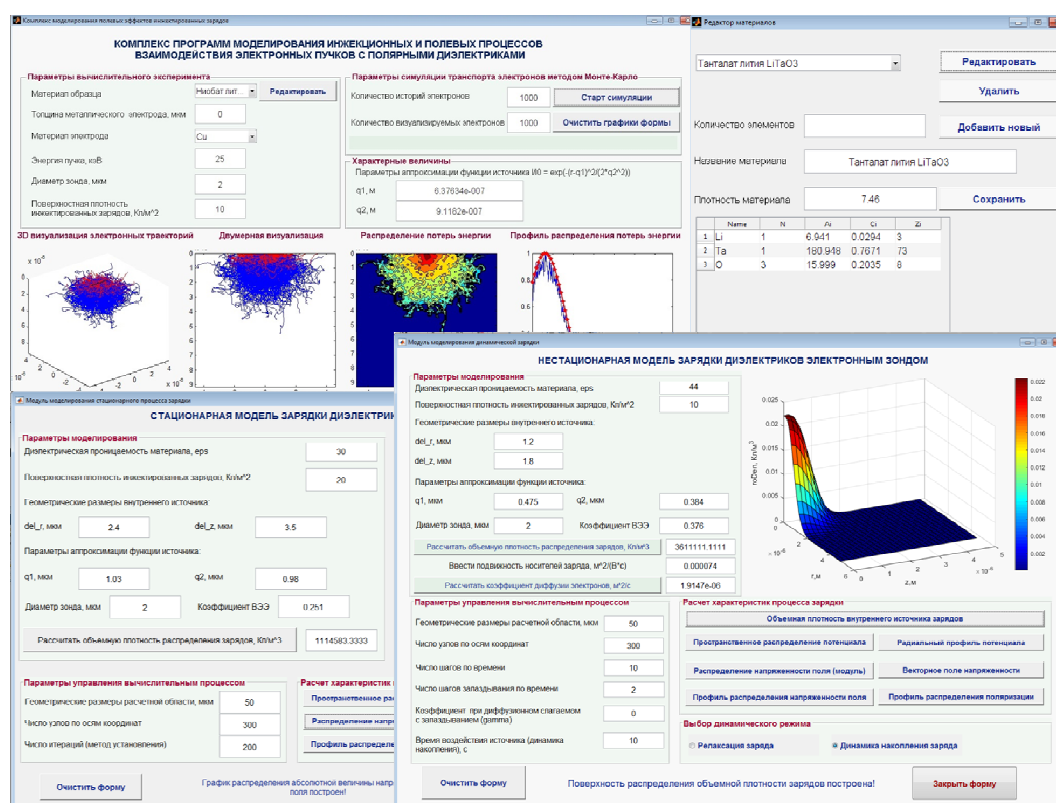


Рис. 4. Общий вид оконных форм интерфейса комплекса программ.

В разделе 4.2 для проверки адекватности результатов математического моделирования представлено сопоставление данных с результатами других авторов на примере тестовых задач. В частности, приведены эмпирические оценки значений средней глубины проникновения электронов и данные моделирования электронных траекторий методом Монте-Карло из литературных источников в сравнении с результатами, полученными в авторской программе. Осуществлены оценки напряженности поля с использованием фундаментальных физических соотношений, соотнесенные с данными вычислительного эксперимента.

Показана практическая сходимость вычислительных схем на основе многоаспектного тестирования схем реализации стационарной и нестационарной моделей

при варьировании управляющих параметров. Указанная процедура позволила установить оптимальное соотношение шагов по координатам и времени, а также числа итераций для реализации стационарной модели. В этом же разделе приведен результат реализации модели стационарной зарядки (без учета) в среде COMSOL Multiphysics в сравнении с данными авторского приложения. Оценка относительной погрешности отклонения решений по норме не превышает 2 %.

В разделе 4.3 показана серия вычислительных экспериментов по моделированию характеристик электронно-индуцированной зарядки на примере перспективных сегнетоэлектриков – танталата лития LiTaO_3 и ниобата лития LiNbO_3 для различных режимов воздействия. Для реализации математической модели проведены инициализация и обоснование выбора параметров облучения (в соответствии с данными физического эксперимента), параметров материалов и параметров управления вычислительным процессом. Показано, что особенностью реализуемой модели является изменение соотношения процессов дрейфа и диффузии в зависимости от режима наблюдения: в задаче о динамике накопления заряда доминирует диффузия, в задаче моделирования процесса релаксации заряда преобладает дрейф. С использованием критерия подобия Пекле установлены характерные параметры вычислительных экспериментов.

Графическое изображение трехмерного распределения траекторий электронов, полученное методом Монте-Карло для танталата лития при стартовой энергии пучка $E_0=25$ кэВ, представлено на рис. 5 а.

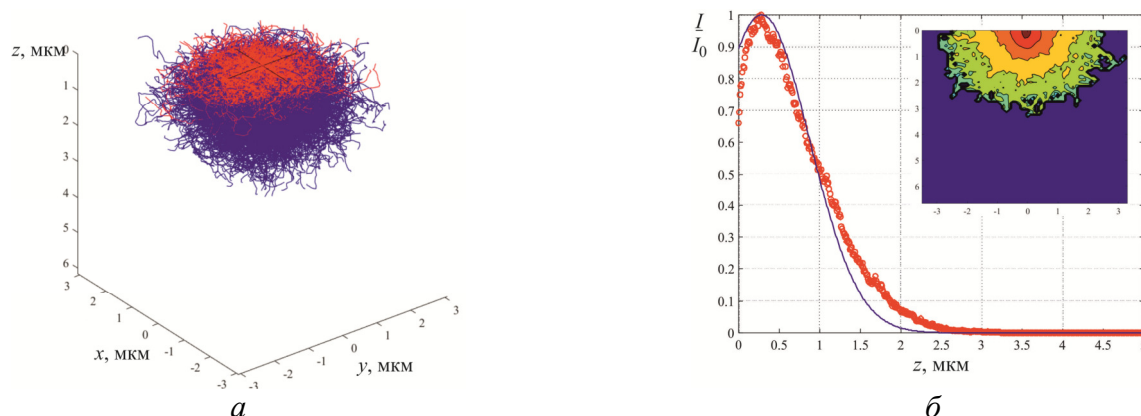


Рис. 5. Результаты вычислительных экспериментов: 3D-распределение электронных траекторий – а, профиль по глубине нормированного распределения потерь энергии электронами – б ($N_e=5000$ историй электронов, диаметр зонда – $d=2$ мкм, параметры источника: $\delta_r=1.2$ мкм, $\delta_z=2$ мкм, параметры аппроксимации $\delta_1=0.282$ мкм, $\delta_2=0.595$ мкм, коэффициент ВЭЭ $\eta=0.376$, на вставке – двумерная проекция).

Для аналитического представления функции источника $G(r,z)$ в режиме динамики накопления заряда, начального распределения объемной плотности зарядов $\rho^0(r,z)$ в режиме релаксации и накопленной плотности зарядов $\rho(r,z)$ в стационарном режиме с использованием выражения (4) проводятся также численные оценки объема внутреннего источника и площади облучаемой зоны, задается поверхностная плотность зарядов σ_{surf} и время облучения.

Режим релаксации заряда. На рис. 6 представлены результаты вычислительных экспериментов по моделированию распределения напряженности поля и потенциала, созданных инжектированными зарядами, в кристалле танталата лития в режиме релаксации заряда в момент времени наблюдения $t=1$ пс (параметры вычислительного процесса: $h_1 = 0.25$ мкм, $\tau = 0.5 \cdot h_1$ мкс).

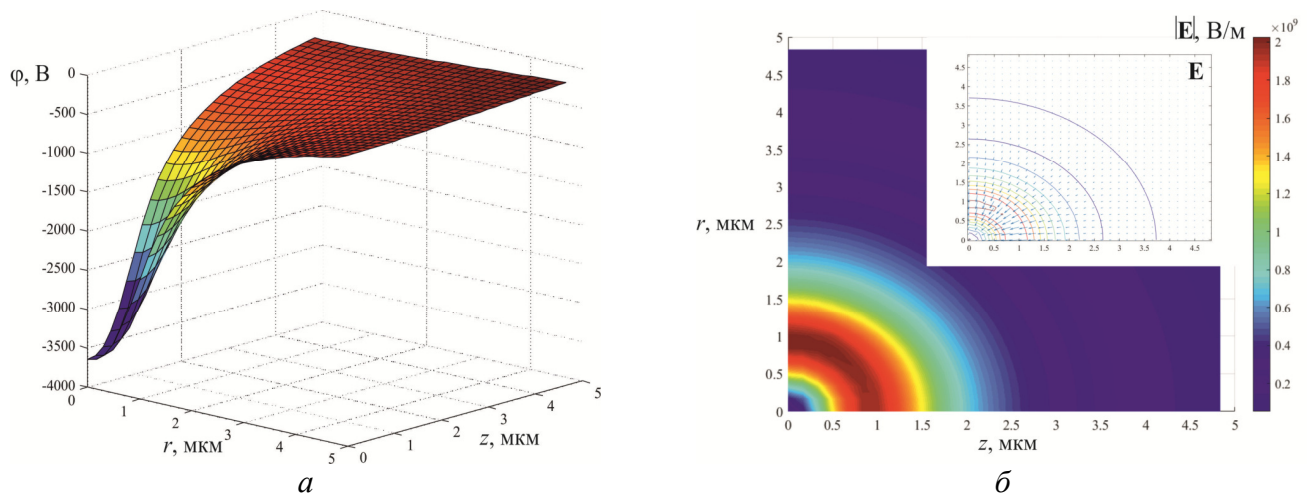


Рис. 6. Результаты моделирования: распределение потенциала – *а*; распределение абсолютного значения и векторного поля напряженности (на вставке) – *б* ($E_0=25$ кВ, $\sigma_{surf}=10$ Кл/м²).

Использование технологии вычислительного эксперимента в данном режиме позволяет наблюдать динамику релаксации заряда и установить время релаксации (в условиях примера – более 100 пс).

Режим динамики накопления заряда. На рис. 7 представлены результаты моделирования характеристик зарядки для кристалла ниобата лития с учетом эффекта запаздывания (параметры управления вычислительным процессом: $h_1 = 0.25$ мкм, $\tau=1$ нс, $\gamma=1$). Данные приведены в сравнении с данными моделирования без учета запаздывания.

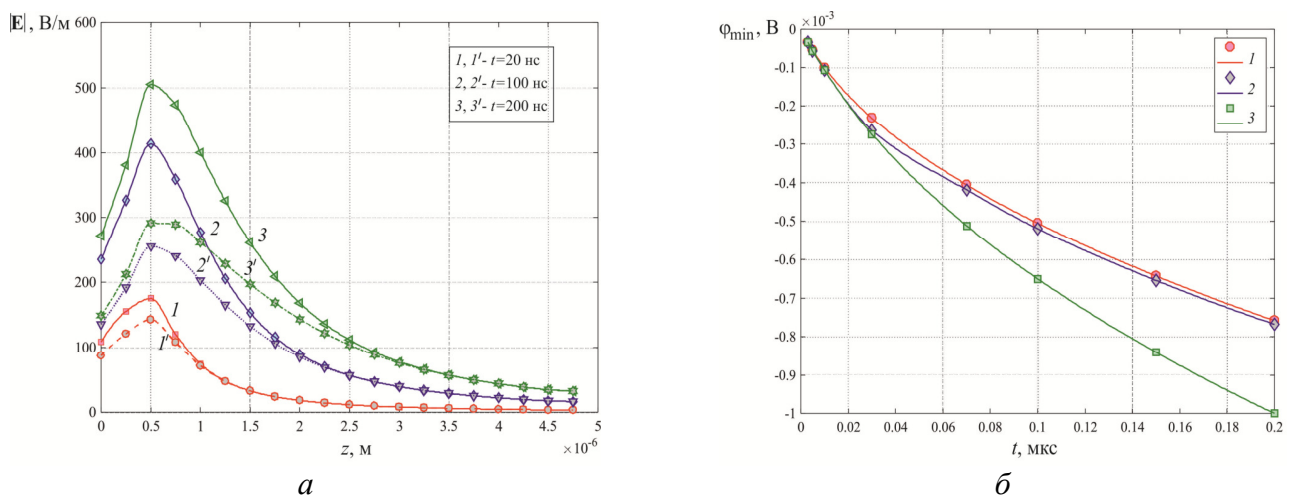


Рис. 7. Результат моделирования распределения абсолютного значения поля по глубине в фиксированные моменты времени (графики 1, 2, 3 – без учета запаздывания, 1', 2', 3' – с учетом запаздывания, время запаздывания $t^*=4$ нс) – *а*; результат расчета динамики изменения минимального значения потенциала при различных значениях временного лага t^* (кривая 1 соответствует $t^*=2$ нс, 2 – $t^*=20$ нс, 3 – без учета запаздывания) – *б* ($E_0=10$ кВ, $\sigma_{surf}=20$ Кл/м², время облучения 10 с).

Результаты вычислительного эксперимента позволяют установить существенную разницу в значениях измеряемой величины (как уровня максимального значения, так и значения в точке воздействия источника) в градиентной зоне. Однако уже на расстоянии 5 мкм от точки падения зонда различия в характеристиках не наблюдается (рис. 7 *а*). Различие в значениях моделируемых характеристик демонстрирует и динамика изменения значения потенциала в точке воздействия источника, как пока-

зано на рис. 7 б. При этом можно отметить изменение временного лага существенно не меняет характер поведения функциональной зависимости.

Режим стационарной зарядки. Результаты моделирования характеристик процесса зарядки в стационарном режиме представлены для танталата лития при варьировании значений стартовой энергии E_0 (от 10 до 30 кэВ) и поверхностной плотности зарядов σ_{surf} (от 5 до 20 Кл/м².) Оценка характерного времени протекания динамического процесса по критерию Фурье составляет 50 мкс, это позволяет заключить, что при воздействии источника от 1 до 10 с в экспериментах по управляемому переключению доменной структуры сегнетоэлектриков при электронном облучении будет реализован стационарный режим.

Анализ соответствующих данных показывает, что в указанном диапазоне параметров поле достигает значений, превышающих значения коэрцитивного поля (для танталата лития – $2.1 \cdot 10^7$ В/м). Это означает, что ориентированные против поля домены способны поменять направление спонтанной поляризации, т.е. переключиться. Так, при $E_0=25$ кэВ и $\sigma_{surf}=10$ Кл/м² максимальное значение поля – $2.1 \cdot 10^9$ В/м на расстоянии 0.05 мкм от источника; поле на границе зоны инжекции – порядка 10^9 В/м и на расстоянии 5 мкм от источника (необлученная часть кристалла) равно $3 \cdot 10^7$ В/м. Полученные нами данные по порядку значений совпадают с литературными данными экспериментов.

Значение поверхностной плотности зарядов $\sigma_{surf}=1$ Кл/м² не позволяет стимулировать интенсивный процесс поляризации в необлученных частях образца при различных значениях энергии пучка (за исключением значения $E_0=10$ кэВ). С другой стороны, использование пониженных значений ускоряющих напряжений (например, 5 кэВ) также не дает возможности создать условия для переключения поляризации в образце при изменении поверхностной плотности заряда во всем рассматриваемом диапазоне. Это позволяет заключить, что для переключения поляризации в сегнетоэлектриках, облучаемых электронным зондом, следует контролировать такие параметры как поверхностная плотность заряда и энергия пучка электронов. Аналогичные параметры являются управляющими и в эксперименте.

Таким образом, использование технологии вычислительного эксперимента позволяет подбирать оптимальные режимы для наблюдения инверсии полярной структуры сегнетоэлектриков при модификации подобных объектов с помощью методик электронной микроскопии.

В заключении кратко сформулированы основные результаты диссертационной работы. В ходе исследований решена актуальная научная задача разработки математического, алгоритмического и программного обеспечения для моделирования и исследования закономерностей динамики инжекционных и полевых процессов в диэлектриках при электронном облучении. Изложенные в диссертации результаты исследований представляют собой законченный цикл схемы вычислительного эксперимента: формализована постановка задач моделирования, разработаны вычислительные схемы решения на основе эффективных численных методов, разработан комплекс программ для расчета характеристик зарядки, осуществлены расчеты, анализ и интерпретация результатов моделирования.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Приведена обобщенная математическая модель процесса электронно-стимулированной зарядки диэлектриков, включающая: систему детерминированных уравнений с частными производными, результат аппроксимации функции источника на основе расчета электронных траекторий и совокупность соотношений, описывающих координатные зависимости вектора напряженности и индуцируемой электронным зондом компоненты вектора поляризации.

2. Предложена авторская математическая модель процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков с учетом эффекта запаздывания по времени. Модификация основана на включении в начально-граничную задачу нелинейного функционально-дифференциального реакционно-диффузионно-дрейфового уравнения.

3. Предложена гибридная вычислительная схема для реализации математической модели зарядки диэлектриков, основанная на синтезе алгоритмов стохастического моделирования электронных траекторий в облученном материале и конечно-разностного решения задачи математической физики. Для решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения предложена модификация метода переменных направлений на основе аппроксимации дрейфового слагаемого по схеме Роберта-Вейсса на текущем временном слое. Последнее обеспечивает монотонность конструируемой вычислительной схемы. Схема имеет второй порядок аппроксимации по пространственным координатам и времени и абсолютно устойчива.

4. Предложена численная методика реализации математической модели процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков с учетом запаздывания на основе аналога вычислительной схемы, разработанной для решения задачи без учета запаздывания.

5. Разработан оригинальный модульный программный комплекс, интегрирующий возможности приложений по моделированию транспорта электронов и характеристик процесса зарядки в облученных электронами полярных диэлектриках.

6. Проведена проверка адекватности результатов моделирования на основе сравнения отдельных результатов с данными других авторов для тестовых примеров. Представлено сопоставление результатов моделирования стационарной зарядки с данными, полученными в среде COMSOL Multiphysics, как альтернативный способ верификации данных. Изложены результаты исследования практической сходимости вычислительных схем. Установлено соотношение процессов диффузии и дрейфа при реализации модели в различных режимах.

7. Проведена серия вычислительных экспериментов по исследованию процессов электронно-стимулированной зарядки функциональных сегнетоэлектриков ниобата и танталата лития при различных режимах воздействия на объект. С использованием модельных расчетов установлены особенности геометрии внутреннего источника зарядов, аппроксимирована зависимость распределения потерь энергии в образце, выявлены закономерности процесса зарядки материалов электронным зондом. Показано влияние характерных параметров запаздывания на оценку полевых характеристик. В условиях реализации стационарной модели установлены оптимальные соотношения управляющих параметров, отвечающие экспериментальным данным, при которых создаются условия для контролируемого переключения поляризации доменной структуры под действием электронного облучения.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК

1. Maslovskaya A., Pavelchuk A. Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM // *Ferroelectrics*. – 2015. – V. 476. – P. 157-167. (Web of Science: Science Citation Index Expanded (база по естественным наукам)).
2. Павельчук А.В. Конечно-элементное моделирование электронно-индуцированной зарядки сегнетоэлектриков с использованием инструментария COMSOL Multiphysics // *Современные технологии. Системный анализ. Моделирование*. – 2016. – № 4 (52). – С.132-137.
3. Ковальский И.А., Павельчук А.В., Масловская А.Г. Разработка программного обеспечения для задач исследования формирования РЭМ-изображений доменных структур сегнетоэлектрических материалов // *Вестник Иркутского гос.техн. ун-та*. – 2016. – № 5. – С. 56-64.
4. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Имитационное моделирование характеристик инжекционных процессов при модификации сегнетоэлектриков электронным облучением // *Научно-технический вестник Поволжья*. – 2017. – № 6. – С. 214-217.

Статьи в зарубежных изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus

5. Maslovskaya A., Pavelchuk A. Simulation of heat conductivity and charging processes in polar dielectrics induced by electron beam exposure // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2015. – V. 81. – P. 012119 (6). doi:10.1088/1757-899X/81/1/012119. (WOS, SCOPUS)
6. Pavelchuk A., Barabash T., Maslovskaya A.G. Electron injection and polarization reversal processes in ferroelectrics analyzed with SEM: modelling of electron beam-stimulated effects // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2016. – V. 110. – P. 012080 (6) doi:10.1088/1757-899X/110/1/012080. (SCOPUS)
7. 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*, 2017. – P. 101760P (12); doi:10.1117/12.2268165. (WOS, SCOPUS)
8. Pavelchuk A.V., Maslovskaya A.G. Numerical simulation of electron beam-induced dielectric charging using advanced computational scheme for solving semilinear reaction-diffusion equation // *World Journal of Modelling and Simulation*, 2018. – V. 14. – No 2. – P. 83-89. (SCOPUS)

Статьи в региональных изданиях и материалы конференций

9. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Математическое моделирование характеристик процесса зарядки функциональных диэлектрических материалов электронными пучками средних энергий // *Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы Всероссийской молодежной научной конференции*. – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2014. – С. 30-33 (ISBN 978-5-93493-174-3).
10. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Численное моделирование процесса зарядки диэлектриков в стационарных условиях электронного облучения // *Математическое и экспериментальное моделирование физических процессов: сборник материалов Всероссийской заочной научно-практической конференции*. – Биробиджан: Изд-во Приамурского гос. ун-та им. Шолом-Алейхема, 2015. – С. 56-61.

11. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Неявная схема расщепления для некоторого класса дифференциальных уравнений параболического типа с возмущением // Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2015. – Вып. 71. – С. 60-69. (ISSN 2073-0268).
12. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Вычислительная схема для расчета динамических характеристик процесса зарядки диэлектриков в условиях электронного облучения // Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-28: сборник трудов XXVIII Международной научной конференции – Саратов: Саратовский гос. техн. ун-т, 2015. – Т. 10. – С. 304-308 с.
13. Павельчук А.В. Использование метода установления для численной реализации математической модели электростатического поля // Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2016. – Вып. 73. – С. 37-43. (ISSN: 2072-0268).
14. Павельчук А.В., Габрелян Н.Л., Масловская А.Г. Математическая модель процесса зарядки диэлектриков, характеризующегося эффектом запаздывания // Вестник Амурского гос. ун-та. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2016. – Вып. 75. – С. 3-9. (ISSN: 2072-0268).
15. Maslovskaya A., Pavelchuk A. Implicit alternating direction scheme for simulation of nonlinear charging diffusion dynamics in polar dielectrics // Информационные технологии и математическое моделирование: сборник материалов XIV Международной научной конференции им. А.Ф. Терпугова – Томск: Изд-во Томского ун-та, 2015. – Ч. 2. – С. 12-17.
16. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Конструирование разностной схемы для задачи расчета характеристик полевых эффектов в облученных электронными пучками диэлектриках // Материалы 7-й научно-практической internet-конференции «Междисциплинарные исследования в области математического моделирования и информатики», 2016 / отв. ред. Ю.С. Нагорнов. – Ульяновск: ЗЕБРА, 2016. – С. 147-150.
17. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Применение метода переменных направлений Писмена-Рэчфорда для построения вычислительной схемы модели процесса зарядки диэлектрика // Математическое и экспериментальное моделирование физических процессов: сборник материалов Международной заочной научно-практической конференции. – Биробиджан: Изд-во Приамурского гос. ун-та им. Шолом-Алейхема, 2016. – С. 51-56.
18. Павельчук А.В. Подходы к построению физико-математической модели процесса зарядки диэлектриков // Сборник материалов XVII научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее», 2016. – Т. 3. – С. 234-236.
19. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Модельные представления динамической зарядки диэлектрических мишеней электронными пучками средних энергий // Материалы XIV региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование». – Хабаровск: Изд-во Тихоокеанского гос. ун-та, 2016. – С. 121-125.
20. Павельчук А.В., Габрелян Н.Л., Масловская А.Г. Численное решение одного класса нелинейных реакционно-диффузионных уравнений параболического типа с запаздыванием // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2017. – Вып. 77. – С. 3-7. (ISSN 2073-0268).

21. Габрелян Н.Л., Павельчук А.В., Масловская А.Г. Гибридный алгоритм для решения задачи моделирования электронно-индуцированной зарядки диэлектриков с учетом эффекта запаздывания // Информационные технологии и математическое моделирование: сборник материалов XIV Международной научной конференции им. А.Ф. Терпугова – Томск: Изд-во НТЛ, 2017. – Ч. 2. – С. 276-283.

22. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Модельное представление функции источника в задачах исследования полевого воздействия электронных пучков на диэлектрические материалы // Математическое и экспериментальное моделирование физических процессов: сборник материалов Международной заочной научно-практической конференции. – Биробиджан: Изд-во Приамурского гос. ун-та им. Шолом-Алейхема, 2017. – С. 81-89.

23. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Комплексная система компьютерного моделирования процессов инжекции и зарядки в облученных электронными пучками диэлектрических материалах // Прикладные задачи математики: сборник трудов XXV Международной научно-технической конференции. – Севастополь: Изд-во Севастопольского гос. ун-та, 2017. – С. 197-202.

24. Масловская А.Г., Павельчук А.В. Оценка полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках, облученных электронными пучками средних энергий // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2017. – Вып. 79. – С. 173-175. (ISSN 2073-0268).

Объекты интеллектуальной собственности

24. Павельчук А.В., Сивунов А.В., Масловская А.Г. Программа моделирования инжекционных и полевых эффектов воздействия электронного облучения на полярные диэлектрики / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016610277, зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам 11.01.2016, г. Москва.

25. Павельчук А.В., Масловская А.Г. Программа моделирования динамических характеристик электронно-индуцированной зарядки диэлектрических материалов / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017617615, зарег. Федеральной службой по интеллектуальной собственности и товарным знакам 11.07.2017, г. Москва.

Павельчук Анна Владимировна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАРЯДКИ ПОЛЯРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Типография АмГУ. Подписано к печати 28.03.2018. Формат 60×84/16.
Усл. печ. л. 1. Тираж 100. Заказ 43.

