

10-я международная конференция по стохастическим методам (МКСМ-10),
посвящённая 90-летию кафедры теории вероятностей МГУ им. М.В. Ломоносова

Об одной возможности построения стохастической модели нагрева мишени электронным зондом средних энергий

М.А. Степович¹, Д.В. Туртин¹, Е.В. Серегина², В.В. Калманович³,
М.Н. Филиппов⁴

¹ Ивановский государственный университет

² Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)

³ Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского

⁴ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

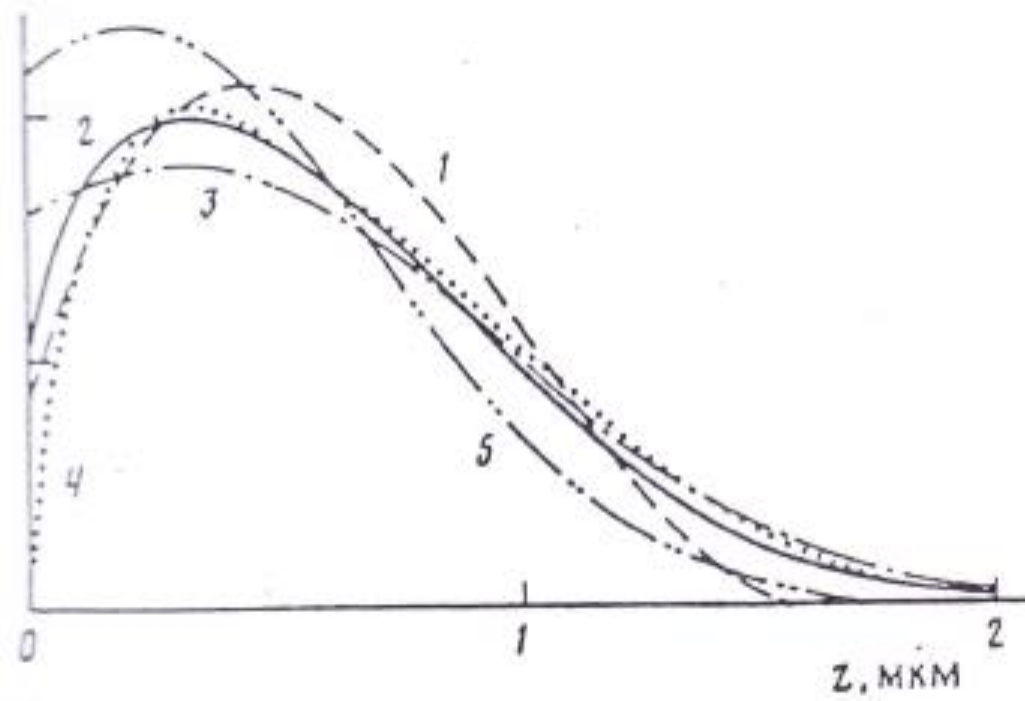
Дивноморское, 1-6 июня 2025 г.

Цель работы: рассмотрение математических моделей тепломассопереноса, обусловленного пучками заряженных частиц или электромагнитного излучения в мишенях различной природы. Получение оценок влияния случайного внешнего воздействия на информативный сигнал. Качественная оценка некоторых возможностей использования полученных результатов при проведении практических расчётов.

СТАЦИОНАРНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

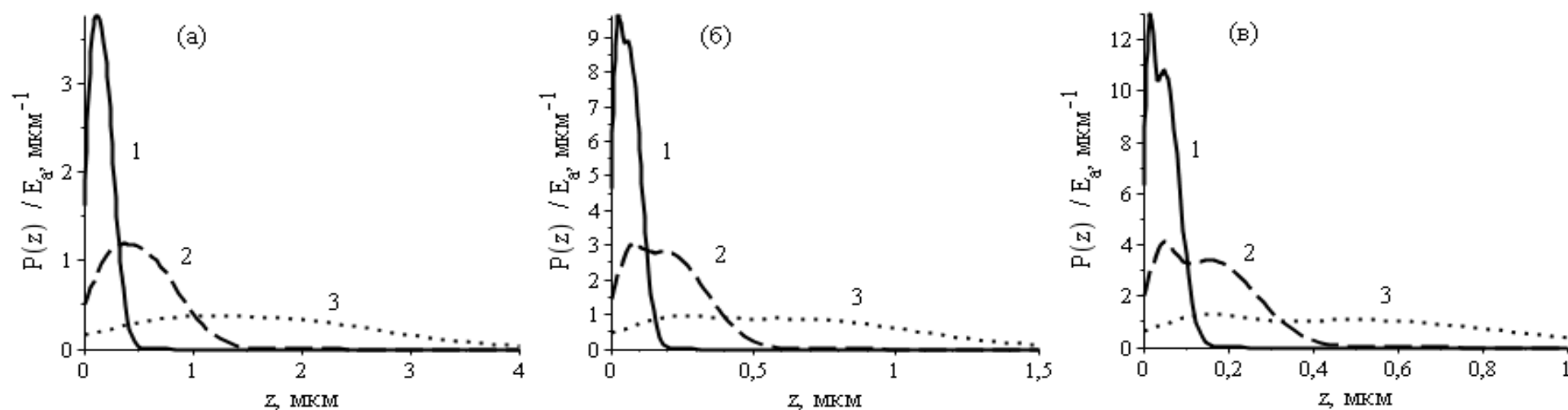
Большая часть энергии первичных электронов идет на нагрев мишени и распределение тепловых источников будет совпадать с распределением потерь энергии первичных электронов. Время установления стационарного режима температуры анализируемого микрообъёма, как правило, значительно меньше времени набора данных, в течение которого электронный зонд позиционируется в данной точке поверхности образца. Это позволяет искать распределение температуры в области взаимодействия электронов зонда с образцом и в прилегающих областях образца на основе решения стационарного уравнения теплопроводности:

$$\left(\frac{\partial^2 T(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, z)}{\partial z^2} \right) = - \frac{\rho(x, y, z)}{k}.$$

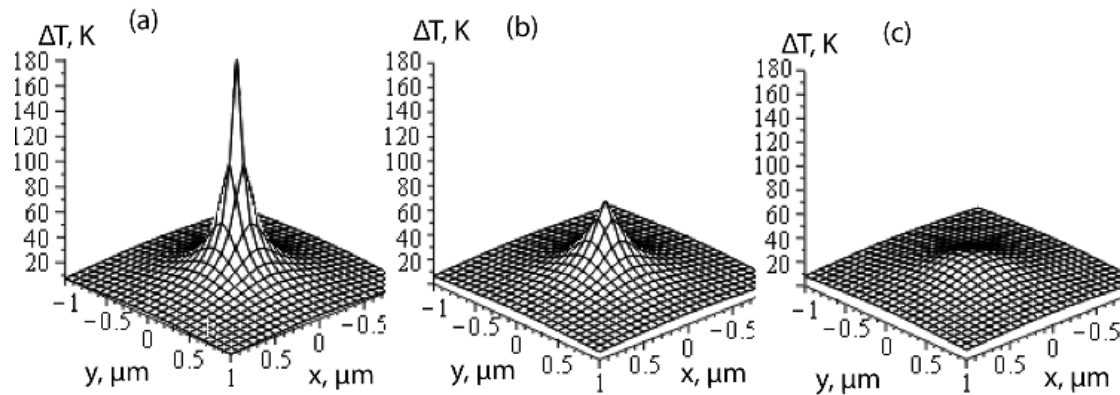
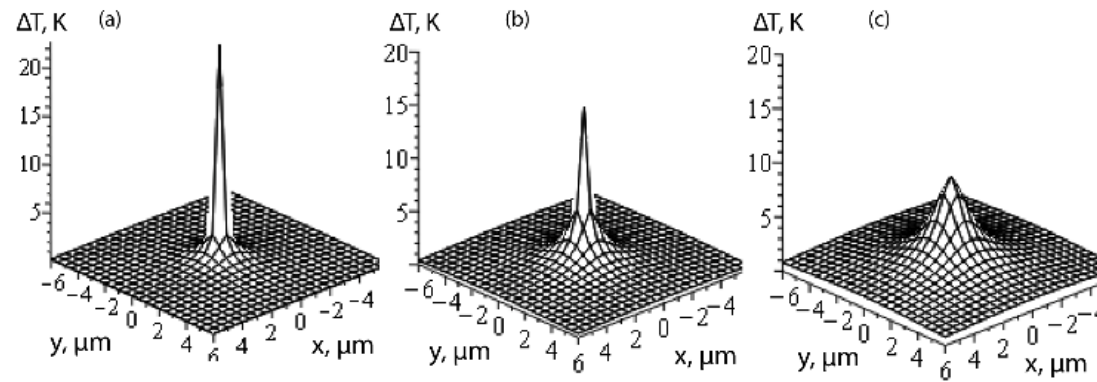
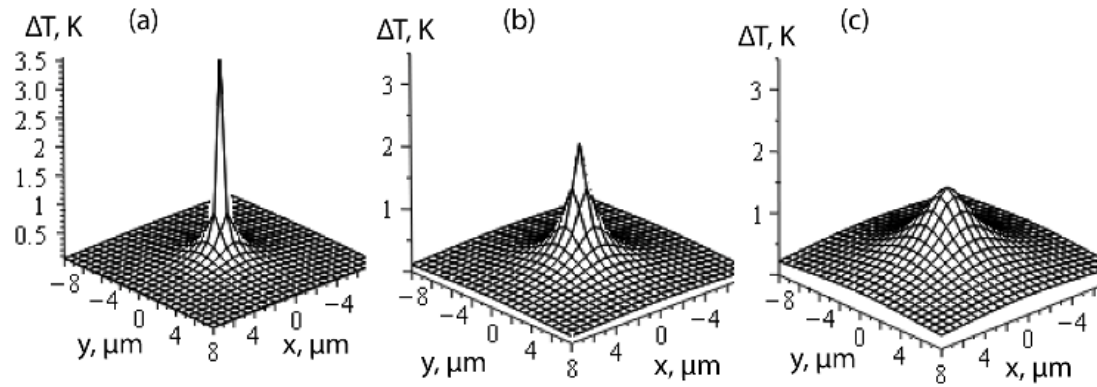


РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

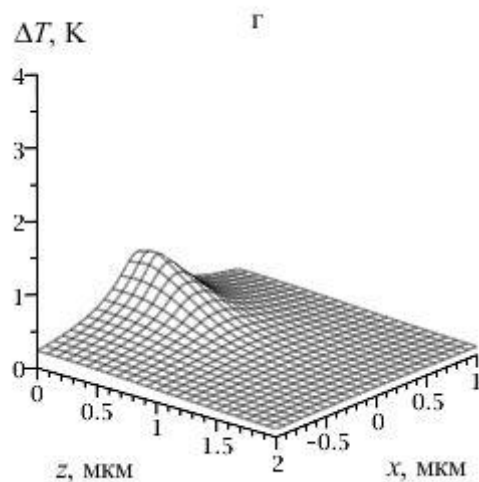
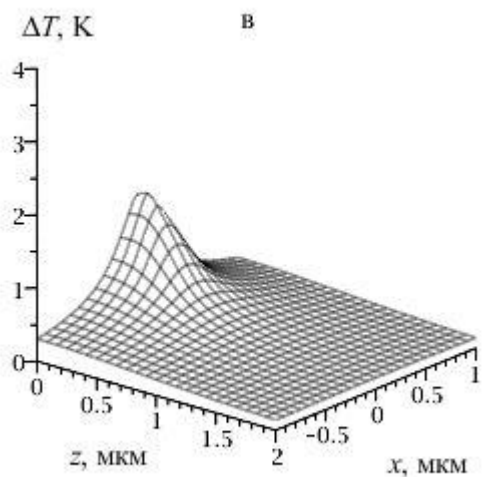
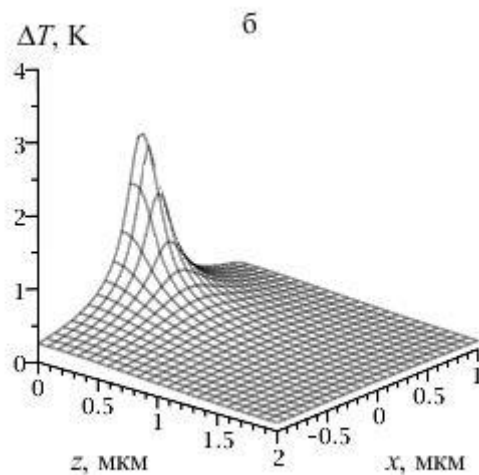
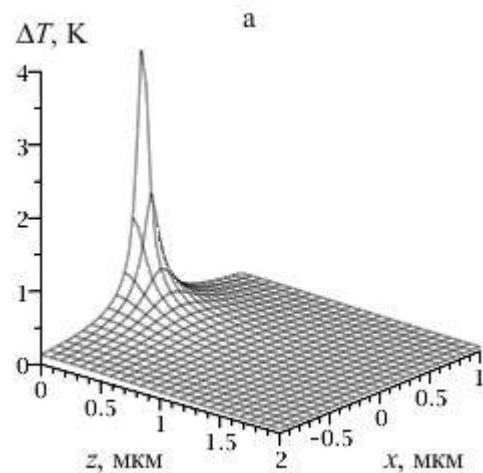
Для электронного пучка распределение потерь энергии в проводящих мишенях любой природы качественно будет иметь одинаковый вид.



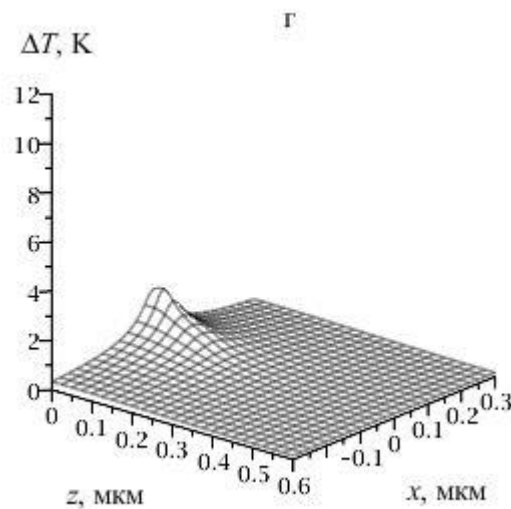
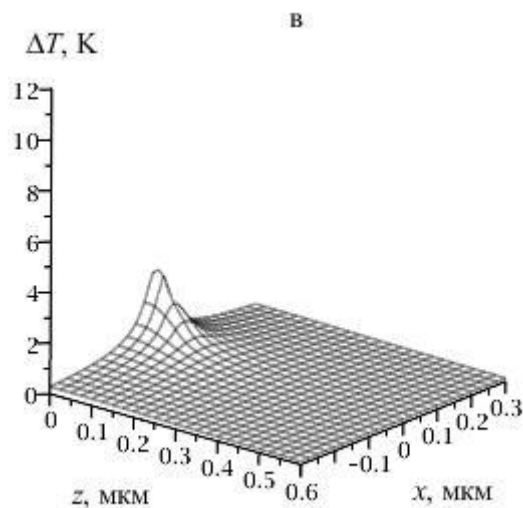
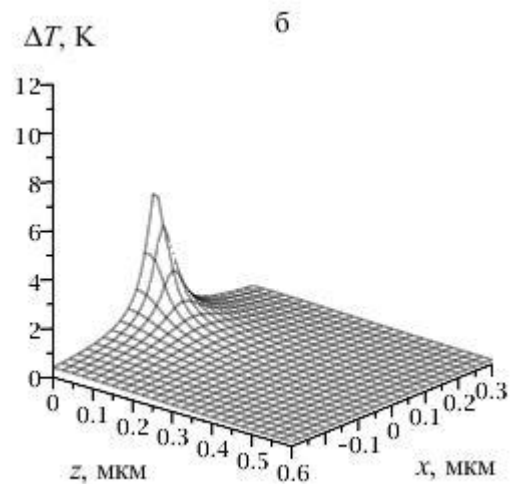
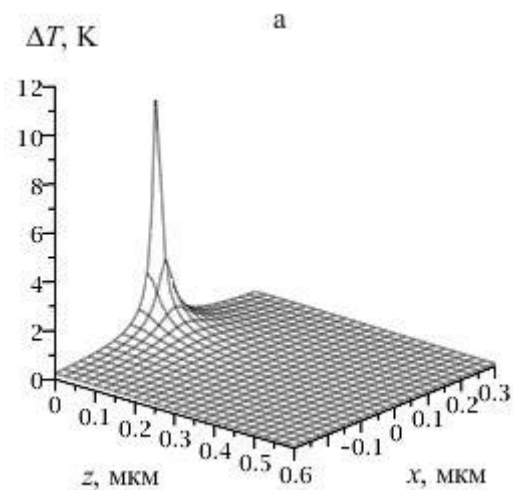
Распределение плотностей потерь энергии электронами пучка в Si (а), GaAs (б) и CdTe (в), нормированные на величину мощности, выделяемой в мишени, и рассчитанные для энергии электронов 5 (кривая 1), 10 (кривая 2), 20 (кривая 3) кэВ



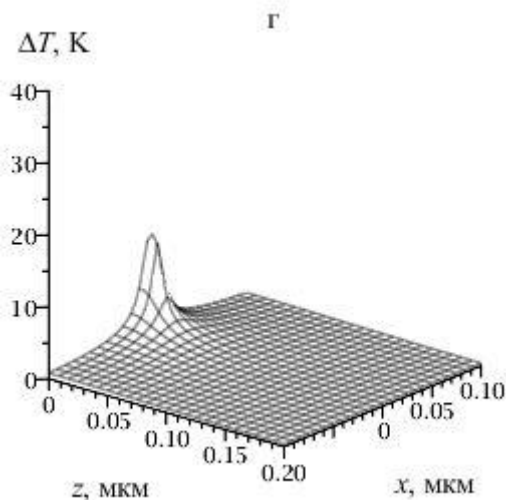
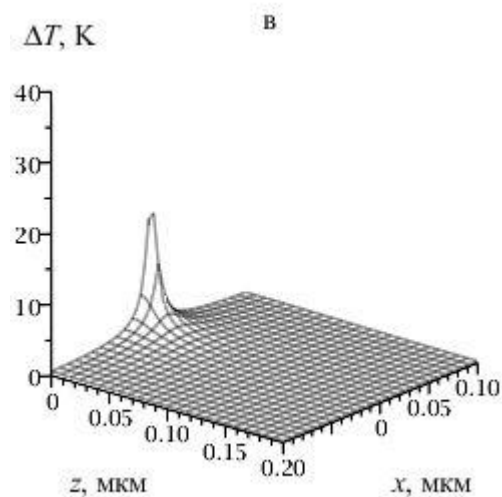
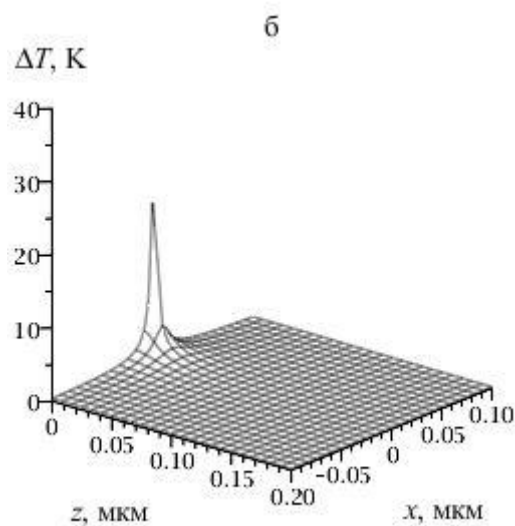
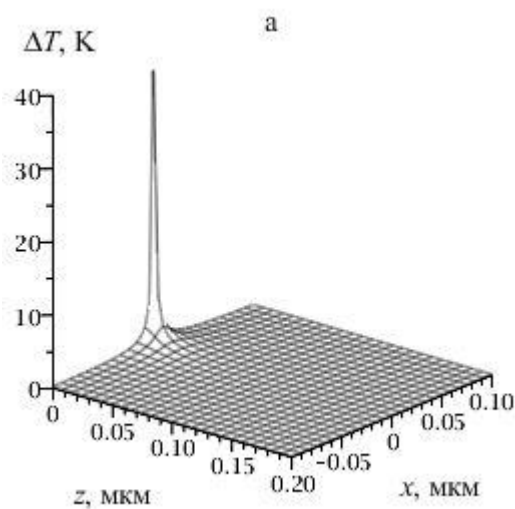
Temperature distribution in Si (top figures), GaAs (middle figures), and CdTe (bottom figures) for probe electron energies: $E_0 = 5$ (a), 10 (b), and 20 (c) keV. The probe current is equal to 10^{-7} A.



Результаты моделирования
распределения температуры в
Al. Расчеты проведены для
энергии электронов $E_0 = 2$ (а),
4 (б), 6 (в) и 8 кэВ (г) при токе
зонда 10^{-7} А.



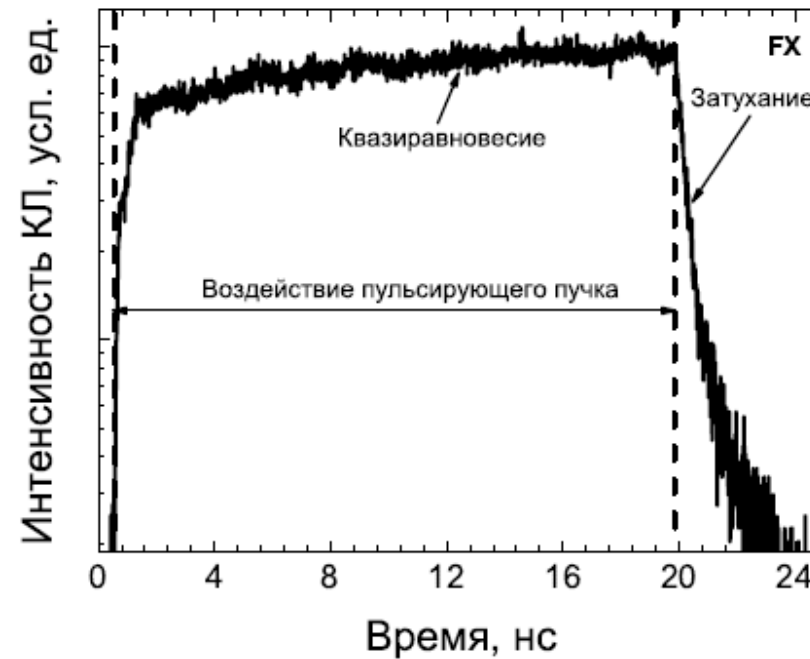
Результаты моделирования распределения температуры в Cu. Расчеты проведены для энергии электронов $E_0 = 2$ (а), 4 (б), 6 (в) и 8 кэВ (г) при токе зонда 10^{-7} А



Результаты моделирования распределения температуры в Au. Расчеты проведены для энергии электронов $E_0 = 2$ (а), 4 (б), 6 (в) и 8 кэВ (г) при токе зонда 10^{-7} А

НЕСТАЦИОНАРНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

(иллюстрация на примере использования пульсирующего электронного зонда)



Типичный вид результатов измерений КЛ.

Нестационарное уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = a^2 \Delta u(\vec{r}, t) + \frac{1}{c_0 \rho_0} \rho(\vec{r}, t).$$

Здесь $u(\vec{r}, t) = T(\vec{r}, t) - T_0$ – температура перегрева образца, T_0 – температура образца до облучения, $a^2 = \lambda / (c \rho_0)$ – температуропроводность образца, λ – теплопроводность образца, c – теплоемкость образца, ρ_0 – плотность образца, $\rho(\vec{r}, t)$ – плотность источников тепла в точке \vec{r} мишени в момент времени t . В декартовой системе координат $\vec{r} = (x, y, z)$.

Краевые условия в декартовой системе координат:

$$u(x, y, z, 0) = 0, u(x, y, z, t) < \infty, x, y, z \in (-\infty, \infty), t \in [0, \infty).$$

Также выполняются условия: $u(x, y, z, t) \rightarrow 0$, при $x, y, z \rightarrow \infty$ и $t \in [0, \infty)$.

Плотность источников тепла $\rho(\vec{r}, t)$ в правой части дифференциального уравнения представим в виде произведения стационарной части, сомножителя $\rho^*(\vec{r}) = P_0(\vec{r})$, описывающего потери энергии электронным зондом в мишени при её стационарном облучении и сомножителя $f(t)$, описывающего зависимость нестационарного характера облучения мишени от времени: $\rho(\vec{r}, t) = \rho^*(\vec{r}) \cdot f(t)$. Тогда решение задачи¹:

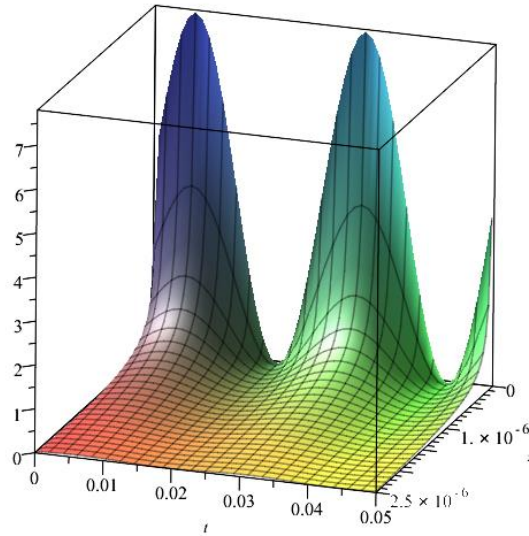
$$u(x, y, z, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{1}{c\rho_0} \rho^*(\xi) f(\tau) \frac{1}{\left[2a\sqrt{\pi(t-\tau)}\right]^3} \exp\left\{-\frac{|\vec{r}-\xi|^2}{4a^2(t-\tau)}\right\} d\xi d\tau,$$

где $d\xi = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3$, $\rho^*(\xi) = \rho^*(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, $|\vec{r}-\xi|^2 = (x-\xi_1)^2 + (y-\xi_2)^2 + (z-\xi_3)^2$.
Для этого выражения и $f(t) = 0.5[1 + \sin(\omega t)]$ в результате получим

¹ Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1967.

$$\Delta u(x, y, z, t) = \int_0^t \frac{1}{c_0 \rho_0} \frac{[1 + \sin(\omega t)]}{2} \cdot \left[\frac{4(ab)^2 \pi(t - \tau)}{4a^2(t - \tau) + b^2} \right] \left\{ \exp \left[-\frac{x^2 + y^2}{4a^2(t - \tau) + b^2} \right] \right\}^2 \times$$

$$\times \frac{\sqrt{\pi} z_0}{2} \sqrt{\frac{4a^2(t - \tau)}{4a^2(t - \tau) + b^2}} \left\{ 1 - \Phi \left[-\frac{(z - z_0)C}{C + z_0^2} + z \sqrt{\frac{C + z_0^2}{C z_0^2}} \right] \right\} \exp \left[-\frac{(z + z_0)^2}{C + z_0^2} \right] d\tau.$$



О погрешностях регистрации и обработке электромагнитных сигналов различных диапазонов

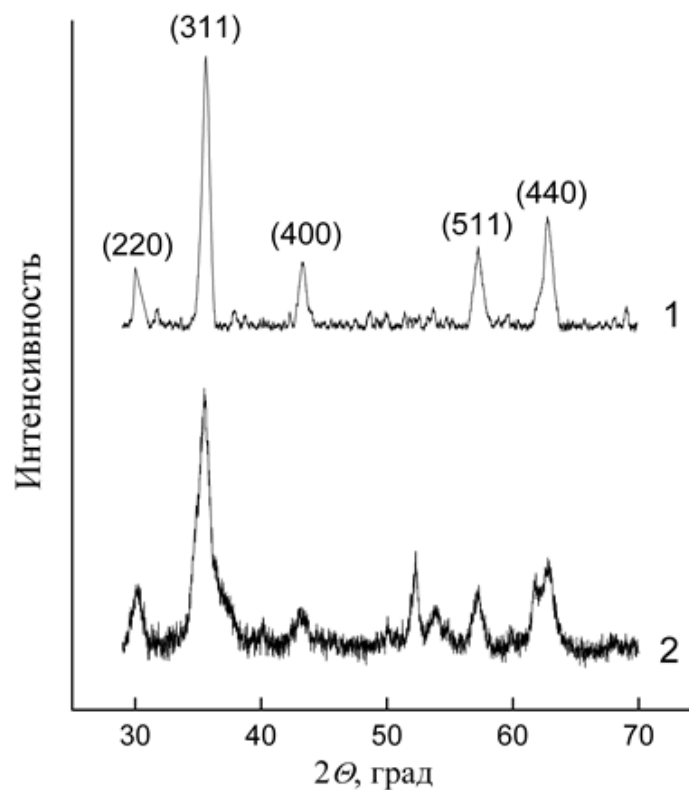


Рис. Рентгеновские дифрактограммы образцов: 1 – смеси оксидов железа; 2 – композита бентонит/оксиды железа.

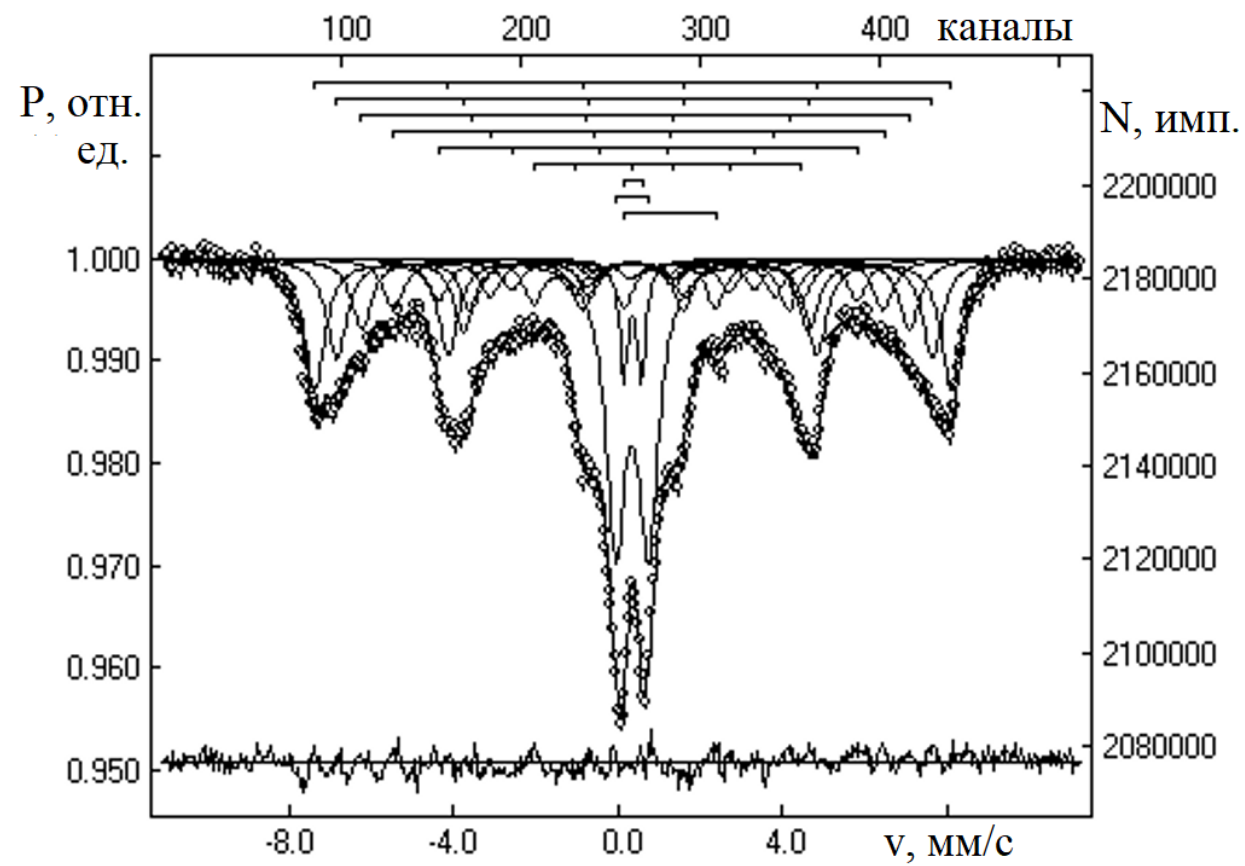
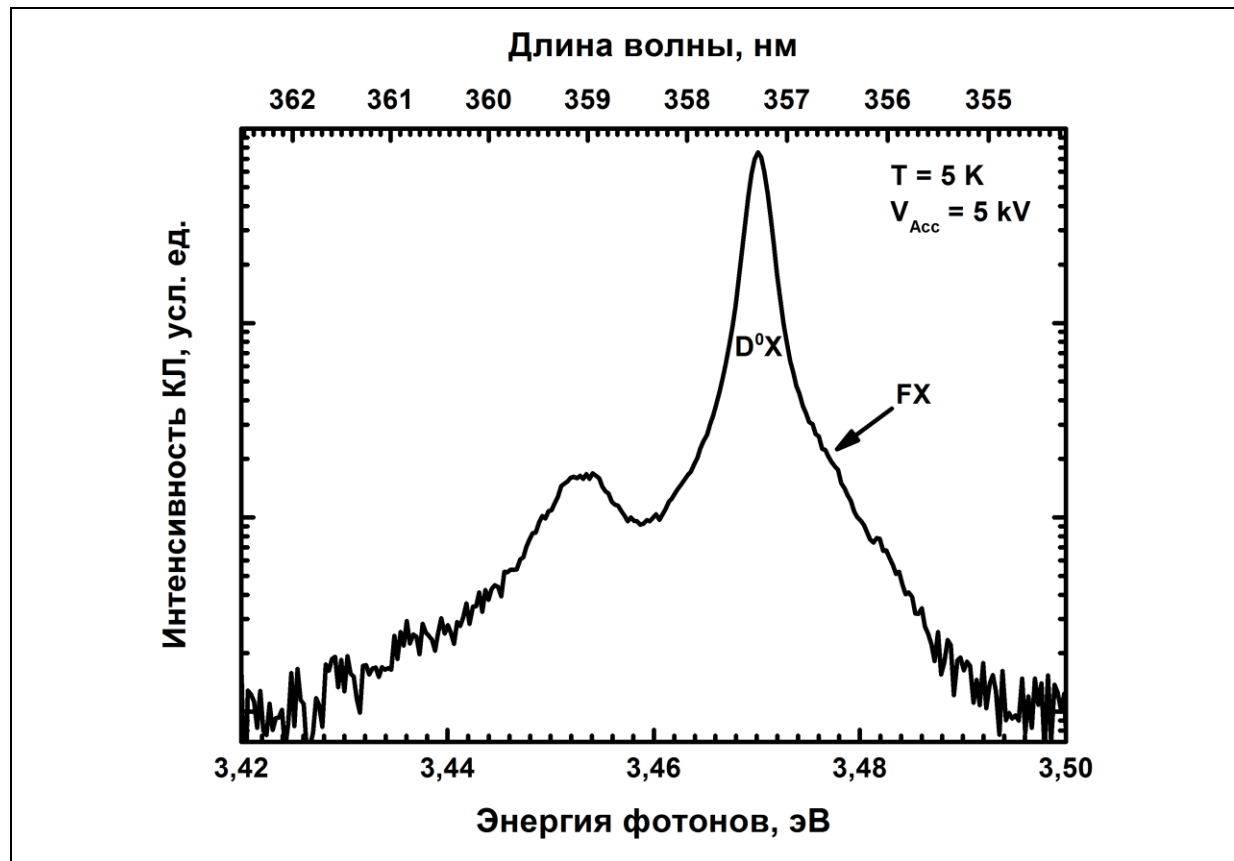


Рис. Мёссбауэровский спектр композита бентонит/смесь оксидов железа.



Спектр катодолюминесценции образца монокристаллического GaN при температуре $T = 5$ К.

Для обработки используются статистические методы.

Используются и иные подходы к обработке сигналов

$\hat{L}\hat{U}$ -метод^{2, 3}

$$\{f_0(x_i)\}, i = \overline{0, m}.$$

$$\hat{L}f_0(x_i) = \max\left(\min(f_0(x_{i-1}), f_0(x_i)), \min(f_0(x_i), f_0(x_{i+1}))\right)$$

$$\hat{U}f_0(x_i) = \min\left(\max(f_0(x_{i-1}), f_0(x_i)), \max(f_0(x_i), f_0(x_{i+1}))\right)$$

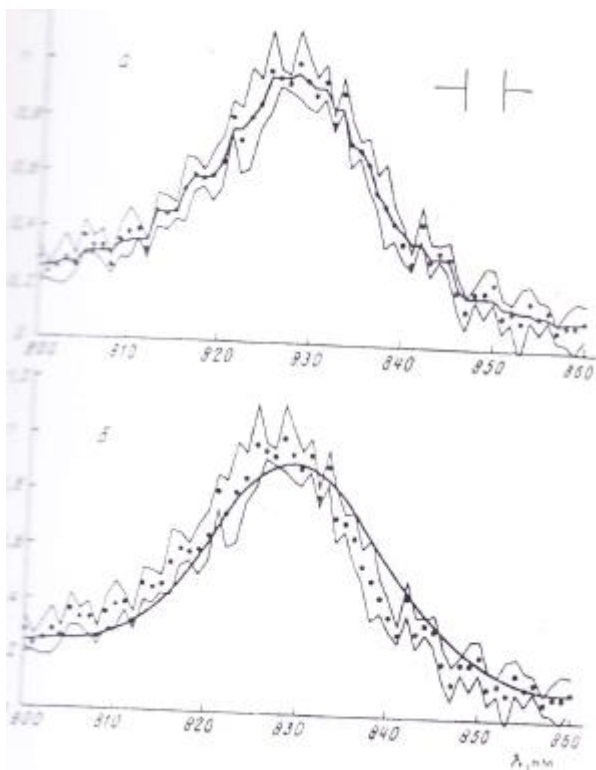
$$i = \overline{1, m-1}.$$

Оператор сглаживания

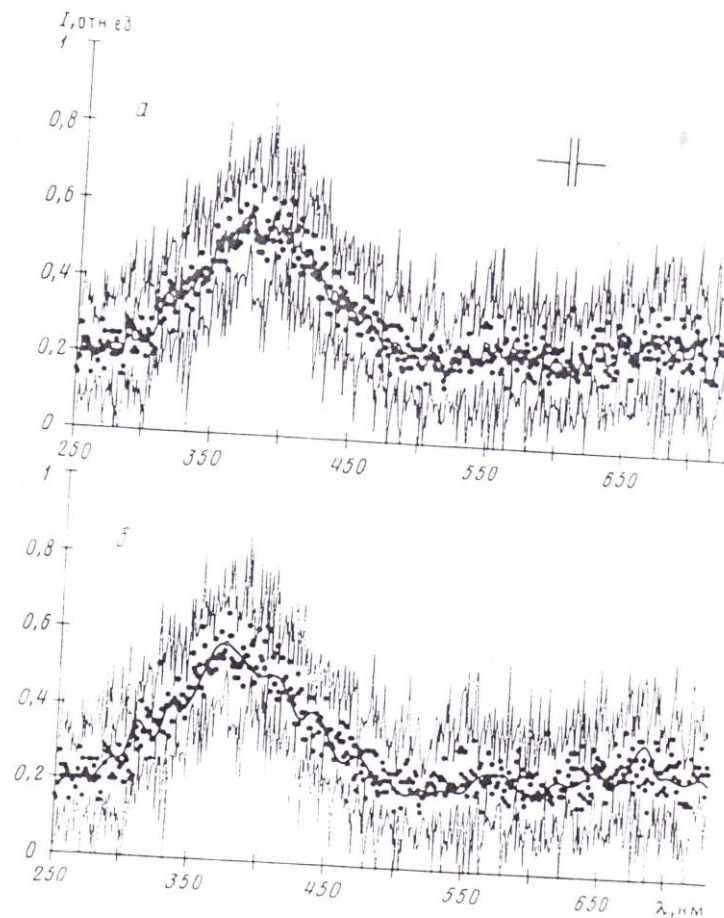
$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{L}\hat{U} + \hat{U}\hat{L})$$

² Rohwer C.H. Fast one-side approximation with spline functions // J. Comput. Appl. Math. 1987. No. 18. P. 93-105.

³ Rohwer C.H. Locally monotone robust approximation of sequences // J. Comput. Appl. Math. 1991. No. 36. P. 399-408.



CdTe



ГГГ

Тонкие линии – границы погрешностей экспериментальных данных.

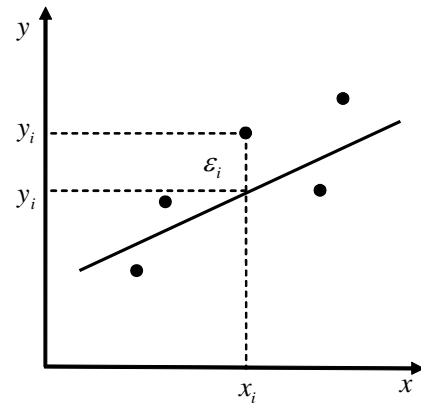
О ПРИЛОЖЕНИЯХ И ПРОБЛЕМАХ

Использование конфлюентного анализа⁴ для интервального оценивания параметров катодолюминесценции прямозонных полупроводников

$$I(E_0, \Theta) \sim \int_{l_s}^{\infty} \Delta p(z) \exp(-\alpha z) dz$$

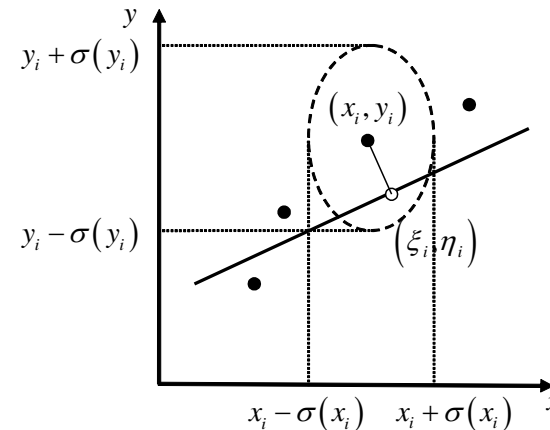
Метод наименьших квадратов

$$F = \sum_{i=1}^n \left(y_i - f(\xi, \bar{\theta}) \right)^2 \rightarrow \min$$



Метод конфлюентного анализа

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\left(E_{0i} - E_0^{(i)} \right)^2}{\sigma^2(E_{0i})} + \frac{\left(I_i - I(E_0^{(i)}, \Theta) \right)^2}{\sigma^2(I_i)} \right] \rightarrow \min$$



⁴ Грешилов А.А. Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конфлюентный анализ. М.: Радио и связь, 1990. – 320 с.

Метод конфлюэнтного анализа позволяет учесть погрешности измерений I и E_0 , получить несмещенные точечные и интервальные оценки параметров Θ , а также точечные и интервальные оценки функциональной зависимости $I(E_0, \Theta)$. Исходная модель оценивания параметров Θ функциональной зависимости $I(E_0, \Theta)$ с учетом погрешностей измеряемых величин имеет вид

$$\begin{aligned} I_i &= I(E_0^{(i)}, \Theta) + \delta_i, \\ E_{0i} &= E_0^{(i)} + \varepsilon_i. \end{aligned}$$

Здесь $E_0^{(i)}$ – истинные (неизвестные) значения энергии электронов пучка, отвечающие измеренным значениям E_{0i} , $i = \overline{1, n}$, n – количество измерений; δ_i и ε_i – случайно распределенные погрешности величин I_i и E_{0i} соответственно.

Примем, что ошибки измерений δ_i и ε_i – нормально распределенные случайные величины с нулевыми средними, дисперсиями $\sigma^2(I_i)$ и $\sigma^2(E_{0i})$, и коэффициентом корреляции $\rho_i = 0$. Тогда совместная плотность распределения, отвечающая вероятности получить точку с координатами (E_{0i}, I_i) , будет иметь вид

$$P_i = \frac{1}{2\pi\sigma(E_{0i})\sigma(I_i)} \exp \left[-\frac{(E_{0i} - E_0^{(i)})^2}{2\sigma^2(E_{0i})} - \frac{(I_i - I(E_0^{(i)}, \Theta))^2}{2\sigma^2(I_i)} \right].$$

Оценки параметров Θ и значений $E_0^{(i)}$ определяются из необходимых условий экстремума функции многих переменных:

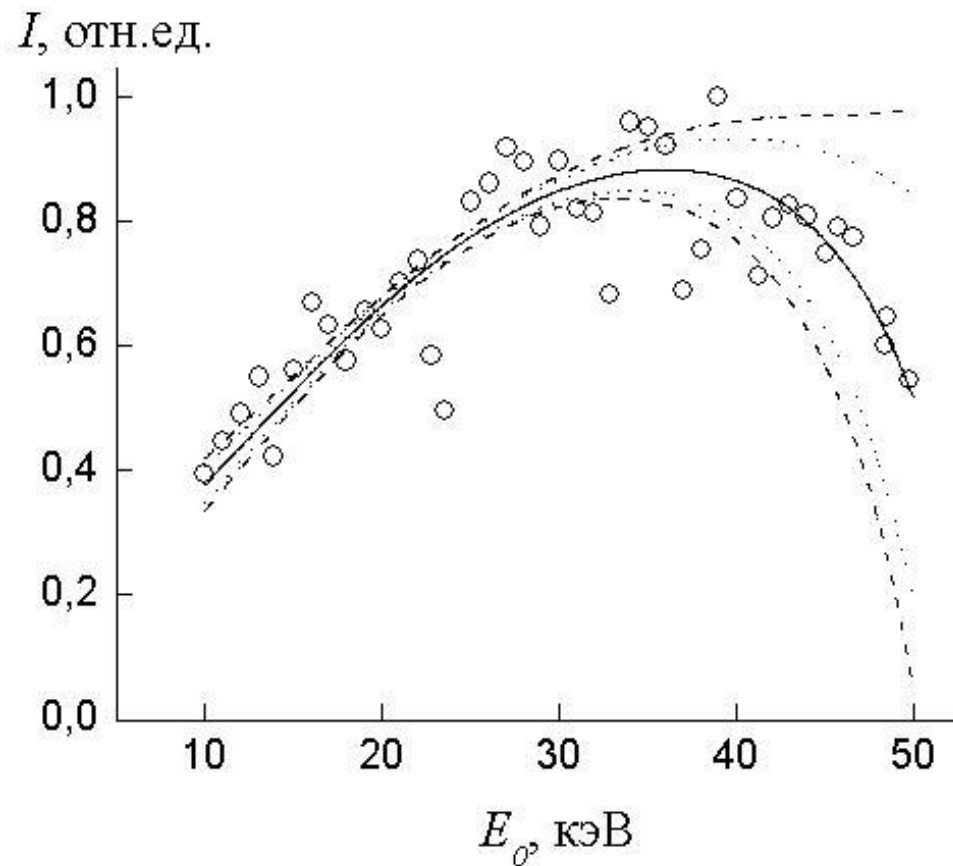
$$\frac{\partial F}{\partial \theta_k} = 0, \quad k = \overline{1, p},$$

$$\frac{\partial F}{\partial E_0^{(i)}} = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Функционал F может быть использован не только для оценки параметров Θ , но и для определения с заданной вероятностью γ интервальных оценок функций $I(E_0, \Theta)$, после чего можно, зная оценки параметров $\hat{\Theta}$, определить их дисперсии $\tilde{D}(\Theta)$:

$$P\left[I(E_0, \hat{\Theta}) - t_\gamma \sqrt{\tilde{D}(I(E_0, \hat{\Theta}))} \leq I(E_0, \hat{\Theta}) \leq I(E_0, \hat{\Theta}) + t_\gamma \sqrt{\tilde{D}(I(E_0, \hat{\Theta}))}\right] = \gamma,$$

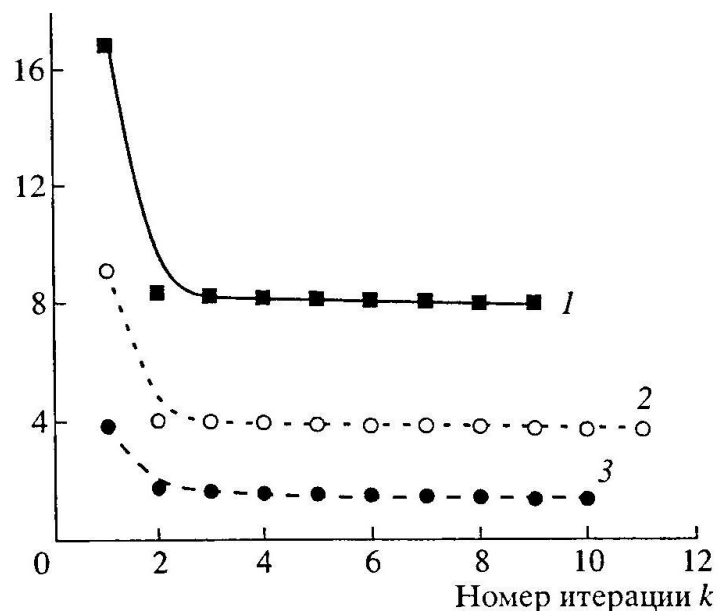
$$\tilde{D}(I(E_0, \hat{\Theta})) = \sum_{k=1}^p \left(\frac{\partial I(E_0, \Theta)}{\partial \theta_k} \right)^2 \bigg|_{\Theta = \hat{\Theta}} \cdot \tilde{D}(\hat{\Theta}).$$



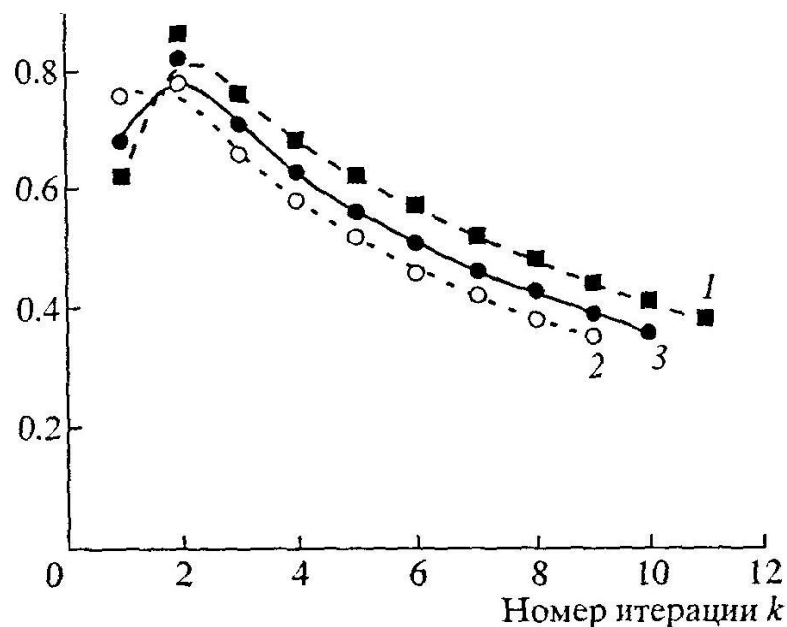
Результаты моделирования интервальных оценок зависимости интенсивности I монохроматического катодолуминесцентного излучения от энергии электронов пучка E_0 , полученные для параметров полупроводника, характерных для монокристаллического CdTe. Кружки – исходные данные, пунктирные линии получены с использованием метода конфлюэнтного анализа.

Отметим, что требование минимальности функционала F , как показывают результаты моделирования, вообще говоря, не всегда гарантирует получение адекватных результатов.

F , отн. ед.



$|L_k - L_0|/L_0$, отн. ед.



Результаты моделирования зависимости функционала F (слева) и относительной величины диффузионной длины ННЗ (справа) от числа итерационных процессов k в методе конфлюентного анализа для параметров полупроводника, характерных для монокристаллического CdTe. Заданная точность измерения энергии электронов пучка составляет: 1 – 0,2 кэВ; 2 – 0,3 кэВ; 3 – 0,5 кэВ.

О выборе начального приближения для идентифицируемых параметров

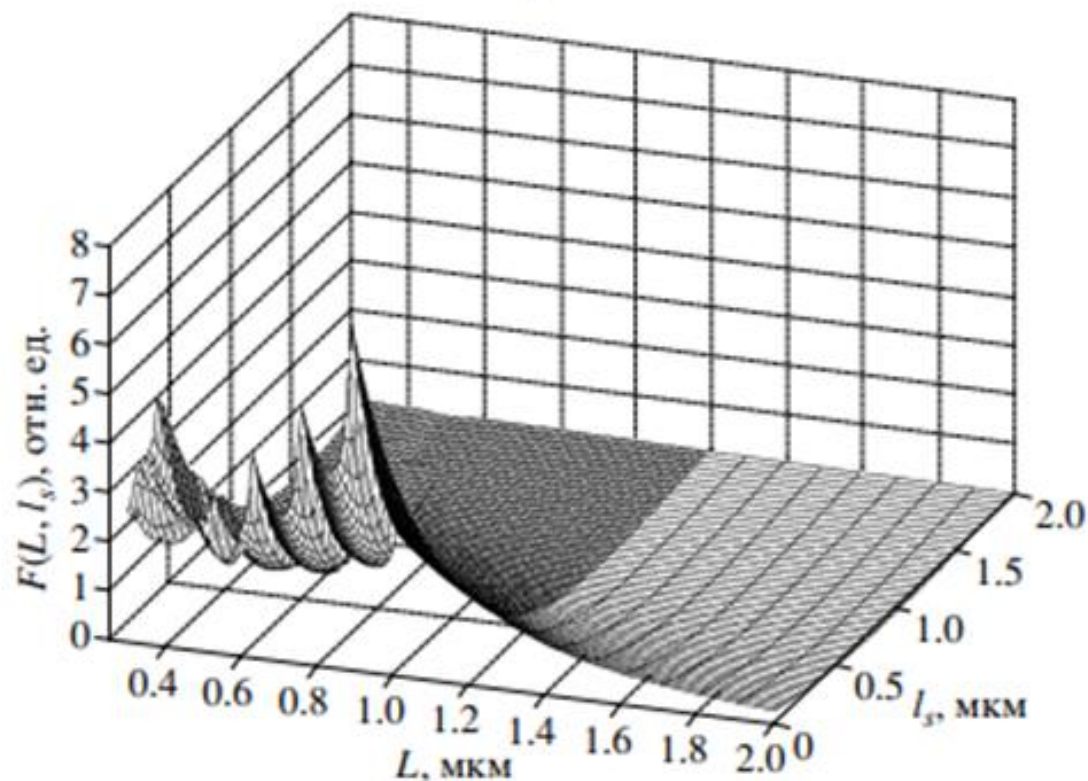
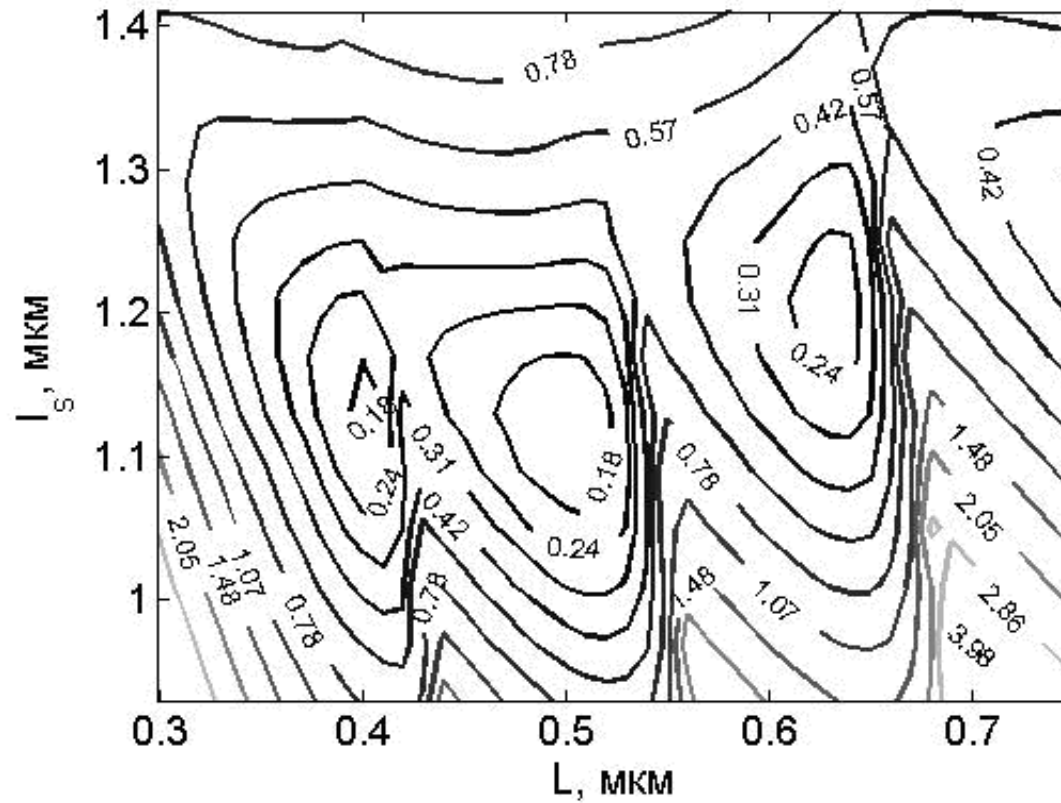


Рис. Зависимость функционала F от диффузионной длины неосновных носителей заряда L и глубины приповерхностной области GaAs, обеднённой основными носителями заряда l_s .



Линии уровня функционала F при $\Theta = (L, l_s)$. Расчеты проведены для параметров полупроводника, характерных для GaAs. Функционал равен нулю в точке $L_0 = 1,5$ мкм, $l_{s0} = 0,86$ мкм.

О моделировании процессов тепломассопереноса в многослойных мишенях

1. О правой части дифференциальных уравнений

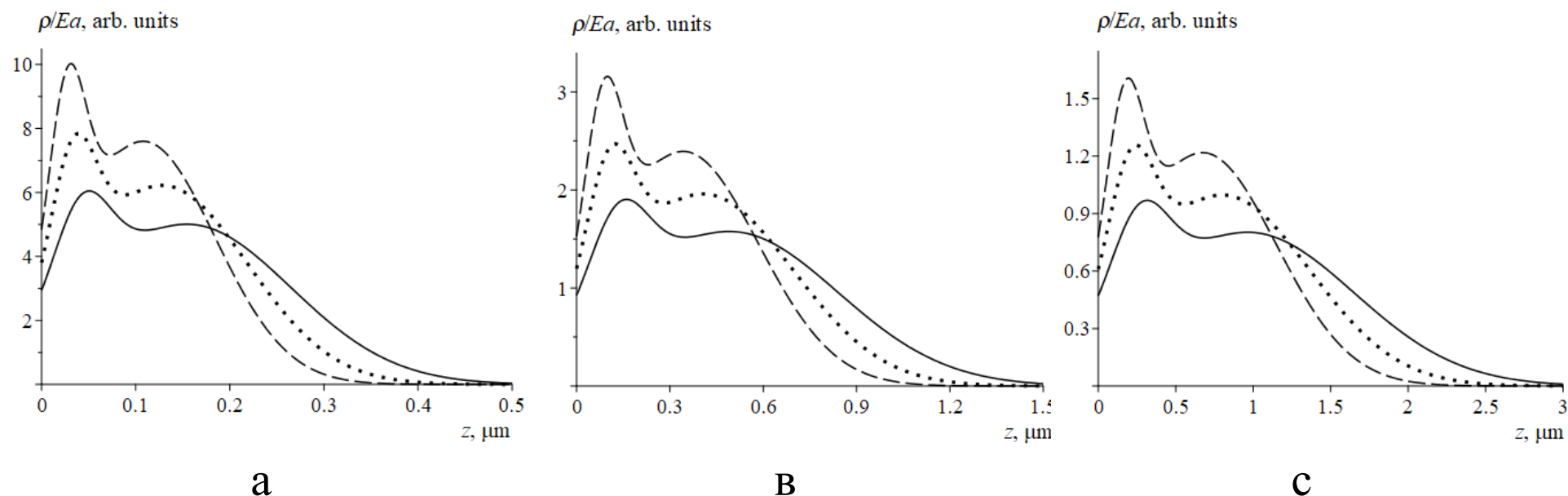


Figure. Normalized to the power E_a , released in targets by an electron beam, energy losses by electrons in single-crystal cadmium telluride (solid curves), its solid solutions $\text{Cd}_{0.6}\text{Hg}_{0.4}\text{Te}$ (dotted lines) and $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$ (dashed lines). Energies of the beam electrons: 10 (a), 20 (b) and 30 (c) keV.

2. О некоторых результатах моделирования

Туртин Д.В., Степович М.А., Калманович В.В., Серегина Е.В. О решении нестационарной задачи тепломассопереноса в многослойной среде методом интегральных представлений // Итоги науки и техники. Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры. – 2022. – Т. 204. – С. 66-73.

Степович М.А., Туртин Д.В., Калманович В.В. Моделирование и качественная оценка процессов тепломассопереноса, обусловленных взаимодействием широких пучков заряженных частиц или электромагнитного излучения с многослойными планарными структурами // Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86, № 11. – С. 1560–1564.

Калманович В.В., Серегина Е.В. О некоторых оценках решений задачи теплопроводности в многослойной среде матричным методом // Таврический вестник информатики и математики. – 2023. – № 2(59). – С. 60-70.



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ