

## Об оценке нагрева мишени электронным зондом. Результаты математического моделирования

М. Н. Филиппов<sup>1,\*</sup>, А. Н. Амрастанов<sup>2,†</sup>, М. А. Степович<sup>2,‡</sup>, А. А. Картанов<sup>3,§</sup>

<sup>1</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова РАН,  
лаборатория химического анализа

Россия, 119991, Москва, Ленинский пр., 31

<sup>2</sup>Калужский государственный университет имени К. Э. Циолковского,  
инженерно-технологический факультет, кафедра физики и математики  
Россия, 248023, Калуга, ул. Степана Разина, д. 26

<sup>3</sup>ООО «КАМИН-Классик». Россия, 248016, Калуга, Теренинский пер., д. 6, офис 403

(Поступила в редакцию 23.12.2023; подписана в печать 02.05.2024)

Методы математического моделирования использованы для оценки нагрева твердотельных мишеней, облучаемых киловольтным электронным зондом. При проведении расчетов использована математическая модель, учитывающая отдельный вклад в потери энергии поглощенных в мишени и обратно рассеянных электронов. Результаты расчетов показали, что для тяжелых мишеней зависимость перегрева мишени от энергии электронов пучка имеет немонокотонный характер: в районе около 3–4 кэВ появлялся локальный минимум, обусловленный существенным вкладом в потери энергии обратно рассеянных электронов. Качественная оценка переноса тепла излучением показала, что для рассмотренной математической модели и низкоэнергетического электронного зонда при постановке краевых задач оправдано считать поток тепла через внешнюю поверхность мишени нулевым.

PACS: 41.75.Fr, 44.40.+a, 02.70.-c

УДК: 537.533.9, 536.332, 543.427.34, 620.187

Ключевые слова: электронный зонд, нагрев мишени, математическое моделирование.

### ВВЕДЕНИЕ

Задачи теплопереноса являются весьма важным классом задач, имеющим широкие практические приложения в различных отраслях науки и практики и поэтому широко изучаемыми теоретическими и экспериментальными методами [1–3]. Одной из причин возникновения явлений теплопереноса может быть передача энергии конденсированному веществу внешним источником: заряженными частицами и/или электромагнитным излучением. При таком взаимодействии в мишени могут возникать различные физические явления, одно из которых — нагрев мишени и связанное с этим излучение, выходящее из нагретой мишени в вакуум или в вакуумную камеру технического устройства. При этом одним из важных вопросов является вопрос об оценках возможности необратимого термического воздействия внешнего источника на анализируемый микрообъем [4, 5], а также вопрос об оценке необходимости учета радиационных потерь при проведении расчетов рассматриваемых явлений теплопереноса.

В электронно-зондовых технологиях в качестве внешнего источника используются потоки заряженных частиц, электронов. При нагреве образца остро сфокусированным электронным пучком, электронным

зондом, площадь поверхности, температура которой значимо отличается от исходной, составляет несколько квадратных микрометров и даже менее. Поскольку экспериментальное измерение температуры с пространственным разрешением менее микрометра весьма затруднительно, для оценки величины нагрева мишени под электронным зондом  $\Delta T(x, y, z)$  особое значение приобретают методы математического моделирования. Довольно подробно математические модели, описывающие потери энергии электронами низких (примерно до 10 кэВ) и средних (от 10 кэВ до примерно 50 кэВ) энергий рассмотрены в [6]. Поскольку к настоящему времени теории, которая описывала бы поведение ускоренных электронов первичного пучка в конденсированном веществе для любых мишеней и энергий электронов, характерных для электронно-микроскопических методов исследования вещества, не существует, количественное описание процессов потери энергии первичными электронами в мишени в той или иной мере опирается на экспериментально установленные факты. И в этом смысле такие математические модели являются полуэмпирическими. В качестве основного и общего отличия в описании потерь энергии монохроматическим пучком электронов в конденсированном веществе можно назвать то, что значительная часть моделей в лучшем случае хорошо описывает только довольно узкий класс материалов и/или довольно узкий диапазон энергий электронов (см., например, [6] и литературу там же). Но возможен и иной подход к описанию рассматриваемого явления. В настоящей работе рассмотрение проведено с использованием одной из таких моделей, отличительной особенностью которой является раздельное описание потерь

\* [mn@filippov.org.ru](mailto:mn@filippov.org.ru)

† [an\\_amr@mail.ru](mailto:an_amr@mail.ru)

‡ [m.stepovich@mail.ru](mailto:m.stepovich@mail.ru)

§ [kartanovartem@gmail.com](mailto:kartanovartem@gmail.com)

энергии первичными электронами, испытавшими в мишени небольшое количество рассеяний на большие углы и вышедшими из мишени (обратно рассеянные электроны), и электронами, испытавшими в мишени рассеяние на небольшие углы и потерявшими первоначальную энергию в конденсированном веществе (поглощенные электроны) [6–8]. Некоторые возможности оценки нагрева мишеней с использованием этой модели для ряда материалов продемонстрированы ранее (см. например, [9–13] и литературу там же). В частности показано, что максимальные значения температуры нагрева по результатам математического моделирования могут составлять десятки и сотни градусов, и для ряда мишеней это может приводить к необратимому термическому воздействию электронного пучка на анализируемый микрообъем. Целью настоящей работы является продолжение изучения возможностей использования методов математического моделирования для оценки нагрева конденсированного вещества киловольтными электронами и оценка необходимости учета радиационных потерь при проведении расчетов рассматриваемых явлений теплопереноса.

## 1. ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ КИЛОВОЛЬТНЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ В КОНДЕНСИРОВАННОМ ВЕЩЕСТВЕ

Функцию, описывающую потери энергии электронным зондом в мишени, учитывающую раздельный вклад обратно рассеянных и поглощенных в мишени электронов запишем в виде [6–8]:

$$\rho(x, y, z) = \frac{1.085(1 - \eta)P_0}{\pi^{3/2}a_1^2 z_{ms} (1 - \eta + \eta z_{ss}/z_{ms})} \times \left\{ \exp \left\{ - \left[ \frac{x^2 + y^2}{a_1^2} + \left( \frac{z - z_{ms}}{z_{ms}} \right)^2 \right] \right\} + \frac{\eta a_1^2}{(1 - \eta) a_2^2} \exp \left\{ - \left[ \frac{x^2 + y^2}{a_2^2} + \left( \frac{z - z_{ss}}{z_{ss}} \right)^2 \right] \right\} \right\}. \quad (1)$$

Здесь начало координат совпадает с точкой падения электронного зонда на образец, координаты  $x$  и  $y$  расположены на плоской поверхности мишени, а ось  $z$  направлена в глубину мишени,  $P_0$  — мощность пучка первичных электронов,  $z_{ms}$  — глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощенными мишенью и  $z_{ss}$  — глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, при этом  $z_{ss} = Z^{-1/3} z_{ms}$ , где  $Z$  — эффективный порядковый номер материала мишени. В формуле (1) также используются следующие параметры:  $\eta$  — коэффициент обратного рассеяния электронов пучка, причем  $\eta(z) = (1.085 a_0 e / \pi^{1/2} z_{ms}) \int_0^z \exp[-(z - z_{ss})^2] dz$ , постоянная  $a_0 = 0.024 (Z^2/A)$ ,  $e$  — основание натуральных логарифмов, и для массивной мишени

$\eta = \int_0^\infty \eta(z) dz \approx 0.024 e Z^{1.67} / A$ , где  $A$  — эффективная относительная атомная масса материала мишени. Параметры  $a_1$  и  $a_2$ , входящие в выражения для  $z_{ms}$  и  $z_{ss}$ , определяются согласно [7, 8].

Сравнение с экспериментальными результатами [7, 8] показало, что эта модель может быть успешно использована при проведении практических расчетов для широкого класса материалов (практически от Al по Au) в широком диапазоне энергий первичных электронов (практически от 2 до 50 кэВ).

## 2. О МОДЕЛИРОВАНИИ НАГРЕВА МИШЕНИ ЭЛЕКТРОННЫМ ЗОНДОМ

Время установления стационарного режима температуры анализируемого микрообъема, 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:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} \Delta T(x, y, z)) = -\frac{\rho(x, y, z)}{k}. \quad (2)$$

Здесь  $\Delta$  обозначает изменение физической величины (т.е. это не оператор Лапласа) — в нашем случае это изменение температуры под действием электронного пучка, перегрев мишени  $\Delta T(x, y, z) = T(x, y, z) - T_0$ , где  $T$  — температура образца в точке  $(x, y, z)$  после установления стационарного режима под воздействием электронного пучка,  $T_0$  — температура образца до воздействия электронного пучка,  $k$  — коэффициент теплопроводности. Функция  $\Delta T(x, y, z)$  удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} \Delta T = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \Delta T = 0, \\ \lim_{y \rightarrow -\infty} \Delta T = 0, \quad \lim_{y \rightarrow +\infty} \Delta T = 0, \\ \lim_{z \rightarrow +\infty} \Delta T = 0. \end{aligned}$$

Поскольку в электронно-зондовых технологиях облучение мишеней электронным пучком в основном проводят в условиях, близких к вакууму, то при расчетах часто задается следующее граничное условие, означающее отсутствие теплообмена с внешней средой:

$$\left. \frac{\partial \Delta T(x, y, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0.$$

Уравнение (2) может быть решено с использованием функции Грина  $G$ . Соответствующее решение будет иметь вид [14]:

$$\Delta T(x, y, z) = \int_D G(x_0, y_0, z_0, x, y, z) \frac{\rho(x_0, y_0, z_0)}{k} dV_Q, \quad (3)$$

где  $D$  — область распространения тепла ( $-\infty < x < +\infty$ ,  $-\infty < y < +\infty$ ,  $0 \leq z < +\infty$ ),  $dV_Q = dx_0 dy_0 dz_0$ . Для рассматриваемой математической модели

$$G = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z+z_0)^2}} \right).$$

Здесь  $(x_0, y_0, z_0)$  — координата точечного источника.

### 3. ОЦЕНКИ НАГРЕВА МИШЕНИ ЭЛЕКТРОННЫМ ЗОНДОМ

Используя соотношение (3), проведены расчеты зависимостей перегрева мишеней  $\Delta T$  от энергии электронов пучка  $E_0$  с учетом вклада в зависимость  $\Delta T(E_0)$  поглощенных в мишени и обратно рассеянных (отраженных) электронов. Для мишеней, отвечающих легким и средним твердым веществам периодической таблицы химических элементов, характерным являлось монотонное уменьшение значений  $\Delta T$  при увеличении  $E_0$ . Однако для тяжелых твердых веществ на зависимостях  $\Delta T(E_0)$  в районе 3–4 кэВ появлялся локальный минимум, обусловленный существенным вкладом в потери энергии обратно рассеянных электронов. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведена зависимость перегрева  $\Delta T(E_0)$  для мишени из золота. Также показан вклад в зависимость  $\Delta T(E_0)$  поглощенных в мишени и обратно рассеянных электронов. Расчеты проведены для тока зонда  $10^{-7}$  А.

Однако при расчетах, результаты которых представлены на рис. 1, не учтены потери энергии на излучение. Такая оценка может быть сделана достаточно элементарным образом. Имея в виду оценку максимального количества уносимого излучением тепла, пренебрегаем влиянием стенок вакуумной камеры технического устройства (например, стенок камеры электронного микроскопа) и полагаем, что образец является абсолютно черным телом. Тогда, в соответствии с законом Стефана–Больцмана, мощность, уносимая из анализируемого микрообъема, описывается соотношением  $P = S\sigma T^4$ , где  $S$  — проекция нагретого микрообъема на поверхность образца,  $\sigma$  — постоянная Стефана–Больцмана,  $T$  — абсолютная температура излучающей поверхности. Реально температура площадки  $S$  спадает от центра к краям, но для оценки максимального значения будем считать, что вся площадка имеет температуру, соответствующую максимальному значению. Размер площадки  $S$  можно оценить, исходя из величины пробега электронов данной энергии в твердом теле (см., например, [6, 15, 16]).

На рис. 2 представлены рассчитанные для абсолютно черной поверхности зависимости тепловой мощности, уносимой в вакуум излучением через площад-

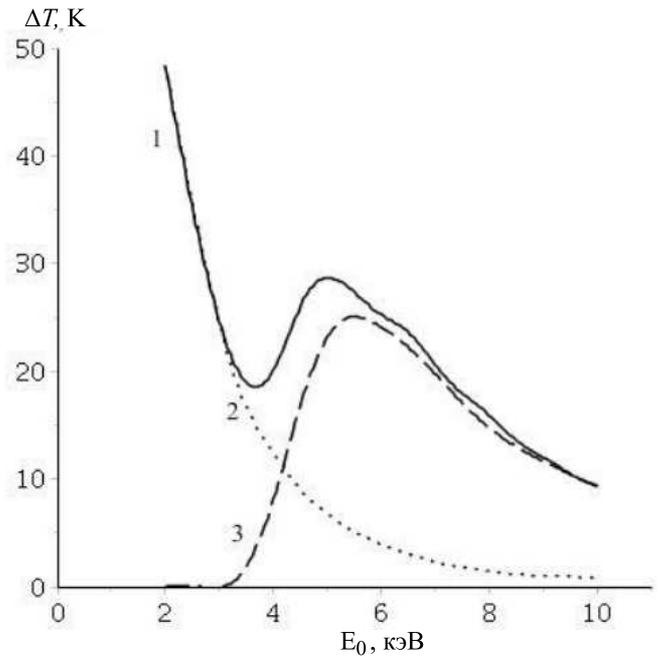


Рис. 1. Зависимость перегрева Au мишени  $\Delta T(E_0)$  от энергии электронов пучка  $E_0$  (кривая 1). Также показан вклад в зависимость  $\Delta T(E_0)$  поглощенных в мишени (кривая 2) и обратно рассеянных (отраженных, кривая 3) электронов. Расчеты проведены для тока зонда  $10^{-7}$  А

ки  $5 \times 5$  мкм,  $2 \times 2$  мкм и  $1 \times 1$  мкм, от абсолютной температуры  $T$  этой площадки. Поскольку образец считался абсолютно черным телом, что соответствует максимальной излучательной способности, реально уносимая излучением энергия может быть в несколько раз меньше.

Как видно из рис. 2, мощность, уносимая излучением, достигает значения мощности, подводимой зондом, только при температуре около 1900 К и площади нагретого участка  $5 \times 5$  мкм. Такие температуры чаще всего несовместимы с устойчивостью образца. Потому при меньших значениях температуры, обычно наблюдаемых в условиях рентгено-спектрального электронно-зондового микроанализа, охлаждение анализируемого микрообъема за счет излучения с поверхности мишени значимым фактором не является. Кроме того, как известно [10], с уменьшением энергии электронов зонда возрастает объемная плотность мощности, рассеиваемой в анализируемом микрообъеме. Это связано с тем, что объем области рассеяния, пропорциональный кубу величины пробега электронов в твердом теле, уменьшается быстрее, чем мощность, прямо пропорциональная энергии первичных электронов. При низких энергиях (1–3 кэВ) существующие модели рассеяния работают плохо и поэтому оценка объема часто проводится на основе эмпирических соотношений. Для диапазона от 1 кэВ до 10 кэВ для аппроксимации экспериментальных данных может быть использовано соотношение  $R = aE_0^n$  [17], где  $E_0$  — энергия первичных элект-

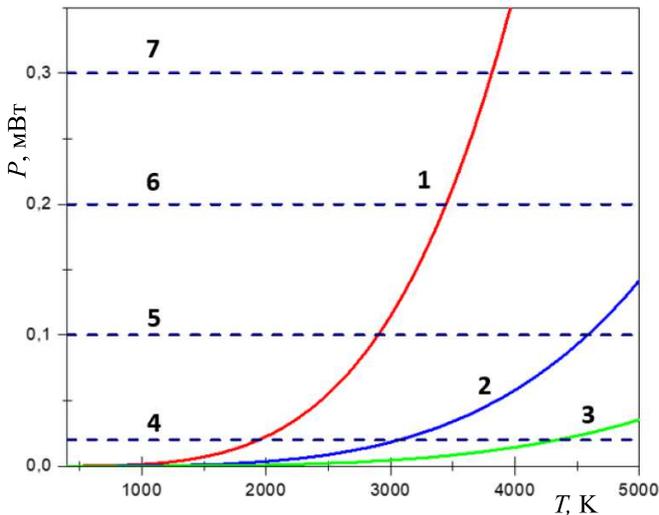


Рис. 2. Зависимости мощности излучения образца от его температуры для различной площади нагретого участка. Кривые 1, 2, 3 соответствуют мощности излучения с поверхности образца в приближении абсолютно черного тела, температурой стенок камеры пренебрегаем: 1 — площадь нагретого участка  $5 \times 5$  мкм; 2 — площадь нагретого участка  $2 \times 2$  мкм; 3 — площадь нагретого участка  $1 \times 1$  мкм. Горизонтальные линии 4, 5, 6, 7 соответствуют различным энергиям и токам электронов зонда: 4 — энергия электронов 20 кэВ, ток зонда 1 нА; 5 — энергия электронов 10 кэВ, ток зонда 10 нА; 6 — энергия электронов 20 кэВ, ток зонда 10 нА; 7 — энергия электронов 30 кэВ, ток зонда 10 нА

тронов в кэВ, а безразмерные постоянные  $a$  и  $n$  — подгоночные параметры, при этом пробег электронов  $R$  получается в мкг/см<sup>2</sup>. В работе [17] для диапазона энергий первичных электронов  $E_0 \in [1; 10]$  кэВ получены следующие значения параметров:  $a \in [9; 12]$  и  $n \in [1.35; 1.44]$ . Например, для алюминия ( $a=9.9$  и  $n=1.37$  [17]) для  $E_0 = 1$  кэВ значение  $R = 0.04$  мкм, а при энергии  $E_0 = 20$  кэВ, характерной для рентгено-

спектрального микроанализа и растровой электронной микроскопии, пробег, оцененный по наиболее адекватному для этой энергии полуэмпирическому соотношению [18], составляет 4.2 мкм. Полагая, что площадь нагретого участка будет пропорциональна квадрату величины пробега, отношение нагретых площадей при  $E_0 = 1$  кэВ и  $E_0 = 20$  кэВ составляет величину порядка  $10^{-4}$ . Соответственно, мощность, уносимая излучением из анализируемого микрообъема при  $E_0 = 1$  кэВ, будет во столько же раз меньше. Таким образом влияние переноса тепла излучением при низких энергиях зонда вообще не будет играть никакой роли. Приведенные оценки оправдывают используемое приближение при постановке краевых задач, в котором поток тепла через поверхность считается нулевым.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование математической модели потерь энергии киловольтным электронным зондом, учитывающей отдельный вклад поглощенных в мишени и обратно рассеянных электронов, показало, что для тяжелых мишеней зависимость перегрева мишени от энергии электронов пучка имеет немонотонный характер и на зависимости температуры перегрева мишени от энергии электронов зонда в районе около 3–4 кэВ появлялся локальный минимум, обусловленный существенным вкладом в потери энергии обратно рассеянных электронов. Качественная оценка переноса тепла излучением показала, что для рассмотренной математической модели и низкоэнергетического электронного зонда при постановке краевых задач оправдано считать поток тепла через внешнюю поверхность мишени нулевым.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Правительства Калужской области № 23-21-10069, <https://rscf.ru/project/23-21-10069/>, <https://rscf.ru/en/project/23-21-10069/>

[1] Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.  
[2] Лыков А.В. Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600 с.  
[3] Кудинов В.А., Карташов Э.М., Калашиников В.В. Аналитические решения задач тепломассопереноса и термоупругости для многослойных конструкций. М.: Высшая школа, 2005. 430 с.  
[4] Ханефт А.В., Долгачев В.А. Дугинов Е.В., Иванов Г.А. // Вестник КемГУ. **3**, № 3(55). 31 (2013).  
[5] Кузин А.Ю., Митюхляев В.Б., Тодуа П.А., Филиппов М.Н. // Измерительная техника. № 11. 68 (2016).  
[6] Степович М.А. // Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники : Дис. д-ра физ.-мат. наук. М.: Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 2003. 351 с.

[7] Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А. // Изв. РАН. Сер. физ. **55**, № 8. 1474. (1991). (Mikheev N.N., Petrov V.I., Stepovich M.A. // Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Phys.Ser. **55**, No. 8. 1 (1991)).  
[8] Михеев Н.Н., Степович М.А. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. **62**, № 4. 20. (1996). (Mikheev N.N., Stepovich M.A. // Industrial Laboratory. 1996. **62**, No. 4. P. 221. (1996)).  
[9] Амрастанов А.Н., Кузин А.Ю., Митюхляев В.Б. и др. // Измерительная техника. № 6. 13. (2017). (Amrastanov A.N., Kuzin A.Yu., Mityukhlyayev V.B. et al. // Measurement Techniques. **60**, Issue 6. 534. (2017)).  
[10] Кузин А.Ю., Степович М.А., Митюхляев В.Б. и др. // Измерительная техника. № 10. 27. (2016). (Kuzin A.Yu., Stepovich M.A., Mityukhlyayev V.B. et al. // Measurement Techniques. **59**, Issue 10. 1061. (2017)).  
[11] Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Степович М.А.,

- Филиппов М.Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исследования. № 8. 48. (2018). DOI:10.1134/S0207352818080036 (Amrastanov A.N., Seregina E.V., Stepovich M.A., Filippov M.N. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. **12**, No. 4. 778. (2018)).
- [12] Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Степович М.А. // *Изв. РАН. Сер. физ.* **82**, № 9. 1304. (2018). (Amrastanov A.N., Seregina E.V., Stepovich M.A. // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. **82**, No. 9. 1187 (2018)).
- [13] Степович М.А., Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Филиппов М.Н. // *Journal of Physics: Conf. Series*. **955**, Art. No. 012040. (2018).
- [14] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 2004. 800 с.
- [15] Практическая растровая электронная микроскопия Под ред. Дж. Гоулдстейна, Х. Яковица. М.: Мир, 1978. 656 с.
- [16] Микроанализ и растровая электронная микроскопия Под ред. Ф. Морис, Л. Мени, Р. Тиксье. М.: Металлургия, 1985. 408 с.
- [17] Boengeler R., Golla U., Kassens M. et al. // *Scanning*. **15**. 1. (1993).
- [18] Kanaya K, Okuyama S // *J. Phys. D: Appl. Phys.* **5**, No. 1. 43. (1972).

## On the assessment of target heating by an electron probe. Results of mathematical modeling

M.N. Filippov<sup>1,a</sup>, A.N. Amrastanov<sup>2,b</sup>, M.A. Stepovich<sup>2,c</sup>, A.A. Kartanov<sup>3,d</sup>

<sup>1</sup>Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Laboratory of Chemical Analysis  
Moscow, 119991, Russia

<sup>2</sup>Tsiolkovsky Kaluga State University, Faculty of Engineering and Technology, Department of Physics and Mathematics  
Kaluga, 248023, Russia

<sup>3</sup>ООО «KAMIN-Classic». Kaluga, 248016, Russia

E-mail: <sup>a</sup>mn@filippov.org.ru, <sup>b</sup>an\_amr@mail.ru, <sup>c</sup>m.stepovich@mail.ru, <sup>d</sup>kartanovartem@gmail.com

Mathematical modeling methods are used to estimate the heating of solid targets irradiated by a kilovolt electron beam. When carrying out the calculations, a mathematical model was used that takes into account the separate contribution to the energy loss of electrons absorbed in the target and backscattered. The calculation results showed that for heavy targets the dependence of target overheating on the beam electron energy is non-monotonic: in the region of about 3–4 keV a local minimum appeared, due to the significant contribution of backscattered electrons to the energy loss. A qualitative assessment of heat transfer by radiation showed that for a low-energy electron probe, when setting boundary value problems, it is justified to consider the body flux through the outer surface of the target to be zero.

PACS: 41.75.Fr, 44.40.+a, 02.70.-c

*Keywords:* electron beam, target heating, mathematical modeling.

*Received 23 December 2023.*

### Сведения об авторах

1. Филиппов Михаил Николаевич — доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. лабораторией; e-mail: mn@filippov.org.ru.
2. Амрастанов Анар Назим оглы — магистр техники и технологии; e-mail: an\_amr@mail.ru.
3. Степович Михаил Адольфович — доктор физ.-мат. наук, профессор, гл. науч. сотрудник; e-mail: m.stepovich@mail.ru.
4. Картанов Артем Алексеевич — инженер-программист ООО «КАМИН-Классик»; e-mail: kartanovartem@gmail.com.