

УДК 537.533.35.7:519.245

Моделирование рассеяния электронов в тонких пленках методом Монте-Карло в приближении дискретных потерь

С. С. Борисов, Е. А. Грачев, Н. Ю. Иванов

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Россия

С. И. Зайцев

Институт проблем технологий микроэлектроники РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

Рассмотрены проблемы моделирования спектров вторичных электронов. Показано, что энергетический спектр электронов на прострел, полученный в приближении дискретных потерь в широком диапазоне энергий, аппроксимируется аналитическим распределением Ландау.

Моделирование методом Монте-Карло (МК) имеет довольно долгую историю, и многие элементы моделирования хорошо отработаны и проверены. Так, эти схемы моделирования хорошо описывают вероятность обратного отражения электрона в зависимости от атомного номера мишени и энергии электрона. Полно описывается и плотность распределения потерь энергии в образце.

Исторически первой использованной для имитационного моделирования была модель на основе приближения непрерывных потерь (ПНП). В этом приближении потери энергии описываются усредненной тормозной способностью (обычно с помощью формулы Бете) — считается, что энергия теряется непрерывно на протяжении траектории. Это приближение можно также назвать приближением средних потерь — считается, что при прохождении малого участка потери энергии электрона не являются случайными, а равны среднему значению. Направление полета электрона, как правило, меняется только в момент упругих столкновений. Впоследствии в сечении упругого взаимодействия была введена поправка, позволяющая учитывать отклонение частицы и при неупругих столкновениях.

Вычислительная модель, использованная при расчетах, а также ПНП и ПДП (приближение дискретных потерь), более подробно представлены в [1].

Как показано в [1], ПНП не способно правильно описывать многие величины, характеризующие процесс рассеяния электронов в веществе, в частности, энергетические спектры электронов, прошедших тонкую пленку вещества. Поэтому была разработана программа на основе ПДП, алгоритм которой учитывает все существенные сечения рассеяния (упругое, ионизация внешних и внутренних атомных оболочек, генерация и распад плазмонов) по отдельности, в отличие от ПНП — в соответствии с дифференциальными сечениями рассеяния в точках взаимодействия. Фактически метод МК в ПДП является

имитационным для задачи рассеяния электронов в твердых гетерогенных средах.

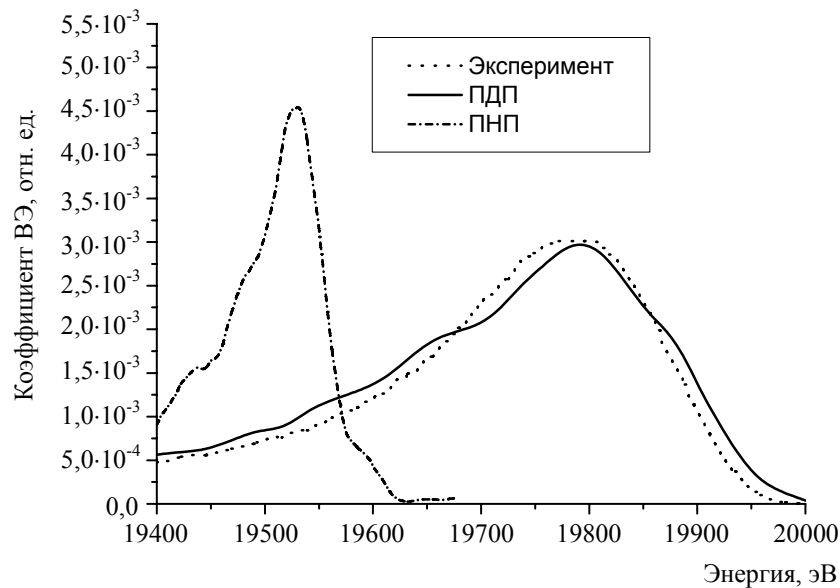
Теоретический анализ ПНП, когда пренебрегается статистическим характером неупругих потерь, показывает [2], что, как ни удивительно, это приближение никогда не выполняется. Данный вывод довольно легко получается из анализа результатов теории Ландау по распределению неупругих потерь электронов после прохождения пленки толщиной x . Именно отношение среднеквадратичного отклонения потерь σ_{Δ} к среднему значению ΔE (коэффициент вариации) [3]

$$\frac{\sigma_{\Delta}}{\Delta E} = \sqrt{\frac{R}{xL_{ion}}}, \quad L_{ion} \approx \ln(1,16 \frac{E_0}{J})$$

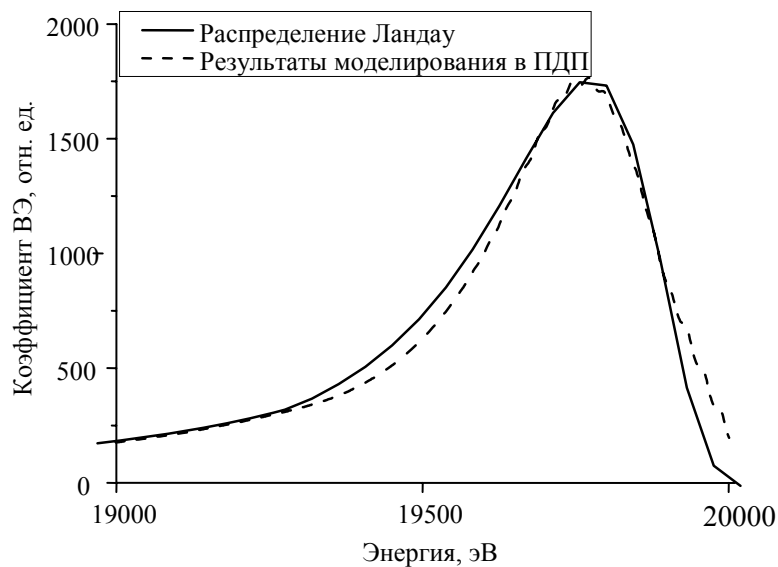
всегда больше единицы. Здесь R — пробег электрона в среде до остановки; J — так называемый эффективный потенциал ионизации с характерным значением от десятков до сотен электрон-вольт, так что значение ионизационного логарифма L_{ion} лежит в районе ~ 5 .

Так как расстояния между упругими соударениями достаточно малы ($x \ll R$), подход Ландау может применяться для анализа процедур МК-алгоритмов. Однако из приведенной оценки видно, что статистический разброс потерь энергии превышает среднее значение, и приближение непрерывных потерь не выполняется.

Хотя оценка коэффициента вариации не вызывает сомнений, все же полезно сравнить (рис. 1, а) результаты моделирования со спектром потерь при прохождении тонких пленок [4]. Видно, что спектр, посчитанный в приближении непрерывных потерь, является слишком узким по сравнению с экспериментально измеренным. Расхождение очень велико, и для правильного описания энергетических спектров необходимо значительное улучшение модели. В [2] показано, что это улучшение можно произвести за счет введения случайности потерь.



а



б

Рис. 1. Сравнение энергетического спектра (ЭС) вторичных электронов (ВЭ), полученных в ПДП и ПНП: а — для пленки золота толщиной 43 нм и энергии первичных частиц 20 кэВ; б — с распределением Ландау

Аналитическая аппроксимация ЭС на прострел

Флуктуации потерь энергии в результате ионизации в процессе прохождения заряженной частицей через тонкий слой вещества были впервые теоретически описаны в работе [3]. Они подчиняются асимметричному универсальному распределению, характеризующему узким пиком в начале и длинным "хвостом" в области положительных значений параметра (благодаря небольшому числу взаимодействий, каждое из которых с малой вероятностью переносит сравнительно большой объем энергии)

$$\Phi(\lambda) = \frac{1}{2i\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(e \log(y) + \lambda y) dy, \quad (1)$$

где λ — безразмерный параметр, пропорциональный потерям энергии;

c — произвольное положительное число.

На рис 1, а изображены спектры, получаемые при использовании различных приближений. Видно, что в ПНП результаты получаются качественно неверные, так как в ПНП существует зона запрещенных потерь — электрон не может потерять энергии меньше, чем потери на прохождение траектории минимальной длины ($E = \int_0^l \frac{dE}{dx} dx$, где l — толщина пленки вещества), и

энергетический спектр образуется за счет разброса длин траекторий, в то время как в ПДП вклад в форму спектра вносят еще и флуктуации потери энергии.

Как видно из рис 1, б ЭС ВЭ на прострел хорошо описывается распределением Ландау для некоторых толщин пленок.

Однако при получении распределения Ландау были сделаны некоторые допущения, в частности о малом количестве взаимодействий и малых потерях. Таким образом, данное распределение действительно только для рассмотрения рассеяния в достаточно тонких пленках. Кроме того, при выводе распределения не учитывается то, что существуют процессы потери энергии не только с непрерывным, но и с дискретным спектром потерь. Один из основных таких процессов — генерация плазмонов. В случае наличия такого рода процессов энергетический спектр электронов, прошедших достаточно тонкую пленку вещества, носит характер набора пиков (рис. 2), по крайней мере в области энергии, близкой к энергии пучка, сглаживающийся по мере увеличения толщины вещества, пройденного электроном за счет наличия процессов с

непрерывным спектром потерь. Следовательно, распределение Ландау неприменимо при моделировании тонкой структуры спектра для достаточно тонких пленок — это хорошо, впрочем, моделируя усредненный спектр с шагом усреднения бóльшим, нежели шаг спектра потерь.

Сравнение ЭС на прострел для пленок золота в диапазоне толщин 30—200 нм при энергии первичных частиц 20 кэВ и разрешающей способности датчика ВЭ 1 % показывает, что результаты моделирования хорошо описываются кривой распределения Ландау. При меньших толщинах и/или большей точности датчика ВЭ на спектре будут видны плазмонные пики, описать которые распределение Ландау не в состоянии.

Таким образом результаты, получаемые в ПДП, согласуются с аналитически полученным распределением (1), что говорит о важности учета флуктуаций потерь энергии, которыми в ПНП пренебрегается.

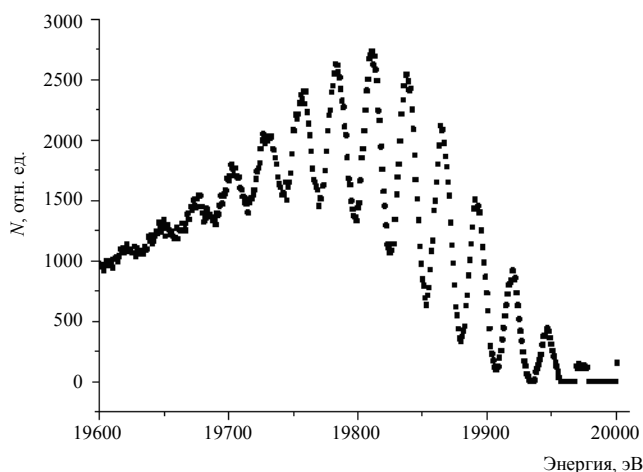


Рис. 2. Спектр на прострел пленки золота толщиной 43 нм с разрешением 1 эВ при энергии первичных частиц 20 кэВ

Литература

1. Борисов С. С., Грачев Е. А., Зайцев С. И. Моделирование взаимодействия электронного пучка с гетерогенными средами методом Монте-Карло в приближении дискретных потерь//Прикладная физика, 2004. № 3. С. 65.
2. Зайцев С. И. Расширенный автореферат докторской диссертации, 2000, Черноголовка.
3. Landau L. On the energy loss of fast particles by ionization//Journal of Physics. 1944. № 8. P. 201.
4. Berger D. Hochaufgeloste Elektronenstreuexperimente für anwendungen in der elektronenmikroskopie und der Monte-Carlo-Simulation der electronenstreuung, Technischen Universitat, Berlin, 2000.

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

Simulation of electron scattering in thin films using Mont-Carlo method in discrete losses approximation

S. S. Borisov, E. A. Grachev, N. Yu. Ivanov
M. V. Lomonosov State University, Moscow, Russia

S. I. Zaitsev

Institute of Problems of Microelectronic Technology, Russian Academy of Science,
Chernogolovka, Moscow region, Russia

Problems of secondary electrons energy spectrum simulation are discussed in present article. It is shown that secondary electrons shoot energy spectrum simulated using discrete losses approximation coincides with Landau distribution function.

* * *