

УДК 537.533.35.7:519.245

## Моделирование взаимодействия электронного пучка с гетерогенными средами методом Монте-Карло в приближении дискретных потерь

С. С. Борисов, Е. А. Грачев

Физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова,  
Москва, Россия

С. И. Зайцев

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

*Рассмотрены проблемы моделирования спектра обратнорассеянных и истинно-вторичных электронов, а также спектров на прострел методом дискретных потерь. Полученная модель позволяет отделять электронные спектры от образцов сложной 3-мерной топологии, и в силу большей точности используемого метода дискретных потерь точнее оценивать распределение выделившейся энергии и заряда. Результаты моделирования сравниваются с экспериментальными данными, приводятся примеры моделирования изображения в РЭМ.*

Диагностика с помощью растровой электронной микроскопии и технологическое использо-

вание электронных пучков (в основном в микроэлектронике) определяют не ослабляющийся

интерес к разработке теоретических и математических моделей взаимодействия быстрых электронов с веществом с целью адекватной интерпретации экспериментальных данных в диагностике и предсказании результата технологического воздействия.

Создание и использование устройств, позволяющих анализировать с высоким разрешением ( $< 1\%$ ) [1–4] спектр отраженных электронов, расширил диагностические возможности РЭМ. Появилась обоснованная надежда на использование спектров для решения томографических задач. Вместе с тем стало ясно, что широкоиспользуемое приближение непрерывных потерь [5] становится явно недостаточным. Так, в работе [6] было предложено использовать подход Ландау для описания случайности потерь энергии и универсальную функцию Ландау для реализации случайности потерь в Монте-Карловском алгоритме. Учет случайности потерь позволил правильно описать распределение потерь энергий быстрых электронов, прошедших через тонкую пластинку (спектр “на прострел”) и получить в спектрах обратноотраженных такую качественную особенность, как “квазиупругий” пик. Однако такой подход [6] является все же полуэмпирическим, количественные ограничения на использование метода не ясны. Поэтому в настоящей работе был использован другой подход для преодоления трудностей метода непрерывных потерь.

Особенность данной модели — попытка охватить все существенные каналы рассеяния и рассмотреть их по отдельности. Такой подход можно назвать методом дискретных (случайных) потерь (МДП), в отличие от метода непрерывных (усредненных) потерь (МНП) в теории Бете—Блоха. Как показано ниже, использование МДП при решении задач рассеяния частиц в веществе дает результаты, лучше согласующиеся с экспериментом, особенно для некоторых классов задач, где МНП дает неверные результаты.

В данной работе моделирование взаимодействия электронного пучка с веществом проводится на основе метода статистических испытаний. Правильное моделирование эмиссионных спектров невозможно без отдельного рассмотрения различных (упругих и неупругих) каналов рассеяния из-за значительного вклада вторичных частиц во вторичный спектр. В диапазоне энергий до 200 кэВ потери на ионизацию и генерацию плазмонов являются доминирующими и составляют  $\sim 97\%$  всех потерь, поэтому остальными каналами неупругого рассеяния можно пренебречь. Кроме того, зная сечение ионизации электронов  $K$  и  $L$  оболочек, можно также моделировать спектр характеристического рентгеновского излучения и спектр Оже-электронов, исходя из выхода флюоресценции.

## Краткое описание моделей

### Модель дискретных потерь

Для описания сечения упругого рассеяния в данной работе использовалась формула Резерфорда с экранированием

$$\sigma(\theta) = \frac{Z^2 e^4}{4E^2(1 - \cos\theta + 2\beta_N)^2},$$

где  $E$  — энергия первичного электрона;  
 $\theta$  — угол рассеяния;  
 $\beta_N = 5,43Z^{2/3}/E$  — параметр экранирования;  
 $e$  — заряд электрона;  
 $Z$  — заряд ядра атома.

При вычислении сечения ионизации  $K$  или  $L$  оболочки следует учитывать энергию связи соответствующего электрона, которая, достигая нескольких кэВ, становится сравнима с начальной энергией первичного электрона. Для моделирования взаимодействия с сильно связанными электронами использовалась полуэмпирическая формула Гризинского, представляющая собой сечение ионизации атомного электрона с энергией связи  $E_j$

$$\sigma(E_s) = \frac{\pi e^4}{EE_s^2} \left( \frac{E}{E + E_j} \right)^{1,5} \left( 1 - \frac{E_s}{E} \right)^{E_j/(E+E_j)} \times \\ \times \left( 1 - \frac{E_j}{E} + \frac{4E_j}{3E_s} \ln \left( 2,7 + \sqrt{\frac{E - E_s}{E_j}} \right) \right), \quad (1)$$

где  $E_s$  — энергия выбитого вторичного электрона;

$E_j$  — энергия связи  $j$ -го электрона.

Для веществ с небольшим  $Z$ , как, например органические диэлектрики, основным механизмом потерь энергии является рассеяние на электронах внешних (валентных) оболочек. В области энергий от 1 до 10 кэВ ионизация  $K$ — $L$  оболочек примерно составляет 10% от общих потерь. В то же время формула (1) малоточна для электронов с малой энергией связи, поэтому для слабосвязанных электронов ( $E_j < 25$ — $50$  эВ) использовалось другое сечение взаимодействия

$$d\sigma(\theta) = Z \left( \frac{e^2}{2E} \right)^2 (\sin^{-4}\theta + \cos^{-4}\theta - \sin^{-2}\theta \cos^{-2}\theta) \times \\ \times \cos\theta d\theta, \sin^2\theta = E_s/E, \quad (2)$$

где  $Z$  — количество электронов из числа атомных, моделирование рассеяния на которых проводится с помощью выражения (2).

Граничное значение энергии  $E_{bord}$ , ниже которой электрон считается слабосвязанным, довольно размыто. В то же время варьирование этой величины в некоторых случаях приводит к

качественному изменению формы спектра вторичных электронов. Рекомендуется выбирать значение исходя из пробного моделирования для веществ с известным спектром. В данной работе приводятся результаты моделирования для  $E_{bord} = 50$  эВ (метод дискретных потерь) и  $E_{bord} = 0$  эВ (метод дискретных потерь, вариант 2). Как показало моделирование, чаще всего значение  $E_{bord} \approx 20-30$  эВ.

Для моделирования спектра истинно вторичных электронов в веществах с выраженными металлическими свойствами необходимо включить в рассмотрение процессы рождения и распада плазмонов. Как было показано в [5, 7] основным процессом такого рода можно считать возбуждение (и распад с образованием вторичной частицы) объемных плазмонов. Сечение рассеяния первичного электрона в процессе рождения плазмона зададим в виде [7, 8]

$$\frac{d\sigma_{pv}(\vartheta)}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi a_0} \frac{\vartheta_E}{\vartheta_E^2 + \vartheta^2}, \quad \vartheta \leq \vartheta_c,$$

$$\vartheta_E = \Delta p / p = \hbar \omega_p / 2E;$$

$$\vartheta_c = \hbar q_c / p = 0,353(k_F / k_p)(R_0 / a_0)^{\frac{1}{2}},$$

$$R_0 = \left(\frac{3}{4\pi n_0}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad \lambda = \frac{A}{N_{A\rho\sigma}},$$

- где  $\vartheta_c$  — критический угол рассеяния;  
 $n_0$  — концентрация валентных электронов;  
 $k_p = p / \hbar$  — волновой вектор первичного электрона;  
 $k_F$  — волновой вектор электрона на уровне Ферми;  
 $p$  — импульс налетающего электрона;  
 $a_0$  — Борковский радиус;  
 $R_0$  — среднее расстояние между валентными электронами;  
 $\lambda$  — длина пробега относительно возбуждения плазмона.

Энергия кванта плазменных колебаний дается соотношением

$$\hbar \omega_p = \hbar \left(4\pi N e^2 / m\right)^{\frac{1}{2}},$$

- где  $N$  — концентрация валентных электронов;  
 $m$  — масса электрона.

В связи с тем что импульс, уносимый плазмоном, в большей части случаев незначителен по сравнению с энергией первичной частицы, изменением направления движения первичного электрона можно пренебречь.

Подробное моделирование физики рассеяния электронов с энергиями порядка десятков электронвольт требует слишком больших вычислительных ресурсов, однако в случае моделирова-

ния рассеяния в металлах и некоторых полупроводниках, как оказалось, можно обойтись достаточно простой моделью.

Рассеяние электронов с энергиями менее 100 эВ будем считать изотропным по углу отклонения (Koshikava, Shimizu, 1974). Таким образом, энергии образовавшихся после рассеяния двух электронов выражаются как

$$E' = E\sqrt{\xi}, \quad E'' = E(1 - \sqrt{\xi}),$$

где  $\xi$  — равномерно распределенная на отрезке  $[0, 1]$  случайная величина.

Вероятность вылета электрона, находящегося на глубине  $z$  (с учетом направления полета), записывается как [5, 9]

$$P_z = \exp(-z / \lambda(E));$$

$$\lambda(E) = a \left\{ \frac{538}{(E - E_F)^2} \right\} + 0,41a\sqrt{(E - E_F)},$$

где  $\lambda$  — длина пробега между взаимодействиями, нм [6];

$a^3 = A/\rho n N_A \cdot 10^{24}$  — толщина мономолекулярного слоя, нм.

Для неорганических соединений  $\lambda$  имеет вид

$$\lambda(E) = a \left\{ \frac{2170}{(E - E_F)^2} \right\} + 0,72a\sqrt{(E - E_F)}.$$

Для органических соединений  $\lambda$ , мг/м<sup>2</sup>

$$\lambda(E) = \frac{49}{(E - E_F)^2} + 0,11\sqrt{(E - E_F)}.$$

При этом считается, что любой не вылетевший электрон испытывает неупругое соударение [9].

Для учета поверхностных эффектов была введена модель поверхностного потенциального барьера. Вероятность его преодоления

$$P_C = 1 - \sqrt{\frac{E_F + \varphi}{E}},$$

- где  $E_F$  — энергия на уровне Ферми;  
 $E$  — энергия электрона;  
 $\varphi$  — работа выхода.

### Модель непрерывных потерь

В данной модели взаимодействия отклонение электрона при столкновении описывается модифицированной формулой Резерфорда, представляющей собой сумму сечений упругого и неупругого рассеяний [3]

$$\sigma(\theta) = \frac{Z(Z+1)e_e^4}{4E^2(1 - \cos(\theta) + 2\beta)^2}, \quad \beta = 5,43Z^{2/3}/E.$$

Потери энергии вдоль траектории вычисляются следующим образом:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi e_e^4 NZ}{E} \ln\left(\frac{E}{2CZ} \sqrt{\frac{e}{2}}\right),$$

$$C = \left(9,76Z + \frac{58,5}{Z^{0,19}}\right), \text{ эВ},$$

где  $E$  — энергия налетающего электрона;  
 $e_e$  — заряд электрона;  
 $Z$  — атомный номер;  
 $C$  — эффективная энергия ионизации;  
 $\beta$  — параметр экранирования.

Исследовались также модификации данной модели, в которых учитывалась генерация быстрых вторичных электронов. Быстрыми считаются вторичные электроны с энергией  $> 500$  эВ, и в качестве сечения их рождения используется сечение вида (2). Потери энергии, соответствующие генерации быстрых вторичных электронов, вычитаются из полученных по формуле 3 (см. ниже). Результаты, получаемые с помощью такого рода модификаций, дают более точные значения коэффициентов эмиссии, однако качественно результаты моделирования не различаются.

### Основные результаты моделирования

С целью проверки адекватности получаемых данных для широкого спектра материалов приводится таблица сравнения полученных коэф-

фициентов вторичной эмиссии с экспериментальными данными (таблица). Видно, что методом дискретных потерь получаются более точные значения коэффициентов эмиссии.

Основным достоинством МДП является возможность адекватного моделирования не только значений коэффициентов эмиссии, но и формы электронных спектров. На рис. 1 приведены экспериментальные электронные спектры на прострел для тонкой (43 нм) пленки золота при облучении электронным пучком с энергией 20 кэВ, а также спектры, полученные при моделировании методами ДП и НП. Сравнивая кривые, можно увидеть, что МДП дает качественно и количественно более точные оценки энергетического распределения электронов внутри образца, а значит, позволяет получать более точные оценки накопленных дозы и заряда. Результаты моделирования спектров на прострел тонких пленок совпадают со спектрами, получаемыми при использовании теории Ландау.

Таким образом, получается, что энергетическое распределение первичных частиц внутри образца по оценкам моделей МНП и МДП может существенно различаться при рассмотрении областей небольшого объема. Это приводит к тому, что хотя модели дают сходные коэффициенты эмиссии, формы энергетических распределений могут существенно отличаться. Это верно не только для спектров на прострел, но и для спектров отраженных электронов. На рис. 2, а, б приведены примеры моделирования МНП и МДП моделей для различных веществ (Al и Au).

Коэффициенты вторичной эмиссии (ВЭ) некоторых материалов

Материал	Энергия, кэВ	Метод непрерывных потерь	Метод непрерывных потерь с учетом "быстрых вторичных" электронов	Метод дискретных потерь, вариант 2	Метод дискретных потерь	Экспериментальные данные [6, 9]
Металлы						
Al	5	0,148	0,162	0,204	0,191	0,174—0,186
	10	0,140	0,149	0,187	0,179	0,142—0,177
	30	0,131	0,144	0,174	0,166	0,134—0,135
Fe	5	0,271	0,266	0,295	0,261	0,300—0,320
	10	0,259	0,248	0,282	0,253	0,265—0,296
	30	0,250	0,219	0,277	0,245	0,252—0,288
W	5	0,483	0,468	0,475	0,440	0,472—0,474
	10	0,459	0,436	0,464	0,435	0,433—0,483
	30	0,441	0,400	0,452	0,423	0,434—0,501
Ag	5	0,391	0,392	0,411	0,381	0,418—0,422
	10	0,323	0,377	0,399	0,372	0,365—0,420
	30	0,360	0,359	0,386	0,362	0,361—0,420
Диэлектрики						
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4	0,148	0,156	0,215	0,167	0,17
BeO	4	0,790	0,912	0,12	0,105	0,1
NaCl	3,5	0,149	0,212	0,24	0,209	0,22
MgO	4	0,201	0,334	0,140	0,174	0,17
KBr	6	0,345	0,140	0,386	0,251	0,26

Рис. 1. Сравнение результатов различных моделей с экспериментальными данными для моделирования спектра "на прострел"

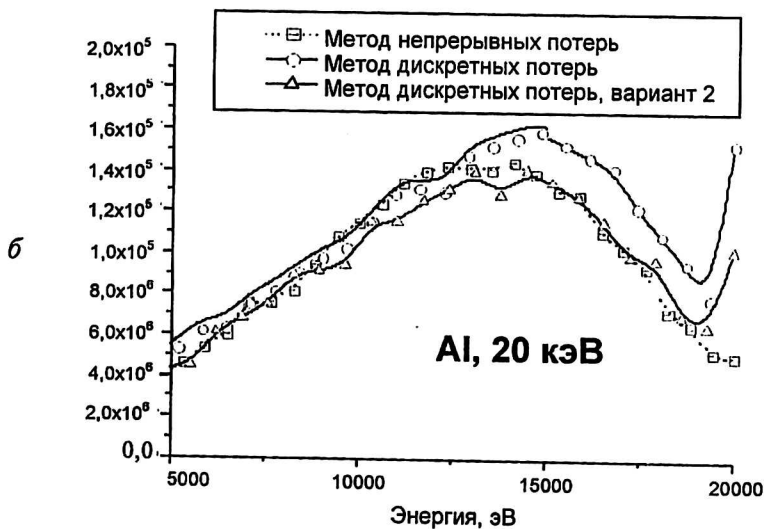
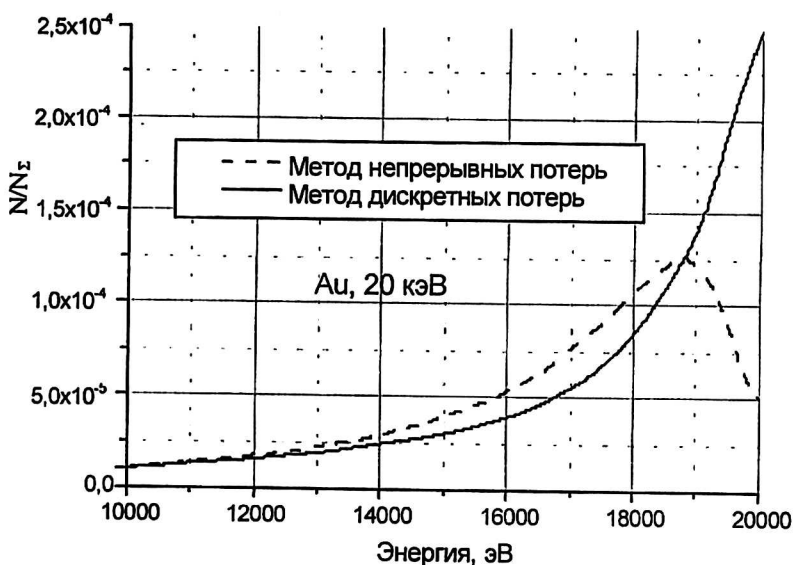
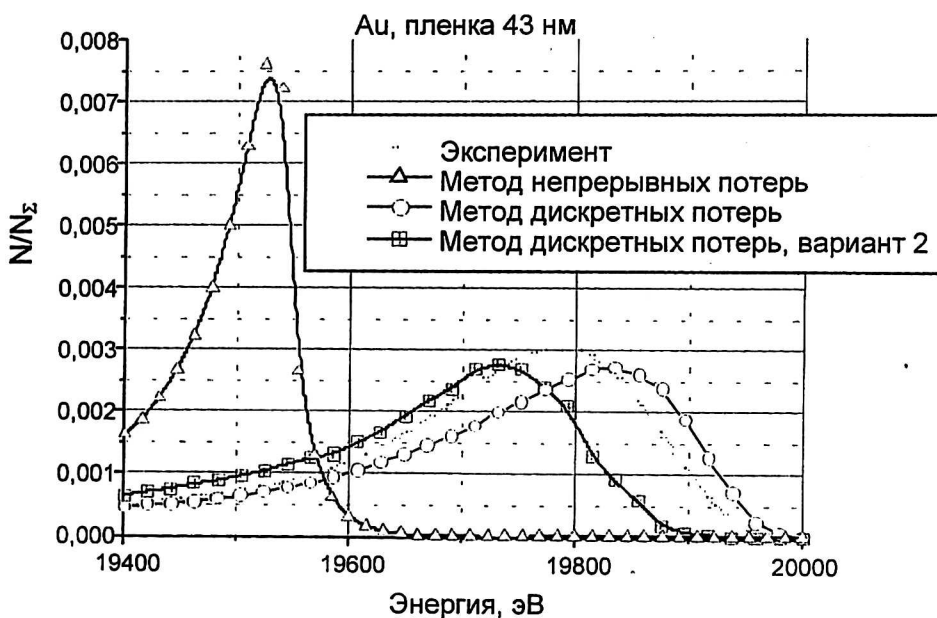


Рис. 2. Сравнение результатов различных видов моделей для моделирования спектра отраженных электронов при облучении образца из: а — золота; б — алюминия

При моделировании в МДП на спектре обратноотраженных электронов удается получить так называемый псевдоупругий пик, не возникающий при использовании МНП (см. рис 2, а, б). Как и в случае спектров на прострел, сходный результат дает теория Ландау, что подтверждает правильность моделирования.

МНП не позволяет получать квазиупругий пик и в некоторых случаях (особенно для веществ с большим удельным весом) дает неправильную форму спектра. Следует отметить, что точность моделирования МДП можно повысить, используя более точные значения сечения упругого рассеяния (Мотта).

При сравнении расчетов с экспериментальными данными часто встает вопрос о влиянии качества обработки поверхности образца на по-

лученные спектры. Рассмотрим этот вопрос на примере влияния наличия тонких пленок на поверхности рассматриваемого образца на энергетический спектр отраженных электронов. Оказывается, что тонкие (1–10 нм) пленки загрязнений (появляющиеся, например, при масляной откатке) могут сильно исказить высокоэнергетическую часть спектра отраженных электронов, полностью убирая псевдоупругий пик. Это подтверждается результатами моделирования, приведенными на рис. 3, а, где показаны спектры золота, покрытого пленками углерода различной толщины, свернутые с аппаратной функцией датчика обратноотраженных электронов. В качестве аппаратной функции использовалось гауссово распределение с шириной 100 эВ.

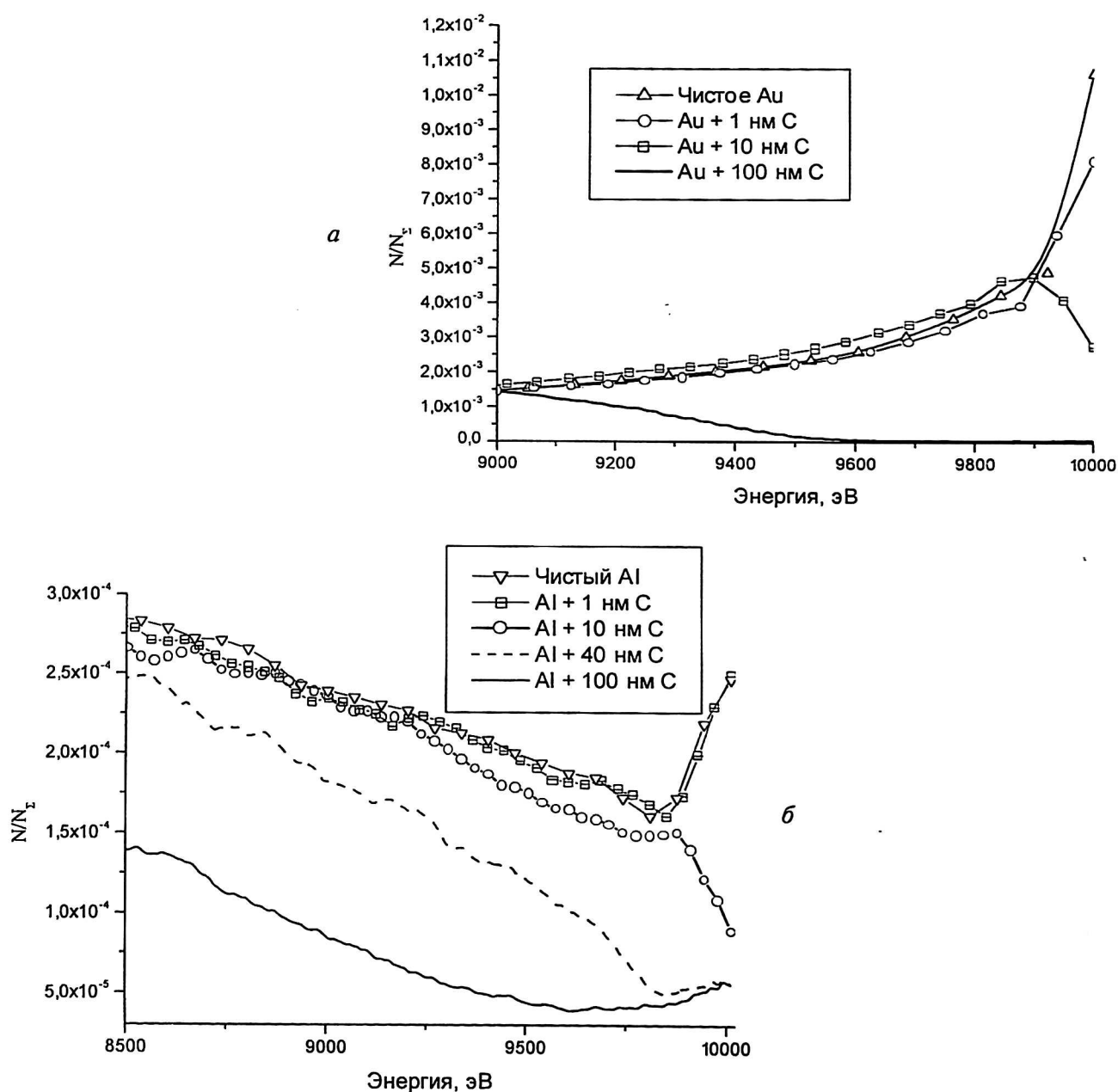


Рис. 3. Влияние загрязнений на поверхности на высокоэнергетическую часть спектра (псевдоупругий пик).  
Примеры моделирования пленки углерода на:  
а — золоте; б — алюминии

Одним из способов ускорения расчетов вторичных электронных спектров служит обрывание траектории электрона, находящегося на глубине ниже глубины выхода (ГВ). Значение этого параметра важно и в некоторых теоретических расчетах. Для алюминия (см. рис. 3, б), например, существуют эмпирическая формула, полученная Вебером [10] в области энергий 3 кэВ—3 МэВ.

$$\rho L_v = 337,5E(1 - 0,98(1 + 3,7E)^{-1}) ;$$

$$\rho L_v - \text{мг/см}^2; \quad E - \text{МэВ} .$$

Для диапазона энергий 0,5—4 кэВ Бронштейном и Фрайманом [11] для некоторых веществ получена зависимость

$$\rho L_v = 3 \cdot 10^{-6} E^{1,4} A / Z ;$$

$$\rho L_v - \text{мг/см}^2; \quad E - \text{кэВ} . \quad (4)$$

Данную величину можно также выяснить с помощью пробного моделирования. Зададим некоторую границу, при пересечении которой моделирование траектории электрона прекращается. Расположим ее параллельно верхней границе полубесконечного образца, и будем опускать ее до тех пор, пока моделируемый спектр отраженных электронов не будет отличаться от полученного при полном моделировании. На рис. 4 показана динамика изменения коэффициента ВЭ с поверхности кремния при энергии пучка 9 кэВ при проведении вышеописанной процедуры.

Там же дан график изменения скорости счета в зависимости от положения уровня остановки электронов. При использовании полученных вышеописанным образом значений глубины выхода вторичного излучения удается получить ускорение счета примерно в 1,4 раза. На рис. 5 показаны вычисленные значения  $L_v$  для кремния в области энергий 1—20 кэВ, а также значения, вычисленные по формулам (3), (4).

Рис. 4. Зависимость скорости счета и коэффициента ВЭ от глубины, на которой траектории электронов обрывались

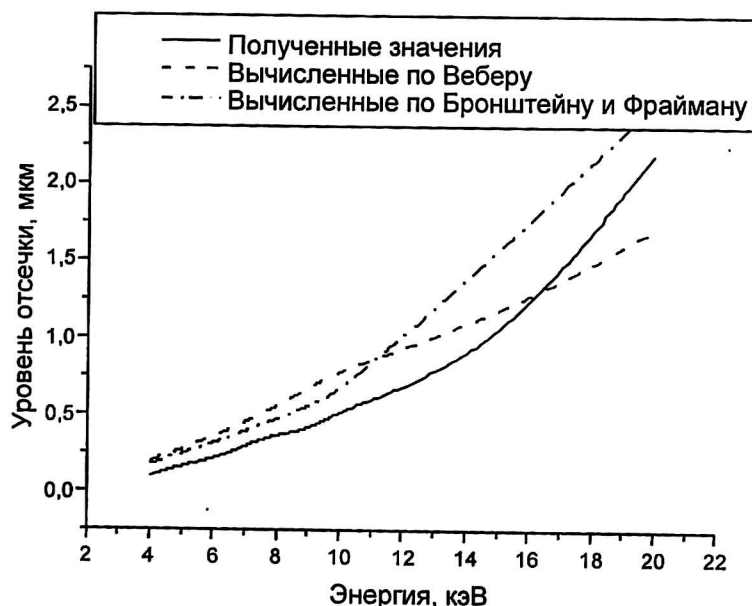
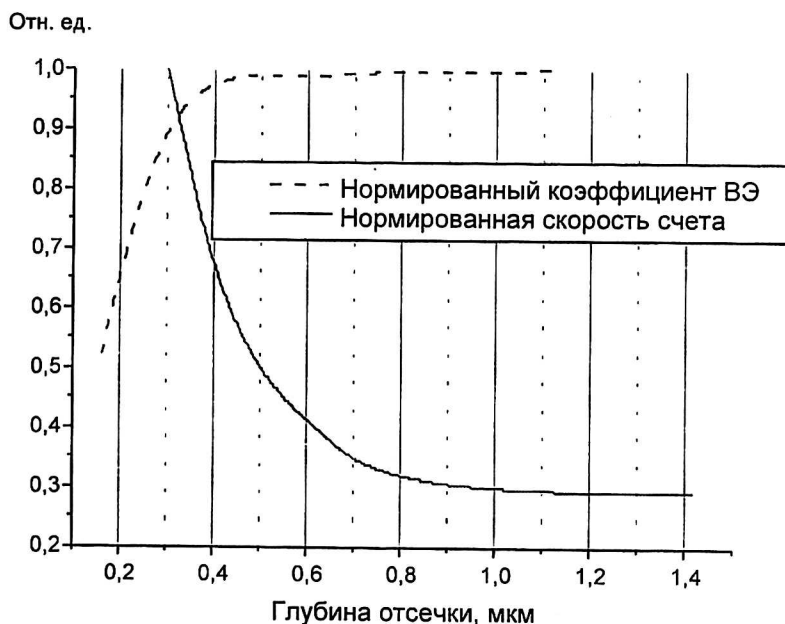


Рис. 5. Вычисленная глубина выхода ВЭ в зависимости от энергии пучка

В качестве примера моделирования приведено (рис. 6) изображение в РЭМ для сложной структуры. Она представляет собой V-образную канавку в кремнии, покрытую слоями оксида кремния и золота с двумя золотыми электродами по бокам. Видно, что сигнал содержит особенности (например резкие пики вблизи значений  $X = -0,8; -0,75; -0,5$ ), которые легко ассоциируются с особенностями рельефа и внутреннего строения. Очевидно, что метод моделирования позволяет получать сигнал, отвечающий количеству электронов с заданной энергией. Набор таких сигналов (с разными потерями энергий) более полно характеризует строение образца по глубине и рельеф. Таким образом, построенный и реализованный алгоритм открывает путь к количественной интерпретации спектров обратно-рассеянных электронов.

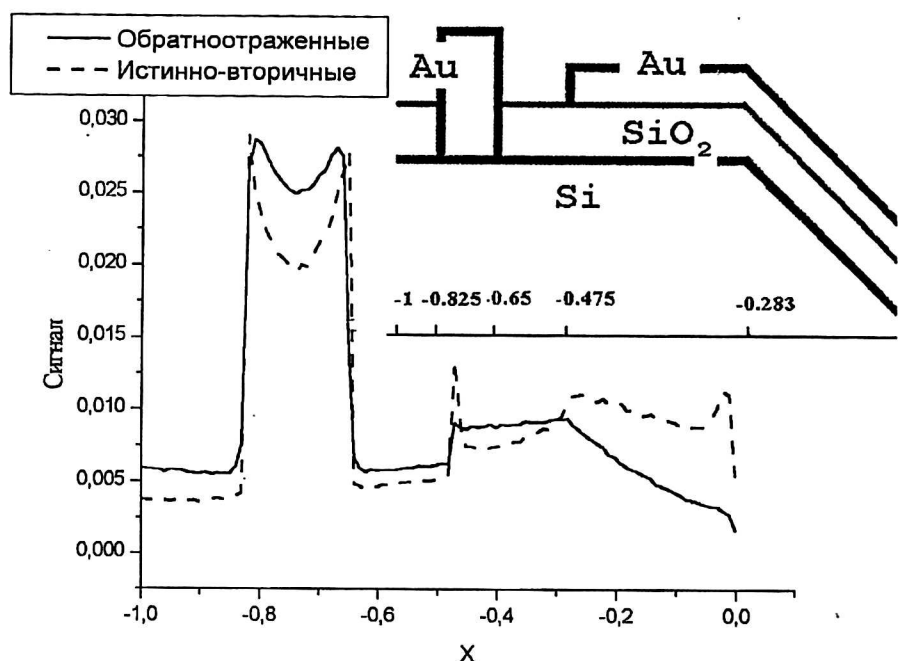
загрязнений на вид спектров обратноотраженных электронов. Обнаружен эффект исчезновения квазиупругого пика при толщине пленки углерода на мишени  $> 5-10$  нм.

Продемонстрирована возможность моделирования сигнала РЭМ от сложных пространственных структур.

К недостаткам этого метода можно отнести большое время расчетов, связанное с использованием подробных сечений для каждого из каналов взаимодействия. Для ускорения расчетов в некоторых случаях можно использовать приближенные аналитические выражения ценой некоторой потери точности и/или подробности моделирования.

В качестве одного из методов ускорения расчетов в случае моделирования вторичного электронного спектра приведен метод обрезания тра-

Рис. 6. Пример моделирования изображения 3-мерной структуры. Сигнал нормирован на единицу



## Выводы

Предложен и алгоритмически реализован новый вариант метода дискретных потерь, в котором каналы взаимодействия нерелятивистских электронов с веществом рассматриваются по отдельности.

Показано, что традиционно используемая модель непрерывных потерь (теория Бете-Блоха) дает качественно неверные спектры потерь энергии прошедших электронов. Реализованная модель позволила адекватно описывать электронные спектры, упругоотраженных, обратноотраженных и прошедших (через тонкий слой вещества) электронов. Предложенная модель дискретных потерь позволила дать теоретическое объяснение и количественно рассчитывать «квазиупругий» пик вторичных электронов.

Модель впервые позволила количественно исследовать влияние сверхтонких пленок «легких»

экторий ниже глубины выхода. Приведен метод оценки глубины выхода. Рассчитанные с его помощью значения сравнены с полуаналитическими оценками.

## Литература

1. Rau E. I., Robinson V. N. E.//Scanning. 1996. V. 18. P. 556—561.
2. Борисов С. С., Грачев Е. А.//Тезисы XII Российского симпозиума по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел. — Черноголовка, июнь 2001. С. 121.
3. Seah M. P., Dench W. A.//Surface and Interface Analysis. 1979. № 1. С. 2—11.
4. Marrian C. R. K., Perkins F. K., Park D., Dobisz E. A., Peckerar M. C., Rhee K.-W., Bass R.// J. Vac. Sci. Technol. 1996. B 14(6), Nov./Dec. P. 3864.
5. Joy D. C. Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis. Oxford University Press, 1995.

6. Зайцев С. И. Расширенный автореферат докторской диссертации, 2000. Черногловка.

7. Lindhard J.//Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 28, 1954. № 8. 1.

8. Афонин В. П., Лебедь В. И. Метод Монте-Карло в рентгеноспектральном микроанализе. — Новосибирск: Наука, 1989.

9. Бронштейн И. М., Фрайман Б. С. Вторичная электронная эмиссия. — М.: Наука, 1969.

10. Murata K., Kyser D. F., Ting C. H.//J. Appl. Phys. July 1981. 52(7). P. 4396.

11. Grysinsky M.//Phys Rev., 1965. V. 138. P. A336—A358.

## Electron beam with homogeneous solids interaction simulation using Monte-Carlo method in discrete looses approximation

*S. S. Borisov, E. A. Grachev*

Physical Department, Moscow State University of M. V. Lomonosov, Moscow, Russia

*S. I. Zaitsev*

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

*Problems of backscattered and true-secondary spectra as far as shoot spectra simulation using discrete looses approximation are regarded in this article. Developed model allows acquiring the electron energy spectra from samples with complicated 3-d structure. Besides due to higher accuracy of the discrete looses method one can evaluate the spatial energy and accumulated charge distribution more accurately. Simulation results are compared with the experimental ones, SEM image simulation examples are given.*

\* \* \*