

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА С ВЕЩЕСТВОМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В.В. Подлипов<sup>1,2</sup>, А.С. Шабека<sup>2</sup>, А.В. Куприянов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия,

<sup>2</sup> Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия

В работе предложено физико-математическое моделирование процесса взаимодействия электронного пучка с веществом на основе метода Монте-Карло. Получены результаты статистического анализа, согласующиеся с известными ранее работами.

**Ключевые слова:** компьютерная оптика, моделирование методом Монте-Карло, электронно-лучевая литография.

## Введение

Взаимодействие электронов с веществом играет важную роль во многих областях науки и техники, особенно таких как электронно-лучевые технологии обработки материалов, просвечивающая (ПЭМ) и сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), энергодисперсионная спектроскопия, электронная литография. Ускоренные электроны, попадая в материал, взаимодействуют с атомами и молекулами, что приводит к возникновению вторичных электронов, обратноотраженных электронов, характеристического и тормозного рентгеновского излучения, оже-электронов и другие [1], оказывая значительное влияние на свойства самого материала, или преобразуя его физико-химическую структуру высокоэнергетическим воздействием [2]. Отмеченные эффекты происходят в процессе электроннолучевой литографии. Однако, они же являются и ограничивающим фактором для создания микроструктур с суб-100-нанометровым пространственным разрешением. В процессе электронно-лучевой литографии проявляется, так называемый, эффект близости, который приводит к переэкспонированию локальных областей резиста, который, необходимо учитывать и проводить коррекцию с учетом этих особенностей взаимодействия электронного луча с материалом. Данная задача часто решается исключительно экспериментальным путем, проводя многочисленные эксперименты и вводя затем предсказания геометрии и дозовых распределений, достигая наилучшего соответствия требуемой микроструктуры и получаемой. В случае изменения типа материала подложки, толщины и/или типа металла отводящего поверхностные заряды, наведенные электронным лучом, а также параметров толщины резистивного слоя, что часто бывает в технологических процессах создания микрооптических элементов дифракционной оптики и нанофотоники [3], отмеченная задача требует значительных трудозатрат, для создания необходимого микрорельефа.

Дополнительные знания о взаимодействии электронного пучка с материалом в локальной области можно получить с использованием трассировки электронов методом Монте-Карло [4]. Известные реализации данного метода [5-7] позволяют лишь получать пространственное распределение траекторий электронов, на основе которых строятся

статистические распределения температурных полей, доз экспонирования или зарядов в материале [6], используя значительные упрощения реальных физических процессов, не учитывая кристаллические особенности микроструктуры материалов и особенности прохождения электронов сквозь многослойные структуры.

В связи с чем, в данной работе ставятся задачи создания уточненной модели взаимодействия электронного пучка с веществом на основе метода Монте-Карло и компьютерной программы реализующей данную модель, которая позволит, в частности, моделировать технологические процессы формирования оптических микроструктур методом электронной литографии на поверхности подложек для задач Компьютерной оптики.

### **Расчет траекторий движения электронов**

Для проведения моделирования методом Монте-Карло, исходным является число электронов, угол падения относительно нормали к поверхности материала, их энергия, а также, параметры вещества, с которым взаимодействуют электроны (атомный номер, плотность, атомный вес, толщина слоя). Подробно о данном методе написано в работах [5-7].

Электроны, называемые первичными, ввиду малости своего размера по сравнению с размерами атомов вещества, способны двигаться в межатомном пространстве, постепенно теряя при этом свою энергию. При движении электрона происходит его взаимодействие, сопровождающееся обменом энергий электрона с атомами вещества, изменением направления движения первичного электрона, генерацией вторичных электронов, возбуждением фононов, химическими процессами.

В процессе взаимодействия электронов с веществом электроны испытывают упругие и неупругие взаимодействия, что приводит к потере энергии. В ходе столкновения электроны случайным образом меняют направление своего движения, образуя ломаную линию, которая суммарно образует моделируемую траекторию движения электрона. Вероятность отклонения траектории электрона по углу распределена не равномерно.

На основе эмпирических экспериментальных данных [6] принимается, что вероятность отклонения электрона на угол  $\varphi$  в диапазоне  $(0^\circ, 10^\circ)$  принимается равной 0,6, а в диапазоне  $(10^\circ, 180^\circ)$  принимается равной 0,4. В свою очередь вероятность отклонения электрона по углу внутри одного из интервалов интервала распределена равномерно. Таким образом, используя указанные выше распределения вероятностей, а также компьютерный генератор случайных величин, определяется угол отклонения траектории электрона  $\varphi$ .

Для нахождения расстояния между взаимодействиями электрона с веществом необходимо рассчитать среднюю длину пробега

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma} \quad (1)$$

где  $A$ - атомный вес, г/моль;  $\rho$ - плотность, г/см<sup>3</sup>;

$N_A$ - число Авогадро, моль<sup>-1</sup>.

Величина сечения рассеяния  $\sigma$  на угол  $\varphi$ , входящая в (1), определяется исходя из величин  $Z$  – порядкового номера вещества в таблице Менделеева и  $E$ - энергии, кэВ по модели Резерфорда:

$$\sigma = 1,62 \cdot 10^{-20} \frac{Z^2}{E^2} \text{ctg}(\varphi/2), \quad (2)$$

Можно получить расстояние между столкновениями в каждом конкретном случае используя формулу

$$ds_i = -\lambda \cdot \ln(\gamma) \quad (3)$$

где  $\gamma$  случайная величина в диапазоне (0, 1), имеющая нормальное распределение вероятности. После каждого взаимодействия происходит расчет нового сечения упруго взаимодействия, и остаточной энергии электрона по формуле

$$E_i = E_{i-1} - dE \quad (4)$$

где  $dE$  - изменение энергии электрона в ходе одного взаимодействия, которая определяется исходя из модели непрерывного замедления по формуле Бете

$$\frac{dE}{ds} = -7,85 \cdot 10^4 \frac{Z\rho}{AE} \ln\left(\frac{1,166E}{J}\right) \quad (5)$$

где  $J$  - средний потенциал ионизации за который примем среднюю потерю энергии на взаимодействие при учете всех возможных процессов потери энергии, эВ:

$$J = 9,76 \cdot Z + 58,5 \cdot Z^{-0,19} \quad (6)$$

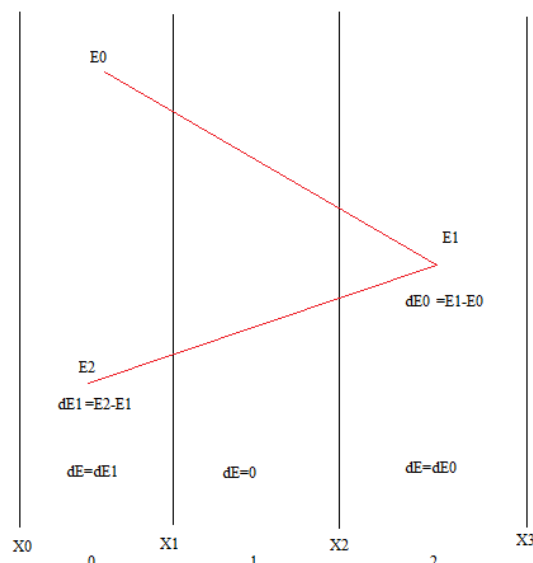


Рис. 1. Пример хода луча и расчет энергии

Таким образом, используя формулы (1)-(6), а также соответствующие формулы пересчета координат электрона, необходимые проверки нахождения электрона в конкретном типе материала или его выхода за пределы облучаемой структуры, в работе был реализован Метод Монте-Карло, на основе которого проводился расчет траекторий движения электронов в материале. Для визуализации траекторий движения, использовались построения, приведенные на рис. 1. Для простоты расчета дозы облучения, в модели принималось, что потери энергии электронов происходят в точках взаимодействия электрона с атомом вещества.

На рис. 2 показано окно программы реализующей данный метод, где показаны результаты расчета траекторий при взаимодействии электронного пучка с электронным резистом для 1000 электронов, нормально падающих на поверхность.

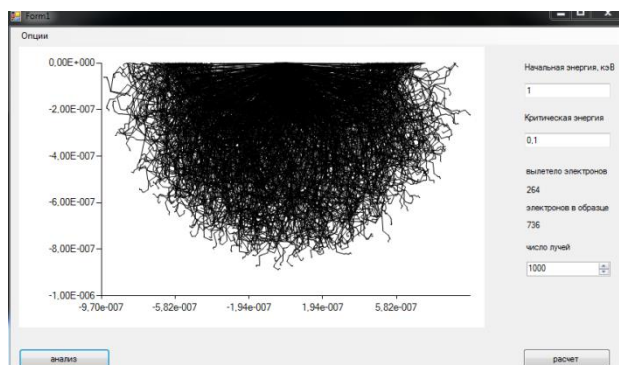


Рис. 2. Результаты вычислений программы моделирующей взаимодействие электронного пучка с материалом

Используя данные моделирования, хранящиеся в памяти компьютера, можно провести их статистический анализ. На рис. 3, а представлены результаты анализа спектральных характеристик распределения электронов вдоль оси X. Оценивание распределения электронов по глубине, результат которого показан на рис. 3 б).

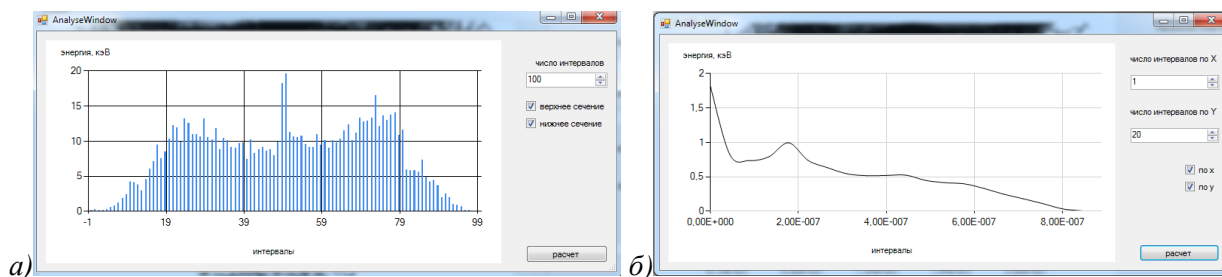


Рис. 3. Пример расчета плотности распределения потерь энергии электронами по глубине материала

Максимум выделения энергии в материале происходит в центре пятна взаимодействия потока электронов, затем первичные электроны постепенно теряют энергию, рассеивая ее в материале, и меняя направления. Поскольку малоугловое рассеяние в диапазоне  $(0^\circ, 10^\circ)$  имеет большую вероятность, чем рассеяние электронов на большие углы  $(10^\circ, 180^\circ)$ , то в материале образуется узкий конус рассеяния энергии в центре. Затем электроны распространяются внутри материала и теряют энергию, до тех пор, пока полностью ее не растратят, некоторые из которых достигают максимальной глубины единиц микрон. Одновременно с этим, часть электронов меняя направления движения, способны изменить направление на прямо противоположное от первоначального, образуя, таким

образом, обратный поток электронов к поверхности, часть из которых имеют достаточную энергию, чтобы покинуть материал. Накладываясь на прямой, обратный поток электронов из материала формируют вторичную область максимума выделения энергии (рис. 3 а, б), которая в случае электронной литографии приводит к возникновению эффекта близости. На практике, в процессе литографии стараются, чтобы полученный максимум выделения энергии находился не в слое резиста, а в подложке, где воздействие электронов не способно значительно ухудшить разрешение литографии, снизив, таким образом, проявление эффекта близости.

## Заключение

В данной работе авторами предложена модель расчета взаимодействия потока электронов с веществом, реализованная в виде программного продукта, позволяющая визуализировать расчетные траектории движения электронов, а также проводить статистический анализ результатов расчета. Как видно, приведенные статистические распределения достаточно точно описывают процессы выделения энергии в веществе в результате его взаимодействия с потоком электронов и хорошо согласуются с известными работами [5-8].

## Благодарности

Работа выполнена при поддержке грантов Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-5205.2016.9 и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-07-00494 А).

## Литература

1. Дж Гоулдстейн. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. / Гоулдстейн Дж., Джой Д., Лифшин Э., Ньюбери Д., Фиори Ч., Эчлин П. – М.: Мир, 1984. – Т. 1, 303 с.
2. Аракчеева А. М. Технология получения полупроводниковых микрорезонаторов и фотонных кристаллов. / Аракчеева, А. М., Нащекин, А. В., Соловьев, В. А., Танклевская, Е. М., Максимов, М. В., Конников, С. Г., Леденцов, Н. Н. // Журнал технической физики. – 2005. – Т. 75. – №. 2. – С. 78-81.
3. Нестеренко Д. В. Создание криволинейных дифракционных решеток для ультрафиолетового диапазона. / Нестеренко, Д. В., Полетаев, С. Д., Моисеев, О. Ю., ЯКУНЕНКОВА, Д., ВОЛКОВ, А., & СКИДАНОВ, Р. // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2011. – Т. 13. – №. 4-1.
4. Son M. S. Monte Carlo electron beam lithography simulation of sub-0.1- $\mu\text{m}$  T-gate process for millimeter-wave HEMTs considering 50-kV and 100-kV electron beam exposure systems. / Son, M. S., Rhee, J. K., Lee, J. H., & Hwang, H. J. // Journal of the Korean Physical Society. – 2004. – Vol. 45 (2). – P. 540-549.
5. URBÁNEK M. Monte carlo simulation of proximity effect in e-beam lithography / URBÁNEK, M., KOLAŘÍK, V., KRÁTKÝ, S., MATĚJKA, M., HORÁČEK, M., & CHLUMSKÁ, J. // Proceedings of the 5th International conference NANOCON 2013. – P. 723-726.
6. Жуковский М. Е., Скачков М. В. О статистических методах моделирования переноса электронов в веществе // Вестник Московского государственного технического университета им. НЭ Баумана. Серия «Естественные науки». – 2009. – №. 1. – С. 31-46.
7. Mohammad M. A. Fundamentals of electron beam exposure and development. / Mohammad, M. A., Muhammad, M., Dew, S. K., Stepanova, M // in book Nanofabrication Techniques and Principles edited by Maria Stepanova, Steven Dew // Springer-Verlag/Wien, 2012. – P. 11-41.
8. Zhou J. Monte Carlo simulation of process parameters in electron beam lithography for thick resist patterning / Zhou J., Yang X. M. // Journal of Vacuum Science & Technology B. – 2006. – Vol. 24(3). – P. 1202-1209.