

1. Рау Э.И. Моделирование взаимодействия электронного пучка с веществом методом Монте–Карло¹

Введение

В основе многих физических методов анализа свойств твердого тела, а также некоторых технологических процессов, лежит бомбардировка исследуемого объекта сфокусированным пучком электронов средних энергий. При взаимодействии первичных электронов с мишенью происходит ряд явлений, регистрация которых позволяет получать информацию о локальных свойствах зондируемого объекта. Количественное описание взаимодействия электронов с твердым телом возможно при решении транспортного (кинетического) уравнения Больцмана движения электронов в веществе. Но более оперативным и наглядным способом изучения области и характера данного взаимодействия является моделирование электронных траекторий методом Монте–Карло. Его преимущество перед другими методами определяется возможностью рассмотрения переноса частиц в сколь угодно сложных по геометрическим параметрам и по структуре средах без необходимости использования существенных упрощений в вычислительном алгоритме. Такие объекты типичны для микроэлектроники, поэтому методы Монте–Карло успешно применяются в этой области. Обусловлено это тем, что технология производства микросхем и соответствующие электронно–зондовые методы диагностики (электронная литография, рентгеноспектральный микроанализ, растровая электронная микроскопия) требуют детального анализа физических процессов взаимодействия электронных пучков с кристаллами, а также многослойными гетерогенными структурами.

Так как задачи взаимодействия элементарных частиц с веществом: рассеяния, отражения и прохождения частиц в твердом теле имеют вероятностную природу, т.е. описывают явления статистического характера, то к ним методы Монте–Карло стали применяться все более интенсивно.

Целью настоящей задачи является ознакомление с некоторыми аспектами физики взаимодействия электронов средних энергий (5 – 50 кэВ) с твердотельными средами. Процессы такого взаимодействия изучаются методом Монте–Карло, занимающему среди вычислительных методов со-

¹ © Э.И. Рау, 2012

© Физический факультет МГУ, 2012

временной физики значительное место. В задаче рассматривается имитационное моделирование на персональном компьютере траекторий электронов в различных мишенях, т.е. ставится вычислительный эксперимент, призванный в наглядной форме ознакомить с основами процесса взаимодействия быстрых электронов с однородными по составу объектами и со сложными композиционными структурами, т.е. отличающимися по химическому составу, плотности и глубинному строению.

Электронные траектории в объеме возбуждения рассчитываются и отображаются на экране дисплея персонального компьютера в зависимости от задаваемых условий эксперимента (кинетическая энергия первичных электронов, угол падения электронов относительно нормали к образцу, количество электронов) и от параметров объекта (атомный номер, плотность и атомный вес вещества мишени, массивный объект или тонкая пленка, слоистые структуры на подложке с варьируемыми характеристиками). Одновременно определяется глубина проникновения электронов в различные материалы, определяется доля отраженных электронов в зависимости от атомного номера материала мишени и угла бомбардировки, а также энергетический спектр отраженных электронов.

1. Краткие сведения о физических явлениях при взаимодействии электронов средних энергий (5 – 50 кэВ) с твердым телом

1.1 Проникновение электронов в вещество

Сталкиваясь с атомами твердотельной среды, первичные налетающие электроны постепенно теряют свою энергию и многократно меняют направление движения [1,2,3]. Траектории рассеиваемых электронов можно представить в виде ломаных линий, общий характер которых определяется упругими и неупругими взаимодействиями этих электронов с атомами вещества.

Если имеет место упругое рассеяние, то изменяется направление вектора скорости электрона, а ее величина остается постоянной, т.е. кинетическая энергия электрона не меняется. При упругом столкновении электрон отклоняется от направления падения на угол θ , который может принимать значения в пределах от 0 вплоть до 180° , но его типичное значение составляет по порядку величины 5° . Упругое рассеяние происходит в результате столкновения электронов высокой энергии с ядрами атомов, частично экранированных связанными электронами, т.е. в результате взаимодействия первичных электронов с полем ядра.

Дифференциальное сечение упругого рассеяния $d\sigma$ электрона с кинетической энергией E в телесный угол $d\Omega$ на атоме с зарядом eZ (Z – атомный номер) связано с углом отклонения (рассеяния) формулой Резерфорда:

$$d\sigma = \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \cdot \frac{d\Omega}{\sin^4(\Theta/2)} \quad (1)$$

Из (1) вытекают следующие закономерности упругого рассеяния: вероятность рассеяния убывает обратно пропорционально квадрату энергии налетающего электрона и быстро растет с увеличением атомного номера и уменьшением угла рассеяния. Так как средняя длина свободного пробега λ , или среднее расстояние, которое проходит электрон между двумя последовательными взаимодействиями, и сечение рассеяния, обратно пропорциональны друг другу, то λ возрастает при уменьшении Z и возрастании E . Вероятность упругого рассеяния больше в материалах с большим атомным номером и при низких энергиях электронов.

При неупругом рассеянии, представляющим собой взаимодействие между падающими электронами и электронной оболочкой атома, энергия бомбардирующего электрона передается атомам и электронам мишени, т.е. кинетическая энергия электрона пучка уменьшается от столкновения к столкновению. Эти потери энергии обусловлены возбуждением плазмонов и фононов электронами пучка, а также долей энергии, затрачиваемой на ионизацию внутренних оболочек атома, на тормозное рентгеновское излучение и на возбуждение электронов проводимости.

Неупругое рассеяние происходит путем множественных дискретных процессов, но во многих случаях полезно рассматривать все неупругие процессы, создающие непрерывные потери энергии, сгруппированными вместе. Соотношение для непрерывной потери энергии, учитывающее все потери dE на единицу длины ds в твердом теле дается уравнением Бете [1–3]:

$$\frac{dE}{ds} [\text{кэВ/см}] = -7,85 \cdot 10^4 \frac{Z\rho}{AE_m} \ln\left(\frac{1,166E_m}{J}\right) \quad (2)$$

где Z – атомный номер, A – атомный вес [г/моль], ρ – плотность материала мишени [г/см^3], E_m – средняя энергия электрона на пути ds [кэВ], J – средний потенциал ионизации [кэВ]. Средний потенциал ионизации, за который примем среднюю потерю энергии на взаимодействие при учете всех возможных процессов потери энергии, равен:

$$J = (9,76Z + 58,5Z^{-0,19}) \cdot 10^{-3} \text{ [кэВ]} \quad (3)$$

Из уравнения Бете (2) можно найти полный траекторный путь, проходимый частицей до полной потери энергии (пробег по Бете R_B):

$$R_B = \int_{E=E_0}^{E=0} \left(\frac{dE}{ds} \right)^{-1} dE \quad (4)$$

Эта величина приблизительно в 1,5 раза больше глубины проникновения электронов в мишень R_0 . Наиболее точно экспериментальным результатам определения максимальной глубины проникновения электронов соответствует выражение Канайя–Окаяма [2]:

$$R_0 \text{ [ммкМ]} = \frac{0,0276AE_0^{1,67}}{\rho Z^{0,889}} \quad (5)$$

где E_0 – энергия первичных электронов [кэВ]. На рис.1 приведены рассчитанные по (5) величины глубины проникновения электронов различных энергий для некоторых материалов.

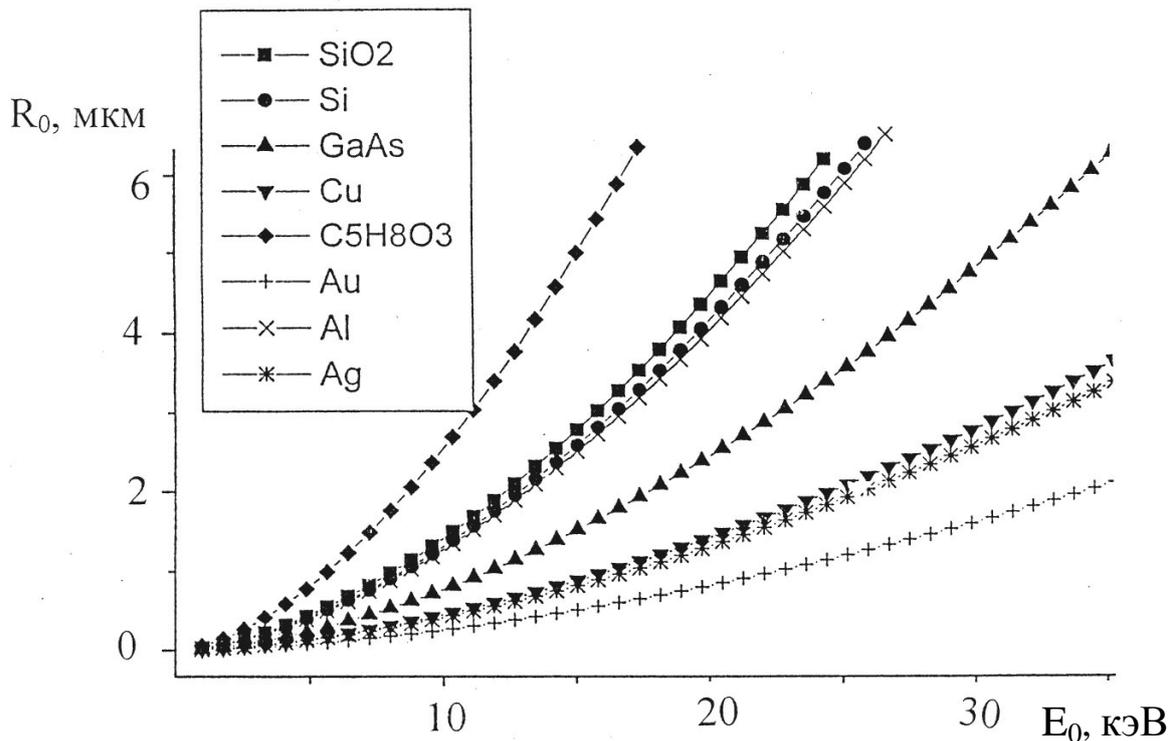


Рис.1. Глубина проникновения электронов в различные материалы в зависимости от их энергии (расчет по формуле (5))

В процессе прохождения пучка электронов через вещество помимо уменьшения его энергии происходит уменьшение интенсивности пучка N по глубине d (поглощение электронов в слое d) [5]:

$$\frac{N}{N_0} = \exp\left(\frac{-4d}{R_0}\right) \quad (6)$$

где N_0 – число электронов, входящих в образец. Закономерность (6) необходимо учитывать при анализе взаимодействия электронов со сложным по составу объектом, типа “тонкая пленка на массивной подложке”.

1.2 Отражение электронов.

Отраженные электроны возникают при актах однократного упругого рассеяния под большими углами и актах многократного малоуглового упругого рассеяния, т.е. процесс отражения происходит за счет последовательности актов упругого рассеяния, в которых изменение направления движения достаточно для выхода электрона из образца [1 – 4].

У элементов с низкими атомными номерами средняя длина свободного пробега электрона (с энергией в диапазоне 5 – 50 кэВ) между последовательными соударениями довольно велика, и многократное рассеяние происходит на довольно большой глубине в мишени. Для элементов с большими атомными номерами средняя длина свободного пробега между актами рассеяния мала и однократное или многократное рассеяние происходит вблизи поверхности. Поскольку с увеличением атомного номера Z растет число упругих рассеяний, доля электронов, которые отражаются, также увеличивается. Коэффициент отражения электронов η определяется как число отраженных электронов n_0 , поделенное на число падающих на мишень электронов пучка n_3 или через соответствующие электронные токи (I_3 – ток зонда, I_0 – ток отраженных электронов):

$$\eta = \frac{n_0}{n_3} = \frac{I_0}{I_3} \quad (7)$$

На рис. 2а приведены зависимости коэффициента отражения электронов от атомного номера Z материала мишени при различных углах наклона образца, т.е. различных углах Φ падения первичных электронов, отсчитываемых от нормали к поверхности. На рис. 2б даны экспериментальные зависимости коэффициента отражения η от угла наклона Φ для ряда материалов с различными атомными номерами. С ростом угла Φ коэффициент η монотонно возрастает. Эта закономерность объясняется тем, что с ростом Φ уменьшается размер области взаимодействия, т. к. тенденция электронов к рассеянию в направлении движения заставляет их распространяться ближе к поверхности и вероятность процесса отражения увеличивается.

Коэффициент отражения η при нормальном падении ($\Phi = 0$) описывается следующим приближенным выражением [3, 4]:

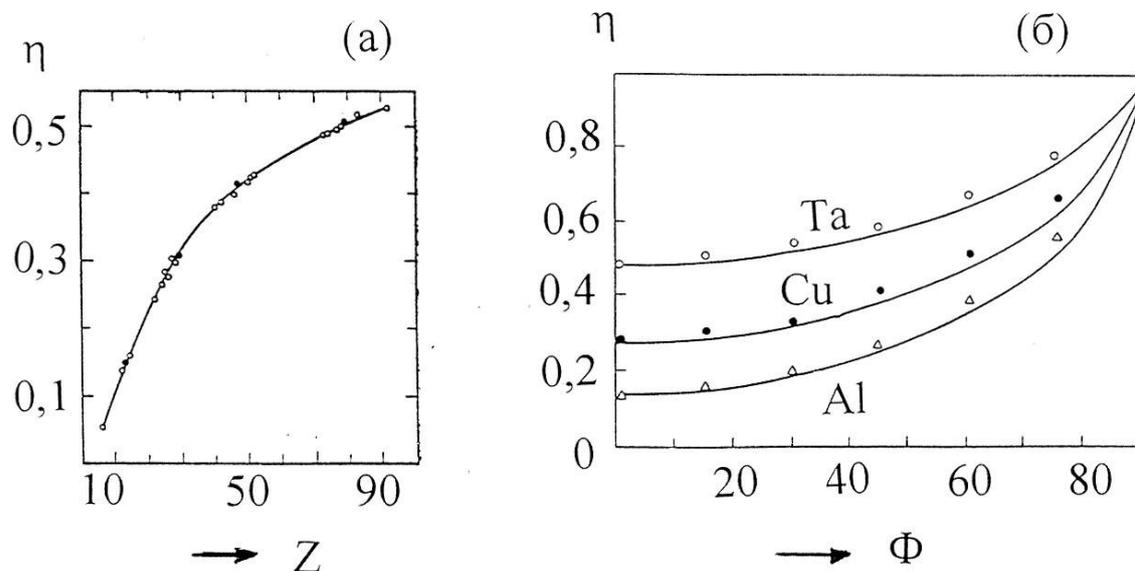


Рис.2. Зависимости коэффициента отражения электронов η от атомного номера Z материала мишени (а) и от угла наклона образца Φ (б) при энергии электронов 25,2 кэВ

$$\eta = -0,0254 + 0,016Z - 1,86 \cdot 10^{-4} Z^2 + 8,3 \cdot 10^{-7} Z^3 \quad (8)$$

а при наклонном падении электронов:

$$\eta = (1 + \cos \Phi)^{-9/\sqrt{Z}} \quad (9)$$

Угловое распределение отраженных электронов сильно зависит от угла наклона образца Φ . При нормальном падении пучка электронов угловое распределение отраженных электронов близко к косинусоидальному (закон Ламберта):

$$\eta(\Theta) = \eta_0 \cos \Theta \quad (10)$$

где Θ – угол между нормалью к поверхности и направлением измерения, η_0 – величина η , измеряемая вдоль нормали к поверхности. Такая зависимость связана с тем, что путь до поверхности, который обратнорассеянный электрон должен пройти с некоторой глубины отражения R , равен $R \cos \Theta$. Так как поглощение электронов пропорционально длине пути и электрон на пути теряет энергию, то уменьшается вероятность его вылета из объекта, т.е. доля электронов, покидающих образец, обратно пропорциональна пути до поверхности $R \cos \Theta$. При нормальном падении пучка электронов угловое распределение отраженных электронов обладает вращательной

симметрией относительно нормали к поверхности (на рис.3 угол падения Φ обозначается индексом α). Из рис.3а видно также, что максимальное число отраженных электронов движется в направлении, обратном направлению движения первичного электронного пучка, причем их число уменьшается до нуля по мере того, как Θ возрастает до 90° .

По мере возрастания угла наклона Φ угловое распределение становится асимметричным относительно оси наклона, диаграмма пространственного распределения сильно вытягивается в направлении прямого рассеяния (рис. 3б). В этом случае наибольшая часть отраженных электронов движется над поверхностью, примерно под тем же самым углом, что и падающий пучок.

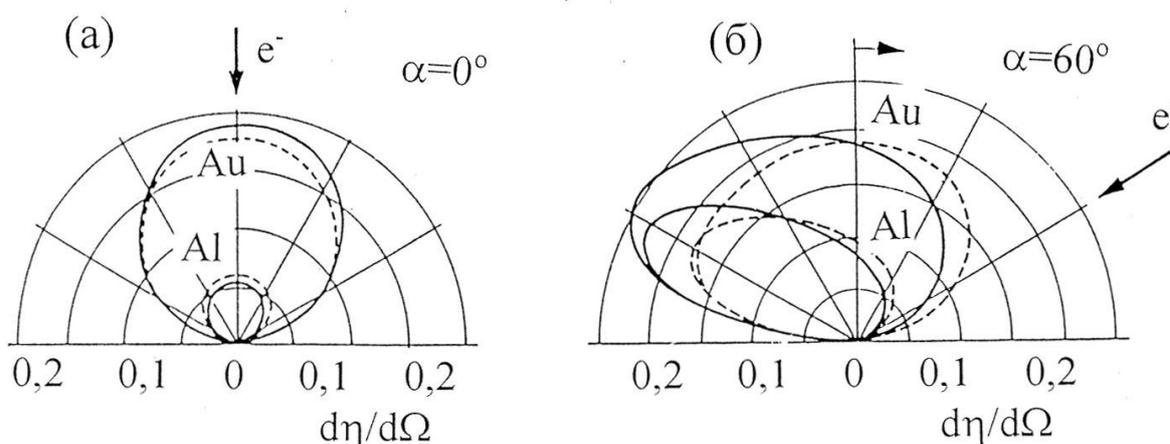


Рис.3. Полярные диаграммы углового распределения электронов для мишени из золота и алюминия при двух энергиях электронов: (а) – при нормальном падении, (б) – при падении электронов под углом 60°

Так как размер области взаимодействия и глубина проникновения сильно зависят от энергии электронного пучка, то можно предположить, что η также значительно изменяется при изменении энергии электронов. Однако это не совсем верно, что показывают эксперименты и анализ уравнений (1) и (2). Хотя увеличение средней длины свободного пробега для упругого рассеяния при высоких энергиях электронного пучка приводит к более глубокому проникновению в образец, скорость потерь энергии уменьшается. Способность электрона продолжать движение в твердом теле и, таким образом, иметь возможность достичь поверхности и вылететь из образца связана с его энергией. Эффекты проникновения почти полно-

стью компенсируются эффектами потерь энергии, поэтому коэффициент отражения η почти не зависит от энергии E_0 .

Для структуры “пленка на массивной подложке” коэффициент отражения рассчитывается по более сложной формуле [3]:

$$\eta = \eta_m + \eta_n(D) \left[1 - \frac{\eta_m}{\eta_{n\infty}} \right] \quad (11)$$

где η_m – коэффициент отражения электронов от массивной мишени–подложки, $\eta_{n\infty}$ – коэффициент отражения от материала пленки для случая ее бесконечной толщины (т.е. массивного объекта),

$$\eta_n(D) = \frac{a-1}{a+1} \left[1 - \left(1 - \frac{2a}{a-1} \frac{D}{R} \right) \left(1 - \frac{D}{R} \right)^a \right] \quad (12)$$

Последнее соотношение характеризует коэффициент отражения для любой свободной пленки толщиной D (R_0 – глубина пробега электронов в материале пленки, $a = 0,045 Z$).

1.3 Энергетическое распределение отраженных электронов.

Рассмотрим распределение отраженных электронов по энергиям. По мере того, как электроны пучка движутся внутри образца, различные процессы неупругого рассеяния приводят к передаче энергии атомам и электронам твердого тела и уменьшению энергии электронов пучка. Типичные значения потерь энергии, вычисленные на основе соотношения Бете (2), составляют по порядку величины 10 эВ/нм и зависят от энергии электрона. Отраженные электроны выходят с меньшей энергией из-за прохождения некоторого расстояния внутри твердого тела. Так как каждый электрон движется по индивидуальной траектории и испытывает различное число упругих и неупругих соударений, то отраженные электроны имеют больший континуум энергий – в диапазоне от начальной энергии E_0 в десятки кэВ до энергий порядка десятков эВ . Графики распределения по энергиям отраженных электронов в зависимости от нормированной энергии $W = E/E_0$ для некоторых элементов показаны на рис.4. Величина dN/dE , которая отложена по оси координат, представляет собой число отраженных электронов в расчете на падающий электрон и на единицу энергетического интервала. Площадь под кривыми зависимости dN/dE дает полное число отраженных электронов.

Из приведенных на рис.4 спектральных характеристик видно, что

при увеличении атомного номера материала образца возрастает число отраженных электронов и максимум их распределения смещается в направлении высокоэнергетического интервала спектра, ближе к энергии E_0 . Это соответствует тому факту, что рассеяние происходит все ближе к поверхности, где электрон теряет мало энергии. Число электронов, отраженных углеродом мало и спектр имеет максимум приблизительно при $E/E_0=0,5$. Другими словами, для легких элементов энергетическое распределение имеет вид широкой плавной кривой, в то время как для тяжелых элементов наблюдается довольно четко выраженный пик.

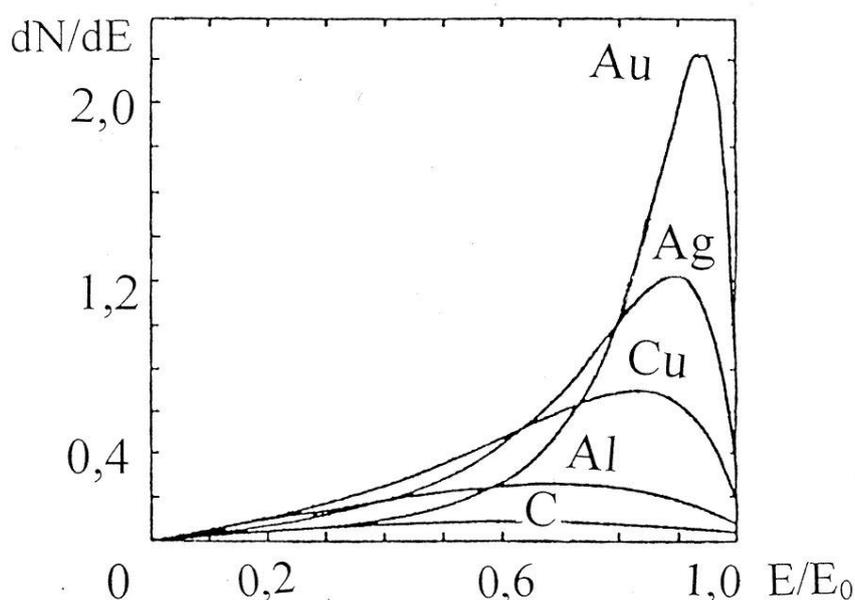


Рис.4. Энергетическое распределение отраженных электронов для различных материалов. Спектры рассчитаны методом Монте-Карло для энергии первичного пучка электронов $E_0 = 20$ кэВ.

Существует достаточно простой метод расчета функции энергетического распределения $d\eta/dE$ отраженных электронов. Возьмем зависимость η от глубины X в следующем виде [6]:

$$\eta(X) = \eta_{\infty} [1 - \exp(-2X/R_x)^p] \quad (13)$$

где X — глубина выхода электронов, R_x — глубина, на которой интенсивность пучка уменьшается в e раз, $\eta = (1/2)^p$, $p = 3,8(Z/A)^{1/2}/\lg Z$.

Длина пути пробега электрона вдоль траектории связана с энергией соотношением:

$$\frac{2X}{gR_x} = 1 - W^{1/r} \quad (14)$$

где $r=2,72Z^{0,4}$; $g=1+0,34Z^{0,4}$; $W=E/E_0$. После подстановки (14) в (13) и дифференцирования по W получим

$$\frac{d\eta}{dW} = \left(\frac{g}{2}\right)^p \left(\frac{p}{r}\right) W^{1/r} (1 - W^{1/r})^{p-1} \exp\left[-(g(1 - W^{1/r}))^p\right] \quad (15)$$

Однако, нужно констатировать, что для отраженных электронов зависимость между энергией и глубиной выхода X несколько отличается от зависимости, принятой для прямого пучка. Поэтому показатель r в формуле (15) обычно выбирают таким образом, чтобы получить наилучшее согласие с модельным экспериментом.

Более точная, в большей степени совпадающая с экспериментальными данными информация об энергетическом распределении отраженных электронов в настоящее время достигается вычислением методом Монте–Карло, в расчетах которого заложена высокая чувствительность значений η и $d\eta/dW$ к выбираемым сечениям упругого и неупругого рассеяния.

2. Вводные положения моделирования траекторий электронов методом Монте–Карло

Методы Монте–Карло (М–К) – это, в сущности, численные методы решения математических задач при помощи моделирования случайных величин, т.е. прослеживания значений одной или нескольких переменных, взятых случайным образом из множества равновероятных значений [5,6,7], Простейший прибор для генерации случайных чисел – рулетка, колесо которой останавливается на случайно выпавшем номере из числа номеров с равной вероятностью их выпадения (отсюда и название метода М–К).

При решении задачи методом М–К сложный вероятностный процесс взаимодействия частицы с веществом рассматривается как последовательность элементарных актов, причем конкретные значения параметров получают из соответствующих распределений с помощью случайных чисел. Алгоритмы метода М–К в изучении столкновений электронов в твердотельной мишени фактически представляют собой повторяющуюся последовательность достаточно простых вычислений.

Общая схема имитационного моделирования прохождения частиц (электронов) через вещество методом М–К включает розыгрыш следующих величин и характеристик:

- точки нахождения частицы (ее координаты);
- направления ее движения;
- ее первоначальной энергии и потерь энергии после каждого столкновения;
- длины свободного пробега;
- типа столкновения;
- углов падения и рассеяния.

Задача ставится при достаточно общих сведениях об объеме:

1) рассеивающие центры среды (электроны и ядра атомов мишени) расположены случайно относительно налетающей на каждом шаге пути частицы, хотя и не обязательно с постоянной плотностью;

2) падающие электроны взаимодействуют одновременно только с одним рассеивающим центром; это означает, что игнорируется когерентное рассеяние сразу на нескольких центрах, когда проявляются волновые свойства частиц;

3) падающие частицы не взаимодействуют между собой, что вполне реально при низких значениях плотности тока.

Моделирование движения электронов в веществе имеет свои существенные особенности. Взаимодействия электронов с атомами сопровождаются в среднем очень малой передачей энергии, сечение рассеяния для электронов велико, а длина свободного пробега мала. Электроны тормозятся, теряя свою энергию до уровня тепловой. Число столкновений, претерпеваемых при этом электронами, столь велико, что прямое моделирование траекторий электронов нерационально (а практически и невозможно !) даже на современных персональных компьютерах.

Для прямого моделирования одной траектории электрона требуется учесть около миллиона соударений, поэтому обычно используются различные приемы, резко снижающие объемы вычислений. Один из таких приемов заключается в разбиении пути электронов на такие отрезки, число соударений, на которых превышает двадцать [6, 7]. В этом случае становится применимой теория многократного рассеяния, что позволяет резко снизить необходимое число розыгрышей. Если длины участков траекторий полагаются равными на всем пути, то к концу пробега получается уширение углового распределения. Более точные результаты дают модели, учитывающие зависимость длины прямых участков траектории от энергии электронов.

При использовании метода Монте–Карло траектория каждого элек-

трона прослеживается от момента входа в мишень до полной остановки или обратного отражения и выхода из образца с учетом всех упругих и неупругих соударений. Пусть электрон с энергией E_0 падает на поверхность образца в некоторой точке P_0 (рис. 5).

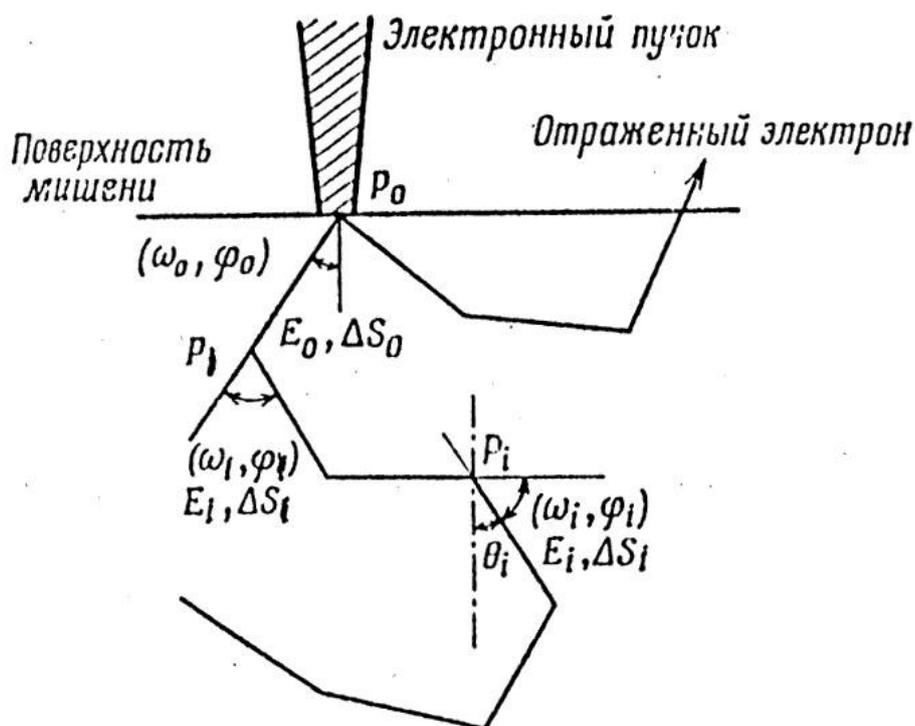


Рис.5. Упрощенная модель траекторий движения электронов в твердом теле.

Методика расчета предполагает, что каждый электрон после рассеяния в точке P_i на углы ω_i , φ_i проходит в образце между случайными событиями рассеяния отрезок пути ΔS_i по прямой линии с энергией E_i . При расчете определяются значения ω_i , φ_i , E_i в каждой последующей точке P_i , расположенной на расстоянии ΔS_i по траектории. Новое значение энергии (тип столкновения) и направление движения электрона после каждого акта рассеяния получают из соответствующих распределений с помощью случайных чисел. Неупругое рассеяние может рассматриваться либо как дискретный процесс, либо, что более часто принято, для расчета величины потерь энергии вдоль траектории используется соотношение Бете (2). Сечение рассеяния берется в виде экранированного сечения Резерфор-

да (1), а длина шага при расчетах обычно берется равной или пропорциональной средней длине свободного пробега электронов. Электронная траектория прослеживается до тех пор, пока энергия электрона вследствие неупругого рассеяния не уменьшится до некоторой пороговой энергии, при которой уже невозможна ионизация атомов (десятки эВ). Пример расчета отдельных траекторий по методу Монте–Карло показан на рис. 6.

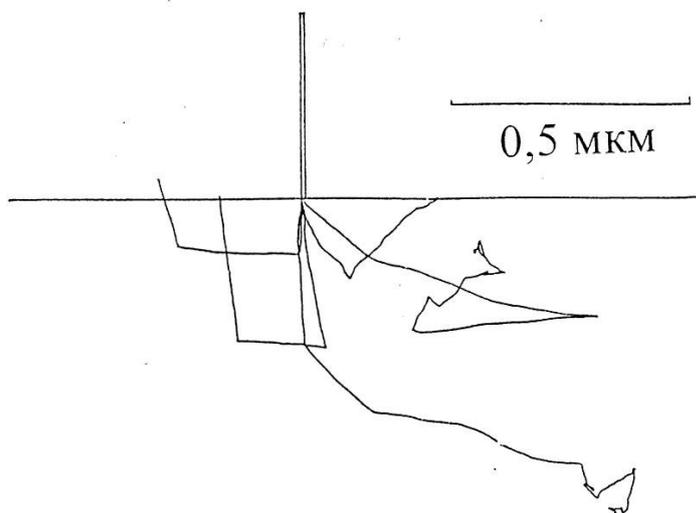
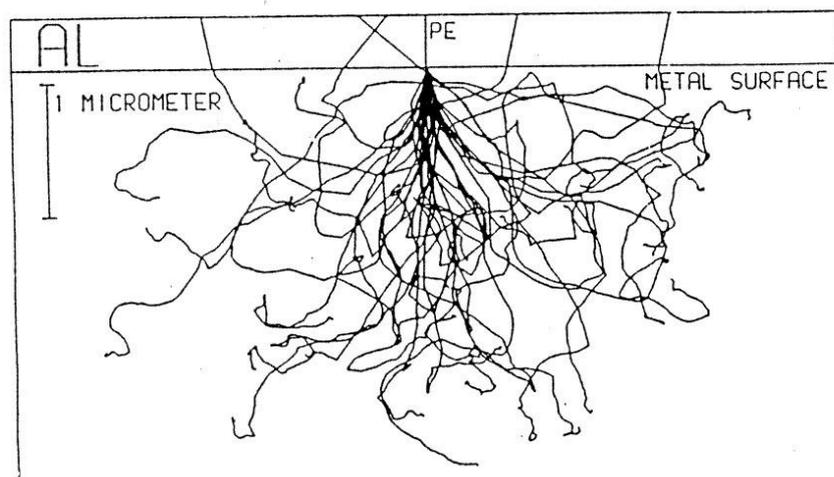


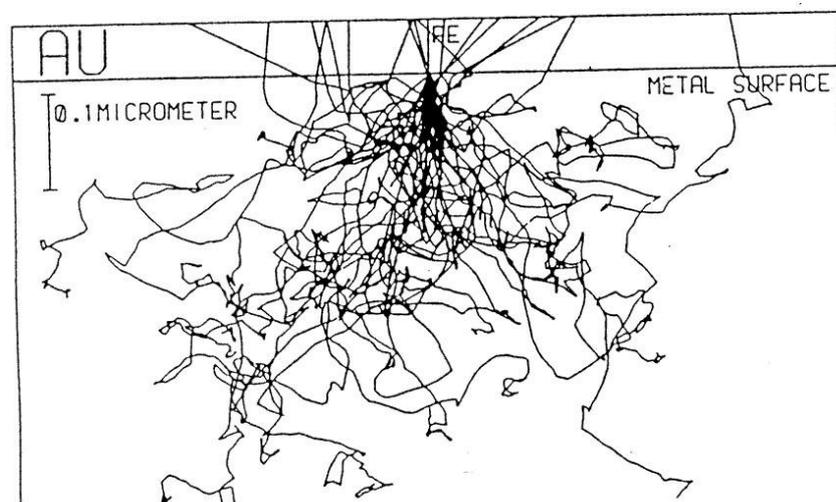
Рис.6. Рассчитанные методом Монте–Карло траектории электронов с энергией $E_0 = 20 \text{ кэВ}$ в железной мишени, показывающие случайные изменения траекторий.

Отдельная траектория, хотя она и может быть точно рассчитана, не дает полной картины взаимодействия электрона с твердым телом, и поэтому для достижения статистической достоверности необходимо рассчитать большое число траекторий (порядка $10^3 - 10^4$). При вычерчивании нескольких десятков траекторий визуализируется форма области взаимодействия электронов пучка с твердым телом (рис. 7). Эта область зависит от параметров пучка и образца: энергии электронов пучка, атомного номера материала объекта, наклона объекта и его структуры. Из рис. 7 видно, что численные значения, характеризующие область взаимодействия, являются приближенными, границы области взаимодействия нечетко определены.

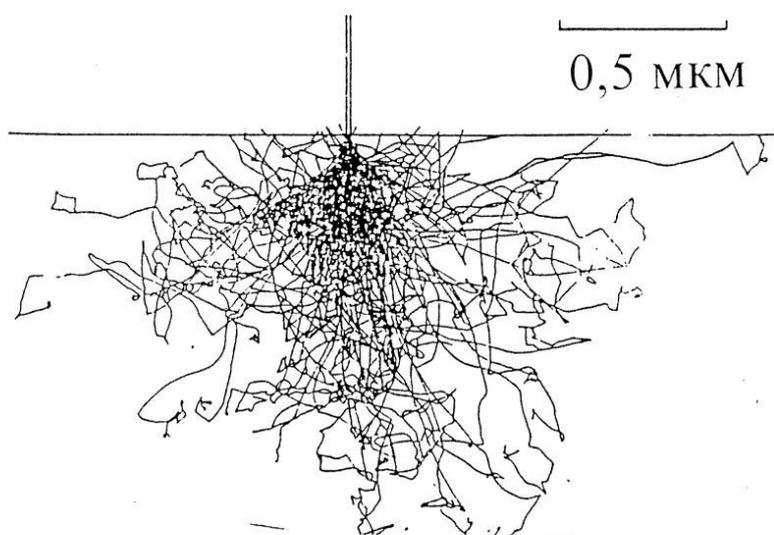
Но при использовании большого количества траекторий (до 10 000) и правильном выборе алгоритма расчетов методом Монте–Карло основные характеристики взаимодействия определяются с точностью до 1 – 5 % .



a



б



в

Рис.7. Рассчитанные методом Монте-Карло траектории электронов с энергией $E_0 = 20 \text{ кэВ}$ в мишенях из алюминия (а – 40 траекторий), золота (б – 40 траекторий), железа (в – 100 траекторий). Нормальное падение

3. Упражнения

В настоящей задаче требуется выполнить три упражнения:

1. Моделирование движения рассеянных электронов в массивной мишени и в свободной тонкой пленке.
2. Моделирование движения рассеянных электронов в системе “пленка – массивная подложка”.
3. Моделирование энергетического распределения обратно–отраженных электронов.

Для их выполнения разработана специальная программа. Физическая модель, положенная в ее основу, использует экранированное сечение упругого рассеяния Резерфорда и уравнение непрерывных потерь Бете. Моделирование осуществляется как процесс парных индивидуальных соударений.

Эта программа позволяет методом Монте–Карло рассчитать коэффициенты отражения и прохождения электронов, а также энергетическое распределение отраженных электронов от массивных объектов в виде чистых элементов и от системы “пленка–подложка”. Пользователь имеет возможность выбрать произвольный материал для пленки и подложки, энергию электронов пучка, толщину пленки и угол падения пучка на образец.

Литература

1. Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980.
2. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ (под редакцией Гоулдстейна Дж. и др.). М.: Мир, 1984, т. 1, гл. 3.
3. Сапарин Г.В. Введение в растровую электронную микроскопию. М.: Изд. МГУ, часть I, 1988; часть 2, 1990.
4. Практическая растровая электронная микроскопия (под редакцией Гоулдстейна Дж. и др.). М.: Мир, 1978, гл. III.
5. Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоиздат, 1991.
6. Афонин В.П., Лебедь В.И. Метод Монте–Карло в рентгеноспектральном микроанализе. Новосибирск, Наука, 1989.
7. Соболев И.М. Численные методы Монте–Карло. М.: Наука, 1973.

Таблица 1. Контрольная таблица к задаче (параметры взяты из [1–4]).

Ма- те- риал ми- ше- ни	Константы вещества			Коэфф. от- ражения, η		Глубина пробега (проникно- вения) R_0 [мкм] при E_0 [кэВ]				
	Атом н. но- мер Z	Атом н. вес A	Плот- ность ρ [г/см ³]	$\alpha =$ 0^0	$\alpha =$ 45^0	5 кэВ	10 кэВ	20 кэВ	30 кэВ	40 кэВ
Al	13	27	2,7	0,154	0,285	0,41	1,32	4,20	8,27	13,37
Si	14	28	2,65	0,22	0,30	0,41	1,31	4,17	8,21	13,27
Ti	22	48	4,50	0,28	0,37	0,27	0,88	2,80	5,51	8,91
Fe	26	56	7,70	0,30	0,40	0,16	0,51	1,64	3,23	5,23
Cu	29	63,5	8,9	0,33	0,44	0,14	0,46	1,48	2,92	4,73
Ag	47	108	10,5	0,45	0,56	0,13	0,43	1,37	2,71	4,38
Au	79	197	19,3	0,56	0,68	0,08	0,27	0,86	1,69	2,74

Упражнение 1. Моделирование движения рассеянных электронов в массивной мишени и в свободной тонкой пленке.

На персональном компьютере выбрать каталог “C:/PRACT/PROGRAMS/MOCASIM”. Упражнению 1 соответствует программа: EXERCISE1.EXE.

Установить последовательно набор параметров эксперимента (один из вариантов – по указанию преподавателя) из таблицы 2:

Таблица 2.

	I вариант	II вариант	III вариант
Энергия первичных электронов E_0	10 кэВ	20 кэВ	30 кэВ
Атомный номер мишени Z	13 и 29	14 и 47	13 и 26

Атомные веса A и плотность ρ материала мишени для выбранного материала с атомным номером Z берутся из прилагаемой контрольной таблицы.

1) Задать последовательно по программе:

а) Энергию пучка первичных электронов E_0 (кэВ) (Input beam energy in keV): 10, 20 или 30.

б) Атомный номер Z элемента материала мишени (Target atomic number): из таблицы.

в) Атомный вес A (Target atomic weight): из таблицы

г) плотность материала мишени ρ [г/см³] (Target density in gm/cc): из таблицы

2) Выбрать по программе сначала массивный объект (Y), а затем свободную пленку (N). (Is this a bulk specimen? (Y/N)).

3) Задать число траекторий – 100. (Number of trajectories required).

В случае массивной мишени по установившейся картине хода траекторий электронов на экране дисплея определить коэффициент отражения электронов η , равный в данном случае числу вышедших из объекта электронов (количество траекторий, прерывающихся на поверхности), деленному на число первичных электронов (например, $N_0=100$). Сравнить с показанием индикатора η на экране (BS coefficient). Оценить по картине и соответствующей масштабной метке среднюю глубину проникновения электронов в твердое тело R_0 .

4) В случае пленочного объекта повторить предыдущие операции задания параметров эксперимента, выбрав толщину пленки в ангстремах (foil thickness A), например, в следующем сочетании:

I вариант: $E_0 = 10$ кэВ (20 кэВ); Z для Al; толщина – 5000 А

II вариант: $E_0 = 20$ кэВ (10 кэВ); Z для Cu; толщина – 5000 А (1000 А)

III вариант: $E_0 = 30$ кэВ; Z для Au; толщина – 2000 А

По картине траекторий подсчитать коэффициент отражения электронов η (сравнить с показанием “BS coefficient”) и коэффициент прохождения электронов. Последнее значение определяется по числу N прерванных траекторий электронов на нижней границе пленки (по соотношению $N/N_0 = N/100$).

Найденные в Упражнении 1 значения параметров η , R_0 , N сравнить с теоретическими параметрами, рассчитанными соответственно по формулам (5–8), и с их табличными значениями.

Установить (в %) различия между определенными методом Монте–Карло и теоретическими значениями.

Упражнение 2. Моделирование движения рассеянных электронов в системе “пленка – массивная подложка”.

1) Выбрать программу EXERCISE2.EXE.

2) Последовательно установить одно из соответствующих значений

параметров моделирования:

а) Энергия первичного пучка электронов: 10 (или 20 кэВ).

б) Толщина пленки d : (boundary depth, microns): 0,5 или 1 или 2

в) Угол падения θ (incident beam angle, degrees): 0° (или 45°)

г) Атомный номер пленки $Z_{\text{пл}}$ (layer atomic number): Al (или Si)

Атомный вес пленки $A_{\text{пл}}$ (layer atomic weight): из таблицы

Плотность материала пленки (г/см^3) (layer density, gm/cc): из таблицы

д) Соответственно задать атомный номер, атомный вес и плотность материала подложки (substrate), например Cu (или Au). Значения взять из таблицы.

Рекомендуемый набор параметров:

$E_0 = 20$ кэВ, пленка – Al, 1,5 мкм, подложка – Cu.

$E_0 = 10$ кэВ, пленка – Si, 0.5 мкм, подложка – Au или Ag.

$\theta = 0^\circ, 45^\circ$ (последовательно взять оба значения).

е) Задать число взаимодействующих электронов пучка – 100 (number of trajectories required).

3) По установившейся картине траекторий на экране дисплея определить число отраженных электронов от сложного объекта.

Полученные результаты сравнить с теоретическими, рассчитанными по формулам (11) и (12). Параметры для расчетов взять из таблицы (в таблице обозначение угла α соответствует углу θ). Оценить (в %) различие между результатами моделирования и расчетными данными.

Упражнение 3. Моделирование энергетического распределения обратно–отраженных электронов.

Для моделирования методом Монте–Карло энергетического распределения обратно–отраженных электронов (ОРЭ) предназначена программа EXERCISE3.EXE

Эта программа позволяет методом Монте–Карло в приближении непрерывных потерь по Бете рассчитать энергетическое распределение ОРЭ от массивных объектов в виде чистых элементов и от системы “пленка–подложка”. Пользователь имеет возможность выбрать произвольный материал для пленки и подложки, энергию электронов пучка, толщину пленки и угол падения пучка на образец.

3.1. Описание пользовательского интерфейса.

После запуска программы exercise3.exe на экране появится окно

изображения процесса рассеяния (в левой части экрана) и диалоговое окно “Input data”, предназначенное для ввода параметров моделирования.

Непосредственно после запуска программа находится в режиме ввода данных, который осуществляется в диалоговом режиме путем ответа на появляющиеся в окне “Input data” запросы. После введения данных в соответствующее поле (синего цвета) с клавиатуры, следует нажать Enter. Символы химических элементов вводят в нижнем регистре (например: золото – au, кремний – si и т.п.).

Последовательность ввода данных.

1) Задание энергии первичных электронов. Непосредственно после запуска, в окне “Input data” имеется надпись “Primary energy” (первичная энергия), справа от которой расположено синее поле ввода. Невидимый курсор установлен в начале этого поля. На этом шаге в поле “Primary energy” следует ввести значение энергии первичных электронов в кэВ (значение набирают на клавиатуре). До того, как нажата клавиша Enter, возможна корректировка этого значения с помощью клавиши Backspace. После нажатия Enter значение вводится в программу и корректировка возможна только путем повторного ввода всех данных. Это относится ко всем этапам ввода. После нажатия Enter программа запрашивает следующий параметр – угол падения.

2) Угол падения первичного пучка на образец. В программе в качестве этого угла выбран угол между внешней нормалью к поверхности образца и направлением первичных электронов. Поэтому, для случая нормального падения пучка (пучок перпендикулярен к плоскости образца) значение этого угла будет 0° . Значение вводится в градусах.

3) Задание числа траекторий. Осуществляется вводом необходимого числа в окно Trajectories. При выборе задаваемого числа траекторий необходимо руководствоваться следующим. Для вычисления спектра ОРЭ требуется набор достаточно большого числа траекторий. Общее число отраженных электронов в среднем равно $N = \eta N_0$, где N – число отраженных электронов, а η – интегральный коэффициент отражения, N_0 – общее число упавших на образец электронов. Для построения спектра весь энергетический диапазон $0 - E_0$ делится на 20 интервалов. Таким образом, в среднем в один интервал попадает $\eta N_0 / 20$ электронов. Полагая η примерно равным 0.3, имеем, что на один интервал приходится $N = 0.05 * 0.3 * N_0 = 1.5 * 10^{-3} * N_0$. Поскольку погрешность метода Монте–Карло порядка $1/\sqrt{N}$, где N – число электронов, накопленных в одном интервале энергий, то для получения

погрешности в 1% необходимо выполнение условия $1/\sqrt{N} = 0.01$, откуда $N=10^4$. С учетом сказанного выше, $N_0 \approx 10^6 - 10^7$. На практике возможно получение качественных результатов, начиная с $N_0 \sim 10^4 - 10^5$. В упражнениях взять число trajectories = 10^4 (для сравнения, предварительно взять $N=1000$).

4) Задание геометрии образца. Осуществляется в строке “domain material”, имеющей два подразделения “1st” и “2nd” (соответственно первый и второй). Если необходимо исследовать пленку, находящуюся на подложке, то в поле 1st вводят химический символ элемента, соответствующего пленке. При нажатии “Enter” справа от окна ввода под надписью “Estimated R, micron” отображается пробег электронов, с энергией, заданной на первом этапе. В окне 2nd вводят химический символ элемента подложки. Аналогичным образом справа от окна ввода отображается пробег электронов в материале подложки. В появившемся затем окне N следует ввести толщину пленки в мкм. Если необходимо моделирование энергетического спектра от однородного массивного образца, то в окна 1st и 2nd следует ввести символ одного и того же химического элемента, соответствующего материалу образца, а в окне N ввести ноль.

Введением значения N заканчивается ввод данных и программа готова к проведению моделирования. В нижней части экрана появляется строка подсказки с описанием управляющих клавиш:

Esc – stop simulation – остановка процесса моделирования, активна в процессе счета.

F1 – Start simulation – старт процесса моделирования.

F3 – повторный запуск программы для введения новых данных после завершения процесса для введенного набора параметров.

F6 – позволяет стереть введенные данные до начала моделирования, но после их введения в программу (используется для коррекции всего набора данных, если замечена ошибка).

1) Запуск программы моделирования. Если данные введены правильно, для запуска моделирования необходимо нажать F1. При этом на левом экране в реальном масштабе времени будет отображаться проекция электронов на плоскость, перпендикулярную поверхности образца. В нижней части экрана появится индикатор выполненного объема моделирования (в процентах). В правом нижнем углу через несколько секунд после начала работы программы появляется индикатор расчетного времени счета.

2) Отображение результатов. После завершения работы программы в левой части экрана появится рассчитанный спектр. По вертикальной оси отложена интенсивность ОРЭ с соответствующей энергией (в относительных единицах), по горизонтальной оси – значение их энергии в долях E_0 (цена деления горизонтальной шкалы – $0.1E_0$).

Задание №1.

Изучение зависимости формы энергетического спектра массивного образца и системы “пленка–подложка” от угла падения электронов.

Необходимо сравнить форму спектра ОРЭ для одного и того же значения энергии при различных углах падения. Выбрать один из легких элементов (по указанию преподавателя): Si, Al (1^{st}) на подложке из Cu или Ag (2^{nd}) и рассчитать спектры ОРЭ для углов 0 (нормальное падение) или 60^0 . Каждый полученный спектр зарисовать и определить положение максимума энергетического распределения. Объяснить полученные зависимости.

Задание №2.

Изучение зависимости формы энергетического спектра от материала образца.

Необходимо сравнить вид спектра ОРЭ для энергии первичных электронов 30 кэВ, падающих по нормали и под углом 60^0 к поверхности массивного Si, Au. Зарисовать полученные зависимости, определить положение максимума энергетического распределения. Дать интерпретацию результатов.

Предварительные вопросы к задаче

1. Общее представление об упругом и неупругом рассеянии первичных электронов в твердотельной среде.
2. Глубина пробега, глубина выхода и коэффициент отражения электронов. Зависимости от атомного номера материала мишени и угла наклона мишени.
3. Характеристики энергетических спектров отраженных электронов.
4. Своеобразие транспорта и отражения электронов от системы «пленка на подложке».
5. Алгоритм расчетов движения электронов в твердом теле методом Монте–Карло.