

УДК 621.382

СЕЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ РАССЕЙЯНИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ЛИТОГРАФИИ

© 2023 г. А. Е. Рогожин¹, Ф. А. Сидоров¹, *

¹Физико-технологический институт имени К.А. Валиева Российской академии наук,
Нахимовский проспект, 36, корп. 1, Москва, 117218 Россия

*E-mail: sidorov@ftian.ru

Поступила в редакцию 14.02.2023 г.

После доработки 27.02.2023 г.

Принята к публикации 27.02.2023 г.

Рассмотрены современные модели, использующиеся для описания процессов упругого, квазиупругого и неупругого рассеяния. Для упругого рассеяния приведены различные формы потенциала электростатического взаимодействия, потенциала обменного взаимодействия и корреляционно-поляризационного потенциала. Для квазиупругих процессов, включающих электрон-фононное и электрон-поляронное рассеяние приведена модель на основе теории диэлектриков и эмпирическая модель. Описание неупругого рассеяния проводится на основе функции потерь энергии, для построения которой используются три различных подхода.

Ключевые слова: электронно-лучевая литография, упругое рассеяние, неупругое рассеяние

DOI: 10.31857/S0544126923700266, **EDN:** PZAFFC

1. ВВЕДЕНИЕ

Электронно-лучевая литография является одним из наиболее распространенных методов микроstructuring, обеспечивающим высокое разрешение получаемого изображения. Однако, при уменьшении критических размеров рельефа до величин порядка 1 мкм проявляются так называемые эффекты близости, ограничивающие разрешение метода [1, 2]. Было установлено, что их причиной является рассеяние электронного луча в резисте и подложке, что приводит к уширению области поглощения энергии относительно заданной области экспонирования и искажению получаемого изображения. Вследствие этого уже несколько десятилетий ведется активное изучение метода электронно-лучевой литографии, направленное на улучшение понимания процессов экспонирования и проявления изображения, а также оптимизацию параметров этих процессов. Одной из важных задач, требовавших решения, являлось определение скорости растворения различных участков проэкспонированного резиста. Было установлено, что при дозах экспонирования, характерных для электронно-лучевой литографии, скорость растворения резиста может быть рассчитана на основе распределения выделившейся в нем энергии [3–6]. Для определения последнего использовались различные подходы к описанию взаимодействия электронного луча с резистом и подложкой, что нашло отражение в различных алгоритмах моделирования процесса, как на основе кинети-

ческой теории транспорта [4, 7–11], так и на основе метода Монте–Карло [12–17].

В случае моделирования планарных структур с небольшим количеством слоев эффективно применяются алгоритмы на основе кинетической теории транспорта. За счет использования функции распределения для описания процесса распространения всех частиц в структуре они не требуют большого вычислительного времени [18–20]. В свою очередь, метод Монте–Карло основан на использовании случайных чисел для описания отдельных параметров моделируемого процесса [21–23], за счет чего является более требовательным к вычислительным мощностям. В основанных на методе Монте–Карло алгоритмах моделирования процессов рассеяния частиц в веществе траектории отдельных частиц моделируются независимо друг от друга, что позволяет использовать их для структур произвольной формы, а также воспроизвести стохастический характер данных процессов [24, 25]. При этом оба этих подхода основываются на одних и тех же данных о веществе — в наиболее простом случае это дифференциальные сечения упругого рассеяния электрона и его потери энергии на единицу длины пути, в которых учитываются все возможные неупругие процессы. Однако, в современных моделях неупругого рассеяния потери энергии сводятся к дискретным процессам, которые также описываются в терминах дифференциальных сечений. Таким образом, сечения упругих и неупругих процессов составляют

основу модели взаимодействия электронного луча с веществом, реализацией которой является алгоритм моделирования.

Данная работа является логическим продолжением вышедшей ранее статьи “Моделирование процессов электронно-лучевой литографии” [26], в которой были описаны алгоритмы моделирования на основе кинетической теории транспорта и метода Монте-Карло, а также были приведены базовые модели рассеяния электронного луча в веществе. В настоящей работе рассматриваются подходы к вычислению сечений упругого и неупругого рассеяния электронов в веществе, использующиеся в современных алгоритмах моделирования и обеспечивающие высокую точность результатов. Таким образом, эти две работы предоставляют информацию необходимую для создания алгоритма моделирования взаимодействия электронного луча с веществом, имеющего широкую область применения.

2. УПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ

Упругое рассеяние происходит в результате взаимодействия налетающего электрона с ядром атома, частично экранированного электронами. В результате упругого рассеяния изменяется направление движения электрона, его энергия при этом остается практически неизменной. Азимутальный угол рассеяния ϕ имеет равномерное распределение на промежутке $(0^\circ, 360^\circ)$, полярный угол рассеяния θ распределен неравномерно на промежутке $(0^\circ, 180^\circ)$ с максимумом плотности вероятности в нуле.

Основной характеристикой упругого рассеяния электронов на атомах мишени является дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$, определяемое как отношение числа частиц, рассеянных мишенью в элемент телесного угла $d\Omega = d\phi \sin\theta d\theta$ за единицу времени к плотности потока налетающих частиц. Полное сечение упругого рассеяния находится путем интегрирования дифференциального сечения по полному телесному углу:

$$\sigma_{el} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (1)$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} \{ (l+1) [\exp(2i\delta_l^-) - 1] + l [\exp(2i\delta_l^+) - 1] \} P_l(\cos\theta),$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} [-\exp(2i\delta_l^-) + \exp(2i\delta_l^+)] P_l^1(\cos\theta). \quad (5)$$

Здесь k — волновое число налетающего релятивистского электрона, $P_l(\cos\theta)$ и $P_l^1(\cos\theta)$ — полиномы Лежандра и присоединенные полино-

мы Лежандра соответственно, $\delta_l^\pm$ — фазовые сдвиги сферических волн, рассчитываемые по формуле

$$\frac{d\sigma_{MMA}}{d\Omega} = 5 \frac{d\sigma_C}{d\Omega} + 2 \frac{d\sigma_O}{d\Omega} + 8 \frac{d\sigma_H}{d\Omega}. \quad (2)$$

Исторически первые дифференциальные сечения упругого рассеяния вычислялись по формуле Резерфорда, получаемой за счет применения борновского приближения в задаче рассеяния электронов на атомном потенциале [27]:

$$\frac{d\sigma_{Ruth}}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{(1 - \cos\theta + \alpha)^2},$$

$$\alpha = \frac{me^4 \pi^2 Z^{2/3}}{h^2 E}, \quad (3)$$

где Z — заряд ядра, E — энергия налетающего электрона, m — масса электрона, h — постоянная Планка. Формула Резерфорда позволяет описывать упругое рассеяние электронов на легких атомах, однако, ее точность снижается с ростом зарядового числа атома, особенно в области низких энергий [28–30].

Более точные значения сечений упругого рассеяния (моттовские сечения) могут быть получены за счет решения уравнения Дирака для задачи рассеяния релятивистского электрона в центральном статическом поле атома-мишени [31–34]. В этом подходе дифференциальное сечение упругого рассеяния задается формулой

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad (4)$$

где $f(\theta)$ и $g(\theta)$ — амплитуды рассеяния, соответствующими параллельному и антипараллельному направлению спина относительно направления движения электрона, соответственно, и определяемые выражениями

$$\operatorname{tg}(\delta_l^\pm) = \frac{Kj_{l+1}(Kr) - j_l(Kr)[(W+1)\operatorname{tg}\phi_l^\pm + (1+l+k^\pm)/r]}{Kn_{l+1}(Kr) - n_l(Kr)[(W+1)\operatorname{tg}\phi_l^\pm + (1+l+k^\pm)/r]}, \quad (6)$$

где $K^2 = W^2 - 1$, W — полная энергия электрона в единицах mc^2 , r — расстояние до рассеивающего центра в единицах $\hbar/2\pi mc$, индексы “+” и “−” обозначают параллельное и антипараллельное направление спина:

$$\begin{aligned} +: k^+ &= -l-1, j = l+1/2, \\ -: k^- &= l, j = l-1/2, \end{aligned} \quad (7)$$

$\phi_l^\pm$ — предел функции $\phi_l^\pm(r)$ ($r \rightarrow \infty: \phi_l^\pm(r) \rightarrow \phi_l^\pm$), которая находится путем численного интегрирования уравнения Дирака:

$$\frac{d\phi_l^\pm(r)}{dr} = \frac{k^\pm}{r} \sin[2\phi_l^\pm(r)] - \cos[2\phi_l^\pm(r)] + W - V(r), \quad (8)$$

где $V(r)$ — рассеивающий потенциал.

В настоящей работе в составе рассеивающего потенциала будет рассматриваться потенциал электростатического взаимодействия $V_{st}(r)$, потенциал обменного взаимодействия $V_{ex}(r)$ и корреляционно-поляризационный потенциал $V_{cp}(r)$ (для частиц с энергией ниже ~ 10 кэВ):

$$V(r) = V_{st}(r) + V_{ex}(r) + V_{cp}(r), \quad (9)$$

2.1. Потенциал электростатического взаимодействия

Для нахождения потенциала электростатического взаимодействия потенциал атома $\phi(r)$ рассчитывается на основе потенциалов заряда ядра и электронного облака ($\phi_n(r)$ и $\phi_e(r)$ соответственно):

$$V_{st}(r) = -e\phi(r) = -e[\phi_n(r) + \phi_e(r)], \quad (10)$$

где $\rho_n(r)$ и $\rho_e(r)$ — объемные плотности заряда протонов ядра и орбитальных электронов:

$$\begin{aligned} \phi_n(r) &= e \left(\frac{1}{r} \int_0^r \rho_n(r') 4\pi r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho_n(r') 4\pi r' dr' \right), \\ \phi_e(r) &= -e \left(\frac{1}{r} \int_0^r \rho_e(r') 4\pi r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho_e(r') 4\pi r' dr' \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Распределение заряда ядра становится существенным для значений энергии налетающего электрона, превышающих 50 МэВ, при которых его длина волны де Бройля

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi}{k} = \frac{12.398 \times 10^{-11} \text{ см}}{\sqrt{(E/\text{МэВ})[(E/\text{МэВ}) + 1.022]}} \quad (12)$$

становится сопоставима с размерами ядра. Значения энергии электронов в электронно-лучевой литографии обычно много меньше 50 МэВ, поэтому в данной работе интерес представляет только модель точечного ядра (остальные модели могут быть найдены в работе [35]):

$$\begin{aligned} \rho_{n,p}(r) &= Z\delta(r), \\ \phi_{n,p}(r) &= \frac{Ze}{r}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\delta(r)$ — дельта-функция Дирака.

В отличие от моделей распределения заряда ядра, различные модели плотности электронного облака представляют интерес во всем диапазоне энергий, и для количественной оценки эффекта экранирования заряда ядра электронами атома вводится функция экранирования:

$$\phi(r) \equiv \frac{r}{Ze} \varphi(r). \quad (14)$$

При этом потенциал атома и объемные плотности его зарядов связаны уравнением Пуассона, которое, с учетом сферической симметрии системы, имеет вид:

$$\rho_n(r) - \rho_e(r) = -\frac{1}{4\pi e r} \frac{d^2}{dr^2} [r\phi(r)] = -\frac{Z}{4\pi r} \frac{d^2\phi(r)}{dr^2}. \quad (15)$$

В условиях модели точечного ядра это выражение принимает более простой вид:

$$\rho_e(r) = \frac{Z}{4\pi r} \frac{d^2\phi(r)}{dr^2}, \quad (16)$$

и в дальнейшем в различных моделях электронной плотности будет приводиться только выражение для функции экранирования.

• Потенциал Томаса–Ферми–Мольера

Наиболее простой метод получения электронной плотности в атоме основывается на модели атома Томаса–Ферми [36, 37], в которой электронное облако рассматривается как однородный электронный газ, удерживаемый полем точечного ядра. В этой модели функция экранирования

не зависит от вида атома и задается уравнением Томаса–Ферми [38]:

$$\frac{d^2\phi_{TF}}{dx^2} = \frac{\phi_{TF}^{3/2}}{\sqrt{x}}, \quad \phi_{TF}(0) = 1, \quad (17)$$

где $x = 2rZ^{1/3} / \left(\frac{3}{4}\pi\right)^{2/3}$. Обычно это уравнение решается численно, после чего решение приближается эмпирической функцией. Наиболее часто используется приближение Мольера [39]:

$$\chi_{TFM}(r) = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-a_i r/b), \quad (18)$$

где

$$A_1 = 0.10, A_2 = 0.55, A_3 = 0.35, a_1 = 6, a_2 = 1.2, a_3 = 0.3 \quad (19)$$

и $b = \frac{(3\pi)^{3/2}}{2^{7/3}} \frac{\hbar^2}{me^2} Z^{-1/3}$ – радиус Томаса–Ферми, r – расстояние до рассеивающего центра в атомных единицах Хартри (здесь и в пунктах 1.1.2 и 1.1.3), m – масса электрона (здесь и далее). Такое приближение хорошо согласуется с исходным решением уравнения Томаса–Ферми в большом диапазоне значений r ($r < 6b$).

• Потенциал Томаса–Ферми–Дирака

Модель Томаса–Ферми может быть дополнена с учетом обменного взаимодействия, что приводит к уравнению Томаса–Ферми–Дирака [38]:

$$\frac{d^2\phi_{TFD}}{dx^2} = x \left(\sqrt{\frac{\phi_{TFD}}{x}} + \beta \right)^3, \quad \beta = \sqrt{\frac{b}{a_0 Z \pi \sqrt{2}}}, \quad \phi_{TFD}(0) = 1. \quad (20)$$

Функция экранирования снова получается путем численного интегрирования дифференциального уравнения, однако в этом случае в решении отсутствует зависимость вида $Z^{-1/3}$. Таким образом, функция экранирования должна вычисляться для каждого элемента индивидуально, и для нее было получено следующее приближение [40, 41]:

$$\phi_{TFD}(r) = \sum_{i=1}^3 B_i \exp(-b_i r), \quad (21)$$

в котором параметры B_i и b_i плавно меняются с ростом Z и могут быть описаны зависимостями:

$$\begin{aligned} B_1 &= 0.0126671 - 0.0261047x + 0.0214184x^2 - 0.00235686x^3 + 0.0000210672x^4, \\ B_2 &= 0.0580612 + 0.0293077x + 0.0857135x^2 - 0.0223342x^3 + 0.00164675x^4, \\ B_3 &= 0.927968 - 0.00164643x - 0.107685x^2 + 0.0247998x^3 - 0.00167822x^4, \\ b_1 &= (164.564 - 152.192x + 62.3879x^2 - 11.5005x^3 + 0.808424x^4)/a_0, \\ b_2 &= (11.3060 - 6.31902x + 2.26025x^2 - 0.370738x^4 + 0.0261151x^4)/a_0, \\ b_3 &= (1.48219 - 0.0557601x + 0.0164387x^3 - 0.00439703x^3 + 0.000997225x^4)/a_0, \end{aligned} \quad (22)$$

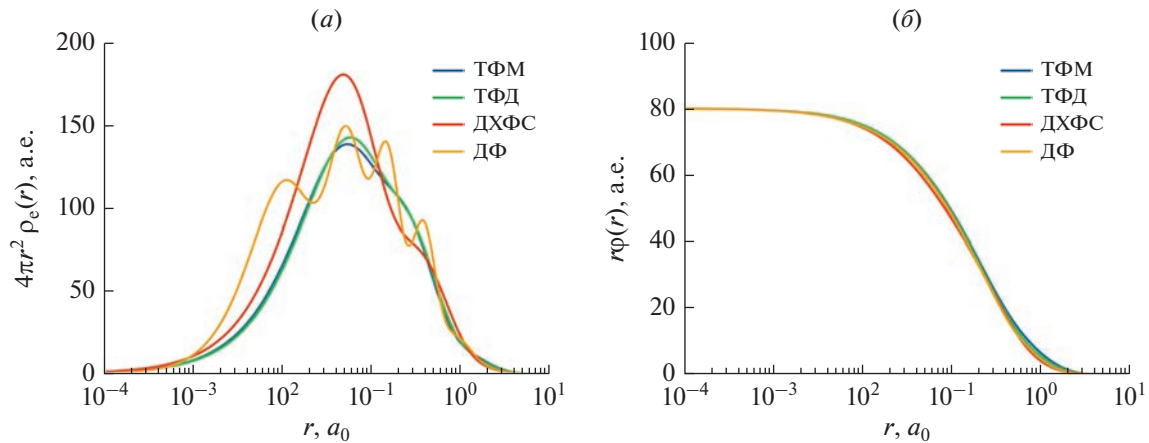


Рис. 1. Графики электронной плотности (а) и потенциала (б), полученные на основе моделей Томаса—Ферми—Мольера (ТФМ), Томаса—Ферми—Дирака (ТФД), Дирака—Хартри—Фока—Слейтера (ДХФС) и Дирака—Фока (ДФ).

где $x = \ln Z$. Однако, такое выражение для функции экранирования уже менее точно согласуется с исходным численным решением уравнения Томаса—Ферми—Дирака, чем в предыдущем случае, особенно, для элементов с низким Z .

• Потенциал Дирака—Хартри—Фока—Слейтера

В модели Дирака—Хартри—Фока—Слейтера [42] N -электронная волновая функция атома представляется в виде детерминанта Слейтера

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_1(\mathbf{r}_N) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}, \quad (23)$$

где функции одноэлектронных состояний $\psi_i(\mathbf{r})$ являются решениями уравнения Дирака

$$[c\alpha\hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 + U(\mathbf{r})]\psi_i(\mathbf{r}) = E\psi_i(\mathbf{r}) \quad (24)$$

в стационарном поле $U(\mathbf{r})$, включающем в себя кулоновское взаимодействие и обменное взаимодействие с потенциалом Слейтера [43]. Как и в двух предыдущих случаях, функция экранирования, полученная таким методом, может быть приближена суммой экспоненциальных функций:

$$\phi_{e,DHFS}(r) = \sum_i C_i \exp(-c_i r). \quad (25)$$

Их параметры для большинства элементов ($Z = 1-92$) приведены в работе [44], также параметры для элементов, входящих в систему ПММА/Si, приведены в табл. 1.

• Потенциал Дирака—Фока

Наиболее точные значения электронной плотности атома могут быть получены многоконфигу-

рационным методом Дирака—Фока [45, 46], являющегося релятивистским аналогом метода Хартри—Фока. Значения электронной плотности атомов, полученные этим методом, могут быть найдены в файлах вида “z_nnn.den”, входящими в состав пакета ELSEPA [35], в котором реализуется решения уравнения Дирака задачи рассеяния электронов и позитронов на свободных атомах и молекулах с различными параметрами рассеивающего потенциала.

Графики электронной плотности и потенциала, полученные на основе различных моделей, приведены на рис. 1.

2.2. Потенциал обменного взаимодействия

Точное описание обменного взаимодействия налетающего электрона с электронной оболочкой атома-мишени формулируется в терминах детерминантов Слейтера [47]. При этом волновая функция должна удовлетворять уравнениям, аналогичным уравнениям Дирака—Фока с нелокальным обменным членом, решение которых представляет определенные трудности [35]. Более простой с вычислительной точки зрения подход

Таблица 1. Параметры функции экранирования, получаемой в модели Дирака—Хартри—Фока—Слейтера для элементов, входящих в систему ПММА/Si

Элемент	C_1	C_2	c_1	c_2
H	-184.39	185.39	2.0027	1.9973
C	0.1537	0.8463	8.0404	1.4913
O	0.0625	0.9375	14.823	2.0403
Si	0.5160	0.4840	5.8492	1.1732

основан на использовании локальной аппроксимации обменного взаимодействия [48]. В данной работе будут приведены три потенциала обменного взаимодействия, полученные с использованием локальной аппроксимации.

• *Потенциал Томаса–Ферми*

Данный обменный потенциал получается путем вычисления потенциала Слейтера [49] в модели атома Томаса–Ферми (модель свободного электронного газа) [50]:

$$\begin{aligned} V_{ex,TF}(r) &= -\frac{e^2}{\pi k_L} \left[k_L k_F - \frac{1}{2} (k_L^2 - k_F^2) \ln \left| \frac{k_L + k_F}{k_L - k_F} \right| \right], \\ k_L &= k^2 + k_F^2, \\ (c\hbar k)^2 &= E(E + 2mc^2), \end{aligned} \quad (26)$$

где $k_F(r) = [3\pi^2 \rho_e(r)]^{1/3}$ – локальное волновое число Ферми электронного облака, c – скорость света.

• *Потенциал Фернесса–МакКарти*

Данный потенциал получается за счет применения квазиклассического приближения (метод ВКБ [51]) в задаче с нелокальным обменным потенциалом [52]:

$$V_{ex,FM}(r) = \frac{1}{2} [E - V_{st}(r)] - \frac{1}{2} \{ [E - V_{st}(r)]^2 + 4\pi a_0 e^4 \rho_e(r) \}^{1/2}. \quad (27)$$

Здесь $V_{st}(r)$ – потенциал электростатического взаимодействия, $\rho_e(r)$ – электронная плотность, a_0 – боровский радиус. Известно, что такой потенциал корректно описывает обменное взаимодействие для атомов водорода и гелия при энергиях налетающего электрона, превышающих 1 Хартри (≈ 27 эВ) [48].

• *Потенциал Рили–Трулара*

При высоких энергиях налетающего электрона степенная функция в потенциале Фернесса–МакКарти может быть разложена в ряд, что приводит к потенциалу Рили–Трулара [50]:

$$V_{ex,RT}(r) = -\pi a_0 e^4 \rho_e(r) \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} k^2 + e\phi(r) \right]^{-1}, \quad (28)$$

где $\phi(r)$ – электростатический потенциал атома-мишени.

2.3. Поляризационно-корреляционный потенциал

Налетающие электроны с низкой энергией могут вызывать поляризацию и появление соответствующего дипольного момента у электронного облака атома-мишени. Это приводит к дополнительному притяжению между электроном и атомом, для описания которого используется поляризационно-корреляционный потенциал.

где α_d – дипольная поляризуемость атома-мишени, d – феноменологический параметр, предотвращающий расходимость потенциала при $r \rightarrow 0$. Экспериментальные значения дипольной поляризуемости атомов приведены в работе [54], а значения параметра d определяются формулой [53]

$$d^4 = \frac{1}{2} \alpha_d a_0 Z^{-1/3} b_{pol}^2, \quad (30)$$

$$b_{pol}^2 = \max \{ (E - 50 \text{ эВ}) / (16 \text{ эВ}), 1 \}. \quad (31)$$

• *Потенциал Букингема*

При больших расстояниях между налетающим электроном и атомом-мишенью корреляционно-поляризационный потенциал может быть описан потенциалом Букингема [53]:

$$V_{cp,B}(r) = -\frac{\alpha_d e^2}{2(r^2 + d^2)^2}, \quad (29)$$

• *Потенциал в приближении локальной плотности*

Более точный корреляционно-поляризационный потенциал может быть получен путем комбинирования потенциала Букингема (для больших расстояния между налетающим электроном и атомом-мишенью) и поляризационного потенциала, получаемого в приближении локальной

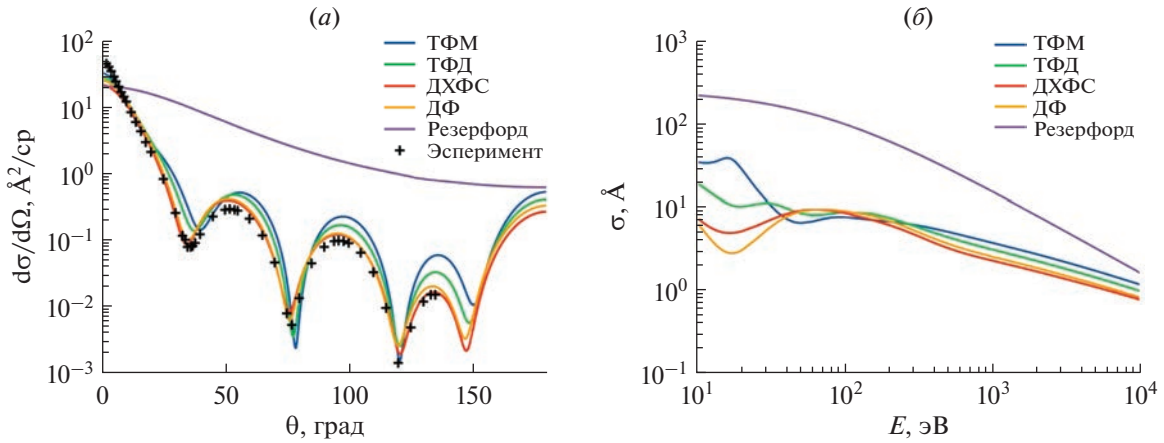


Рис. 2. Дифференциальные сечения (а) (для энергии 300 эВ) и полные сечения (б) упругого рассеяния электронов на атомах ртути ($Z = 80$), полученные с различными потенциалами электростатического взаимодействия.

плотности [53]. Последнее основывается на предположении о том, что энергия корреляционно-поляризационного взаимодействия атома с налетающим электроном является такой же, как и в случае движения электрона в свободном электронном газе с плотностью $\rho_e(r)$, равной локальной электронной плотности атома. При этом удобно использовать параметр

$$r_s \equiv \frac{1}{a_0} \left[\frac{3}{4\pi\rho_e(r)} \right]^{1/3}, \quad (32)$$

определяемый как радиус сферы (в единицах a_0), содержащей в среднем один электрон газа. Параметризация потенциала, полученного в приближении локальной плотности, приводит к следующим выражениям [55]:

$$V_{cp,LDA}(r) = -\frac{e^2}{a_0} (0.0311 \ln r_s - 0.0584 + 0.00133 r_s \ln r_s - 0.0084 r_s), \quad r_s < 1,$$

$$V_{cp,LDA}(r) = -\frac{e^2}{a_0} \beta_0 \frac{1 + (7/6)\beta_1 r_s^{1/2} + (4/3)\beta_2 r_s}{(1 + \beta_1 r_s^{1/2} + \beta_2 r_s)^2}, \quad r_s \geq 1, \quad (33)$$

$$\beta_0 = 0.1423, \quad \beta_1 = 1.0529, \quad \beta_2 = 0.3334.$$

На рис. 2–4 приведены дифференциальные сечения и полные сечения упругого рассеяния, полученные с различными потенциалами электростатического, обменного и корреляционно-поляризационного взаимодействия. Для потенциала электростатического взаимодействия (V_{st}) используются модели Томаса–Ферми–Мольера (ТФМ), Томаса–Ферми–Дирака (ТФД), Дирака–Хартри–Фока–Слейтера (ДХФС) и Дирака–Фока (ДФ), для потенциала обменного взаимодействия (V_{ex}) – модели Томаса–Ферми (ТФ), Фернесса–МакКарти (ФМ) и Рили–Трулара (РТ), для корреляционно-поляризационного потенциала (V_{cp}) – модель Бункинга (Б) и приближение локальной плотности (ПЛП). При вариации потенциала одного из взаимодействий два других выбираются согласно стандартным настройкам для программы ELSEPA (V_{st} – ДФ, V_{ex} – ФМ, V_{cp} = 0) [56]. Также для сравнения приведены сечения, полученные по формуле Резерфорда. Как видно из графиков, дифференци-

альные и полные сечения упругого рассеяния наиболее чувствительны к изменению модели потенциала электростатического взаимодействия. При этом основные различия наблюдаются в области сверхнизких энергий (ниже 100 эВ), где точность многих моделей (как упругого, так и неупругого рассеяния) вызывает определенные вопросы [57–59].

3. КВАЗИУПРУГИЕ И НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ

Квазиупругие и неупругие процессы включают в себя все процессы взаимодействия между налетающим электроном и веществом мишени, в которых электрон теряет свою энергию. При этом также происходит изменение направления движения электрона, и полярный угол рассеяния θ задается выражением

$$\sin^2 \theta = \frac{\hbar\omega}{E}, \quad (34)$$

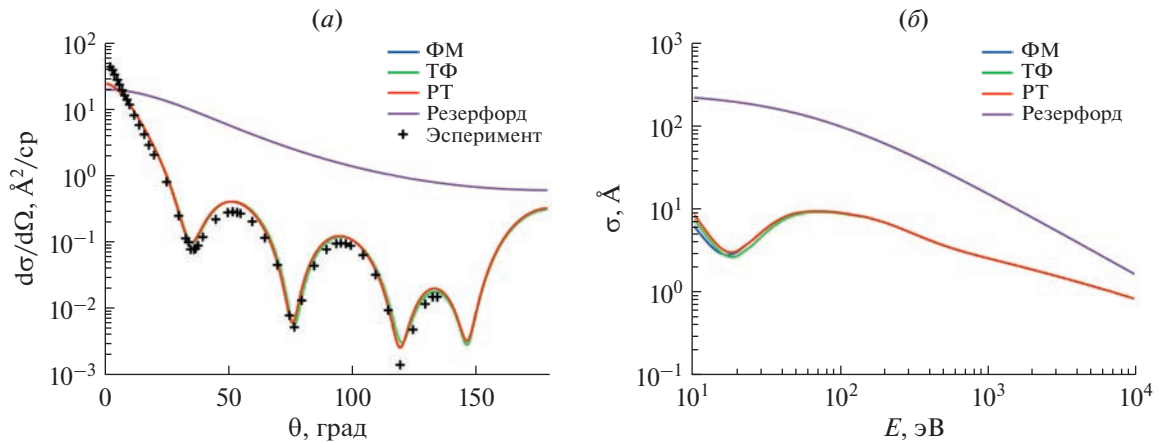


Рис. 3. Дифференциальные сечения (а) (для энергии 300 эВ) и полные сечения (б) упругого рассеяния электронов на атомах ртути ($Z = 80$), полученные с различными потенциалами обменного взаимодействия.

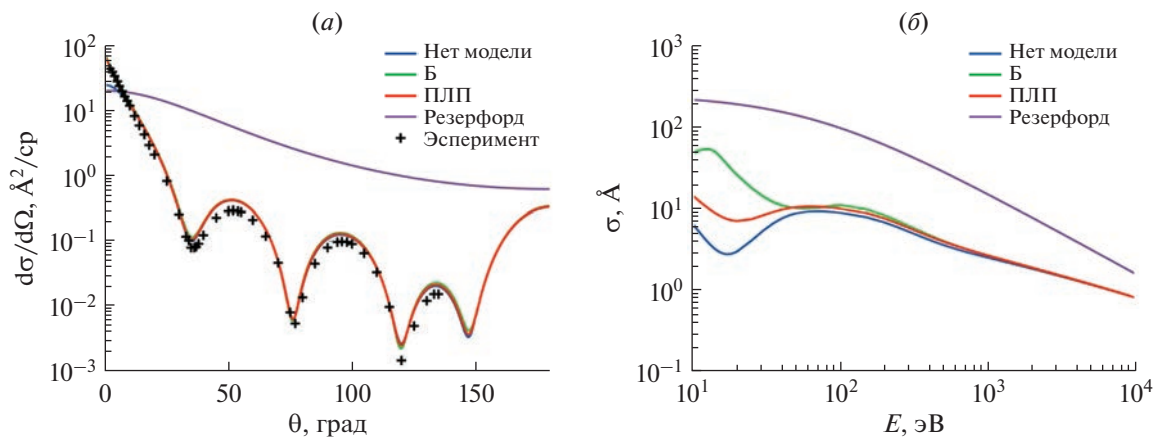


Рис. 4. Дифференциальные сечения (а) (для энергии 300 эВ) и полные сечения (б) упругого рассеяния электронов на атомах ртути ($Z = 80$), полученные с различными корреляционно-поляризационными потенциалами.

где E — энергия электрона до акта рассеяния, $\hbar\omega$ — потери энергии [60]. В моделях неупругого рассеяния часто рассматривается взаимодействие налетающего электрона с веществом мишени в целом, и для описания такого взаимодействия используется обратная длина свободного пробега $\lambda_{\text{inel}}^{-1}(E)$ [61–63], связанная с сечением неупругого рассеяния σ_{inel} формулой

$$\lambda_{\text{inel}}^{-1}(E) = n\sigma(E), \quad (35)$$

где n — концентрация рассеивающих центров в веществе.

Основной характеристикой упругого рассеяния электронов на атомах мишени является дифференциальная обратная длина свободного пробега $\frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}}{d\hbar\omega}(E, \hbar\omega)$, позволяющая определить обратную длину свободного пробега по формуле [64]

$$\lambda_{\text{inel}}^{-1}(E) = \int_0^{E/2} \frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}(E, \hbar\omega)}{d\hbar\omega} d\hbar\omega, \quad (36)$$

а также потери энергии электрона на единицу длины пути $S(E)$ по формуле

$$S(E) = \int_0^{E/2} \frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}(E, \hbar\omega)}{d\hbar\omega} \hbar\omega d\hbar\omega \quad (37)$$

Потери энергии $\hbar\omega$ при неупругом рассеянии также определяются на основе функции $\frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}}{d\hbar\omega}$ методом Монте-Карло [60]. Потери энергии на единицу длины пути, вообще говоря, не используются в современных моделях дискретных потерь энергии заряженных частиц в веществе, но

эта величина в целом является важной характеристикой функции $\frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}}{d\hbar\omega}$, используемой, например, при сравнении различных моделей.

3.1. Электрон-фононное взаимодействие

За счет теплового движения атомы кристаллических тел колеблются вблизи своих положений равновесия. С такими колебаниями связывается наличие фононов в кристаллической решетке, и взаимодействие налетающего электрона с опти-

ческими модами колебаний решетки может увеличивать их число [65, 66]. Энергия фононов не превышает значения $k_B T_D$, где k_B — постоянная Больцмана и T_D — температура Дебая. Для большинства твердых тел величина $k_B T_D$ составляет менее 0.1 эВ, и учет потерь энергии налетающего электрона на генерацию фононов становится целесообразен при энергиях электрона порядка 1 эВ [67].

Согласно существующим работам [65, 66], обратная длина свободного пробега при электрон-фононном рассеянии может быть выражена формулой

$$\lambda_{\text{ph}}^{-1} = \frac{1}{a_0} \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \frac{\hbar\omega n(T) + 1}{E} \ln \left[\frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega/E}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega/E}} \right], \quad (38)$$

где E — энергия налетающего электрона, $\hbar\omega$ — его потери энергии (порядка 0.01–0.1 эВ), ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, ϵ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, a_0 — борковский радиус и $n(T)$ — число заполнения:

$$n(T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}, \quad (39)$$

Было установлено, что для ПММА величина $\hbar\omega$ может быть принята равной 0.1 эВ [66, 67], что вкупе с формулой (38) предоставляет все необходимое для моделирования электрон-фононного взаимодействия.

3.2. Электрон-поляронное взаимодействие

Электроны, медленно движущиеся в диэлектриках, приводят к появлению поляризационного поля, которое оказывает на них стабилизирующее воздействие. Такой процесс описывается как генерация квазичастицы — полярона, состоящего из электрона и поляризационного облака вокруг него. Было установлено, что обратная длина свободного пробега для такого взаимодействия может быть описана экспоненциальной функцией [67]

$$\lambda_{\text{pol}}^{-1} = C e^{-\gamma E}, \quad (40)$$

параметры которой определяются для каждого вещества косвенным методом (например, по энергетическому распределению вторичных электронов [60, 68]). При этом считается, что при генерации полярона налетающий электрон полностью останавливается ($\hbar\omega = E$). Было установлено, что для ПММА параметры C и γ могут быть приняты равными 0.1 нм⁻¹ и 0.15 эВ⁻¹, соответственно [69]. Следует отметить, что в силу фиксированных потерь энергии как при электрон-фононном, так и при электрон-поляронном рассеянии допустимо непосредственное использование обратной длины

свободного пробега (без предварительного введения дифференциальной обратной длины свободного пробега).

3.3. Электрон-электронное взаимодействие

Электрон-электронное рассеяние, вызываемое взаимодействием налетающего электрона с электронной оболочкой атома-мишени, является доминирующим неупругим процессом при движении электрона в веществе. Если энергия налетающего электрона достаточно высока, он может вызвать переход одного из основных электронов в свободное состояние выше уровня Ферми. Последующая релаксация атома происходит посредством рентгеновского излучения или испускания другого электрона. Взаимодействие налетающего электрона с валентными электронами атома может происходить одним из двух возможных способов. В первом случае происходит возбуждение одного валентного электрона, что приводит к его переходам внутри зоны или между зонами. При получении большей энергии от налетающего электрона возбужденный электрон также может преодолеть потенциальный барьер между зоной проводимости и вакуумом и в дальнейшем быть зарегистрированным как вторичный электрон. Снятие возбуждения атома при этом происходит за счет излучения света в видимом диапазоне (катодолуминесценция) или за счет безызлучательного переходов с выделением тепла. Во втором случае происходит коллективное возбуждение валентных электронов, описываемое как генерация плазмона. Энергия плазмона, как правило, находится в диапазоне 5–30 эВ, и его распад сопровождается генерацией вторичного электрона и/или выделением тепла [27].

Исторически первые подходы к описанию потерь энергии электрона в веществе основывались на формуле Бете [70, 71]. Эта формула приведена в работе [72], предшествующей настоящей и, в силу

своей простоты, имеет существенные недостатки. Формула Бете не может быть применена в области низких энергий, а также она описывает лишь потери энергии на единицу длины пути, не предоставляя информации о длине свободного пробега. Поэтому в настоящей работе будут рассматриваться более точные и детальные подходы на основе функции потерь энергии (Energy Loss Function, ELF):

$$ELF(q, \omega) \equiv \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right], \quad (41)$$

где $\varepsilon(q, \omega)$ — комплексная диэлектрическая проницаемость, q и $\hbar\omega$ — передаваемые среде импульс и энергия, соответственно. При известной функции потерь энергии дифференциальная обратная длина свободного пробега может быть найдена по формуле

$$\frac{d\lambda_{\text{inel}}^{-1}}{d\hbar\omega} = \frac{1}{\pi E a_0} \int_{k_-}^{k_+} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] \frac{dq}{q}, \quad (42)$$

где

$$q_{\pm} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} (\sqrt{E} \pm \sqrt{E - \hbar\omega}), \quad (43)$$

E — энергия налетающего электрона, m — масса электрона и a_0 — боровский радиус.

Поскольку функция $\varepsilon(\omega, q)$ может быть найдена из первых принципов только в нескольких идеализированных случаях [73, 74], часто используется подход на основе оптической функции потерь энергии, получаемой в пределе $q \rightarrow 0$:

$$OELF(\omega) \equiv ELF(0, \omega) = \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right]. \quad (44)$$

Оптическая функция потерь энергии может быть рассчитана на основе значений коэффициентов преломления (n) и поглощения (k) [75]:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \frac{2nk}{(n^2 + k^2)^2}. \quad (45)$$

Коэффициенты n и k табулированы для низких энергий (примерно до 2 кэВ) [76, 77], для более же высоких энергий они могут быть найдены из компонент атомных факторов рассеяния $f = f_1 + if_2$ (для молекулярных веществ) [78, 79]:

$$n = 1 - \frac{e^2}{2\pi m c^2} \lambda^2 N \sum_p x_p f_{1p}, \quad (46)$$

$$k = \frac{e}{2\pi m c^2} \lambda^2 N \sum_p x_p f_{2p},$$

где N — концентрация молекул, содержащих x_p атомов каждого вида, λ — длина волны фотона. Для атомарных веществ оптическая функция потерь энергии может быть найдена непосредственно по формуле

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \frac{n_m c \sigma_{\text{phot}}}{\omega}, \quad (47)$$

где n_m — концентрация остовных электронов, σ_{phot} — сечение фотоионизации [80, 81]. На рис. 5а приведены графики оптической функции потерь энергии для ПММА и кремния, найденные вышеописанными способами.

При известной оптической функции потерь энергии поведение функция потерь энергии в области $q > 0$ учитывается с помощью одного из подходов, описанных ниже.

• Аппроксимация функции потерь энергии эмпирической функцией

Наиболее простым является подход, в котором поведение функции потерь энергии в области $q > 0$ описывается подгоночными функциями $L(x)$ и $S(x)$ [82, 83], что позволяет непосредственно рассчитывать обратную длину свободного пробега:

$$\lambda^{-1}(E) = \frac{m e^2}{2\pi \hbar^2 E} \int_0^{W_{\text{max}}} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] L\left(\frac{\hbar\omega}{E}\right) d\hbar\omega, \quad (48)$$

$$L(x) = (1-x) \ln \frac{4}{x} - \frac{7}{4}x + x^{3/2} - \frac{33}{32}x^2,$$

а также потери энергии на единицу длины пути:

$$-\frac{dE}{ds} = \frac{m e^2}{\pi \hbar^2 E} \int_0^{W_{\text{max}}} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] S\left(\frac{\hbar\omega}{E}\right) \hbar\omega d\hbar\omega, \quad (49)$$

$$S(x) = \ln \frac{1.166}{x} - \frac{3}{4}x - \frac{x}{4} \ln \frac{4}{x} + \frac{1}{2}x^{3/2} - \frac{x^2}{16} \ln \frac{4}{x} - \frac{31}{48}x^2,$$

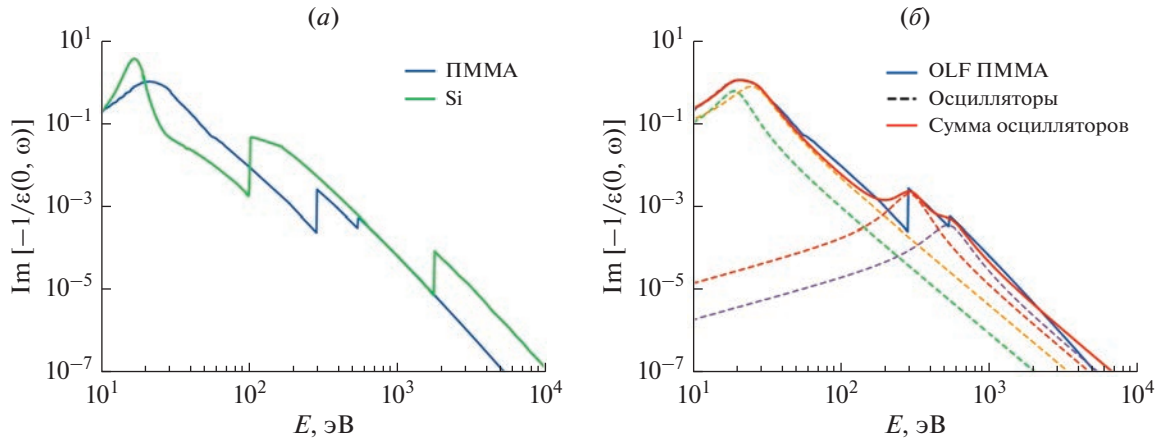


Рис. 5. (а) Оптические функции потерь энергии ПММА и Si, (б) оптическая функция потерь энергии ПММА, приближенная суммой осцилляторов Друде.

где $W_{\max} = E/2$. В данном подходе сложно говорить о дифференциальной обратной длине свободного пробега, которая может потребоваться, например, для моделирования потерь энергии при электрон-электронном рассеянии. Однако, при необходимости она может быть определена по формуле [60]

$$\frac{d\lambda^{-1}}{d\hbar\omega} = \frac{me^2}{2\pi\hbar^2 E} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] L \left(\frac{\hbar\omega}{E} \right). \quad (50)$$

• *Аппроксимация функции потерь энергии суммой осцилляторов Друде*

В данном подходе оптическая функция потерь энергии приближается суммой осцилляторов Друде [84]:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \sum_i \frac{A_i \Gamma_i \hbar\omega}{[E_i^2 - (\hbar\omega)^2]^2 + (\Gamma_i \hbar\omega)^2}, \quad (51)$$

параметры E_i , Γ_i и A_i которых определяются путем подгонки [75, 85] (см. рис. 5б, табл. 2). Продолжение оптической функции потерь энергии в область $q > 0$ осуществляется за счет использования квадратичного закон дисперсии:

$$E_i(q) = E_i + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad (52)$$

что в дальнейшем позволяет построить функцию потерь энергии (см. рис. 6а):

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \sum_i \frac{A_i \Gamma_i \hbar\omega}{\left[\left(E_i + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right)^2 - (\hbar\omega)^2 \right]^2 + (\Gamma_i \hbar\omega)^2}, \quad (53)$$

Таблица 2. Параметры осцилляторов для ПММА в моделях Друде и Мермина [75, 90]

i	Осцилляторы Друде			Осцилляторы Мермина		
	E_i , эВ	Γ_i , эВ	A_i , эВ ²	$\hbar\omega_i$, эВ	$\hbar\gamma_i$, эВ	A_i
1	19.46	8.77	100.0	19.13	9.03	2.59×10^{-1}
2	25.84	14.75	286.5	25.36	14.34	4.46×10^{-1}
3	300.0	140.0	80.0	70.75	48.98	4.44×10^{-3}
4	550.0	300.0	55.0		—	

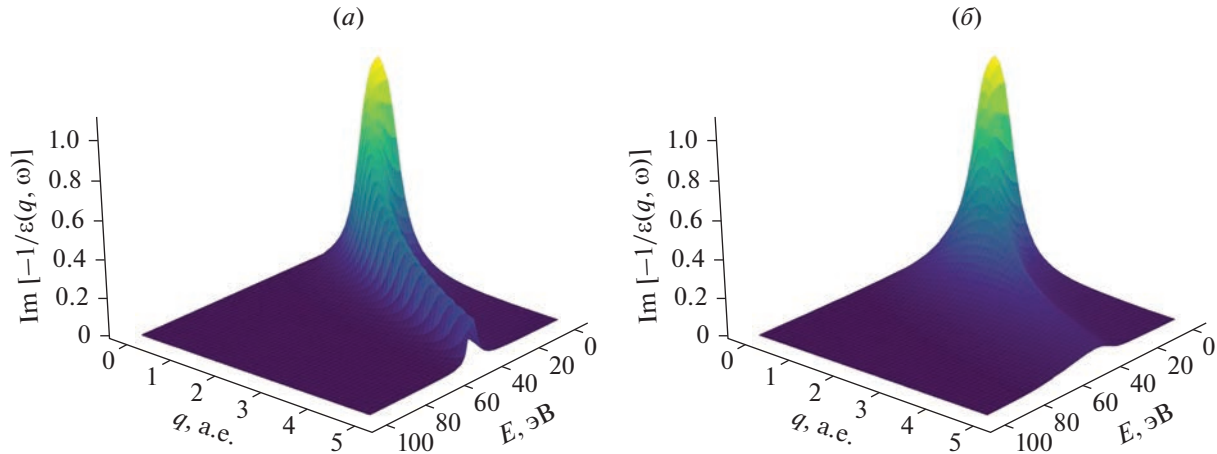


Рис. 6. (а) Функция потерь энергии ПММА, представленная суммой осцилляторов Друде, (б) функция потерь энергии ПММА, представленная суммой осцилляторов Мермина.

и получить дифференциальную обратную длину свободного пробега по формуле (42).

Следует отметить, что именно такой подход к определению дифференциальной обратной длины свободного пробега используется в модуле “MuElec”, входящим в состав пакета Geant4 и предназначенном для моделирования процессов в области микроэлектроники [86, 87]. Для кремния ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$), например, в нем используется функция потерь энергии, включающая в себя шесть осцилляторов: один для K -оболочки ($1s$), два для L -оболочки ($2s$ и $2p$), два для M -оболочки

($3s$ и $3p$) и один для описания коллективных колебаний валентных электронов.

• Диэлектрическая функция Мермина

Наиболее точным подходом к построению функции потерь энергии в органических полимерах является подход на основе модели Мермина [69, 88, 89]. В его основе лежит диэлектрическая функция Мермина для столкновительной плазмы,

$$\epsilon_M(q, \omega) = 1 + \frac{(1 + i\gamma/\omega)[\epsilon_L(q, \omega + i\gamma) - 1]}{1 + (i\gamma/\omega)[\epsilon_L(q, \omega + i\gamma) - 1]/[\epsilon_L(q, 0) - 1]}, \quad (54)$$

где γ — постоянная затухания, $\epsilon_L(q, \omega)$ — диэлектрическая функция Линдхарда [73]:

$$\epsilon_L(q, \omega) = 1 + \frac{\chi^2}{z^2} [f_1(u, z) + if_2(u, z)]. \quad (55)$$

Здесь $u = \omega/(qv_F)$, $z = q/(2q_F)$ и $\chi^2 = e^2/(\pi\hbar v_F)$, где v_F — скорость Ферми валентных электронов вещества, $q_F = mv_F/\hbar$. При этом функции $f_1(u, z)$ и $f_2(u, z)$ определяются формулами

$$f_1(u, z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} [g(z-u) + g(z+u)],$$

$$f_2(u, z) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}u, & |z-u| < 1 < z+u \\ \frac{\pi}{8z} [1 - (z-u)^2], & |z-u| < 1 < z+u \\ 0, & |z-u| > 1. \end{cases} \quad (56)$$

где

$$g(x) = (1 - x^2) \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (57)$$

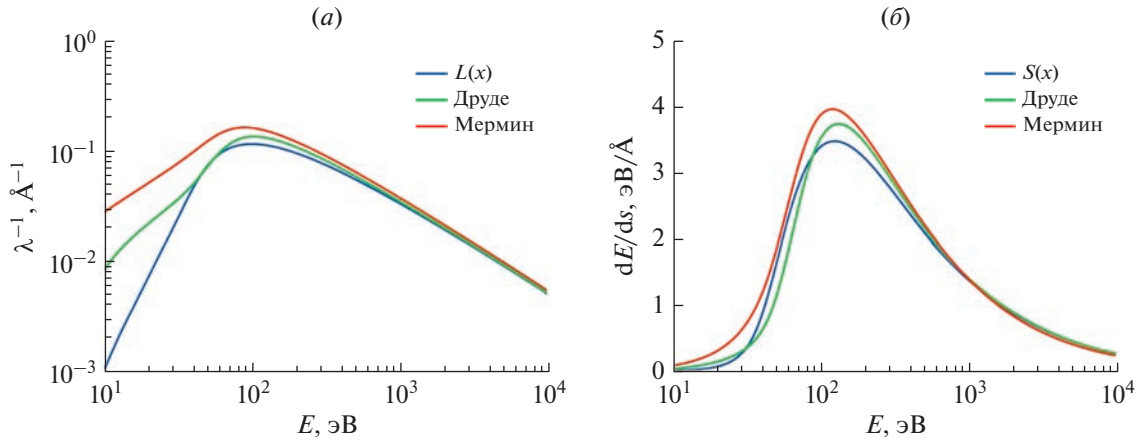


Рис. 7. Энергетические зависимости обратной длины свободного пробега (а) и потерь энергии на единицу длины пути (б) при неупругом рассеянии, полученные для ПММА с использованием различных моделей.

Как и в предыдущем подходе, функция потерь энергии вещества суммой функций потерь отдельных осцилляторов, и ее построение проводится в два этапа. Сначала оптическая функция потерь энергии вещества подгоняется суммой функций потерь энергии Мермина (осцилляторов Мермина) для $q = 0$:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \sum_i A_i \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_M(\omega_i, \gamma_i, q=0, \omega)} \right], \quad (58)$$

что позволяет получить параметры A_i , ω_i и γ_i отдельных осцилляторов (см. табл. 2, рис. 6б). Параметр ω_i определяет частоту каждого из осцилляторов, что позволяет найти параметр v_F , входящий в величины u , z и χ , используемые в диэлектрической функции Линдхарда:

$$\begin{aligned} \omega_i &= \sqrt{\frac{4\pi n_i e^2}{m}} \Rightarrow n_i = \frac{\omega_i^2 m}{4\pi e^2}, \\ v_{Fi} &= \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n_i)^{1/3}, \end{aligned} \quad (59)$$

где n_i — концентрация электронов, соответствующая осциллятору с индексом i , m — масса электрона. Далее на основе параметров A_i , ω_i и γ_i составляется функция потерь энергии:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \sum_i A_i \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_M(\omega_i, \gamma_i, q, \omega)} \right] \quad (60)$$

и определяется дифференциальная обратная длина свободного пробега.

На рис. 7 приведено сравнение энергетических зависимостей обратной длины свободного пробега и потерь энергии на единицу длины пути, полученные для ПММА с использованием вышеописанных моделей. Как видно из графиков, принципиальное различие между моделями проявляется в области малых энергий налетающего электрона, и при энергиях выше 1 кэВ зависимости, полученные на основе различных моделей, практически совпадают. Таким образом каждая из них может применяться для моделирования выделения энергии в слое резисте толщиной порядка 100 нм при экспонировании электронным лучом с начальной энергией электронов в несколько де-

сятков килоэлектронвольт. В случаях, когда необходимы точные значения длины свободного пробега в области низких энергий (например, при моделировании различных распределений для вторичных электронов), следует использовать подходы на основе осцилляторов Друде и Мермина.

Энергетические зависимости обратной длины свободного пробега электронов в ПММА для упругого и всех видов неупругого рассеяния приведены на рис. 8. Как и следовало ожидать, преобладающими являются процессы упругого и электрон-электронного рассеяния, в то время как вклад процессов электрон-поляронного и электрон-фононного рассеяния проявляется лишь в области сверхнизких энергий (ниже 100 эВ). Такая модель, учитывающая четыре вышеупомянутых ме-

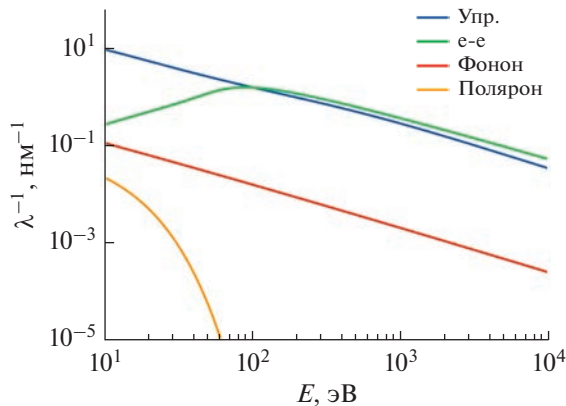


Рис. 8. Энергетические зависимости обратной длины свободного пробега электронов в ПММА для упругого и всех видов неупругого рассеяния.

ханизма взаимодействия налетающего электрона с веществом, изначально была предложена именно для ПММА [60]. Однако, она также может быть применена и для других веществ, для которых были или могут быть проведены необходимые измерения. Так, для построения функции потерь энергии на основе оптической функции потерь энергии необходимы данные о показателях преломления и поглощения вещества, для определения обратной длины пробега при электрон-фононном рассеянии — статическая и высокочастотная диэлектрическая проницаемость вещества. Параметры обратной длины свободного пробега при электрон-фононном рассеянии могут быть определены на основе работы выхода вещества и распределения вторичных электронов аналогично тому, как это было сделано для ПММА [60, 68, 69]. Следует также отметить, что учет электрон-фононного и электрон-поляронного взаимодействия является критичным в основном в случае высоких требований к точности моделирования в области низких энергий. При решении же вышеупомянутой задачи моделирования выделения энергии в слое резиста при экспонировании учет этих двух взаимодействий может быть заменен введением энергии отсечки в несколько десятков электрон-вольт, что существенно упростит процесс построения модели и сам алгоритм моделирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассмотрены современные подходы к вычислению сечений взаимодействия электронного луча с веществом — подход на основе релятивистской квантовой теории рассеяния для вычисления сечений упругого рассеяния и подход на основе функции потерь энергии для вычисления сечений неупругого электрон-электронного рассеяния. Также приведены модели процессов, характерных для сверхнизких энергий электрона —

электрон-фононного и электрон-поляронного рассеяния. Вкупе с предыдущей работой, посвященной описанию алгоритмов моделирования рассеяния электронного луча в веществе [72], это предоставляет всю информацию, необходимую для разработки высокоточных алгоритмов моделирования. Такие алгоритмы могут применяться для моделирования распределения энергии, выделившейся в резисте на стадии экспонирования в процессе электронно-лучевой литографии, что позволяет оценить масштабы проявления эффекта близости и скорректировать параметры экспонирования. Следует также отметить, что область применения вышеописанных моделей выходит далеко за пределы электронно-лучевой литографии. К примеру, подходы на основе функции потерь энергии широко применяются для определения характеристик веществ, используемых в микроэлектронике, космической промышленности, в различных биологических и медицинских отраслях.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме № FFNN-2022-0021.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chang T.H.P.* Proximity effect in electron-beam lithography // *J. Vac. Sci. Technol. Nov.* 1975. V. 12. № 6. P. 1271–1275.
2. *Nilsson B.A.* Experimental evaluation method of point spread functions used for proximity effects correction in electron beam lithography // *J. Vac. Sci. Technol. B, Nanotechnol. Microelectron. Mater. Process. Meas. Phenom.* 2011. V. 29. № 6. P. 06F311.
3. *Greeneich J.S., T. Van Duzer.* Model for Exposure of Electron-Sensitive Resists // *J. Vac. Sci. Technol. Nov.* 1973. V. 10. № 6. P. 1056–1059.
4. *Greeneich J.S., T. Van Duzer.* An Exposure Model For Electron-Sensitive Resists // *IEEE Trans. Electron Devices.* 1974. V. 21. № 5. P. 286–299.
5. *Greeneich J.S.* Solubility Rate of Poly-(Methyl Methacrylate), PMMA, Electron-Resist // *J. Electrochem. Soc.* 1974. V. 121. № 12. P. 1669.
6. *Greeneich J.S.* Developer Characteristics of Poly-(Methyl Methacrylate) Electron Resist // *J. Electrochem. Soc.* 1975. V. 122. № 7. P. 970.
7. *Glezos N.* Application of a new analytical technique of electron distribution calculations to the profile simulation of a high sensitivity negative electron-beam resist // *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct. Nov.* 1992. V. 10. № 6. P. 2606.
8. *Schmoranzner H., Reisser M.* Spatial energy deposition distribution by a keV-electron beam in resist layers for electron-beam lithography // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 1995. V. 105. № 1–4. P. 35–41.
9. *Paul B.K.* An analytical model of the diffusive scattering of low-energy electrons in electron-beam resists // *Microelectron. Eng.* 1999. V. 49. № 3–4. P. 233–244.

10. *Raptis I., Glezos N., Hatzakis M.* Use of the Boltzmann transport equation for the evaluation of energy deposition in the case of electron sensitive resist films over composite substrates // *Microelectron. Eng.* 1993. V. 21. № 1–4. P. 289–292.
11. *Stepanova M. et al.* Simulation of electron beam lithography of nanostructures // *J. Vac. Sci. Technol. B, Nanotechnol. Microelectron. Mater. Process. Meas. Phenom.* 2010. V. 28. № 6. P. C6C48–C6C57.
12. *Kyser D.F., Viswanathan N.S.* Monte Carlo simulation of spatially distributed beams in electron-beam lithography // *J. Vac. Sci. Technol.* 2002. V. 12. № 6. P. 1305–1308.
13. *Shimizu R., Everhart T.E.* A semiempirical stopping-power formula for use in microprobe analysis // *Appl. Phys. Lett.* 1978. V. 33. № 8. P. 784–786.
14. *Adesida I., Shimizu R., Everhart T.E.* A study of electron penetration in solids using a direct Monte Carlo approach // *J. Appl. Phys.* 1980. V. 51. № 11. P. 5962–5969.
15. *Samoto N., Shimizu R.* Theoretical study of the ultimate resolution in electron beam lithography by Monte Carlo simulation, including secondary electron generation: Energy dissipation profile in polymethylmethacrylate // *J. Appl. Phys.* 1983. V. 54. № 7. P. 3855–3859.
16. *Kim S.-H., Ham Y.-M., Lee W., Chun K.* New approach of Monte Carlo simulation for low energy electron beam lithography // *Microelectron. Eng.* 1998. V. 41–42. P. 179–182.
17. *Ivin V.V., Silakov M.V., Vorotnikova N.V., Resnick D.J., Nordquist K.N., Siragusa L.* Efficient and robust algorithms for Monte Carlo and e-beam lithography simulation // *Microelectron. Eng.* 2001. V. 57–58. P. 355–360.
18. *Glezos N., Raptis I.* A fast electron beam lithography simulator based on the Boltzmann transport equation // *IEEE Trans. Comput. Des. Integr. Circuits Syst.*, 1996. V. 15. № 1. P. 92–102.
19. *Aktary M., Stepanova M., Dew S.K.* Simulation of the spatial distribution and molecular weight of polymethylmethacrylate fragments in electron beam lithography exposures // *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.* 2006. V. 24. № 2. PP. 768–779.
20. *Stepanova M. et al.* Simulation of electron beam lithography of nanostructures // *J. Vac. Sci. Technol. B, Nanotechnol. Microelectron. Mater. Process. Meas. Phenom.* Nov. 2010. V. 28. № 6. P. C6C48–C6C57.
21. *Асадов С.М., Мустафаева С.Н., Лукичев В.Ф., Келбалиев К.И.* Концентрационные зависимости переноса заряда и кинетика Монте-Карло моделирования роста 2D моно- и нанокристаллов халькогенидов галлия // *Микроэлектроника.* 2022. V. 51. № 1. P. 48–59.
22. *Пермякова О.О., Рогожин А.Е.* Моделирование резистивного переключения в мемристорных структурах на основе оксидов переходных металлов // *Микроэлектроника,* 2020. Т. 49. № 5. С. 323–333.
23. *Борздов В.М., Борздов А.В., Сперанский Д.С., Вьюрков В.В., Орлюковский А.А.* Оценка эффективной пороговой энергии межзонной ударной ионизации в глубокосубмикронном кремниевом n-канальном МОП-транзисторе // *Микроэлектроника.* 2014. Т. 43. № 3. С. 188–192.
24. *Руденко М.К., Мяконьких А.В., Лукичев В.Ф.* Моделирование методом Монте-Карло дефектов профиля тренча в процессе глубокого криогенного травления кремния // *Микроэлектроника.* 2019. Т. 48. № 3. С. 191–200.
25. *Руденко М.К., Мяконьких А.В., Лукичев В.Ф.* Численное моделирование криогенного травления: модель с отложенной десорбцией // *Микроэлектроника.* 2021. Т. 50. № 1. С. 58–67.
26. *Рогожин А.Е., Сидоров Ф.А.* Моделирование процессов электронно-лучевой литографии // *Микроэлектроника.* 2020. Т. 49. № 2. С. 116–132.
27. *Dapor M.* Transport of Energetic Electrons in Solids, 2014. V. 257. Cham: Springer International Publishing.
28. *Marrian C.R.K.* Modeling of electron elastic and inelastic scattering // *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.* 1996. V. 14. № 6. P. 3864.
29. *Ding-Ju J., Zhen-Yu T.* A Monte Carlo Study of Low-Energy Electron Transport in Liquid Water: Influence of the Rutherford Formula and the Mott Model // *Chinese Phys. Lett.* 2010. V. 27. № 3. P. 033401.
30. *Dapor M.* Elastic scattering calculations for electrons and positrons in solid targets // *J. Appl. Phys.* 1996. V. 79. № 11. P. 8406–8411.
31. *Mott N.F., Massey H.S.W.* The Theory Of Atomic Collisions. Oxford University Press, London, 1949.
32. *Dapor M.* Elastic scattering of electrons and positrons by atoms: differential and transport cross section calculations // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. Apr.* 1995. V. 95. № 4. P. 470–476.
33. *Czyżewski Z., MacCallum D.O.N., Romig A., Joy D.C.* Calculations of Mott scattering cross section // *J. Appl. Phys.* Oct. 1990. V. 68. № 7. P. 3066–3072.
34. *Gauvin R., Drouin D.* A formula to compute total elastic mott cross-sections // *Scanning.* 1993. V. 15. № 3. P. 140–150.
35. *Salvat F., Jablonski A., Powell C.J.* Elsepa-Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // *Comput. Phys. Commun.* 2005. V. 165. № 2. P. 157–190.
36. *Thomas L.H.* The calculation of atomic fields // *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 1927. V. 23. № 5. P. 542–548.
37. *Fermi E.* No Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atome // *Rend. Accad. Naz. Lincei.* 1927. V. 6. P. 602–607.
38. *Bethe H., Jackiw R.* Intermediate Quantum Mechanics. New York - Amsterdam: CRC Press, 1986.
39. *Molière G.* Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen // *Zeitschrift für Naturforsch. A.* Mar. 1955. V. 10. № 3. P. 177–211.
40. *Thomas L.H.* Tables of statistical electron distributions for atoms with degree of ionization zero to four and of the corresponding electrostatic potentials // *J. Chem. Phys.* 1954. V. 22. № 10. P. 1758–1767.
41. *Bonham E.A., Strand T.G.* Analytical expressions for potentials of neutral thomas-fermi-dirac atoms and for

- the corresponding atomic scattering factors for x rays and electrons // *J. Chem. Phys.* 1963. V. 39. № 9. P. 2200–2204.
42. *Liberman D., Waber J.T., Cromer D.T.* Self-consistent-field dirac-slater wave functions for atoms and ions. I. Comparison with previous calculations // *Phys. Rev.* 1965. V. 137. № 1. P. A27–A34.
 43. *Liberman D.A., Cromer D.T., Waber J.T.* Relativistic self-consistent field program for atoms and ions // *Comput. Phys. Commun.* 1971. V. 2. № 2. P. 107–113.
 44. *Salvat F., Martí nez J.D., Mayol R., Parellada J.* Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ($Z = 1-92$) // *Phys. Rev. A.* 1987. V. 36. № 2. P. 467–474.
 45. *Desclaux J.P.* A multiconfiguration relativistic DIRAC-FOCK program // *Comput. Phys. Commun.* Jan. 1975. V. 9. № 1. P. 31–45.
 46. *Fischer C.F., Godefroid M., Brage T., Jönsson P., Gaigalas G.* Advanced multiconfiguration methods for complex atoms: I. Energies and wave functions // *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* 2016. V. 49. № 18. P. 1–35.
 47. *Yates A.C.* Spin Polarization of Low-Energy Electrons Scattered Elastically from Atoms and Molecules // *Phys. Rev. Dec.* 1968. V. 176. № 1. P. 173–180.
 48. *Bransden B.H., McDowell M.R.C., Noble C.J., Scott T.* Equivalent exchange potentials in electron scattering // *J. Phys. B At. Mol. Phys.* Jun. 1976. V. 9. № 8. P. 1301–1317.
 49. *Slater J.C.* A simplification of the Hartree-Fock method // *Phys. Rev.* V. 81. № 3. P. 385–390. 1951.
 50. *Riley M.E., Truhlar D.G.* Approximations for the exchange potential in electron scattering // *J. Chem. Phys.* 1975. V. 63. № 5. P. 2182–2191.
 51. *Karnakov B.M., Krainov V.P.* WKB Approximation in Atomic Physics. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
 52. *Furness J.B., McCarthy I.E.* Semiphenomenological optical model for electron scattering on atoms // *J. Phys. B At. Mol. Phys.* Nov. 1973. V. 6. № 11. P. 2280–2291.
 53. *Salvat F.* Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms // *Phys. Rev. A – At. Mol. Opt. Phys.* 2003. V. 68. № 1. P. 17.
 54. *Weast R.C.*, Handbook of chemistry and physics, 49th ed // *Am. J. Med. Sci.* 1969. V. 257. № 6. P. 423.
 55. *Perdew J.P., Wang Y.*, Erratum: Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy (*Physical Review B* (1992) 45 (13244)) // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 98. № 7. P. 244–249. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.13244>
 56. *Salvat F., Jablonski A., Powell C.J.* Elsepa—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // *Comput. Phys. Commun.* Jan. 2005. V. 165. № 2. P. 157–190.
 57. *Tan Z., Xia Y., Liu X., Zhao M.* Monte-Carlo simulation of low-energy electron scattering in PMMA – Using stopping powers from dielectric formalism // *Microelectron. Eng.*, 2005. V. 77. № 3–4. P. 285–291.
 58. *Wang F., Li D.-J., Li X.-J., Cui W.-Z., Hu T.-C., Cao M.* Modelling energy deposition in polymethyl methacrylate with low-energy electron irradiation // *Micron.* 2022. V. 156. P. 103232.
 59. *Lee Y., Lee W., Chun K., Kim H.* New three dimensional simulator for low energy (~1 keV) electron beam systems // *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.*, 2002. V. 17. № 6. P. 2903.
 60. *Ciappa M.* Monte Carlo modeling in the low-energy domain of the secondary electron emission of polymethylmethacrylate for critical-dimension scanning electron microscopy // *J. Micro/Nanolithography, MEMS, MOEMS.* 2010. V. 9. № 2. P. 023001.
 61. *Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R.* Calculations of electron inelastic mean free paths. V. Data for 14 organic compounds over the 50–2000 eV range // *Surf. Interface Anal.* 1994. V. 21. № 3. P. 165–176.
 62. *Roberts R.F., Allara D.L., Pryde C.A., Buchanan D.N.E., Hobbs N.D.* Mean free path for inelastic scattering of 1.2 keV electrons in thin poly(methylmethacrylate) films // *Surf. Interface Anal.* 1980. V. 2. № 1. P. 5–10.
 63. *Tahir D. and Sari N.H.* Stopping powers and inelastic mean free path of 200 eV–50 keV electrons in polymer PMMA, PE, and PVC // *Appl. Radiat. Isot.* 2015. V. 95. P. 59–62.
 64. *Tan Z., Xia Y., Liu X., Zhao M., Zhang L.* A new calculation on the stopping power and mean free path for low energy electrons in toluene over energy range of 20–10000 eV // *Appl. Radiat. Isot.* 2009. V. 67. № 4. P. 625–629.
 65. *Fröhlich H.* Electrons in lattice fields // *Adv. Phys.*, Jul. 1954. V. 3. № 11. P. 325–361.
 66. *Llacer J., Garwin E.L.* Electron-Phonon Interaction in Alkali Halides. I. The Transport of Secondary Electrons with Energies between 0.25 and 7.5 eV // *J. Appl. Phys.* Jun. 1969. V. 40. № 7. P. 2766–2775.
 67. *Ganachaud J.P., Mokrani A.* Theoretical study of the secondary electron emission of insulating targets // *Surf. Sci.* Jul. 1995. V. 334. № 1–3. P. 329–341.
 68. *Dapor M.* Secondary electron emission yield calculation performed using two different Monte Carlo strategies // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* Jul. 2011. V. 269. № 14. P. 1668–1671.
 69. *Dapor M.* Role of the tail of high-energy secondary electrons in the Monte Carlo evaluation of the fraction of electrons backscattered from polymethylmethacrylate // *Appl. Surf. Sci.* Jan. 2017. V. 391. P. 3–11.
 70. *Bethe H.* Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie // *Ann. Phys.* 1930. V. 397. № 3. P. 325–400.
 71. *Bethe J., Ashkin H.* Experimental Nuclear Physics. New York: Wiley, 1953.
 72. *Rogozhin A.E., Sidorov F.A.* E-Beam Lithography Simulation Techniques // *Russ. Microelectron.* Mar. 2020. V. 49. № 2. P. 108–122.
 73. *Lindhard J.* On the properties of a gas of charged particles // *Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Mat-fys. Medd.* 1954. V. 28. P. 8.
 74. *Ritchie R.H.* Interaction of Charged Particles with a Degenerate Fermi-Dirac Electron Gas // *Phys. Rev.*, May 1959. V. 114. № 3. P. 644–654.

75. *Dapor M.* Energy loss of fast electrons impinging upon polymethylmethacrylate // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2015. V. 352. P. 190–194.
76. *Palik E.D.* Handbook of Optical Constants of Solids. USA: Academic Press, 1998.
77. *Ritsko J.J., Brillson L.J., Bigelow R.W., Fabish T.J.* Electron energy loss spectroscopy and the optical properties of polymethylmethacrylate from 1 to 300 eV // J. Chem. Phys. 1978. V. 69. № 9. P. 3931–3939.
78. *Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C.* X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50\text{--}30000\text{ eV}$, $Z = 1\text{--}92$ // At. Data Nucl. Data Tables. Jul. 1993. V. 54. № 2. P. 181–342.
79. *Henke B.L., Lee P., Tanaka T.J., Shimabukuro R.L., Fujikawa B.K.* Low-energy x-ray interaction coefficients: Photoabsorption, scattering, and reflection // At. Data Nucl. Data Tables. Jan. 1982. V. 27. № 1. P. 1–144.
80. *Biggs F., Lighthill R.* Analytical Approximations for X-Ray Cross Sections III // Natl. Tech. Inf. Serv. 1988.
81. *Fano U., Cooper J.W.* Spectral distribution of atomic oscillator strengths // Rev. Mod. Phys. 1968. V. 40. № 3. P. 441–507.
82. *Ashley J.C.* Simple model for electron inelastic mean free paths: Application to condensed organic materials // J. Electron Spectros. Relat. Phenomena, Jan. 1982. V. 28. № 2. P. 177–194.
83. *Ashley J.C.* Energy loss rate and inelastic mean free path of low-energy electrons and positrons in condensed matter // J. Electron Spectros. Relat. Phenomena. Jan. 1990. V. 50. № 2. P. 323–334.
84. *Ritchie R.H., Howie A.* Electron excitation and the optical potential in electron microscopy // Philos. Mag. 1977. V. 36. № 2. P. 463–481.
85. *Akkerman A., Boutboul T., Breskin A., Chechik R., Gibrakhterman A., Lifshitz Y.* Inelastic Electron Interactions in the Energy Range 50 eV to 10 keV in Insulators: Alkali Halides and Metal Oxides // Phys. Status Solidi. Dec. 1996. V. 198. № 2. P. 769–784.
86. *Valentin A., Raine M., Sauvestre J.E.* Inelastic cross-sections of low-energy electrons in silicon for the simulation of heavy ion tracks with the GEANT4-DNA toolkit // 2010. № 2. P. 80–85.
87. *Valentin A., Raine M., Sauvestre J.E., Gaillardin M., Paillet P.* Geant4 physics processes for microdosimetry simulation: Very low energy electromagnetic models for electrons in silicon // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2012. V. 288. P. 66–73.
88. *Mermin N.D.* Lindhard Dielectric Function in the Relaxation-Time Approximation // Phys. Rev. B. Mar. 1970. V. 1. № 5. P. 2362–2363.
89. *Dapor M.* Mermin Differential Inverse Inelastic Mean Free Path of Electrons in Polymethylmethacrylate // Front. Mater. 2015. V. 2. № April. P. 10–12.
90. *Vera P.De, Abril I., Garcia-Molina R.* Inelastic scattering of electron and light ion beams in organic polymers // J. Appl. Phys., 2011. V. 109. № 9.