
МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 621.382

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА, ПОГЛОЩЕННОЙ В ПММА И Si, С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ РАССЕЯНИЯ

© 2025 г. А. Е. Рогожин*, Ф. А. Сидоров**

Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН
Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”

*E-mail: rogozhin@ftian.ru

**E-mail: sidorov@ftian.ru

Поступила в редакцию 01.10.2024 г.

После доработки 20.02.2025 г.

Принята к публикации 20.02.2025 г.

В данной работе описывается моделирование рассеяния электронного пучка в полиметилметакрилате (ПММА) и кремнии (Si) методом Монте-Карло с использованием различных моделей рассеяния. Для каждого вещества при моделировании использовались три различные комбинации моделей упругого и неупругого рассеяния из числа наиболее распространенных, как с учетом генерации вторичных электронов, так и без него. В результате моделирования были получены распределения поглощенной энергии и распределения актов рассеяния по координате, анализ которых позволил выявить характерные особенности различных моделей рассеяния.

Ключевые слова: электронно-лучевая литография, моделирование методом Монте-Карло, распределения поглощения энергии

DOI: 10.31857/S0544126925010027, **EDN:** GILEOW

1. ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование рассеяния электронного пучка в резисте и подложке широко используется для определения необходимого профиля и дозы экспонирования в электронно-лучевой литографии [1–3]. Существующие алгоритмы моделирования процессов рассеяния включают в себя алгоритмы на основе кинетической теории и алгоритмы на основе метода Монте-Карло. Алгоритмы первой группы описывают рассеяние электронного пучка в терминах функции распределения, а потери энергии – как непрерывный процесс, характеризующийся потерями на единицу длины пути. При таком подходе само моделирование производится за счет решения кинетического уравнения Больцмана, что позволяет получить распределение поглощенной энергии. К преимуществам данного подхода можно отнести быстродействие и относительную простоту, к недостаткам – ограниченность по отношению моделям рассеяния, которые могут быть использованы при таком моделировании. В алгоритмах моделирования на основе метода Монте-Карло, в свою очередь, акты рассеяния электронов моделируются отдельно друг от друга. Это делает моделирова-

ние более ресурсоемким, но при этом также более универсальным и точным. В силу этого, именно алгоритмы на основе метода Монте-Карло использовались в данной работе.

Ранее были опубликованы обзорные работы, в которых рассматривались различные модели упругого и неупругого рассеяния электронного пучка в полиметилметакрилате (ПММА) и кремнии (Si), а также были описаны алгоритмы моделирования на основе кинетической теории транспорта и метода Монте-Карло [4, 5]. В частности, в данных работах приводились энергетические зависимости сечений упругого и неупругого рассеяния, полученные с использованием различных моделей. При этом, с практической точки зрения ключевой интерес представляют распределения, характеризующие рассеяние электронного пучка в веществе, получаемые в результате непосредственного проведения моделирования с использованием этих моделей [6]. Таким образом, логичным продолжением обзорных работ [4, 5] видится работа, в которой будут приведены результаты моделирования рассеяния электронного пучка в ПММА и Si методом Монте-Карло с использованием моделей, описанных ранее.

Для наглядности в первой части данной работы будут кратко описаны модели, с использованием которых проводилось моделирование рассеяния электронного пучка в ПММА и Si. Далее будет описан процесс моделирования и будут приведены распределения поглощенной энергии, полученные с использованием данных моделей.

2. МОДЕЛИ УПРУГОГО И НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ

Процессы рассеяния электронного пучка в веществе разделяют на две группы – упругое и неупругое рассеяние. Упругое рассеяние происходит в результате взаимодействия налетающего электрона с ядром атома, в результате чего изменяется направление движения электрона, энергия электрона при этом остается практически неизменной. В свою очередь, неупругое рассеяние включает все процессы взаимодействия между налетающим электроном и веществом, в которых электрон теряет энергию. Ранее было приведено подробное описание величин, характеризующих рассеяние (дифференциальное сечение рассеяния, средняя длина свободного пробега и др.) [4], поэтому для моделей, использовавшихся в данной работе, будут приведены лишь ключевые формулы.

2.1. Упругое рассеяние

Наиболее простой подход к расчету дифференциальных сечений упругого рассеяния электрона на ядре атома-мишени заключается в использовании формулы Резерфорда [7]:

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

где Z – зарядовое число атома, e – заряд электрона, E – энергия налетающего электрона, β – параметр экранирования поля ядра атомными электронами. Формула Резерфорда основана на классической теории рассеяния, и ее применение обосновано в основном в области высоких энергий [7]. В свою очередь, точный расчет сечений упругого рассеяния связан с решением уравнения Дирака для задачи рассеяния электрона в центральном статическом поле ядра (моттовские сечения) [8]. Дифференциальное сечение упругого рассеяния выражается через амплитуды рассеяния $f(x)$ и $g(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{Mott}}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \\ f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{i=0}^{\infty} \left[(i+1) \left(e^{2i\delta_l^+} - 1 \right) + i \left(e^{2i\delta_l^-} - 1 \right) \right] P_l(\cos\theta), \\ g(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{i=0}^{\infty} \left(e^{2i\delta_l^-} - e^{2i\delta_l^+} \right) P_l^1(\cos\theta), \end{aligned} \quad (2)$$

где k – волновое число, соответствующее налетающей частице, $P_l(\cos\theta)$ – полиномы Лежандра, $P_l^1(\cos\theta)$ – присоединенные функции Лежандра,

δ_l^+, δ_l^- – фазовые сдвиги парциальных волн, соответствующие значениям проекциям спина «вверх» и «вниз», соответственно.

2.2. Неупругое рассеяние

Неупругое рассеяние обусловлено ионизацией атомов, электронными, плазменными и фононными возбуждениями и другими процессами, приводящими к потерям энергии электрона в веществе. Исторически первые подходы к описанию потерь энергии основывались на формуле Бете, позволяющей рассчитать потери энергии на единицу длины пути:

$$-\left(\frac{dE}{ds} \right)_{Bethe} = \frac{2\pi e^4 N_A \rho Z}{AE} \ln \left(\frac{1.166E}{J} \right), \quad (3)$$

где N_A – число Авогадро, ρ – плотность вещества, Z и A – зарядовое число и молярная масса вещества, соответственно, e и E – заряд и энергия движущегося в веществе электрона, соответственно. Средний потенциал ионизации J может быть определен по формуле [9]:

$$J = Z \left(9.76 + 58.8Z^{-1.19} \right). \quad (4)$$

В исходном виде формула Бете может быть применена только в области энергий $E > 6.338J$, и для устранения этого ограничения формула Бете может быть модифицирована [10]:

$$-\left(\frac{dE}{ds} \right)_{Bethe} = \frac{2\pi e^4 N_A \rho Z}{AE} \ln \left(\frac{1.166(E + KJ)}{J} \right), \quad (5)$$

$$K = 0.734Z^{0.037}.$$

Более точным является описание потерь энергии как дискретного процесса, что, в свою очередь, требует определения дифференциального сечения неупротого рассеяния. В первых моделях дискретных потерь энергии было использовано предположение о том, что все потери энергии обусловлены ионизацией различных оболочек атома. При этом использовалась полуэмпирическая формула Гризинского [11] для дифференциального сечения однократной ионизации:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Delta E} &= \frac{\pi e^4}{\Delta E^3} \frac{E_B}{E} \left(\frac{E}{E + E_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\frac{E_B}{E_B + \Delta E}} \times \\ &\times \left\{ \frac{\Delta E}{E_B} \left(1 - \frac{E_B}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left(2.7 + \left(\frac{E - \Delta E}{E_B} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

где E – энергия налетающего электрона, ΔE – потери энергии при ионизации, E_B – энергия связи на j -й оболочке атома. При этом стоит отметить, что формула Гризинского основана на предположении об изотропном распределении скоростей электронов оболочки, поэтому ее использование для описания неупротого рассеяния на валентных электронах не вполне корректно.

Современные модели неупругого рассеяния основаны на использовании функции потерь энергии (Energy Loss Function, ELF):

$$ELF(q, \omega) \equiv \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right], \quad (7)$$

где $\varepsilon(q, \omega)$ – комплексная диэлектрическая функция, q и \hbar – передаваемые среде импульс и энергия, соответственно. При таком подходе вещества рассматривается в целом (а не как совокупность атомов), и более корректным становится использование не сечений, а средней длины свободного пробега между последовательными актами неупругого рассеяния. При известной функции потерь энергии дифференциальная обратная длина свободного пробега может быть найдена по формуле

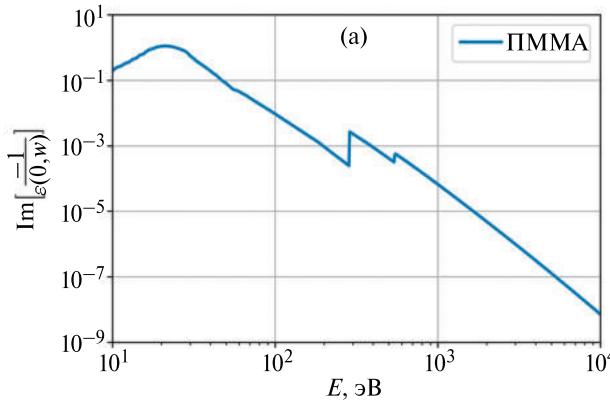
$$\frac{d\lambda_{inel}^{-1}}{d\hbar\omega} = \frac{1}{\pi E a_0} \int_{q_-}^{q_+} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] \frac{dq}{q}, \quad (8)$$

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

где E – энергия налетающего электрона, m – масса электрона и a_0 – боровский радиус. Теоретический расчет функции $\varepsilon(q, \omega)$ достаточно сложен, поэтому часто используются подходы на основе оптической функции потерь энергии (рис. 1):

$$OELF(\omega) \equiv ELF(0, \omega) = \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right]. \quad (9)$$

Зависимость $\varepsilon(0, \omega)$ может быть определена методом спектроскопии характеристических потерь электронов или на основе коэффициентов преломления и поглощения (n и k , соответственно) и в дальнейшем продолжена в область $q > 0$. Один из способов такого продолжения заключается в приближении оптической функции потерь энергии суммой осцилляторов Друде [12] с параметрами E_i , Γ_i и A_i :



$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \sum_i \frac{A_i \Gamma_i \hbar \omega}{\left[E_i^2 - (\hbar \omega)^2 \right]^2 + (\Gamma_i \hbar \omega)^2}, \quad (10)$$

и использования квадратичного закона дисперсии:

$$E_i(q) = E_i + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad (11)$$

что в дальнейшем позволяет построить функцию потерь энергии:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \sum_i \frac{A_i \Gamma_i \hbar \omega}{\left[\left(E_i + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right)^2 - (\hbar \omega)^2 \right]^2 + (\Gamma_i \hbar \omega)^2}. \quad (12)$$

Следует отметить, что именно такой подход используется для описания процессов неупругого рассеяния в модуле «MuElec», входящим в состав пакета Geant4 и предназначенном для моделирования процессов в области микроэлектроники.

Более точным подходом к построению функции потерь энергии является подход на основе диэлектрической функции Мермина [13] для столкновительной плазмы:

$$\varepsilon_M(q, \omega) = \frac{(1 + i\gamma/\omega)[\varepsilon_L(q, \omega + i\gamma) - 1]}{1 + (i\gamma/\omega)[\varepsilon_L(q, \omega + i\gamma) - 1]/[\varepsilon_L(q, 0) - 1]}, \quad (13)$$

где γ – постоянная затухания, $\varepsilon_L(q, \omega)$ – диэлектрическая функция Линдхарда, подробно описанная в работе [5].

Как и в предыдущем подходе, функция потерь энергии вещества описывается суммой функций потерь отдельных осцилляторов, и ее построение

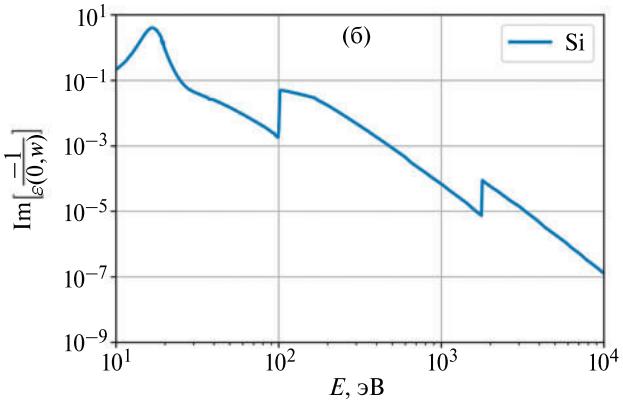


Рис. 1. Оптические функции потерь энергии ПММА (а) и Si (б), рассчитанные на основе данных, приведенных в работах [20–22]

проводится в два этапа. Сначала оптическая функция потерь энергии вещества аппроксимируется суммой функций потерь энергии Мермина (осцилляторов Мермина) со значением $q = 0$:

$$\operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \omega)} \right] = \sum_i A_i \operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_M(\omega_i, \gamma_i, q=0, \omega)} \right], \quad (14)$$

что позволяет получить параметры A_i , ω_i и γ_i отдельных осцилляторов. Далее на основе этих параметров составляется функция потерь энергии:

$$\operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] = \sum_i A_i \operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_M(\omega_i, \gamma_i, q, \omega)} \right]. \quad (15)$$

Помимо этого, современные модели рассеяния электронного пучка в ПММА включают в себя квазиупругие процессы — электрон-фононное и электрон-поляронное рассеяние. Согласно существующим работам, обратная длина свободного пробега при электрон-фононном рассеянии может быть выражена формулой

$$\lambda_{\text{ph}}^{-1} = \frac{1}{a_0} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \frac{\hbar \omega}{E} \frac{n(T) + 1}{2} \ln \left[\frac{1 + \sqrt{1 - \hbar \omega/E}}{1 - \sqrt{1 - \hbar \omega/E}} \right], \quad (16)$$

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

$$n(T) = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}. \quad (17)$$

В свою очередь, обратная длина свободного пробега при электрон-поляронном рассеянии может быть описана экспоненциальной функцией [14]:

$$\lambda_{\text{pol}}^{-1} = C e^{-\gamma E}. \quad (18)$$

Установлено, что для ПММА параметры C и γ могут быть приняты равными 0.1 нм^{-1} и 0.15 эВ^{-1} , соответственно [7].

3. МОДЕЛИ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ПММА И Si

На основе вышеописанных моделей упругого и неупругого рассеяния электронов в веществе были составлены различные модели рассеяния электронного пучка в ПММА и Si, что в дальнейшем позволило реализовать и применить соответствующие алгоритмы моделирования. Далее приведено подробное описание моделей рассеяния, на основе которых в рамках данной работы были реализованы алгоритмы моделирования.

3.1. Резерфорд–Бете (PMMA, Si)

В данной модели сечения упругого рассеяния рассчитываются по формуле Резерфорда, потери энергии на единицу длины траектории — по модифицированной формуле Бете (5). Значение среднего потенциала ионизации принято равным 65.5 эВ для ПММА [15] и 172.3 эВ для Si (данное значение рассчитано по формуле 4). Моделируется только рассеяние первичных электронов, используется энергия отсечки, равная 10 эВ (энергия, при достижении которой считается, что электрон останавливается, и его энергия передается среде).

3.2. Мотт–Друде (PMMA, Si)

В данной модели используются моттовские сечения упругого рассеяния, дифференциальная обратная длина свободного пробега при неупругом рассеянии определяется на основе функции потерь энергии, представленной суммой четырех (ПММА) и пяти (Si) осцилляторов Друде с квадратичным законом дисперсии (12). Для ПММА использовались параметры осцилляторов, приведенные в работе [12], для Si параметры осцилляторов были получены путем аппроксимации оптической функции потерь энергии. Параметры осцилляторов, использованные для ПММА и Si, приведены в табл. 1. Моделируется рассеяние как первичных, так и всех вторичных электронов, при моделировании генерации вторичного электрона для ПММА энергией связи электрона пренебрегается согласно [7], для Si считается, что энергия связи передается среде. Для ПММА энергия отсечки принята равной 20 эВ, что обеспечивает компромисс между точностью и быстродействием алгоритма модели-

Таблица 1. Параметры осцилляторов Друде для ПММА и Si, использовавшиеся в данной работе

i	ПММА			Si		
	E_i (эВ)	Γ_i (эВ)	A_i (эВ ²)	E_i (эВ)	Γ_i (эВ)	A_i (эВ ²)
1	19.46	8.77	100.0	16.7	2.72	235.0
2	25.84	14.75	286.5	20.0	114.0	39.0
3	300.0	140.0	80.0	102.0	120.0	667.0
4	550.0	300.0	55.0	151.0	118.0	190.0
5	—	—	—	1828.0	468.0	83.0

рования. Для Si энергия отсечки принята равной 16.7 эВ, что равняется энергии возбуждения плазмона в Si.

3.3. Мотт–Гризинский (Si)

Данная модель применялась только для Si. В ней используются моттовские сечения упругого рассеяния, дифференциальная обратная длина свободного пробега при неупругом рассеянии определяется по формуле Гризинского (6). Для десяти оставшихся электронов атома Si ($1s^2, 2s^2, 2p^6$) используются значения энергии связи, равные 1844, 154, и 104 эВ [16], соответственно, для четырех валентных электронов – значение энергии связи, равное 8 эВ [17]. Моделируется рассеяние как первичных, так и всех вторичных электронов, при моделировании генерации вторичного электрона считается, что энергия связи передается среде. Энергия отсечки принята равной 10 эВ.

3.4. Мотт–Мермин (ПММА)

Данная модель применялась только для ПММА. В ней используются моттовские сечения упругого рассеяния, дифференциальная обратная длина свободного пробега при неупругом электрон-электронном рассеянии определяется на основе функции потерь энергии, представленной суммой трех осцилляторов Мермина (15). Параметры осцилляторов были взяты из работы [18] (табл. 2). Моделируется рассеяние как первичных, так и всех вторичных электронов, при моделировании генерации вторичного электрона энергией связи электрона пренебрегается согласно работе [7]. Помимо электрон-электронного рассеяния также моделируется электрон-фононное и электрон-поляронное рассеяния. Считается, что при электрон-поляронном рассеянии электрон останавливается, и его энергия передается среде [7].

Таблица 2. Параметры осцилляторов Мермина для ПММА, использовавшиеся в данной работе

i	\hbar (эВ)	\hbar (эВ)	A_i
1	19.13	9.03	2.59×10^{-1}
2	25.36	14.34	4.46×10^{-1}
3	70.75	48.98	4.44×10^{-3}

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ПММА И Si

Для каждой из вышеописанных моделей рассеяния электронного пучка в ПММА и Si методом Монте-Карло было промоделировано рассеяние электронного пучка, содержащего 50,000 первичных электронов с начальной энергией 1, 5 и 25 кэВ. На основе промоделированных траекторий первичных и вторичных электронов были получены распределения выделившейся энергии по глубине и радиальной координате (расстояние от оси пучка) для ПММА (рис. 2, 3) и Si (рис. 4, 5). Анализ полученных распределений позволил сделать несколько выводов относительно использования вышеописанных моделей.

Во-первых, использование наиболее простой модели “Резерфорд–Бете” приводит к более узким распределениям поглощения энергии по отношению к распределениям, получаемых с использованием других моделей. Данное расхождение особенно заметно при низких энергиях электронного пучка, при этом оно уменьшается с ростом энергии. Также видно, что при высоких энергиях модель “Резерфорд–Бете” лучше описывает рассеяния в Si, для которого значение среднего потенциала ионизации было одним, в отличие от ПММА, для которого данное значение усреднялось по всем атомам.

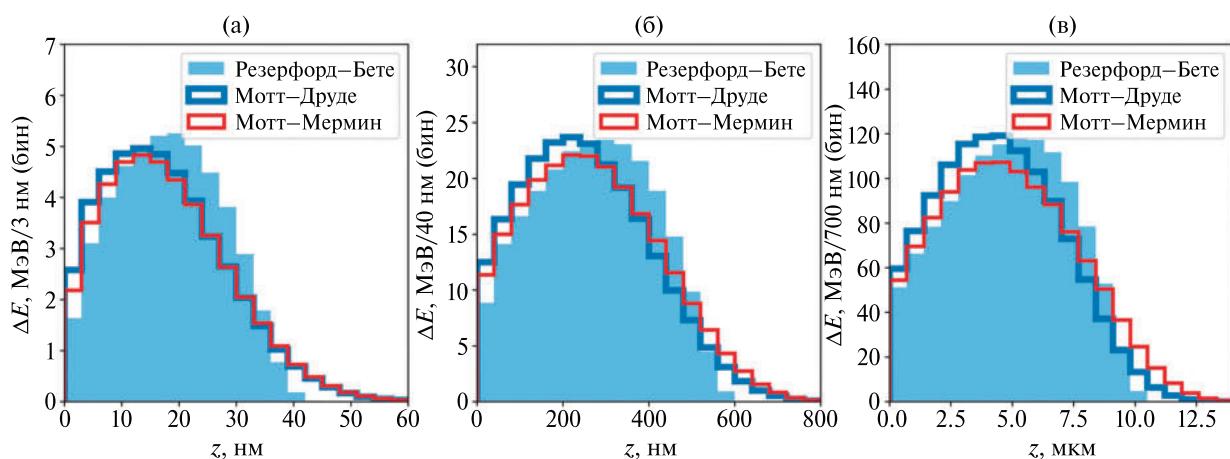


Рис. 2. Распределения поглощения энергии электронного пучка в слое ПММА по глубине (z). Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

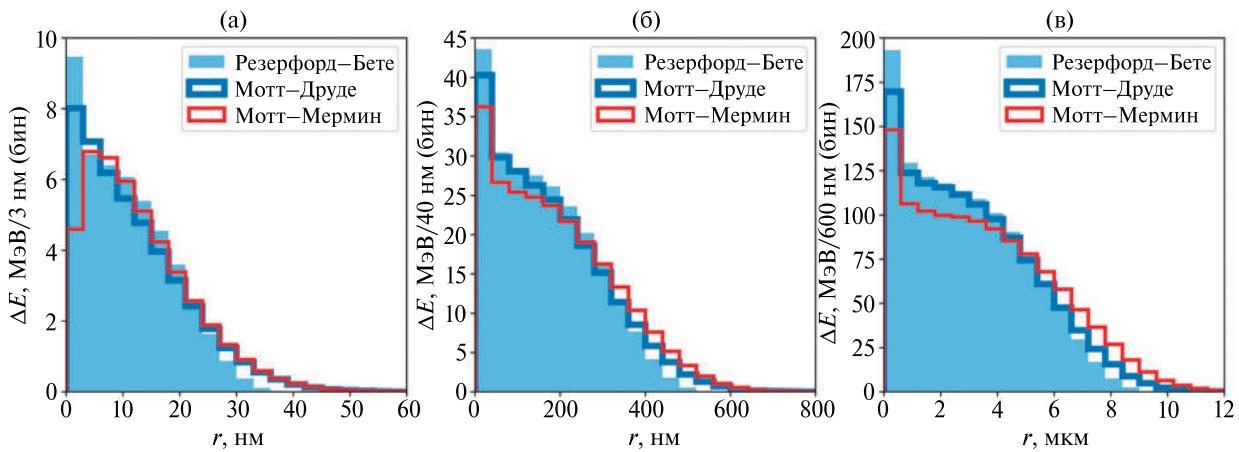


Рис. 3. Распределения поглощения энергии электронного пучка в слое ПММА по радиальной координате (расстояние от оси пучка, r). Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

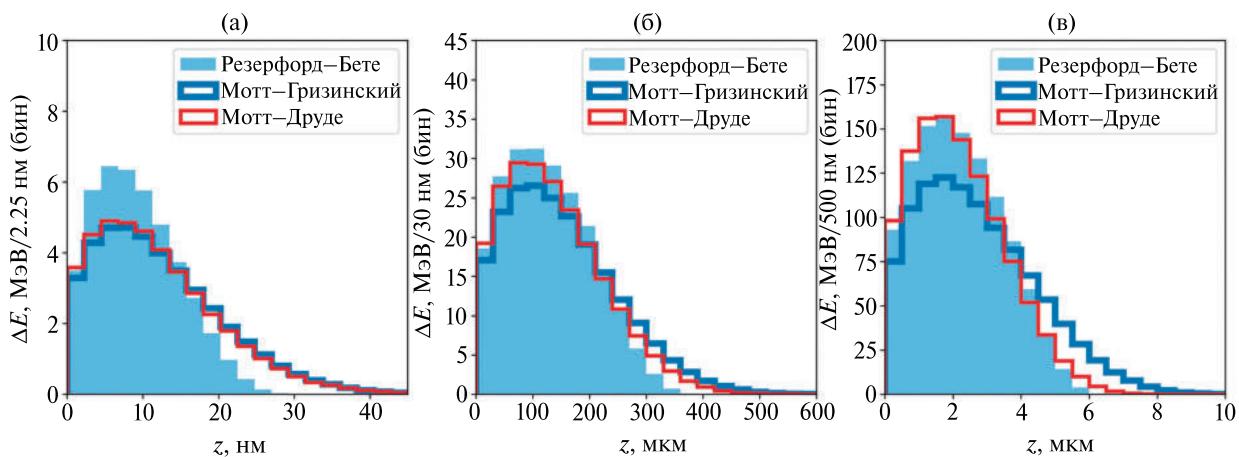


Рис. 4. Распределения поглощения энергии электронного пучка в слое Si по глубине (z). Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

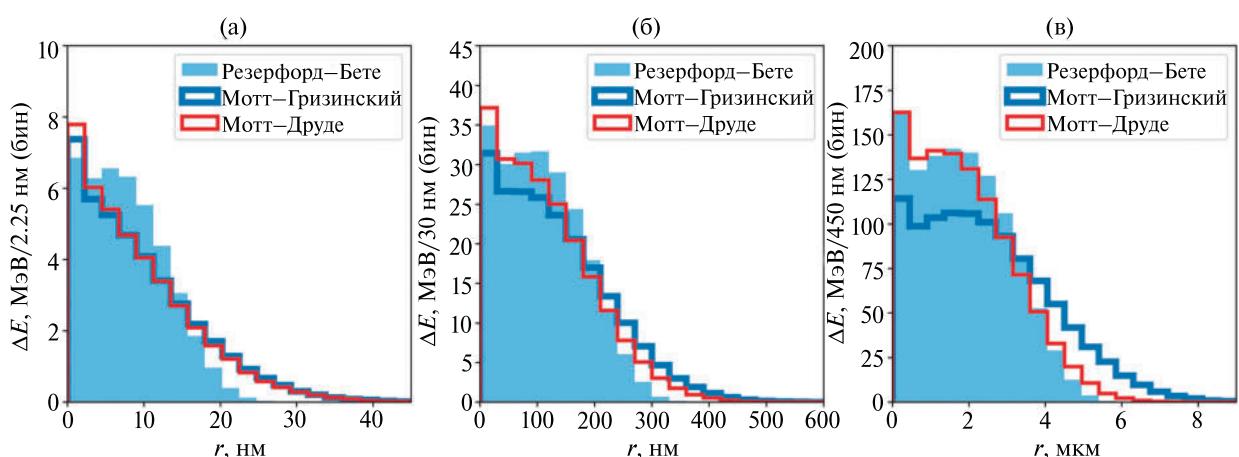


Рис. 5. Распределения поглощения энергии электронного пучка в слое Si по радиальной координате (расстояние от оси пучка, r). Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

Во-вторых, распределения поглощенной энергии в Si, полученные с использованием модели “Мотт–Гризинский”, при низких энергиях электронного пучка в достаточной степени согласуются с распределениями, соответствующими более точной модели “Мотт–Друде”. При этом, с ростом энергии расхождение между моделями увеличивается. Судя по всему, с точки зрения рассеяния налетающего электрона описание слабо связанных валентных электронов моделью, относящейся к электронам внутренних оболочек, уместно лишь в области низких энергий.

В-третьих, модели на основе осцилляторов Друде и Мермина (“Мотт–Друде” и “Мотт–Мермин”), использовавшиеся для ПММА, обеспечивают достаточно близкие распределения поглощения энергии. Учитывая, что расчет функции потерь энергии для осцилляторов Мермина явля-

ется более трудоемким, чем для осцилляторов Друде, универсальная модель “Мотт–Друде” может оказаться оптимальной для широкого круга задач.

Как уже было отмечено, в большинстве случаев именно распределения энергии, поглощенной в слое вещества, представляют ключевой интерес. Однако, в некоторых случаях моделирование производится для расчета более специфичных пространственных распределений [1, 19]. В этих целях на основе промоделированных траекторий первичных и вторичных электронов были также получены распределения по глубине проникновения электронного пучка в ПММА и Si (рис. 6, 7). Данные распределения показывают, что отмеченное ранее улучшение точности модели “Резерфорд–Бете” в области высоких энергий относится лишь к описанию процессов потерь энергии, а не всего рассеяния в целом.

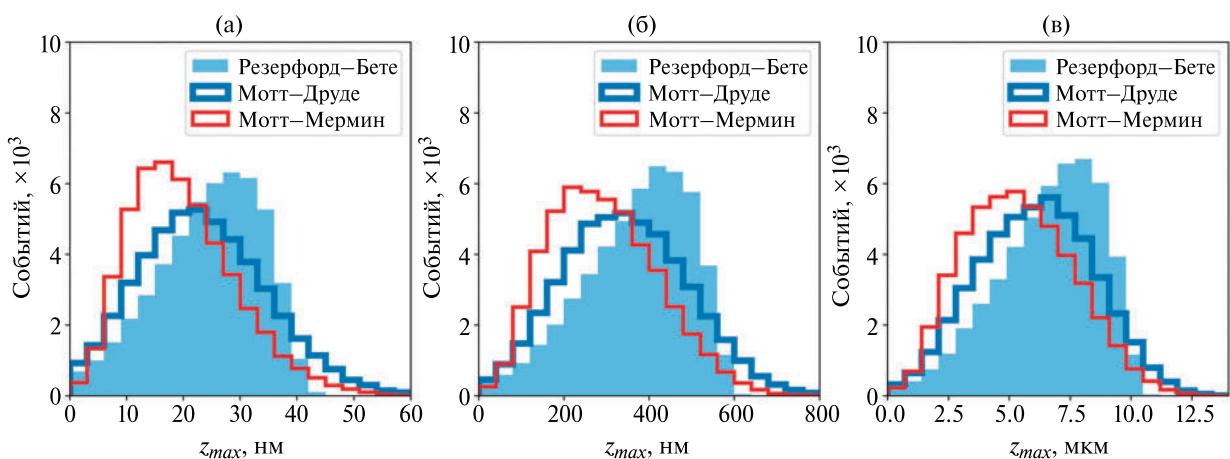


Рис. 6. Распределения максимальной глубины проникновения электронного пучка (z_{max}) в ПММА. Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

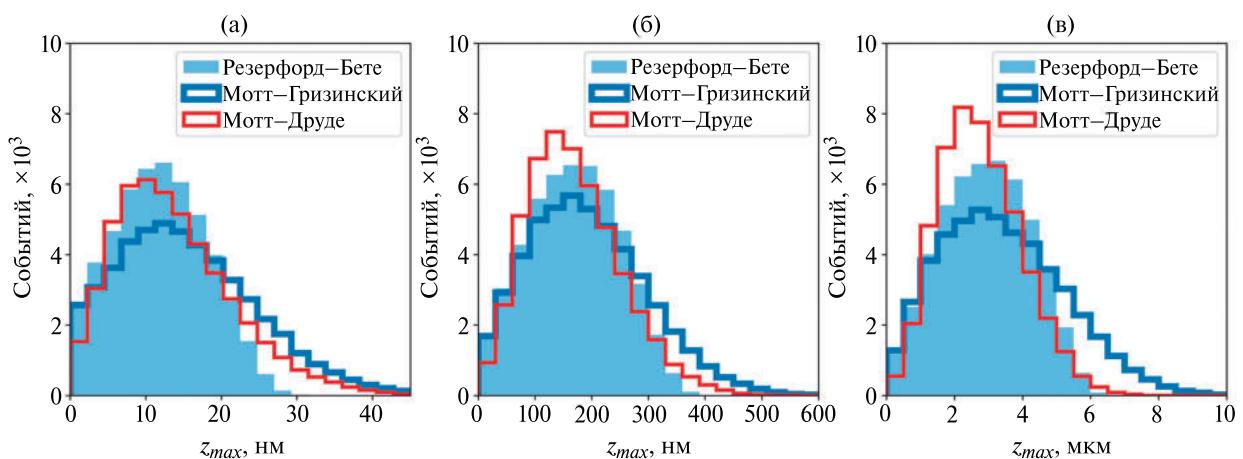


Рис. 7. Распределения максимальной глубины проникновения электронного пучка (z_{max}) в Si. Начальная энергия электронов в пучке составляет 1 кэВ (а), 5 кэВ (б) и 25 кэВ (в)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная работа является логическим продолжением опубликованных ранее обзорных статей, посвященных методам моделирования и моделям упругого и неупругого рассеяния [4, 5]. Помимо прочего, в данных работах приводились энергетические зависимости сечений упругого и неупругого рассеяния, полученные с использованием различных моделей. Однако, с практической точки зрения ключевой интерес представляют распределения, характеризующие рассеяние электронного пучка в веществе, получаемые в результате непосредственного проведения моделирования с использованием этих моделей. Ввиду этого данная работа посвящена моделирования рассеяния электронного пучка в ПММА и Si методом Монте-Карло с использованием различных моделей упругого и неупругого рассеяния. При моделировании для каждого вещества использовались алгоритмы на основе трех различных комбинаций моделей упругого и неупругого рассеяния из числа наиболее распространенных. В частности, для ПММА и Si было проведено моделирование на основе алгоритма с резерфордовскими сечениями упругого рассеяния и потерями энергии, вычисляемыми по формуле Бете (в силу простоты и широкой распространенности такого подхода). Также, для обоих материалов был использован алгоритм с моттовскими сечениями упругого рассеяния и дифференциальной обратной длиной свободного пробега при неупругом рассеянии, рассчитываемой на основе модели осцилляторов Друде (как достаточно современный и точный алгоритм моделирования). В результате моделирования были получены распределения поглощенной энергии электронного пучка и распределения глубины проникновения электронного пучка в ПММА и Si, анализ которых позволил выявить характерные особенности различных моделей.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *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. Proc. Meas. Phen.* 2006, V. 24, № 2. P. 768–779.
2. *Cui Z.* Monte Carlo simulation of electron beam lithography on topographical substrates // *Microelectron. Eng.* 1998, V. 41. P. 175–178.
3. *Mladenov G.M., Vutova K.J., Koleva E.G.* Computer Simulation of Electron and Ion Beam Lithography of Nanostructures // *Phys. Chem. Sol. St.* 2009, V. 3. P. 707–714.
4. *Рогожин А.Е., Сидоров Ф.А.* Моделирование процессов электронно-лучевой литографии // Микроэлектроника 2020, Т. 49, № 2. С. 116–132.
5. *Рогожин А.Е., Сидоров Ф.А.* Сечения процессов рассеяния при электронно-лучевой литографии // Микроэлектроника 2023, Т. 52, № 2. С. 110–126.
6. *Greeneich J.S.* Developer Characteristics of Poly-(Methyl Methacrylate) Electron Resist // *J. Electrochem. Soc.* 1975, V. 122, № 7. P. 970.
7. *Dapor M.* Transport of Energetic Electrons in Solids: Computer Simulation with Applications to Materials Analysis and Characterization // Springer Nature 2023, V. 290.
8. *Czyżewski Z. et al.* Calculations of Mott scattering cross section // *J. Appl. Phys.* 1990, V. 68, № 7. P. 3066–3072.
9. *Seltzer S.M., Berger M.J.* Evaluation of the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons // *Int. J. Appl. Radiat. Isot.* 1982, V. 33, № 11. P. 1189–1218.
10. *Joy D.C., Luo S.* An empirical stopping power relationship for low-energy electrons // *Scanning* 1989, V. 11, № 4. P. 176–180.
11. *Gryziński M.* Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions // *Phys. Rev.* 1965, V. 138, № 2A.
12. *Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C.* X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50\text{--}30,000$ eV, $Z = 1\text{--}92$ // *At. Dat. Nucl. Dat. Tabl.* 1993, V. 54, № 2. P. 181–342.
13. *Ritsko J.J. et al.* 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.
14. *Palik E.D.* Handbook of Optical Constants of Solids // *Handbook of Optical Constants of Solids* ed. Palik E. D. USA: Academic Press, 1998.
15. *Dapor M.* Energy loss of fast electrons impinging upon polymethylmethacrylate // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*. 2015, V. 352. P. 190–194.
16. *Dapor M.* Mermin Differential Inverse Inelastic Mean Free Path of Electrons in Polymethylmethacrylate // *Front. Mater.* 2015, V. 2. P. 1.
17. *Ganachaud J.P., Mokrani A.* Theoretical study of the secondary electron emission of insulating targets // *Surf. Sci.* 1995, V. 334, № 1. P. 329–341.
18. *Tan Z. et al.* Monte-Carlo simulation of low-energy electron scattering in PMMA – Using stopping powers from dielectric formalism // *Microelectron. Eng.* 2005, V. 77, № 3. P. 285–291.

19. *Lotz W.* Subshell Binding Energies of Atoms and Ions from Hydrogen to Zinc* // *J. Opt. Soc. Am.* 1968, V. 58, № 7. P. 915.
20. *Valkealahti S., Nieminen R.M.* Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids // *Appl. Phys. A* 1983, V. 32, № 2. P. 95–106.
21. *de Vera P., Abril I., Garcia-Molina R.* Inelastic scattering of electron and light ion beams in organic polymers // *J. Appl. Phys.* 2011, V. 109, № 9. P. 094901.
22. *Sidorov F. et al.* Direct Monte-Carlo simulation of dry e-beam etching of resist // *Microelectron. Eng.* 2020, Vol. 227. P. 111313.

CALCULATION OF DISTRIBUTIONS OF ELECTRON BEAM ENERGY ABSORBED IN PMMA AND Si USING VARIOUS SCATTERING MODELS

© 2025 A. E. Rogozhin*, F. A. Sidorov**

NRC “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

*E-mail: rogozhin@ftian.ru

**E-mail: sidorov@ftian.ru

This paper describes the simulation of electron beam scattering in polymethylmethacrylate (PMMA) and silicon (Si) using Monte Carlo method. The simulation used various scattering models, including both elastic and inelastic models, with and without secondary electron generation taken into account. For each material, three combinations of scattering models were tested in simulation. As a result, the distributions of absorbed energy and scattering events along the coordinate were obtained. The analysis of these results revealed the characteristic features of each scattering model.

Keywords: e-beam lithography, Monte-Carlo simulation, energy deposition

REFERENCES

1. *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. Proc. Meas. Phen.* 2006, V. 24, № 2. P. 768–779.
<https://doi.org/10.1116/1.2181580>
2. *Cui Z.* Monte Carlo simulation of electron beam lithography on topographical substrates // *Microelectron. Eng.* 1998, V. 41. P. 175–178.
[https://doi.org/10.1016/S0167-9317\(98\)00039-2](https://doi.org/10.1016/S0167-9317(98)00039-2)
3. *Mladenov G.M., Vutova K.J., Koleva E.G.* Computer Simulation of Electron and Ion Beam Lithography of Nanostructures // *Phys. Chem. Sol. St.* 2009, V. 3. P. 707–714. ISSN 1729-4428.
4. *Rogozhin A.E., and Sidorov F.A.* E-beam lithography simulation techniques // *Russ. Microelectron.* 2020, V. 49, № 2. P. 108–122.
<https://doi.org/10.1134/S1063739720010096>
5. *Rogozhin A.E., Sidorov F.A.* Cross Sections of Scattering Processes in Electron-Beam Lithography // *Russ. Microelectron.* 2023. V. 52. № 2. P. 57–73.
<https://doi.org/10.1134/S1063739723700300>
6. *Greeneich J.S.* Developer Characteristics of Poly-(Methyl Methacrylate) Electron Resist // *J. Electrochem. Soc.* 1975, V. 122, № 7. P. 970.
<https://doi.org/10.1149/1.2134380>
7. *Dapor M.* Transport of Energetic Electrons in Solids: Computer Simulation with Applications to Materials Analysis and Characterization // *Springer Nature* 2023, V. 290. ISSN 0081-3869.
8. *Czyżewski Z. et al.* Calculations of Mott scattering cross section // *J. Appl. Phys.* 1990, V. 68, № 7, P. 3066–3072.
<https://doi.org/10.1063/1.346400>
9. *Seltzer S.M., Berger M.J.* Evaluation of the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons // *Int. J. Appl. Radiat. Isot.* 1982, V. 33, № 11. P. 1189–1218.
[https://doi.org/10.1016/0020-708X\(82\)90244-7](https://doi.org/10.1016/0020-708X(82)90244-7)
10. *Joy D.C., Luo S.* An empirical stopping power relationship for low-energy electrons // *Scanning* 1989, V. 11, № 4. P. 176–180.
<https://doi.org/10.1002/SCA.4950110404>
11. *Gryzinski M.* Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions // *Phys. Rev.* 1965, V. 138, № 2A.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A336>
12. *Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C.* X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50\text{--}30,000 \text{ eV}$, $Z = 1\text{--}92$ // *At. Dat. Nucl. Dat. Tabl.* 1993, V. 54, № 2. P. 181–342.
<https://doi.org/10.1006/adnd.1993.1013>
13. *Ritsko J.J. et al.* 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.
<https://doi.org/10.1063/1.437131>
14. *Palik E.D.* Handbook of Optical Constants of Solids // Handbook of Optical Constants of Solids ed. Palik E.D. USA: Academic Press, 1998. ISBN 978-0125444231
15. *Dapor M.* Energy loss of fast electrons impinging upon polymethylmethacrylate // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B.* 2015, V. 352. P. 190–194.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2014.11.101>
16. *Dapor M.* Mermin Differential Inverse Inelastic Mean Free Path of Electrons in Polymethylmethacrylate // *Front. Mater.* 2015, V. 2. P. 1.
<https://doi.org/10.3389/fmats.2015.00027>
17. *Ganachaud J.P., Mokrani A.* Theoretical study of the secondary electron emission of insulating targets // *Surf. Sci.* 1995, V. 334, № 1. P. 329–341.
[https://doi.org/10.1016/0039-6028\(95\)00474-2](https://doi.org/10.1016/0039-6028(95)00474-2)
18. *Tan Z. et al.* Monte-Carlo simulation of low-energy electron scattering in PMMA – Using stopping powers from dielectric formalism // *Microelectron. Eng.* 2005, V. 77, № 3. P. 285–291.
<https://doi.org/10.1016/j.mee.2004.11.009>
19. *Lotz W.* Subshell Binding Energies of Atoms and Ions from Hydrogen to Zinc // *J. Opt. Soc. Am.* 1968, V. 58, № 7. P. 915.
<https://doi.org/10.1364/JOSA.58.000915>
20. *Valkealahti S., Nieminen R.M.* Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids // *Appl. Phys. A* 1983, V. 32, № 2. P. 95–106.
<https://doi.org/10.1007/BF00617834>
21. *de Vera P., Abril I., Garcia-Molina R.* Inelastic scattering of electron and light ion beams in organic polymers // *J. Appl. Phys.* 2011, V. 109, № 9. P. 094901.
<https://doi.org/10.1063/1.3581120>
22. *Sidorov F. et al.* Direct Monte-Carlo simulation of dry e-beam etching of resist // *Microelectron. Eng.* 2020, Vol. 227. P. 111313.crystal at direct and alternating current // *Physics of the Solid State.* 2022. V. 64. No 4. P. 426–433.
<https://doi.org/10.1016/j.mee.2020.111313>