

# 低能束作用下衬底上超薄膜背散射电子发射

谭震宇<sup>1)</sup> 夏日源<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 山东大学电气工程学院, 济南 250061)

<sup>2)</sup> 山东大学物理与微电子学院, 济南 250100)

(2001 年 11 月 16 日收到, 2001 年 12 月 27 日收到修改稿)

应用 Monte Carlo 方法模拟千电子伏低能束作用下, 不同衬底上不同薄膜背散射电子发射. 应用 Mott 散射截面和 Joy 方法修正的 Bethe 方程描述和计算低能电子在固体中弹性和非弹性散射, 引入边界方程, 修正穿越薄膜与衬底界面的电子散射路径. 计算分析了薄膜背散射系数  $\eta$  随薄膜厚度  $D$  的变化和规律, 以及不同情况下  $\eta$ - $D$  线性区范围的分布及其定量结果  $D_{\max}$ . 计算了背散射电子角分布和空间密度分布.

关键词: 背散射电子, Monte Carlo 方法, 超薄膜

PACC: 3480, 4180D, 6890

## 1. 引 言

薄膜技术在现代材料科学、微电子学器件和生物科学中广泛应用. 多年来, 薄膜厚度测定一直是从事电子显微学、电子探针显微分析的学者所致力的研究课题<sup>[1-5]</sup>. 现代材料科学的发展及半导体技术中日益微型化过程使制备的薄膜厚度越来越小, 已达到几十纳米, 甚至更小的厚度, 称为超薄膜<sup>[4-7]</sup> (ultra-thin film). 因此, 超薄膜厚度的测定日益引起人们的重视, 建立一个高厚度分辨率测定方法已成为重要的研究课题. 电子背散射方法是薄膜厚度测定的一个重要方法. 当电子束能  $E_0$  为几十千电子伏量级时, 该方法测定薄膜厚度的原理是基于薄膜背散射系数  $\eta$  与薄膜厚度  $D$  之间存在的线性关系. 这一方法的应用需要分析  $\eta$ - $D$  曲线线性区分布及范围  $D_{\max}$ , 并由大量实验测定或 Monte Carlo 方法模拟计算给出  $D_{\max}$ . 实验研究和理论分析均表明, 降低束能是提高超薄膜测定厚度分辨率的有效方法. 如 Schlichting 等<sup>[5]</sup> 基于测量衬底上薄膜一定出射角范围背散射电子能谱, 测定超薄膜厚度, 就表明当束能降至几千电子伏 (低能束) 时, 可获得纳米或亚纳米的高厚度分辨率. 应用电子背散射方法测定基于一定衬底上超薄膜 (记为薄膜/衬底) 厚度, 在千电子伏低能束作用下, 背散射电子的发射及表面空间分布、薄膜背散射系数随薄膜厚度的变化、线性区范围的分布及其定量结果  $D_{\max}$  等均需进一步研究. 本文应用 Monte Carlo 方法, 模拟千电子伏低能束作用下, 不

同衬底上不同薄膜背散射电子发射. 分析了电子背散射系数随薄膜厚度的变化、线性区范围的分布及其定量结果, 计算了背散射电子角分布及表面空间密度分布.

## 2. Monte Carlo 模拟方法

一定能量的电子入射到固体中, 电子与固体的相互作用可归结为电子在固体中的弹性和非弹性散射. 低能电子在固体中的弹性散射用较严格的 Mott 截面描述<sup>[8]</sup>. Mott 微分截面为

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad (1)$$

并按文献 [9] 的方法计算.

低能电子非弹性散射基于能量损失的连续减速近似, 应用 Joy 方法<sup>[10]</sup> 修正的 Bethe 方程进行计算:

$$-\frac{dE}{dS} = \frac{2\pi e^4}{E} \frac{\rho N_A}{A} Z \ln \left( K + \frac{1.166E}{J} \right), \quad (2)$$

其中  $A$ ,  $\rho$ ,  $Z$  以及  $J$  分别为介质的原子量、密度、原子序数和电离电位,  $N_A$  为 Avogadro 常数,  $K$  为引入的修正系数, Al 取 0.815, Cu 以上元素近似取 1.0.

能量为  $E$  的电子在固体中发生弹性散射, 总散射截面  $\sigma_T$  按下式由数值积分, 得到

$$\sigma_T = \int_0^\pi (|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2) 2\pi \sin\theta d\theta. \quad (3)$$

电子散射步长  $S$  由如下随机抽样确定:

$$S = -\frac{A}{\rho N \sigma_T} \ln R, \quad (4)$$

其中  $R$  为  $(0, 1)$  上均匀分布的随机数. 该步长电子非弹性散射能量损失  $\Delta E$  根据 (2) 式进行计算. 电子弹性散射角  $\theta$ 、散射方位角  $\phi$  同样由随机抽样产生:

$$R = \int_0^\theta \left( \frac{d\alpha(\theta)}{d\Omega} \right) \sin\theta d\theta / \int_0^\pi \left( \frac{d\alpha(\theta)}{d\Omega} \right) \sin\theta d\theta, \quad (5)$$

$$\phi = 2\pi R. \quad (6)$$

至此, 应用电子在固体中空间输运过程坐标转换随动坐标系计算方法<sup>[11]</sup>, 便可计算确定散射电子的空间位置.

当电子散射穿越薄膜与衬底界面时, 由于电子在两相邻介质中的散射概率不同, 需对电子散射路径进行修正, 即边界处理. 本文采用如下边界方程<sup>[12, 13]</sup>:

$$S_1 - \overline{AO} - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \overline{OB} = 0. \quad (7)$$

如图 1 所示,  $S_1$  是介质 I 中 A 点电子散射步长,  $\lambda_1, \lambda_2$  分别为能量为  $E_A$  的电子在二介质中的平均自由程,  $\overline{OB}$  则为经修正后电子在介质 II 中的散射步长.

按照上述原理及过程, 模拟电子在固体中散射直至电子从固体表面逸出或因能量耗尽终止在固体中. 本文计算中电子为垂直入射, Monte Carlo 方法模拟电子数是 40000.

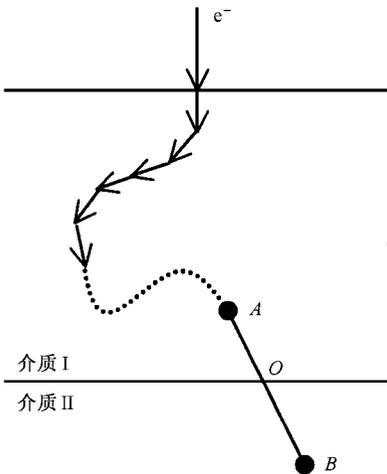


图 1 电子穿越边界路径

### 3. 计算结果与讨论

基于以上原理和方法, 我们建立了一个低能电子在薄膜/衬底中散射 Monte Carlo 模拟程序系统, 可

方便地模拟各种情况(不同薄膜、衬底、束能)下背散射电子发射, 并获得背散射电子各种信息. 记薄膜、衬底的原子序数分别为  $Z_f, Z_s$ , 则薄膜/衬底可分为  $Z_f > Z_s, Z_f < Z_s$  两类结构.

#### 3.1. $Z_f > Z_s$ 下薄膜/衬底的 $\eta$ - $D$ 曲线

束能为  $E_0, Z_f > Z_s$  情形下, 当散射电子从薄膜进入衬底后, 相对于薄膜电子在衬底中的平均散射角减小、能量损失亦减小, 从而使电子在衬底中的作用范围增大, 减小了电子返回薄膜并从薄膜表面逸出的概率. 因此, 薄膜/衬底电子背散射系数  $\eta$  应小于相同能量  $E_0$  下原子序数为  $Z_f$  的块样(以下简称  $Z_f$  块样)电子背散射系数. 若记束能  $E_0$  下原子序数为  $Z_f, Z_s$  的块样电子背散射系数分别为  $\eta_f, \eta_s$ , 则薄膜/衬底的背散射系数  $\eta$  应在  $\eta_s < \eta < \eta_f$  范围, 且随薄膜厚度  $D$  增加而增大, 并逐渐趋近  $\eta_f$ .

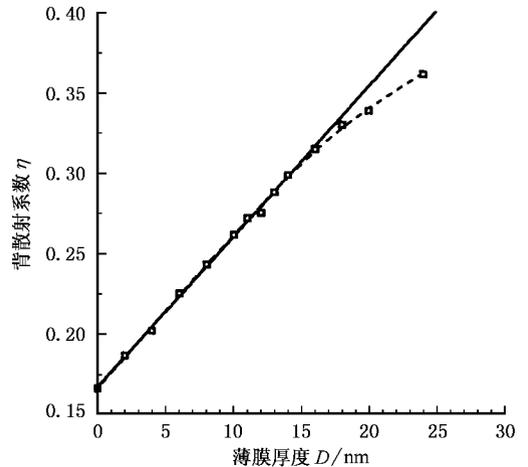


图 2  $E_0 = 4\text{keV}$ , Ag/Al 的  $\eta$ - $D$  曲线 □ 为 Monte Carlo 方法模拟计算结果, ..... 为光滑曲线, —— 为线性回归直线

图 2 给出  $E_0$  为 4keV, Ag/Al 的  $\eta$  随  $D$  的变化. 图 2 中  $\eta$  随  $D$  增加逐渐增大. 当  $D$  增加到一定值后,  $\eta$  增大减缓, 逐渐趋近于一个饱和值, 即相同  $E_0$  下  $Z_f$  块样的电子背散射系数. 这与上述分析一致. 注意到  $\eta$ - $D$  曲线在  $\eta$  趋于饱和前仅存在单一的线性区, 在下面其他情况下计算的  $\eta$ - $D$  曲线同样具有这一特点. 这与  $E_0$  为十几千电子伏或几十千电子伏下薄膜/衬底  $\eta$ - $D$  曲线存在 2—3 个线性段的复杂情形<sup>[2, 4]</sup>明显不同. 图 2 给出对计算的  $\eta$  作光滑后的曲线以及  $\eta$ - $D$  关系初始线性区线性回归直线. 可以看到  $\eta$ - $D$  曲线初始线性区范围约为 16nm. 图 3 给出

$E_0$  分别为 3 和 5keV ,Cu/Al 的  $\eta$ - $D$  曲线,初始线性区范围约分别为 11 和 21nm. 此外,图 3 表明,能量越小, $\eta$ - $D$  曲线初始线性段斜率越大,因而厚度分辨率越高,即降低束能可提高薄膜测定厚度分辨率.当然,这同时也减小了可测定薄膜的厚度范围.图 4 为  $E_0 = 4\text{keV}$  ,Au/Al ,Au/Cu ,Au/Ge 的  $\eta$ - $D$  曲线.它反映  $Z_f$  一定时,衬底  $Z_s$  改变对  $\eta$ - $D$  曲线的影响.计算结果表明: $Z_f$  一定时,衬底  $Z_s$  越小, $\eta$ - $D$  曲线初始线性段斜率越大,厚度分辨率越高,三条曲线的线性区范围均约为 9nm.这就说明只要  $Z_f, Z_s$  之间差异较明显,衬底改变对  $\eta$ - $D$  曲线初始线性区范围  $D_{\max}$  的影响不大, $D_{\max}$  主要决定于薄膜材料.我们计算了上述各种情况下  $\eta$ - $D$  曲线线性范围  $D_{\max}$  与相同束能  $E_0$  下  $Z_f$  块样背散射电子最大作用深度  $D_{\text{BSE}}$  的比  $D_{\max}/D_{\text{BSE}}$ ,结果均约为 0.4.

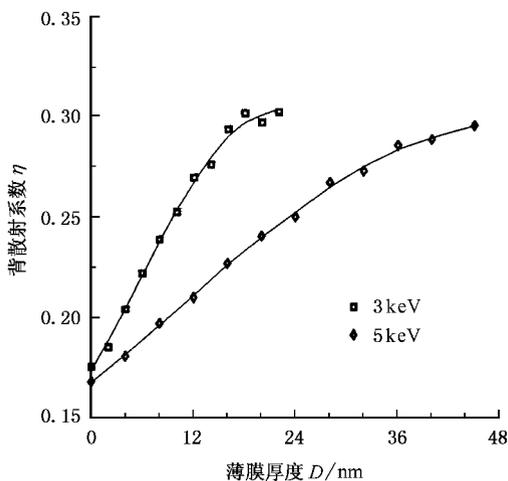


图 3  $E_0 = 3$  和  $5\text{keV}$  ,Cu/Al 的  $\eta$ - $D$  曲线

### 3.2. $Z_f < Z_s$ 下薄膜/衬底的 $\eta$ - $D$ 曲线

$Z_f < Z_s$  情形下,薄膜/衬底的背散射系数  $\eta$  随薄膜厚度  $D$  变化与  $Z_f > Z_s$  的相反, $\eta$  应在  $\eta_i < \eta < \eta_s$  范围,且随薄膜厚度  $D$  增加而减小,并逐渐趋近  $\eta_i$ . 图 5 为  $E_0 = 3$  和  $5\text{keV}$  ,Cu/Au 的  $\eta$ - $D$  曲线.线性区范围约分别为 15 和 32nm. 在  $Z_f < Z_s$  情形下,这一结果同样给出了  $E_0$  越小, $\eta$ - $D$  曲线线性段斜率越大,薄膜厚度分辨率越高的性质.  $E_0$  和  $Z_f$  一定时,为反映衬底改变对  $\eta$ - $D$  曲线的影响,计算了  $E_0 = 3\text{keV}$  ,Al/Au 和 Al/Ag 的  $\eta$ - $D$  曲线的变化,如图 6 所示.结果表明:薄膜材料一定时,衬底的  $Z_s$  越大,即  $Z_s$  与  $Z_f$  的差异越大, $\eta$ - $D$  曲线线性段斜率越

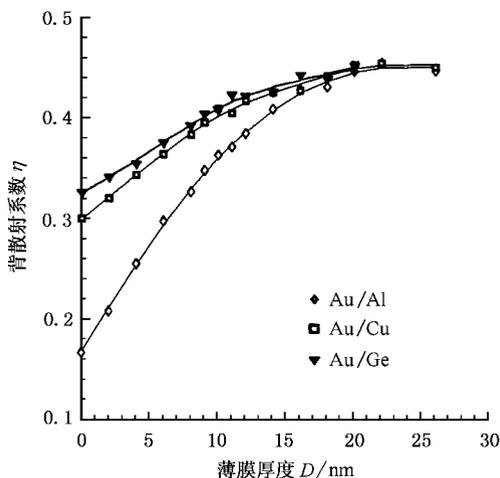


图 4  $E_0 = 4\text{keV}$  ,Au/Al ,Au/Cu ,Au/Ge 的  $\eta$ - $D$  曲线

大,薄膜厚度分辨率越高.此外,两种情况下  $\eta$ - $D$  曲线线性区范围均约为 40nm,这同样表明在  $Z_f < Z_s$  情形下,只要  $Z_f$  与  $Z_s$  之间差异较大,衬底的改变对  $\eta$ - $D$  曲线线性区范围  $D_{\max}$  的影响不大.我们也计算了上述各种情况下  $\eta$ - $D$  曲线线性区范围  $D_{\max}$  与相同束能  $E_0$  下  $Z_f$  块样背散射电子最大作用深度  $D_{\text{BSE}}$  的比  $D_{\max}/D_{\text{BSE}}$ ,结果约为 0.6.

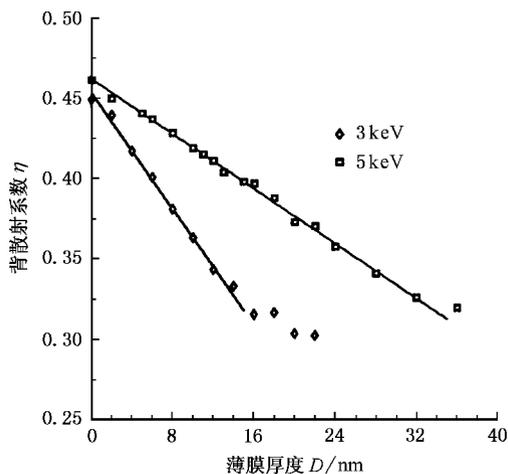


图 5  $E_0 = 3$  和  $5\text{keV}$  ,Cu/Au 的  $\eta$ - $D$  曲线

上述  $Z_f > Z_s, Z_f < Z_s$  情形下计算的  $\eta$ - $D$  曲线线性区范围  $D_{\max}$  分别为相同束能  $E_0$  下  $Z_f$  块样背散射电子最大作用深度  $D_{\text{BSE}}$  的 40% 和 60%. 这是千电子伏低能束作用下薄膜/衬底背散射电子发射的一个特征.也为估算  $D_{\max}$  提供了一个方便的计算方法.表 1 列出  $E_0$  分别为 2 3 4 5keV 时 Al ,Cu ,Ag ,Au 块样背散射电子最大作用深度  $D_{\text{BSE}}$  的 Monte Carlo 方法模拟

计算结果.

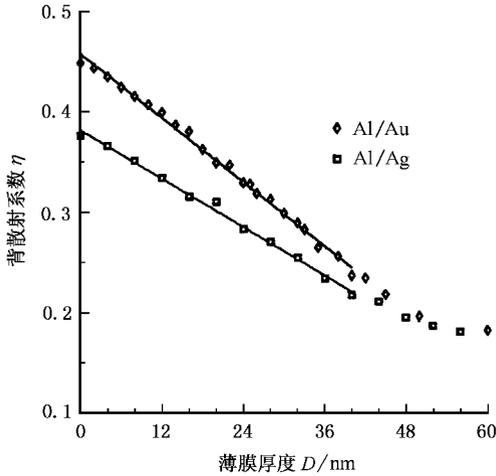


图6  $E_0 = 3\text{keV}$  ,Al/Au ,Al/Ag 的  $\eta$ - $D$  曲线

表 1 背散射电子最大作用深度  $D_{\text{ISE}}$ (单位: nm)

$E_0/\text{keV}$	2	3	4	5
Al	37	66	108	150
Cu	13	25	38	54
Ag	15	26	39	57
Au	12	19	27	36

3.3. 背散射电子角分布与表面空间分布

应用法拉第筒对电子背散射系数进行实际测量,存在两个主要的误差源.它们是从筒的顶部孔逃逸的背散射电子以及从筒底部孔与靶表面之间逃逸的背散射电子.定义背散射电子的出射角  $\theta$  为背散射电子出射方向与靶表面法线的夹角,则该两部分背散射电子的角分布分别在约 0—6 和 84—90deg 的范围<sup>[2]</sup>.在几十千电子伏束能作用下,背散射电子的角分布服从余弦分布律,从上述角范围逃逸的背散射电子引起的误差小于 2%.在千电子伏低能束作用下,计算的重元素块样背散射电子角分布略偏离余弦分布律<sup>[14,15]</sup>,但从上述角范围出射的背散射电子引起的误差仍小于 2%.对薄膜/衬底,背散射电子角分布及上述误差如何,未见相关实验及理论计算报道.为此,本文计算了不同薄膜/衬底、不同低能束下背散射电子的角分布.结果表明,在千电子伏束能作用下,薄膜/衬底背散射电子的角分布与块样的一致,略偏离余弦分布律.从 0—6 和 84—90deg 出射角范围逃逸的背散射电子占总背散射电子的比均小于 2%.图 7 分别给出  $E_0 = 3\text{keV}$  , $D = 20\text{nm}$  ,Al/Au 和  $E_0 = 4\text{keV}$  , $D = 6\text{nm}$  ,Au/Cu 的背散射电子角分

布.图 7 中  $d\eta/d\theta$  为背散射系数对出射角的微分分布.两种情形下从 0—6 和 84—90deg 出射角范围逃逸的背散射电子约占总背散射电子的 1.5% .

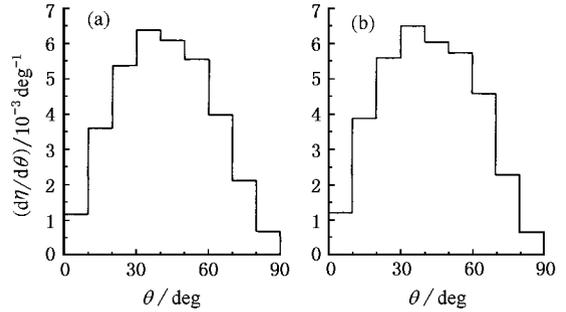
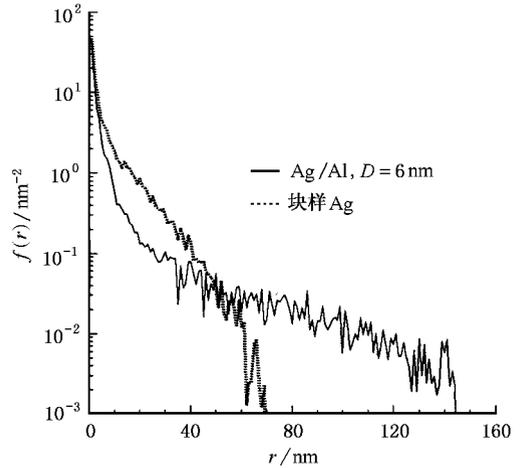
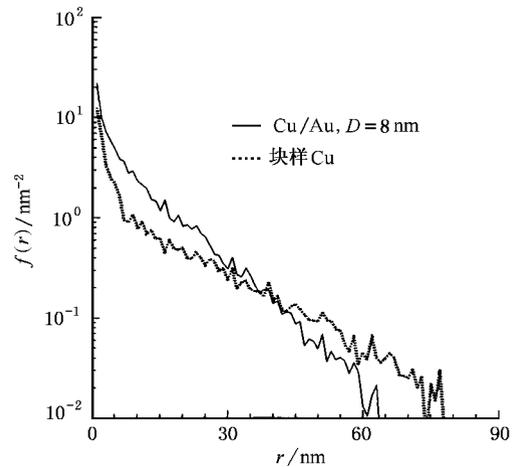


图 7 背散射电子角分布 (a)为 Al/Au , $E_0 = 3\text{keV}$  (b)为 Au/Cu , $E_0 = 4\text{keV}$



(a)  $E_0 = 4\text{keV}$



(b)  $E_0 = 5\text{keV}$

图 8 背散射电子表面空间密度径向分布

本文也计算了薄膜/衬底背散射电子在薄膜表面的空间密度分布. 图 8(a)和(b)分别给出  $E_0 = 4\text{keV}$ ,  $D = 6\text{nm}$ , Ag/Al 和  $E_0 = 5\text{keV}$ ,  $D = 8\text{nm}$ , Cu/Au 的背散射电子表面空间密度分布  $f(r)$ , 其中  $r$  为以入射点为中心背散射电子表面出射点的径向距离,  $f(r)$  为半径  $r$  处的单位面积上背散射电子数与总入射电子数的比. 图 8(a)为  $Z_f > Z_s$ , 相对于  $Z_f$  块样, 衬底的作用使背散射电子的空间分布范围增大, 但入射点附近背散射电子空间密度减小. 图 8(b)为  $Z_f < Z_s$ , 衬底的作用与图 8(a)的相反. 但不论何种情况, 背散射电子表面空间密度分布范围远小于几十千电子伏束能作用下的结果. 这是在千电子伏低能束作用下测定电子背散射系数要考虑的一个特点.

## 4. 结 论

应用 Monte Carlo 方法, 模拟了千电子伏低能束

作用下薄膜/衬底背散射电子发射及表面空间分布, 获得一些不同于几十千电子伏束能下的有意义的结果. 千电子伏低能束作用下, 薄膜/衬底的  $\eta$ - $D$  曲线初始范围仅存在单一的线性区. 只要  $Z_f$  与  $Z_s$  之间差异较大,  $\eta$ - $D$  曲线线性区范围  $D_{\max}$  主要决定于薄膜材料, 且在  $Z_f > Z_s$ ,  $Z_f < Z_s$  两种情形下约分别为相同  $E_0$  下  $Z_f$  块样背散射电子最大作用深度  $D_{\text{BSE}}$  的 40% 和 60%. 薄膜/衬底一定,  $E_0$  越小薄膜厚度分辨率越高.  $Z_f$  一定,  $Z_s$  越大, 薄膜厚度分辨率越高. 计算的背散射电子角分布与块样的一致, 略偏离余弦分布律. 从 0—6 和 84—90deg 出射角范围逃逸的背散射电子占总背散射电子的比均小于 2%. 背散射电子表面空间密度分布范围远较几十千电子伏束能下的小.

- [ 1 ] Niedrig H 1977 *Opt. Acta* **24** 679
- [ 2 ] Niedrig H 1982 *J. Appl. Phys.* **53** R15
- [ 3 ] He Y C *et al* 1990 *Sci. China A* **7** 757 ( in Chinese ) [ 何延才等 1990 中国科学 A **7** 757 ]
- [ 4 ] Sheng Y Q, Munz P and Schultheiss R 1985 *Phys. Stat. Sol.* **92** 121
- [ 5 ] Schlichting D, Berger D and Niedrig H 1999 *Scanning* **21** 197
- [ 6 ] Wu F M *et al* 2000 *Chin. Phys.* **9** 672
- [ 7 ] Wang D M *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 46
- [ 8 ] Mott N F and Massey H S W 1949 *The Theory of Atomic Collisions* ( Oxford : Clarendon ) p243
- [ 9 ] Tan Z Y and He Y C 1993 *Chin. J. Compt. Phys.* **10** 239 ( in Chinese ) [ 谭震宇、何延才 1993 计算物理 **10** 239 ]
- [ 10 ] Joy D C and Luo S 1989 *Scanning* **11** 176
- [ 11 ] Tan Z Y *et al* 1992 *J. Shandong Univ. Technol.* **22** 30 ( in Chinese ) [ 谭震宇等 1992 山东工业大学学报 **22** 30 ]
- [ 12 ] Tan Z Y *et al* 1992 *Chin. Sci. Bull.* **37** 1517 ( in Chinese ) [ 谭震宇等 1992 科学通报 **37** 1517 ]
- [ 13 ] Ren L M, Chen B Q and Tan Z Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 512 ( in Chinese ) [ 任黎明、陈宝钦、谭震宇 2002 物理学报 **51** 512 ]
- [ 14 ] Bögeler R *et al* 1993 *Scanning* **15** 1
- [ 15 ] Tan Z Y and He Y C 2001 *Chin. J. Compt. Phys.* **18** 253 ( in Chinese ) [ 谭震宇、何延才 2001 计算物理 **18** 253 ]

# Emission of the backscattered electrons from ultra-thin film on substrate under the action of low-energy beams

Tan Zhen-Yu<sup>1)</sup> Xia Yue-Yuan<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*School of Electrical Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China*

<sup>2)</sup>*School of Physics and Microelectronics, Shandong University, Jinan 250100, China*

( Received 16 November 2001 ; revised manuscript received 27 December 2001 )

## Abstract

The emission of backscattered electrons from an ultra-thin film on a substrate under the action of keV low-energy beams is simulated with Monte Carlo method. The mott cross-section and the modified Bethe equation are used to describe and calculate the elastic and inelastic scattering of electrons in solids, respectively. A boundary equation is introduced to modify the path of the scattered electrons traversing the interface between the film and substrate. The dependence of backscattering coefficient  $\eta$  on the thickness  $D$  of the thin film, the distribution of the linear range of  $\eta$ - $D$  curve and corresponding quantitative result  $D_{\max}$  are calculated and analyzed. The angular distribution and the spatial density distribution of the backscattered electrons on the film surface are also calculated.

**Keywords** : backscattered electron, Monte Carlo method, ultra-thin film

**PACC** : 3480, 4180D, 6890