

电子辐照聚合物带电特性多参数共同作用的数值模拟

封国宝 王芳 曹猛

Numerical simulation of multi-combined effects of parameters on polymer charging characteristics due to electron irradiation

Feng Guo-Bao Wang Fang Cao Meng

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 227901 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.227901

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.227901>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I22>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

双能态自旋-晶格声子耦合量子隧道系统的非经典能态和量子相干耗散

[Non-classical energy state and quantum tunneling coherence dissipation for the two-state system with the spin coupled to the lattice phonon](#)

物理学报.2013, 62(20): 207201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.207201>

膨胀石墨 3 mm 波消光数值计算

[Numerical calculation of 3 mm wave extinction for expanded graphite](#)

物理学报.2013, 62(9): 097201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.097201>

目标宽带电磁散射特性的自适应分析

[Adaptive scattering analysis of objects over a broad frequency band](#)

物理学报.2012, 61(9): 097201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.097201>

# 电子辐照聚合物带电特性多参数共同作用的数值模拟\*

封国宝 王芳† 曹猛

(西安交通大学电子科学与技术系, 电子物理与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

(2015年6月2日收到; 2015年8月2日收到修改稿)

电子辐照聚合物样品的带电特性是扫描电子显微镜成像、电子束探针微分析以及空间器件辐照效应等领域的一个重要研究课题. 通过建立基于蒙特卡罗方法的电子散射和时域有限差分法的电子输运的数值模型, 并采用高效的多线程并行计算, 模拟了电子非透射辐照聚合物样品的带电特性, 得到了带电稳态下的样品底部泄漏电流密度、表面负电位以及样品总电荷密度等带电特征量受入射电子能量、入射电流密度、样品材料的电子迁移率、样品厚度等相关参数共同作用的影响. 结果表明, 一个参数的变化使表面负电位增强时, 其他参数对负电位的影响将增强. 样品的带电稳态特征量在同一个电流平衡的模式下受参数影响的变化是单调的. 当电流平衡模式发生变化时, 如在入射电子能量较低条件下, 样品内部的总电荷量会随着样品厚度的增大而先增加后减小, 出现局部极大值. 样品底部的泄漏电流密度随着入射电流密度的增大而近线性成比例地增大. 研究结果对于揭示电子辐照聚合物的带电规律及微观机理、预测不同条件下的样品带电状态具有重要科学意义.

**关键词:** 带电特性, 数值模拟, 等值线图, 聚合物

**PACS:** 79.20.Ap, 72.20.Dp, 02.70.Uu, 72.80.Le

**DOI:** 10.7498/aps.64.227901

## 1 引言

电子辐照介质样品所产生的带电现象是电子物理学领域中的研究热点之一. 同时它在电子束成像与加工、高功率微波器件、航天器微波系统等诸多领域也一直备受瞩目<sup>[1]</sup>. 通常这种带电会影响电子束成像与加工的精度和质量<sup>[2-5]</sup>, 降低各类微波器件的性能和可靠性. 然而在电子束成像领域, 又可以利用电子辐照介质材料的带电规律来检测集成电路内的掩埋层结构<sup>[6-8]</sup>. 因此, 深入研究电子辐照介质样品的带电特性以及相关参数的影响具有非常重要的科学与应用价值.

电子非穿透辐照介质样品的带电是由于入射电流和出射电流(包括表面的二次电子电流和样品

底部的泄漏电流)在辐照过程中的不平衡导致电荷累积形成的. 而这种电荷的累积过程容易受到辐照条件(如入射电子束能量、电流密度等)和样品性质(如电子迁移率、样品厚度等)等多参数的影响<sup>[9,10]</sup>. 考虑到单个参数对样品带电影响的规律还受到其他参数条件的影响而呈现出不同的特点<sup>[11-14]</sup>, 因此, 为了得到更为全面的参数影响样品带电的规律, 还需要对带电特征量展开更深入的多参数共同影响的研究. 近年来, 国内外的相关研究报道了电子辐照电介质的带电物理机理以及暂态特性<sup>[15,16]</sup>. 法国的Fakhfakh课题组<sup>[17]</sup>采用一个环形电极的装置测量了电子辐照样品底部的位移电流暂态特性. 文献<sup>[18, 19]</sup>采用脉冲电声方法测量了电子辐照航天聚合物材料的空间电荷分布. 中国科学院空间科学与应用研究中心的韩建伟课题

\* 国家自然科学基金(批准号: 11175140, 11004157, 11204229)、空间微波技术国家重点实验室基金(批准号: 9140C530101130C53013)和中央高校基本科研业务费资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangfang@mail.xjtu.edu.cn

组 [1,20] 通过引入传输电流项改进了辐照诱导电导率 (radiation-induced conductivity, RIC) 模型, 得到了电介质的空间电荷、表面电位、内部电场分布. 西安交通大学的郑晓泉等 [21] 利用高能电子束辐照对聚四氟乙烯非线性电导改性的方法消除或削弱材料的内带电现象. 然而, 由于一些实验参数不易更改, 大多数的研究都集中于某一个或某几个确定照射条件和样品参数下流经样品的各电流以及样品带电量的暂态特性 [22-26]. 针对单一参数对带电影响的数值模拟, 大多采用 RIC 模型 [27,28], 采用宏观参数简化了不同条件下入射电子散射过程中的电荷分布, 并忽略了样品的表面带电对二次电子出射的影响. 而对介质样品带电的微观物理过程以及多参数共同作用下带电的规律仍然需要进一步深入研究.

本文针对在航天器和集成电路中被广泛使用的典型材料聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA), 采用数值模拟的方法研究非穿透入射电子辐照条件和薄膜样品特性多个参数对介质带电特性的共同作用规律. 采用蒙特卡罗方法与时域有限差分法, 模拟样品内部的电子散射和输运过程, 并采用多线程并行算法进行加速计算, 研究样品的表面电位、净电荷量以及样品泄漏电流密度在不同入射条件以及样品参数组合条件下的变化规律. 利用带电特征量受多参数共同作用的等值线关系图分析多参数的影响规律及其物理机理.

## 2 模型与方法

### 2.1 模型概述

如图 1 所示, 电子非穿透辐照 PMMA 薄膜样品的带电过程需要考虑入射电子的散射过程和内部电荷的输运过程. 当能量为  $E_{PE}$  的电子进入样品后, 会与样品内部原子产生弹性和非弹性散射, 激发产生内二次电子和空穴对, 一部分内二次电子脱离表面以二次电子的形式出射, 形成二次电子电流  $J_{SE}$ . 同时, 样品内的电荷会在自建电场和电荷浓度梯度的作用下向样品底部输运, 形成传输电流  $J_E$ . 在电子向样品底部输运的过程中, 由于样品内部缺陷的存在, 部分自由电子会被样品内的缺陷俘获形成俘获电子. 而未被俘获的自由电荷达到样品底部后形成泄漏电流  $J_L$ . 此外, 根据电流连续性原理, 金属地板的底部会因为感应电场而产生位移电流  $J_D$ . 对于接地型的金属下极板,

实际测量的样品电流  $J_S$  为泄漏电流与位移电流之和:  $J_S = J_D + J_L$ . 本文针对实验环境中常用的 4—10 keV 入射电子能量 [29] (即非穿透辐照), 研究受到广泛关注的介质样品的负带电现象 [30,31]. 在负带电情况, 由于样品内部的空穴数量小于电子数量, 并且被束缚在浅表层附近, 所以在模拟样品带电过程时可以只考虑等效负电荷 (净电子) 的散射积累以及输运迁移.

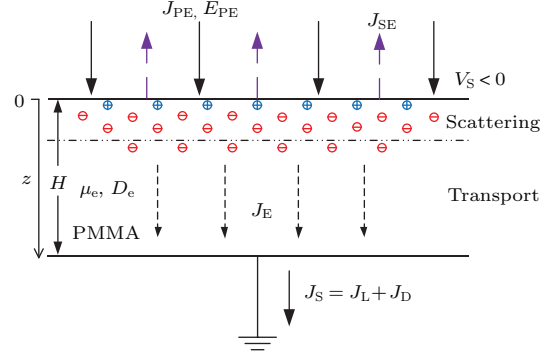


图 1 电子辐照 PMMA 样品带电过程模拟的示意图  
Fig. 1. Simulation schematic of PMMA film charging due to electron irradiation.

### 2.2 电子散射模型

本文通过采用蒙特卡罗方法模拟电子在材料中的散射过程. 电子在样品内的散射分为弹性散射和非弹性散射两种类型 [32]. 本文使用 Mott 弹性散射截面 [33] 模拟弹性散射过程:

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

这里,  $\sigma$  为 Mott 散射截面;  $\Omega$  和  $\theta$  分别为立体角和散射角;  $f(\theta)$  和  $g(\theta)$  分别表示入射和散射分波函数. 考虑到 Mott 散射截面的计算复杂性, 本文的研究直接采用已有的 Mott 散射截面数据库 [34].

对于非弹性散射过程, 则根据电子能量的不同分别采用了两种模型. 当入射电子能量低于 3 keV 时, 采用 Penn [35,36] 介电函数模型. 对应的非弹性微分散射截面为

$$\frac{d\lambda_{in}^{-1}}{d(\Delta E)} = \frac{1}{\pi a_0 E_{PE}} \int_0^\infty \frac{E_p dE_p}{\Delta E^2 - E_p^2 + \left[ \frac{(\hbar q)^2}{2m} \right]^2} \times \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(E_p)} \right) \Theta \left( \frac{\hbar^2}{2m} (2k\bar{q} - \bar{q}^2) - \Delta E \right), \quad (2)$$

这里,  $\lambda_{in}$  为非弹性散射的平均自由程;  $\Delta E$  为电子转移能量; 等离子能量  $E_p$  满足  $E_p = \hbar\omega_p$ , 其中  $\omega_p$  为等离子频率;  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  为电子的自由波矢;  $\text{Im}$  表示函数虚部, 对应于非弹性散射过程的能量

损失;  $\Theta$  为考虑能量和动量守恒的阶梯函数;  $\bar{q}$  为以下色散方程的根:

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{1}{3}v_F^2\bar{q}^2 + \left(\frac{\hbar\bar{q}}{2m}\right)^2, \quad (3)$$

其中  $v_F$  为费米速度.

当入射电子能量高于 3 keV 时, 采用快二次电子模型来计算非弹性散射截面<sup>[37]</sup>:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{in}} &= \int_{\theta_c}^{0.5} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_M \\ &= \frac{\pi e^4}{E^2} \left\{ \frac{1}{\Omega^2} + \frac{1}{(1-\Omega)^2} + \ln\left(\frac{\Omega_c}{1-\Omega_c}\right) \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

这里,  $E$  为入射电子能量;  $e$  表示电子电量;  $\Omega_c$  为最小归一化能量损失系数, 取值为 0.001.

对于非弹性散射过程中的能量损失, 本文采用 Joy 和 Luo<sup>[37]</sup> 修正的 Bethe 连续能量损失模型来计算:

$$\left(\frac{dE}{dS}\right)_{\text{Bethe}} = 78500 \frac{\rho\bar{Z}}{AE} \ln\left(\frac{1.166(E+k\bar{J})}{\bar{J}}\right), \quad (5)$$

其中,  $k$  为材料的修正系数;  $\bar{Z}$ ,  $\bar{A}$  和  $\bar{J}$  分别为材料的平均原子序数、原子量以及电离能;  $\rho$  为材料密度.

当一次非弹性散射过程中的能量转移大于材料的禁带宽度时, 则会激发一个本征二次电子和空穴对. 新生成的二次电子在材料中的级联散射过程可以采用与入射电子相同的方法来追踪. 运动到样品表面附近且能量较高的本征二次电子及背散射电子有可能克服亲和势从表面出射, 形成二次电子发射. 二次电子产额定义为出射二次电子数与入射辐照电子数之比.

### 2.3 电荷输运模型

散射过程中沉积的电荷还会在自建电场以及电荷浓度梯度场的作用下进行迁移和扩散的输运过程. 在输运过程中, 样品内部的电荷满足电流连续性方程、电荷输运方程、俘获方程以及泊松方程:

$$\frac{\partial(n_F(z,t) + n_{\text{trap}}(z,t))}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{J}_E(z,t)}{e}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_E(z,t) &= -e\mu_e n_F(z,t)\nabla V(z,t) \\ &+ eD_e \nabla n_F(z,t), \quad (7) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial n_{\text{trap}}(z,t)}{\partial t} = \frac{n_F(z,t)}{\tau_e} \frac{N_T - n_{\text{trap}}(z,t)}{N_T}, \quad (8)$$

$$\nabla^2 V(z,t) = \frac{e(n_F(z,t) + n_{\text{trap}}(z,t))}{\epsilon}, \quad (9)$$

式中,  $n_F(z,t)$  和  $n_{\text{trap}}(z,t)$  分别为自由电子密度和俘获电荷密度;  $N_T$  和  $\tau_e$  分别表示俘获密度和俘获时间常数;  $e$  为单个电子电量;  $\epsilon$  为 PMMA 的介电常数;  $\mu_e$  和  $D_e$  分别为 PMMA 样品的电子迁移率和扩散系数, 并满足 Nernst–Einstein 方程  $D_e = \mu_e k_B T / e$ , 其中  $k_B$  为玻尔兹曼常数, 温度  $T = 300$  K. 此外, 在带电的模拟中, 样品内的暂态总电荷量密度  $Q(t_i)$  可以通过时域电荷守恒或者  $z$  方向的空间电荷密度积分求得

$$Q(t_i) = \int_0^{t_i} J_D dt = \int_0^{t_i} \epsilon \frac{\partial(\nabla V(z,t)|_{z=H})}{\partial t} dt$$

或

$$Q(t_i) = \int_0^H e(n_F(z,t) + n_{\text{trap}}(z,t)) dz. \quad (10)$$

### 2.4 模拟流程

对于某一确定参数条件下的电子非穿透辐照 PMMA 样品的带电过程, 我们同时考虑电子的散射和输运, 采用时域有限差分的迭代算法进行模拟, 直到带电过程达到一个动态的平衡, 即带电特征量不再随时间而变化. 具体模拟流程如下:

1) 初始化设置, 在  $t_0 = 0$  时刻, 初始化样品内自由电子密度  $n_F(z,t)$  和俘获电荷密度  $n_{\text{trap}}(z,t)$  为零, 并设置各入射电子和样品参数值;

2) 根据入射电子能量和表面电位得到电子着地能量,  $E_{\text{land}} = E_{\text{PE}} - |V_S(t)|$ , 并采用蒙特卡罗方法模拟在  $\Delta t$  时间内, 入射电子散射沉积在样品内的电荷分布  $n_{\text{scat}}(z, \Delta t)$ , 计入样品内的电荷中  $n_F(z,t) = n_F(z,t) + n_{\text{scat}}(z, \Delta t)$ ;

3) 根据内部自由电子  $n_F(z,t)$  和俘获电子  $n_{\text{trap}}(z,t)$  建立的自洽场, 内部电荷在  $\Delta t$  时间内进行包括迁移、扩散和俘获在内的输运过程, 得到下一时刻的电荷分布  $n_F(z,t + \Delta t)$  和  $n_{\text{trap}}(z,t + \Delta t)$  以及样品内的电位  $V(z,t + \Delta t)$ ;

4) 赋值  $t = t + \Delta t$  后转到第 2 步, 直至内部电荷分布达到一个动态平衡, 即不再随时间变化;

5) 得到稳态下的带电特征量, 即泄漏电流值  $J_L$ 、表面电位  $V_S$  和总电荷密度  $Q_{\text{SAT}}$ .

图 2 为入射电子持续照射下, 从样品表面出射的二次电子电流  $I_{\text{SE}}$  和感应电场产生的位移电流  $I_D$  暂态变化过程的数值模拟结果与法国 Blaise 课题组<sup>[38]</sup> 实验的对比. 实验前, PMMA 样品经过了表面平整化, 退火, 表面清洗、干燥等处理, 并被安放在一个接地的金属基板上. 模拟中的

相关参数(入射电子能量  $E_{PE} = 4 \text{ keV}$ , 入射电流  $I_{PE} = 570 \text{ pA}$ , PMMA 样品厚度  $H = 2 \text{ mm}$ , 介电常数  $\epsilon = 2.6\epsilon_0$  等)设置均与实验条件相同. 如图 2 所示, 模拟结果与实验结果基本相符, 随着入射电子的持续辐照, 进入样品的负电荷增多, 表面负电位随之变强, 入射电子着地能量降低, 使得二次电子产额逐渐上升. 位移电流趋于 0, 样品带电逐渐达到稳态. 模拟得到二次电子电流和位移电流的暂态变化过程与实验结果的一致也证明了本文的数值计算模型在模拟介质材料带电特性方面的合理性.

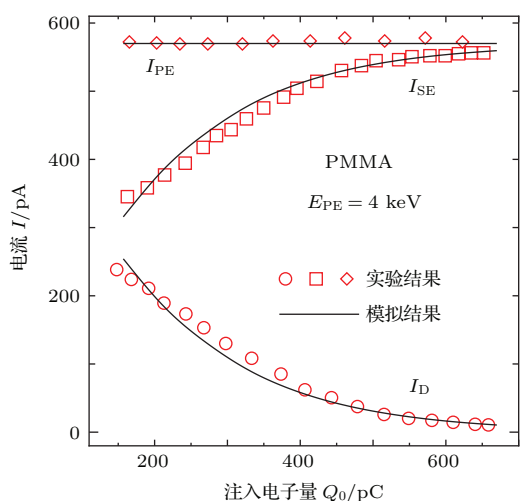


图 2 PMMA 样品在电子辐照带电过程电流暂态特性与实验的对比 [38]

Fig. 2. Transient characteristics of currents at PMMA sample due to e-beam irradiation compared with experiment results [38].

表 1 电子辐照 PMMA 带电模拟计算的参数设置

Table 1. Parameters of primary current and PMMA sample used in the simulation.

参数名称	参数值/范围
相对介电常数	3.9
样品厚度/ $\mu\text{m}$	10–50
电子迁移率/ $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$1.0 \times 10^{-11} - 1.0 \times 10^{-9}$
俘获密度/ $\text{cm}^{-3}$	$5 \times 10^{14}$
入射电子能量/ $\text{keV}$	4–10
入射束流密度/ $\text{nA} \cdot \text{cm}^{-2}$	20–80

为研究多参数对带电的共同影响, 本文进行了多参数组合下带电过程的模拟, 并采用基于 OpenMP 构架的多线程并行算法进行加速计算, 得到不同参数组合下各稳态带电特征量的等值线图. 与一般的单参数变量方法不同, 等值线图的方法提供了一个更为广域的二维参数条件范围,

因此, 在研究双参数对带电的共同影响时, 这种方法能够更准确地从理论上预测样品在电子非穿透辐照下的带电特征量. 表 1 列出了本文数值模拟使用的相关参数值以及取值范围. 在下文中如未做特殊说明, 入射电流密度、样品电子迁移率以及样品厚度默认值分别为:  $50 \text{ nA} \cdot \text{cm}^{-2}$ ,  $7.0 \times 10^{-10} \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  和  $25 \mu\text{m}$ .

### 3 数值模拟结果与分析

#### 3.1 入射电子能量与电子迁移率对带电的共同作用

图 3 给出了在不同的入射电子能量  $E_{PE}$  和样品电子迁移率  $\mu_e$  组合条件下样品带电达到稳态时带电特征量的等值线图. 入射电子能量  $E_{PE}$  和电子迁移率  $\mu_e$  的取值范围均为表 1 所列. 入射束流密度  $J_{PE}$  和样品厚度  $H$  分别被设为:  $50 \text{ nA} \cdot \text{cm}^{-2}$  和  $25 \mu\text{m}$ .

图 3(a) 为归一化泄漏电流密度  $J_L/J_{PE}$  的等值线图. 如图中所示, 泄漏电流随着迁移率的增大或入射电子能量的增大而单调性增强. 这是由于内部自由电荷在样品电子迁移率大且入射电子能量高的条件下更容易向底部泄漏, 如  $J_L/J_{PE} > 0.25$  对应的区域. 由于在计算的入射能量范围内, 随着入射电子能量  $E_{PE}$  的增加, 出射的二次电子产额减小, 沉积在样品内部的净电荷量增大, 因此在稳态下的进出样品电流平衡条件下, 泄漏电流则会随  $E_{PE}$  增大而增大; 此外, 入射电子能量越高, 其射程越大, 对应的散射区域更靠近样品下表面, 散射形成的自由电子向底部运输的路程更短, 也促进了电荷的泄漏过程. 对于迁移率较大的样品, 因为样品内部自由电子在自建场的作用下向底部运输的速度较大, 自由电荷向底部的泄漏过程被加速, 导致稳态下的泄漏电流值更大.

通过对比图 3(a) 中的梯度线方向 I 和 II 的变化, 可发现随着样品迁移率的增大, 入射电子能量  $E_{PE}$  对泄漏电流的影响增强. 这是因为迁移率的增大使得散射沉积的自由电荷非常容易迁移到底部形成泄漏电流, 此时泄漏电流的稳态值主要受制于散射过程沉积的电荷量, 而受运输的影响变小. 因此, 与散射相关的入射电子能量对稳态下的泄漏电流影响变大, 与运输相关的样品迁移率对泄漏电流影响变弱.

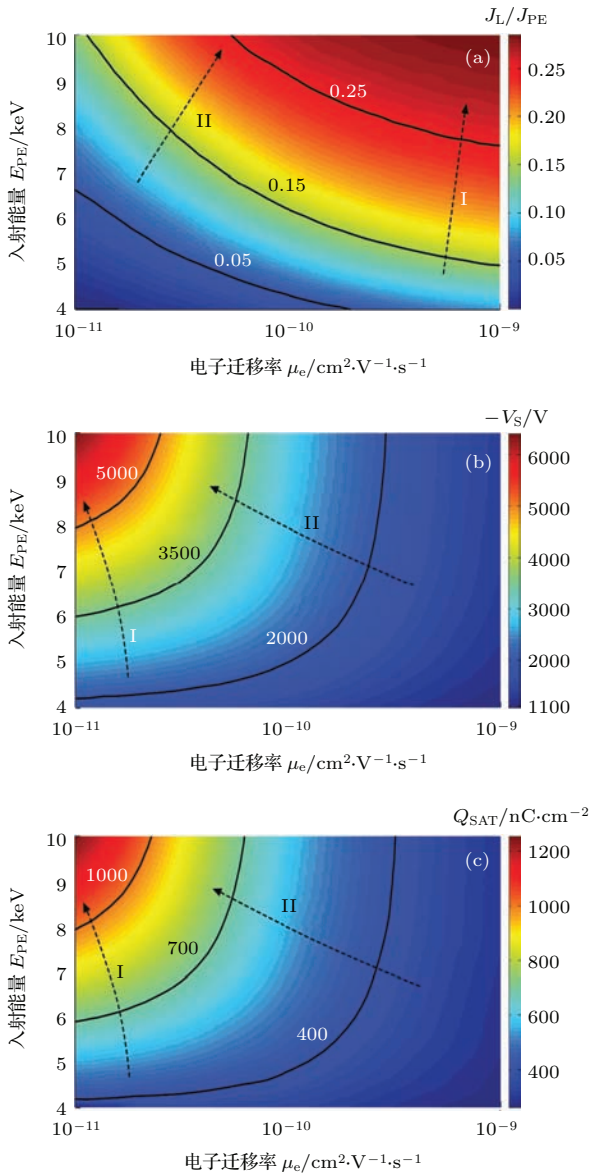


图3 (网刊彩色) 入射电子能量  $E_{PE}$  与电子迁移率  $\mu_e$  对带电特征量影响的等值线 (a) 归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  的等值线图; (b) 负表面电位  $-V_S$  的等值线图; (c) 总电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图

Fig. 3. (color online) Simulated contour map of steady-state charging characteristics as functions of primary energy  $E_{PE}$  and electron mobility  $\mu_e$ : (a) The normalized leakage current  $J_L/J_{PE}$ ; (b) the negative surface potential  $-V_S$ ; (c) the total charge per unit area  $Q_{SAT}$ .

图3(b)和图3(c)分别给出了负表面电位  $-V_S$  和总负电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图。对比图3(b)与图3(c)可以发现,  $-V_S$  和  $Q_{SAT}$  的等值线图变化规律类似, 受入射能量  $E_{PE}$  和电子迁移率  $\mu_e$  共同作用的影响基本相同。  $-V_S$  和  $Q_{SAT}$  的稳态值都随着入射能量的增大或迁移率的减小而单调性增加, 带电较强的状态出现在电子迁移率较小且入射电子能量较大处, 如图3(b)中  $-V_S > 5000$  V 区域和

图3(c)中  $Q_{SAT} > 1000$  nC·cm<sup>-2</sup> 的区域。这是因为, 在负带电对应的入射电子能量范围, 在非穿透辐照情况下, 入射能量越高, 二次电子产额越少, 进入样品内部的净电荷量越多; 而且样品的迁移率越小, 散射沉积的电荷更难输运到底部泄漏出去, 从而使得样品内部带电更多。考虑到表面电位可以由样品内部电荷分布通过泊松方程得到, 因此在样品厚度一定的情况下, 表面电位与总电荷量有一致的对应关系, 从而使得表面电位与总电荷量受入射电子能量和电子迁移率的共同影响趋势一致。

对比图3(b)与图3(c)中的梯度线I和II方向的变化, 可以发现  $-V_S$  和  $Q_{SAT}$  受入射电子能量  $E_{PE}$  的影响随着电子迁移率  $\mu_e$  的增大而减弱。这是因为, 较大迁移率使电荷的泄露增加, 此时带电的平衡过程更多地取决于电荷泄露过程, 样品的带电受与电荷输运相关参数即迁移率的影响增强, 而受与散射相关的入射电子能量的影响减弱。

### 3.2 入射电子能量与样品厚度对带电的共同作用

图4给出了在不同入射能量  $E_{PE}$  和样品厚度  $H$  组合条件下样品带电特征量的稳态等值线图。图4(a)为归一化泄漏电流密度  $J_L/J_{PE}$  等值线图。从图4(a)可以看出,  $J_L/J_{PE}$  的较大值出现在入射能量大且样品厚度较小的情况下, 并且随着能量的减小和样品厚度的增加单调性地减小。在样品负带电条件下, 电子非穿透情况下, 更高的入射能量使得散射过程沉积更多的净负电荷且分布得更深, 且样品厚度较小时自由电荷输运到底部的距离更短, 更容易形成泄漏电流。因此  $J_L/J_{PE}$  随入射能量增加及样品厚度的减小而单调增大。

图4(b)和图4(c)分别为负表面电位  $-V_S$  和总负电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图。如图4(b)所示, 表面负电位  $-V_S$  随着入射电子能量和样品厚度的增大而单调性增大; 而在图4(c)中, 当入射能量较低时, 总负电荷密度  $Q_{SAT}$  随着样品厚度的增大会出现一个局部的极大值, 把随厚度变化的  $Q_{SAT}$  极大值点连接起来可形成一条脊线。在脊线的上方, 总负电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图趋势与表面负电位  $-V_S$  的趋势相同, 而在脊线的下方,  $Q_{SAT}$  呈现出随厚度增大而减小的相反趋势。这是因为, 脊线下方的区域对应于泄漏电流较小的区域, 如  $J_L/J_{PE} < 0.05$ , 此时泄漏电流很小, 构成样品内部电荷平衡的出射电流部分主要由二次电子电流决

定, 而样品厚度增加会增大表面负电位从而减小入射电子着地能量, 使得二次电子产额增大, 样品内部积累的电荷以二次电子电流耗散增多, 最终导致内部总电荷量减少.

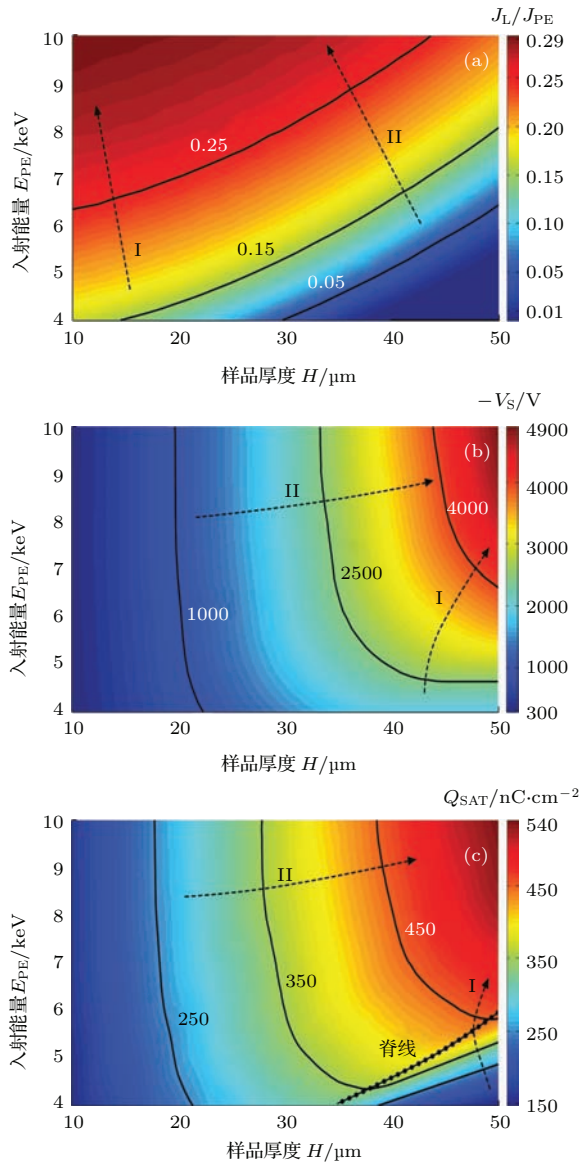


图4 (网刊彩色) 入射电子能量  $E_{PE}$  与样品厚度  $H$  对带电特征量影响的等值线图 (a) 归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  的等值线图; (b) 负表面电位  $-V_S$  的等值线图; (c) 总电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图

Fig. 4. (color online) Simulated contour map of steady-state charging characteristics as functions of primary energy  $E_{PE}$  and sample thickness  $H$ : (a) The normalized leakage current  $J_L/J_{PE}$ ; (b) the negative surface potential  $-V_S$ ; (c) the total charge per unit area  $Q_{SAT}$ .

此外, 图4(b)中梯度线I和II方向的变化也说明了入射能量  $E_{PE}$  对  $-V_S$  的影响随着样品厚度  $H$  的增大而显著地增强. 入射电子能量的增加会减少出射的二次电子, 使得净进入样品的负电荷增多,

表面电位增强. 又根据电位求解的泊松方程, 样品厚度的增加使内部电荷与接地地板的平均距离增大, 直接拉大了表面与底面的电位差, 从而使得在增加相同入射能量下表面电位的增强变得更为显著.

### 3.3 入射电子能量与入射电流密度对带电的共同作用

图5给出了在不同入射电子能量  $E_{PE}$  和入射电流密度  $J_{PE}$  组合条件下样品带电特征量的稳态等值线图. 图5(a)和图5(b)分别为样品底部泄漏电流  $J_L$  和归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  的等值线图. 从图5(a)中可以看出, 泄漏电流密度  $J_L$  随着入射能量  $E_{PE}$  和入射电流密度  $J_{PE}$  的增大而单调性增大, 并且梯度线I和II方向的变化表明入射能量对泄漏电流密度  $J_L$  的影响随着  $J_{PE}$  的增大而增强. 而在图5(b)归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  的等值线图中, 等值线基本水平方向平行, 如等值线  $J_L/J_{PE} = 0.25$ ,  $J_L/J_{PE} = 0.2$  以及  $J_L/J_{PE} = 0.1$ , 这表明在入射能量一定的情况下, 束流密度的增大使泄漏电流与入射电流线性同比例增大, 此时归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  只随着入射能量  $E_{PE}$  的增大而增大, 受入射电流密度  $J_{PE}$  的影响不大, 这也与空间电荷限制流的Mott-Gurney定律相符合<sup>[39]</sup>. 图5(b)中  $J_L/J_{PE}$  等值线的微小斜率主要是由样品内部缺陷的俘获所引起的空间电荷限制流的非线性造成的, 由于束流密度增加会使样品的俘获电荷变多, 从而使得流出的归一化泄露电流相应轻微减小.

图5(c)和图5(d)则分别表示负表面电位  $-V_S$  和总负电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图. 如图所示,  $-V_S$  与  $Q_{SAT}$  的等值线变化规律基本相同, 表明在一定厚度下  $-V_S$  与  $Q_{SAT}$  受相关参数的共同作用也基本一致, 即随入射电子能量和入射电流密度的增大单调性增大, 且入射电子能量对带电强度的影响会随着入射束流密度的增大而变强. 这是由于较高的入射能量和较大的入射束流密度都会直接增加进入到样品内部的净电荷, 使得样品内的总负电荷密度  $Q_{SAT}$  以及表面负电位  $-V_S$  强度均增大; 此外, 随着入射束流密度的增大, 在样品负带电条件下增大入射电子能量所导致的净进入电子数量的增加量也相应更大, 从而对进入到样品内部的电荷量的影响增大. 等值线图中出现的一些微小波动, 如图4(c)和图5(d)等, 主要是由于模拟的参数组以一定间隔离散取值造成的.

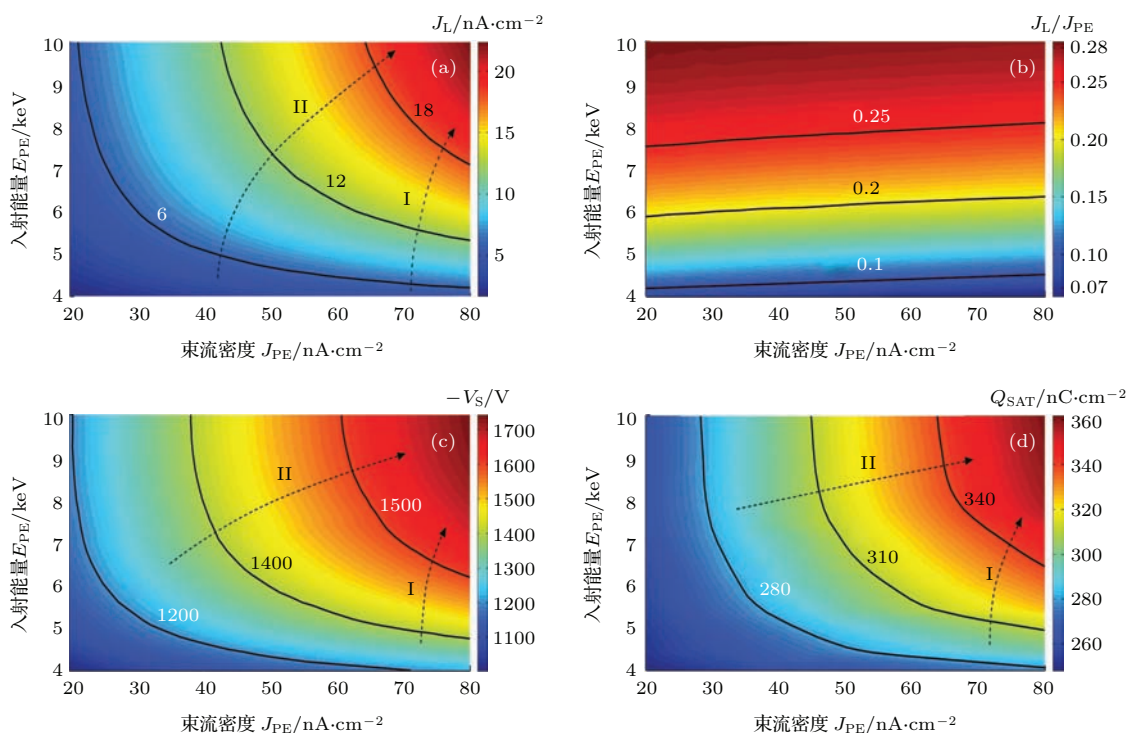


图5 (网刊彩色) 入射电子能量  $E_{PE}$  与束流密度  $J_{PE}$  对带电特征量影响的等值线图 (a) 泄漏电流密度  $J_L$  的等值线图; (b) 归一化泄漏电流  $J_L/J_{PE}$  的等值线图; (c) 负表面电位  $-V_S$  的等值线图; (d) 总电荷密度  $Q_{SAT}$  的等值线图

Fig. 5. (color online) Simulated contour map of steady-state charging characteristics as functions of primary energy  $E_{PE}$  and primary current density  $J_{PE}$ : (a) The leakage current  $J_L$ ; (b) the normalized leakage current  $J_L/J_{PE}$ ; (c) the negative surface potential  $-V_S$ ; (d) the total charge per unit area  $Q_{SAT}$ .

### 3.4 分析与讨论

通过以上的数值模拟结果可以发现: 增大电子入射能量、入射束流密度、样品厚度, 减小电子迁移率都可以使表面的负电位增强; 多参数对样品带电程度的影响是相互关联的, 即一个参数对带电的影响程度会随着另一个参数的变化而改变. 一个参数的改变使带电特征量增强的同时, 其对带电特征量的影响程度减弱, 而其他参量的变化对带电影响加强. 例如图 5(c) 中, 束流密度的增大使得表面负电位增强的同时, 束流密度对表面负电位影响程度减弱, 而入射电子能量的变化对电位的影响逐渐增强.

样品带电稳态从宏观上表现为进出样品的电流达到动态平衡, 即  $J_{PE} = J_L + J_{SE}$  (稳态下  $J_D = 0$ ,  $J_S = J_L$ ). 随着内部电荷的迁移, 泄漏电流密度从照射初期的 0 增加为稳态下的  $J_L(t_B)$ ; 同时, 随着表面负电位的提升, 入射电子的着地能量降低, 二次电子产额增加, 二次电子电流密度从照射初期的  $J_{SE}(t_0) = \delta_0 J_{PE}$  增加为稳态下的  $J_{SE}(t_B) = \delta_{t_B} J_{PE}$ . 因此, 在照射初期  $J_{PE} > J_L + J_{SE}$ , 随着泄漏电流  $J_L$  与二次电子电流

$J_{SE}$  的增加, 最终达到平衡态  $J_{PE} = J_L + J_{SE}$ . 在电子辐照期间, 泄漏电流密度增量  $\Delta J_L = J_L(t_B) - 0$  与二次电子电流密度增量  $\Delta J_{SE} = (\delta_{t_B} - \delta_0) J_{PE}$  的相对大小成为最终稳态带电量的决定因素. 在一些参数条件 (如厚度薄、迁移率大的样品或者能量高、束流强的辐照电子) 下, 在样品带电达到平衡的暂态过程中, 如图 6(a) 所示, 泄漏电流的增量明显大于二次电流的增量  $\Delta J_L > \Delta J_{SE}$ , 此时, 电荷平衡过程主要由泄漏电流的变化  $\Delta J_L$  主导, 且稳态下的带电特征量主要由电荷运输相关的参数决定, 如等值线图 3 和图 4 中所示的  $J_L/J_{PE} > 0.25$  的区域. 而在另一些参数条件 (如样品厚度大、迁移率小的样品或者能量低、束流弱的辐照电子) 下, 在样品带电达到平衡的暂态过程中, 如图 6(b) 所示, 二次电子电流的增量明显大于泄漏电流的增量  $\Delta J_{SE} > \Delta J_L$ , 此时, 电荷平衡过程主要由二次电子电流的变化  $\Delta J_{SE}$  主导, 稳态下的带电特征量主要由电子散射相关的参数决定, 如等值线图 3 和图 4 中所示的  $J_L/J_{PE} < 0.05$  的区域. 此外, 对于图 6(c) 的情况, 暂态过程中泄漏电流的增量与二次电子电流的增量相当, 电荷的平衡由二次电子电流



与泄漏电流共同决定, 此时电流平衡为混合模式. 对应的如等值线图中  $J_L/J_{PE} = 0.15$  附近的区域.

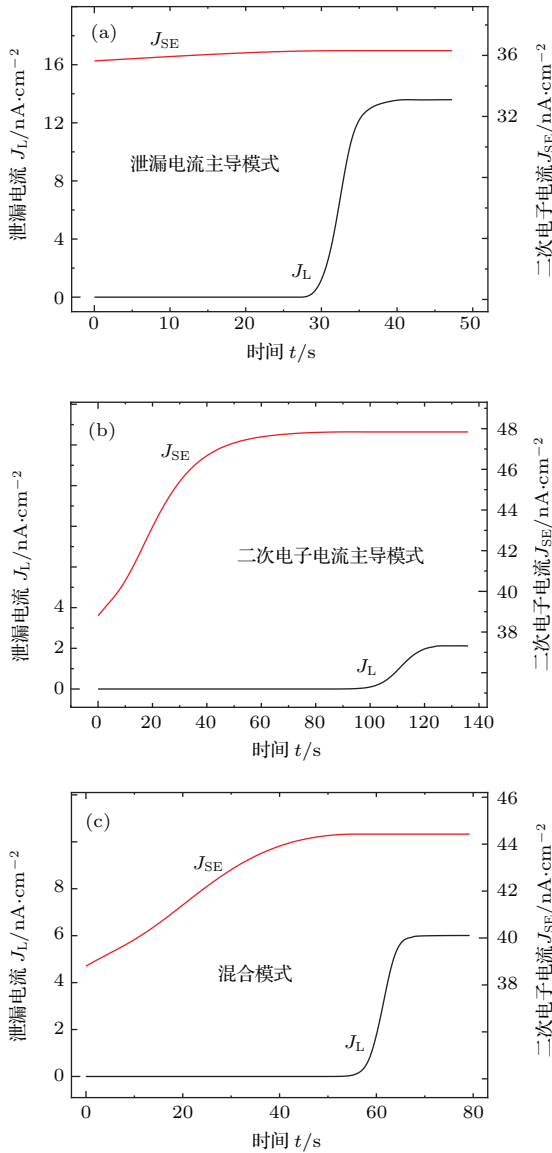


图6 不同带电平衡模式下, 泄漏电流  $J_L$  与二次电子电流  $J_{SE}$  的暂态过程 (a) 泄漏电流主导模式; (b) 二次电子电流主导模式; (c) 混合模式

Fig. 6. Transient characteristics of leakage current  $J_L$  and secondary electron current  $J_{SE}$  at different charging equilibrium model: (a) The leakage current dominated mode; (b) the secondary electron current dominated mode; (c) mixture mode.

在同一带电平衡主导区域内, 由于样品带电平衡模式相同, 带电特征量受参数影响是单调性的. 而只有在不同的带电平衡主导的交界区域, 带电特征量受参数的影响才可能出现非单调性, 并且在带电平衡主导的交界区域, 如图4(c), 样品内部的总电荷量才会随着厚度的增大出现一个局部的最大值. 同时根据 Gauss 定理可知, 样品总电荷量的最

大值也预示着下表面的电场也会随着厚度的增加出现一个局部最大值. 这种表面负电位状态与内部总电荷量在不同带电平衡区域下的不一致, 也为我们在不同条件下对带电状态表征量选取提供一个理论参考.

为简化计算模型, 本文忽略了介质样品中空穴的运输和电子空穴对的复合过程, 这是因为对于以电子为主要载流子的材料来说空穴的迁移率要远低于自由电子, 且负带电过程中大部分为负电荷的累积、迁移和扩散. 本文模拟针对电子非穿透辐照聚合物样品的带电特性, 而电子透射情况下的样品带电特性还有待进一步研究. 此外, 本文只涉及了一种固定的材料和有限的参数范围, 而采用的模拟方法以及得到的规律性的结论依然可以类推到其他介质材料的带电特性研究中. 一些更多影响因素的作用, 如温度的改变、介电常数受带电的改变等, 也有待深入的研究.

## 4 结 论

本文采用等值模拟的方法, 研究了电子非穿透辐照 PMMA 薄膜样品时多参数组对样品带电稳态特征量的共同影响, 采用等值线图较为全面地描述了复杂的多参数影响规律.

在本文研究的参数取值范围下, 主要得到以下结论: 样品的带电稳态的电流平衡根据不同的电荷耗散机理表现为二次电子电流主导模式、泄漏电流主导模式和混合模式; 增大入射电子能量、样品厚度、束流密度, 或者减小样品迁移率都会使得稳态表面负电位增强, 电流平衡转向二次电子电流主导模式; 一个参数的变化使表面负电位增强时, 其他参数对表面负电位的影响将增强; 在相同带电平衡模式下, 带电特征量受参数影响的变化是单调的; 而由于带电平衡模式的改变, 总电量在低能辐照的情况下随着样品厚度的增加出现一个极大值, 该极大值随着入射电子能量的增加而变大; 泄漏电流与入射束流密度之间表现出一种近线性增长关系.

本研究工作和获得的结果有助于深入研究多参数作用下的介质微观带电机理, 并对已知辐照条件下介质样品带电状态的预测有重要的参考价值.

## 参考文献

[1] Quan R H, Zhang Z L, Han J W, Huang J G, Yan X J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1205 (in Chinese) [全荣辉, 张

- 振龙, 韩建伟, 黄建国, 闫小娟 2009 物理学报 **58** 1205]
- [2] Cazaux J 2005 *J. Microsc.* **217** 16
- [3] Cazaux J 2010 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **176** 58
- [4] Bolorizadeh M, Joy D C 2007 *J. Micro-Nanolithogr. MEMS MOEMS* **6** 023004
- [5] Ciappa M, Koschik A, Dapor M, Fichtner W 2010 *Microelectron. Reliab.* **50** 1407
- [6] Ura K 1998 *J. Electron Microsc.* **47** 143
- [7] Zhang H B, Li W Q, Wu D W 2009 *J. Electron Microsc.* **58** 15
- [8] Li W J, Bauhofer W 2011 *Carbon* **49** 3891
- [9] Cao M, Wang F, Liu J, Zhang H B 2012 *Chin. Phys. B* **21** 127901
- [10] Zhang H B, Li W Q, Cao M 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 047901
- [11] Hillenbrand J, Motz T, Sessler G M, Zhang X, Behrendt N, von Salis-Soglio C, Erhard D P, Altstaedt V, Schmidt H W 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 065410
- [12] Song Z G, Ong C K, Gong H 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 7123
- [13] Liu W, Ingino J, Pease R F 1995 *J. Vac. Sci. Technol. B* **13** 1979
- [14] Feng G B, Cao M, Yan L P, Zhang H B 2013 *Micron* **52-53** 62
- [15] Boughariou A, Blaise G, Braga D, Kallel A 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 4117
- [16] Tsuno N, Ominami Y, Ohta H, Shinada H, Makino H, Kimura Y 2011 *J. Vac. Sci. Technol. B* **29** 031209
- [17] Fakhfakh S, Jbara O, Rondot S, Hadjadj A, Fakhfakh Z 2012 *J. Non-Cryst. Solids* **358** 1157
- [18] Qin X G, Li K, Ma Y L, Zheng X Q, Liu X D 2009 *Proceedings of the 9th International Conference: Protection of Materials and Structures from Space Environment Toronto, Canada, May 20-23, 2008* p665
- [19] Zhou B, Su Q, He D Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4988
- [20] Chen R, Han J W, Zheng H S, Yu Y T, Shangguang S P, Feng G Q, Ma Y Q 2015 *Chin. Phys. B* **24** 046103
- [21] Zheng X Q, Li S T, Wu J, Qin X G, Wang L 2009 *Aerospace Mat. Tech.* **39** 44 (in Chinese) [郑晓泉, 李盛涛, 乌江, 秦晓刚, 王立 2009 宇航材料工艺 **39** 44]
- [22] Fitting H J, Touzin M 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 033711
- [23] Sessler G M 2006 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **13** 942
- [24] Dapor M, Ciappa M, Fichtner W 2010 *J. Micro-Nanolithogr. MEMS MOEMS* **9** 023001
- [25] Yasuda M, Morimoto K, Kainuma Y, Kawata H, Hirai Y 2008 *Jpn. J. Appl. Phys.* **47** 4890
- [26] Qin X G, He D Y, Wang J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 684 (in Chinese) [秦晓刚, 贺德衍, 王骥 2009 物理学报 **58** 684]
- [27] Sessler G M, Figueiredo M T, Ferreira G F L 2004 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **11** 192
- [28] Yasuda M, Kainuma Y, Kawata H, Hirai Y, Tanaka Y, Watanabe R, Kotera M 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 124904
- [29] Li W J, Buschhorn S T, Schulte K, Bauhofer W 2011 *Carbon* **49** 1955
- [30] Miyoshi M, Ura K 2005 *J. Vac. Sci. Technol. B* **23** 2763
- [31] Li W Q, Zhang H B 2010 *Micron* **41** 416
- [32] Chang T H, Zheng J R 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 241401 (in Chinese) [常天海, 郑俊荣 2012 物理学报 **61** 241401]
- [33] Czyzewski Z, MacCallum D O, Romig A, Joy D C 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 3066
- [34] Mott Elastic Scattering Cross Section Calculations <http://web.utk.edu/~srcutk/Mott/mott.htm> [2015-6-01]
- [35] Penn D R 1987 *Phys. Rev. B* **35** 482
- [36] Ding Z J, Shimizu R 1996 *Scanning* **18** 92
- [37] Joy D C, Luo S 1989 *Scanning* **11** 176
- [38] Boubaya M, Blaise G 2007 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **37** 79
- [39] Taylor D M 1978 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **11** 2443

# Numerical simulation of multi-combined effects of parameters on polymer charging characteristics due to electron irradiation\*

Feng Guo-Bao Wang Fang<sup>†</sup> Cao Meng

(Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of the Ministry of Education, Department of Electronic Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

( Received 2 June 2015; revised manuscript received 2 August 2015 )

## Abstract

Charging characteristics of an insulator specimen due to non-penetrated electron irradiation have been attracting a great deal of attention in the fields such as scanning electron microscopy, electron probe analysis, and space irradiation. In this paper, we use a numerical simulation model based on Monte Carlo method for investigating the electron scattering. The elastic scattering is calculated with the Mott cross-section, and the inelastic scattering is simulated with Penn model and the fast secondary electron model according to the primary energy. The charge transport caused by the build-in electric field and charge density gradient is calculated with finite-difference time-domain method. Multi-combined effect of correlative parameters on charging characteristics is investigated by efficient multithreading parallel computing. During the irradiation, the landing energy of primary electrons decreases due to the negative surface potential, which makes the secondary electron yield increase. Variations of secondary electron current and sample current are presented to verify the validity of the simulation model by comparing with existing experimental results. Evolutions of leakage current, surface potential and internal space charge quantity are calculated under different conditions of incident electron current, primary energy and sample thickness. The results are presented in contour maps with different multi-parameter combinations, primary energy and sample mobility, primary energy and sample thickness, and primary energy and incident current. The balance state of charging will be determined by leakage current under conditions of a larger primary energy, sample mobility, incident current, or a less sample thickness, which is shown as the leakage current dominated mode. While in the cases of a lower primary energy, sample mobility, incident current, or a larger sample thickness, the balance state of charging is mainly dominated by secondary electron current, as the secondary electron current dominated mode. In other cases except the above two, the balance state will be determined by both leakage and secondary currents as the mixture mode. In the same mode, variations of charging characteristics with parameters are monotonic. When the change of a parameter makes the negative surface potential increase, the effect of this parameter on negative surface potential will be weakened, while the effects of other parameters on the negative potential will be enhanced. With the change of current dominated mode, the total charge quantity exhibits the local maximum with respect to the sample thickness, and the value of this maximum increases with primary energy. Moreover, the leakage current increases with incident current linearly. The presented results can be helpful for understanding regularities and mechanisms of charging due to electron irradiation, and estimating the charging intensity under different conditions of irradiation and sample material.

**Keywords:** charging characteristics, numerical simulation, contour map, polymer

**PACS:** 79.20.Ap, 72.20.Dp, 02.70.Uu, 72.80.Le

**DOI:** 10.7498/aps.64.227901

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11175140, 11004157, 11204229), the Foundation of National Key Laboratory of Space Microwave Technology, China (Grant No. 9140C530101130C53013), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: wangfang@mail.xjtu.edu.cn