

基于散射截面模型修正的固体表面二次电子发射蒙特卡洛模拟

姚凯文¹, 王丹^{1,2,3*}, 李洋^{1*}, 王晓飞¹, 李瑞东⁴, 贺永宁¹, 张国和¹

1 西安交通大学微电子学院, 710049, 西安;

2 陕西省电子器件与高端芯片重点实验室, 710049, 西安;

3 西安市微纳电子与系统集成重点实验室, 710049, 西安;

4 山东云海国创云计算装备产业创新中心有限公司, 250101, 济南

摘要: 二次电子发射 (SEE) 是固态物理学、表面物理学和材料科学中的关键物理现象, 在能谱仪、探测器、电子显微镜等仪器设备中有重要应用。研究提出一种适用于多种应用场景的二次电子产额 (SEY) 模拟方法, 旨在实现实际工程场景中固体表面 SEY 的有效预测。基于弹性散射、非弹性散射、界面透射三类电子与物质相互作用过程, 应用 Geant4 仿真平台建立基于蒙特卡洛方法的 SEE 计算模型。引入电子截止能量和材料表面势垒等参数提高仿真精度, 仿真获得的归一化结果表明, 在 1.5 倍最可能能量的初始电子能量范围内, 该模型仿真与实验结果差异小于 10%。依据材料特性设置不同的仿真参数特征值, 并用于铝、硅、氧化铝等 6 种固体材料的 SEY 计算, 仿真与实验结果一致性良好。针对实际工程中表面具有功能镀层和微观结构的样品进行 SEY 模拟, 仿真与实验结果在趋势上具有一致性。其中, 硅基氧化铝和氧化镁镀层厚度小于 3 nm 时, 镀层厚度增加会使得 SEY 逐渐增加并趋于饱和。针对微观结构的计算结果表明, 氧化铝和氮化钛表面微观结构能够显著降低 SEY, 随微观结构深宽比和表面孔隙率增加 SEY 逐渐降低并趋于饱和, 且仿真和实验结果的 SEY 最大值平均差异低于 10%。该模型在涉及 SEE 过程的工程场景中具有潜在应用价值。

关键词: 二次电子; 散射截面; 蒙特卡洛方法; Geant4

1 引言

二次电子发射 (secondary electron emission, SEE) 是指在真空环境或低气压条件下, 入射电子以一定能量轰击固体材料表面后, 引发固体内部电子逸出的物理过程。SEE 现象反映了电子与物质相互作用的结果, 是物理电子学领域的重要研究内容之一^[1]。在表面微纳分析领域, SEE 现象普遍存在于电子显微镜、能谱仪、质谱仪探测模块等多种精密科学仪器中^[2,3,4]。在定量描述 SEE 的物理参量中, 二次电子产额 (secondary electron yield, SEY) 是反映固体表面发射二次电子能力的重要参数, 其物理意义是平均每个入射电子可以产生的二次电子个数。SEY 属于材料固有特性, 与材料的原子/分子结构、相结构、表面状态都相关, 这也直接决定了某些材料在特定 SEE 场景中的应用。例如在电子倍增器中, 可以通过在打拿极表面镀覆具有高 SEY 的功能层提升器件整体增益^[5]。在易于发生静电放电的场景中, 可以使用具有高 SEY 的介质材料作为防护层来减缓介质表面的高水平负带电, 提升静电放电阈值^[6]。在加速器、高功率微波等高电场环境中, SEE 现象可能在电磁场环境的加持下引起二次电子倍增放电, 诱发电子云、微放电等不良效应^[7,8,9], 使得系统功能劣化, 这些场景中通常需要降低表面 SEY 来实现系统可靠性的提升^[10]。在实际工程中, 为了减弱或增强特定固体表面 SEY, 可采用表面镀层、微纳制造等方法来调控 SEY^[11,12]。然而, 基于实验的工程实践往往存在周期长、成本高的限制, 且在复杂应用环境中, 多种因素共同作用下的 SEY 变化难以评估。因此, 开发适用于多种应用场景的 SEY 仿真方法, 实现特定条件下固体表面 SEY 水平的精确评估, 对于涉及 SEE 过程的多种工程场景具有重要的应用价值。

目前主流的 SEE 计算模型主要分为三类: 半物理模型、唯象概率模型以及散射截面模型。其中, 半物

甘肃省集成电路制造材料创新联合体项目(批准号: 25ZDGE004)、陕西省创新能力支撑计划-科技创新团队项目(2026RS-CXTD-05)、中央高校基本科研业务费(xtr062025004, xzy012025052)、中国核工业集团有限公司领创科研项目; 陕西省自然科学基金基础研究计划(2025JC-YBQN-076)、强脉冲辐射环境模拟与效应全国重点实验室专项经费(NKLIPR2524)资助的课题。

*通讯作者: E-mail: alexaustin@xjtu.edu.cn, yang.li@xjtu.edu.cn

理模型最早由 Frohlich 于 1932 年提出^[13]，并由 Dionne 在 1975 年进行了系统总结^[14]。该模型形式简洁，参数具有明确的物理意义，但其适用范围较为有限，仅适用于平面，且无法提供详细的二次电子的能量与角度分布等细节信息。为弥补其不足，Vaughan 于 1988 年提出了 SEE 唯象概率模型，通过纯数学方法实现了多种材料 SEY 数据的拟合和预测^[15]。此后，Furman 在 2002 年对该模型进行了完善，增加了二次电子数量、能量和角度的详细分布描述，显著提升了模型的适用性^[16]。尽管如此，SEE 唯象模型在物理解释方面仍较为有限，难以反映固体内部的电子运动行为，因此无法解释纳米表面改性影响 SEY 的物理本质。基于电子散射截面理论的 SEE 计算模型方法则克服了以上两种模型的缺点，从粒子运动的微观角度出发，通过数理公式描述单个电子在固体中的运动路径，并结合蒙特卡洛 (Monte Carlo, MC) 方法，计算电子的散射与激发过程，最终获得 SEE 相关数据。该方法的相关研究最早由 Mott 于 1929 年提出，用于描述弹性散射^[17]，随后 Bethe 于 1930 年对这一方法进行了补充，提出了电子在材料内的能量损失公式^[18]。1987 年 Penn 提出了介电函数模型，在相对论条件下对电子的非弹性散射截面进行了计算^[19]。与其他模型相比，散射截面模型具有更广泛的理论适用性，能够适应不同形态表面的 SEY 预测，但该模型在预测材料本征物理特性对 SEE 行为的影响方面仍有所欠缺。

基于 MC 方法，欧洲核子研究中心开发了 Geant4 (Geometry and Tracking 4) 开源平台，适用于模拟粒子与物质相互作用时发生的各类物理过程。Geant4 平台具有模块化的编程结构和高度可扩展性，支持多种粒子、多种能量范围、多种物理过程的仿真计算，能够处理复杂几何结构受粒子辐照物理过程的模拟，在仿真粒子与物质互作用领域有广泛应用。Geant4 仿真的核心思想是 MC 方法，通过统计大量微观的粒子事件来反映宏观的物理过程，软件中内置了多种物理模型库，支持对多种基本粒子与材料相互作用过程的精确模拟^[20]，并可以根据研究需要选择或自定义物理模型。近年来，已有学者将 Geant4 应用于 SEE 仿真研究。例如，2008 年 Kieft 与 Bosch 在 Geant4 中集成了 Mott 散射截面、声子散射截面以及介电函数理论，成功实现了低压 SEM 下电子与材料相互作用的仿真，并在硅、铝和金等单质材料上取得了与实验结果较为一致的 SEY 模拟结果^[21]。2020 年，Gibaru 等人在此基础上引入了能量损失拟合项与界面逸出功模型，进一步改进了 MicroElec 模型，使其可用于预测 11 种材料（如碳、铝等）的 SEE 行为^[22]。此外，还有研究基于 Furman 模型发展出基于 Geant4 平台的 SEE 唯象概率模型，并开展 SEY 和电子倍增器性能仿真^[23]。综上所述，Geant4 在 SEE 仿真中的应用具有良好的可扩展性。通过模块化调整各类物理模型参数，可实现对 SEE 过程更为精准的模拟与优化。

唯象概率模型虽计算高效，却难以从微观散射机制揭示材料内部的物理过程对 SEE 的影响；MicroElec 等散射截面模型虽物理内涵丰富，但在低能电子输运及界面透射过程的描述上仍存在不足。本工作以电子散射截面理论为基础，以 Geant4 软件作为仿真平台，基于软件中集成的标准电磁物理模型 (G4EmStandardPhysics) 进行部分散射截面模型修正，开展 SEE 仿真研究。仿真过程中，将低能量下的多散射模型修改为单散射模型，并引入了非弹性散射和界面透射过程，构建了一种适用于预测不同材料、不同结构 SEY 演化趋势的 SEE 仿真模型，适用的入射电子能量范围为 50 eV 至 1000 eV。与已有基于 Geant4 的 SEE 仿真研究相比，本工作针对低能电子诱发的 SEE 过程，对 Geant4 的部分物理模型和关键参数进行了修正和补充。模型重点考虑了散射截面、平均自由程、能量损失及散射角分布等关键物理参数，系统探讨了表面势垒与截止能量对内部二次电子产生的影响。模拟了多种材料在不同参数、不同表面状态下的 SEY 演化规律，并将部分仿真数据与已公开的实验结果进行了比较，证明了该仿真方法的适用性。

2 基于散射截面的二次电子发射模拟方法

固体中粒子碰撞诱发 SEE 的物理过程中，包含三种能够产生内二次电子的物理过程：弹性散射、非弹性散射和界面透射。针对弹性散射，其物理过程如图 1(a)所示，该过程中固体内部电子会在不损失能量的情况下，仅发生运动方向的偏转。第二类产生二次电子的过程为非弹性散射，也是产生内部二次电子的主要物

理过程。非弹性散射过程如图 1(b)所示，在固体中，电子在受到原子核或原子内部电子的作用时，电子的能量发生损失，伴随固体内部的价电子的激发或电离。非弹性散射对固体内部电子的能量输运和能谱分布具有重要影响。第三类产生二次电子的物理过程即为电子发生界面透射，其示意图如图 1(c)所示，界面透射过程的模拟用于衡量电子在两种不同物质界面上发生的相互作用。当电子穿过两个固体之间的界面时，需要克服表面势垒并损失一定的能量 E_L 。对于从固体表面进入真空的电子， E_L 是费米能级与功函数之和^[21]。对于穿过两种不同固体材料的电子， E_L 是两种固体材料表面势垒的差值。能量小于 E_L 的电子会被势垒阻挡，无法穿过界面。因此， E_L 的大小直接影响电子的透射效率。

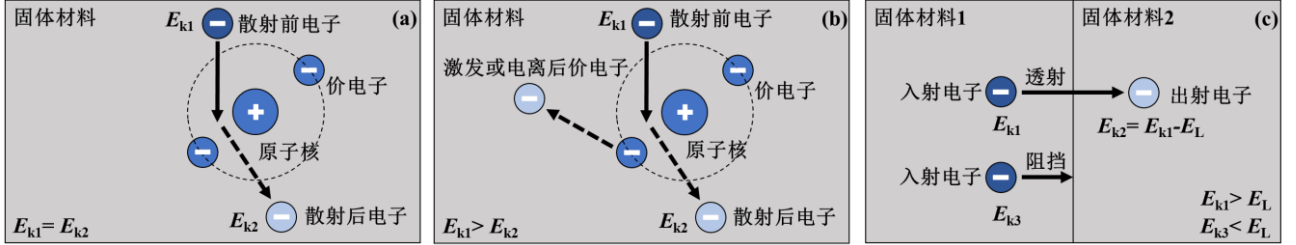


图 1. 电子与物质互作用的三类物理过程示意图，(a) 弹性散射，(b) 非弹性散射，(c) 界面透射

Figure 1. Schematic diagrams of three situations for the physical process of (a) elastic scattering, (b) inelastic scattering, and (c) interface transmission when electrons interact with matter

2.1 弹性散射过程

对于弹性散射，主要包括单散射模型与多散射模型两种。多散射模型使用精简模拟算法，通过合成不同弹性散射的等效近似过程，可以大大提高仿真效率，但是仿真精度会受到近似精度的限制。单散射模型的优点是可以完全使用数理公式进行散射截面的计算，计算精度高。这种计算方式也引入了单散射模型的缺点，在单散射计算过程中，由于每次弹性碰撞均需要进行计算，带电粒子的步数与多次散射模型相比显著增加，因此其仿真速度较差。对比两种散射模型，多散射模型将大量微小散射统计化，在高密度材料中散射截面大，因此碰撞概率高，存在大量散射，然而在低密度的介质（真空、低密度气体）中，发生散射的概率很小，多散射模型可能会产生错误的结果，因此这种情形下单散射模型更合适，故本工作中使用了单散射模型^[24]。

单散射模型可以描述带电粒子 e （电子为 $-e$ ）与原子序数为 Z 的原子核之间的弹性散射^[25]。本工作中针对电子进行讨论，在已知电子和原子核距离 r 的情况下，简化的电子-原子核散射势 V 可表示为：

$$V(r) = -Ze^2 r^{-1} \exp\left(\frac{-r}{R}\right) \quad (1)$$

公式(1)指数项中的参数 R 为屏蔽半径^[26]，用于表示屏蔽效应对散射势的影响，由公式(1)可以看出， R 值越大，指数项对散射势的影响越小，表明屏蔽效果越好；反之， R 值越小，指数项对散射势的影响越大，表明屏蔽效果越差。文献^[26]指出屏蔽半径 R 与原子序数存在如下关系：

$$R = 0.885 r_B^{-3} Z \quad (2)$$

公式(2)中 r_B 是玻尔半径。在第一玻恩近似下，弹性散射截面 $\sigma^{(w)}$ 的微分可以表示为：

$$\frac{d\sigma^{(w)}(\theta)}{d\Omega} = \frac{(-e^2)^2}{(p\beta c)^2} \frac{Z(Z+1)}{(2A+1-\cos\theta)^2} \quad (3)$$

其中 p 是电子动量， β 是电子速度。屏蔽参数 A 可以由文献^[26]给出的方法计算。

最终，修正后的总弹性微分截面 σ 可以通过公式(3)得到：

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma^{(w)}(\theta)}{d\Omega} \left(\frac{Z}{Z+1 \left[1 + \frac{(qR_N)^2}{12} \right]^2} + \frac{1}{Z+1} \right) \quad (4)$$

其中 q 是碰撞后电子转移到原子核中的动量, R_N 是原子核半径。公式(4)中的项 $\left[1 + \frac{(qR_N)^2}{12}\right]^2$ 是考虑原子核

量子尺寸效应的分项^[27], 项 $\frac{1}{Z+1}$ 是基于屏蔽效应及目标电子可动性的考虑了电子散射的经验值。

弹性散射过程的总截面是通过将公式(4)中的微分截面进行积分得到。散射截面的计算, 需要先在截面的立体角空间区间 $(0, \pi)$ 内进行积分, 接着在较小的区间 $(0, \theta_m)$ 内积分, 该区间表示仿真中电子散射的截断角度, 其中 θ_m 是电子的最大散射角。

2.2 非弹性散射过程

应用 Geant4 进行 SEE 仿真的过程中, 电子发生非弹性散射的概率是由其非弹性散射截面的大小决定的。针对本研究涉及的电磁物理模型, 使用 G4eIonisation 语言包来描述固体中电离引起的电子能量损失^[24]。初始电子的能量损失会通过激发固体内部基态电子从而转化为这些电子的动能, 因此在确定非弹性散射过程的能量损失前, 首先需要确定发生非弹性散射的初始电子关于受激电子动能 E_k 的微分散射截面:

$$\frac{d\sigma(Z, E, E_k)}{dE_k} \quad (5)$$

公式(5)的物理意义如下: 在具有特定物理密度和原子序数 Z 的固体中, 总能量为 E 的入射电子激活基态电子并使其具有初始动能 E_k 时, 初始电子所具有的微分散射截面。在非弹性散射建模过程中, 二次电子的截止能量 E_c 是一个需要在仿真中设置的参数, 表示产生内部二次电子所需的最小能量。当 E_k 小于 E_c 时, 获得能量的电子由于其动能小于产生二次电子所需的最小能量, 所以认为不会激发内部二次电子, 这部分能量可认为沉积在晶格中^[24], 可以使用连续能量损失对其进行计算:

$$\frac{dE}{dx} = n_{at} \int_0^{E_c} \frac{d\sigma(Z, E, E_k)}{dE_k} E_k dE_k \quad (6)$$

其中 n_{at} 是固体中单位体积内的电子数量。

当 E_k 大于 E_c 时, 基态电子接收到的能量足以使其摆脱原有能级, 成为激发态电子, 此时固体产生内部二次电子^[24], 并且其散射截面为:

$$\sigma(Z, E, E_k) = \int_{E_c}^{E_{max}} \frac{d\sigma(Z, E, E_k)}{dE_k} dE_k \quad (7)$$

其中 E_{max} 是可以传递到内部二次电子的最大能量, 由公式(8)给出:

$$E_{max} = \frac{E - mc^2}{2} \quad (8)$$

其中 mc^2 是电子的静能。此时的能量损失可以通过 Berger-Seltzer 方程^[28]进行描述:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi r_e^2 mc^2 n_{el}}{1 - (mc^2/E)^2} \left[\ln \frac{2(E/mc^2 + 1)}{(I/mc^2)^2} + F(\tau, \tau_{up}) - \delta \right] \quad (9)$$

公式(9)中, r_e 是电子半径, n_{el} 是电子密度, I 是固体的平均激发能, 其实验取值可参考文献^[29], δ 是密度效应函数, 可根据 Sternheimer 和 Peierls 的方法计算^[30]。函数 $F(\tau, \tau_{up})$ 是 Berger-Seltzer 方程的修正函数, 其中的 τ 表示入射电子动能的归一化, τ_{up} 表示可转移最大能量的归一化:

$$\tau = \frac{E}{mc^2} - 1 \quad (10)$$

$$\tau_{up} = \min\left(\frac{E_c}{mc^2}, \frac{E_{max}}{mc^2}\right) \quad (11)$$

基于此, 公式(9)中的函数 $F(\tau, \tau_{up})$ 可以进一步表示为:

$$F(\tau, \tau_{up}) = +\ln[(\tau - \tau_{up})\tau_{up}] - 2 + \frac{\tau}{\tau - \tau_{up}} + \left(\frac{mc^2}{E}\right)^2 \left[\frac{\tau_{up}^2}{2} + (2\tau + 1)\ln\left(1 - \frac{\tau_{up}}{\tau}\right) + 1 \right] \quad (12)$$

对于 $E_k > E_c$ 处的离散能量损失，可以使用 Moller 截面进行计算^[28]，该截面模型是用于描述电子对电子散射过程的散射截面模型，能够实现理想化的电子互作用过程模拟。在考虑相对论的条件下，对公式(7)进行积分，可以得到每个电子的总散射截面为：

$$\sigma(Z, E, E_c) = \frac{2\pi r_e^2 Z}{E/mc^2 - 1} \frac{1}{1 - (mc^2/E)^2} \left[\frac{(E/mc^2 - 1)^2}{(E/mc^2)^2} \left(\frac{1}{2} - \tau_c \right) + \frac{1}{\tau_c} - \frac{1}{1 - \tau_c} - \frac{2E/mc^2 - 1}{(E/mc^2)^2} \ln \frac{1 - \tau_c}{\tau_c} \right] \quad (13)$$

其中 τ_c 表示以电子动能为基准的截止能量归一化量：

$$\tau_c = \frac{E_c}{E - mc^2} \quad (14)$$

在得到单个电子散射截面的情况下，可以得知固体内部该电子的平均自由程 λ_{in} 为：

$$\lambda_{in} = \frac{1}{n_{at}\sigma} \quad (15)$$

内部二次电子的初始动能 E_k 通过 MC 模型进行随机采样，采样成功后，计算电子的散射方位角和散射极角。其中散射方位角 φ 服从均匀分布，需要满足初级电子和二次电子在同一平面上。对于散射极角，根据散射发生前后电子的能量和动量守恒，可计算出散射的极角 θ 。

2.3 界面透射过程

在界面透射过程中，由于界面势垒 E_L 一般低于 Geant4 中粒子仿真的能量范围（大于等于 10 eV），因此基础的 Geant4 模拟过程并未考虑界面透射过程中势垒对粒子的阻碍作用。因此，在本工作的仿真过程中，定义了界面势垒 E_L ，并认为能量小于 E_L 的电子会被表面势垒反射并沉积在固体中，能量高于 E_L 的电子穿过表面势垒的概率由公式(16)给出^[31]，其中 α 是粒子入射界面时的入射极角，当 $E_L/E_k \cos^2 \alpha > 1$ 时，认为电子穿过表面势垒的概率 $T_q = 0$ 。

$$T_q = \frac{4\sqrt{1 - E_L/E_k \cos^2 \alpha}}{\left(1 + \sqrt{1 - E_L/E_k \cos^2 \alpha}\right)^2} \quad (16)$$

公式(16)采用一维突变势阶跃的量子透射系数，并将三维入射问题按界面法向动能 $E_k \cos^2 \alpha$ 处理。该式适用于局部平面、无充电、无表面态且界面势垒突变的理想条件。

2.4 仿真方法

本工作中建立的 SEE 仿真平台可视化结果如图 2 所示，模拟中选用纯净的 Al_2O_3 作为衬底，选取 1000 个初始动能为 2000 eV 的电子作为初始入射电子，固体中的红色部分为真空，蓝色部分为理想 Al_2O_3 。此外图 2 中垂直于蓝色部分的红线表示入射电子，蓝色部分中的折线表示受到激发的内部二次电子经受散射过程，每折一次表示内部二次电子经历了一次散射，红色部分中每条从蓝色部分中出射的红线代表一个离开固体内部并成功出射的电子轨迹。对于每个受到激发的二次电子，只存在两种可能性，（1）从表面出射成为逃逸的二次电子，（2）经历散射后被固体吸收，所有能量都沉积在固体内部。

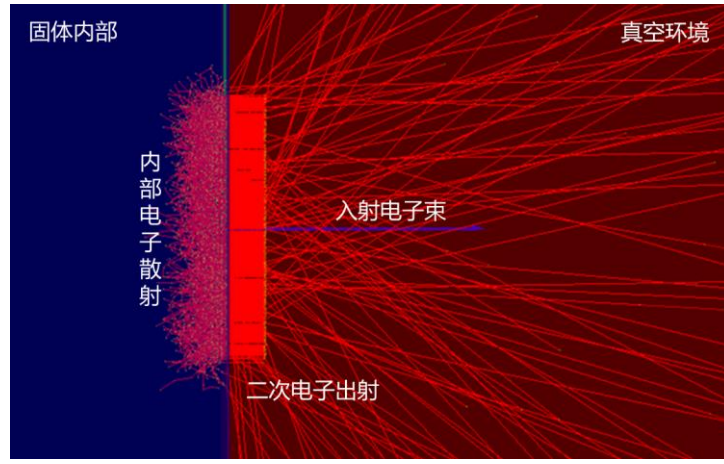


图 2. 仿真模型中设置 1000 个入射电子模拟 SEE 过程的可视化界面

Figure 2. Visualization for simulating the SEE process with 1000 incident electrons set in the simulation model

对于固体内部电子运动和散射的物理过程，最重要的特征参数是电子的平均自由程和能量损失率，图 3 给出这两个参数与电子能量关系的计算结果。如图 3(a)所示，当电子能量 E 约为 100 eV 时，能量损失率达到峰值。此外，图 3(a)中三种固体材料的能量损失率 $-dE/dx$ 存在显著差异，对比发现，密度越高的固体能量损失率越高，表明其在吸收电子能量和阻止内部电子运动方面更有效。图 3(b)展示了 Al_2O_3 、Al 和 Cu 三种固体的电子总平均自由程 λ_{tot} ，结果表明物理密度较高的固体内部电子的 λ_{tot} 较小，并且当内部电子的能量较低时， λ_{tot} 趋于一个较小的常数值，表明此时电子遭受散射的概率较高。此外，图 3 中的计算结果表明，当内部电子的能量从 150 eV 开始升高时， $-dE/dx$ 逐渐减小， λ_{tot} 增加，表明电子在固体内部的能量损失变小，平均自由程变大，说明电子能够在固体内部运动更远的距离。

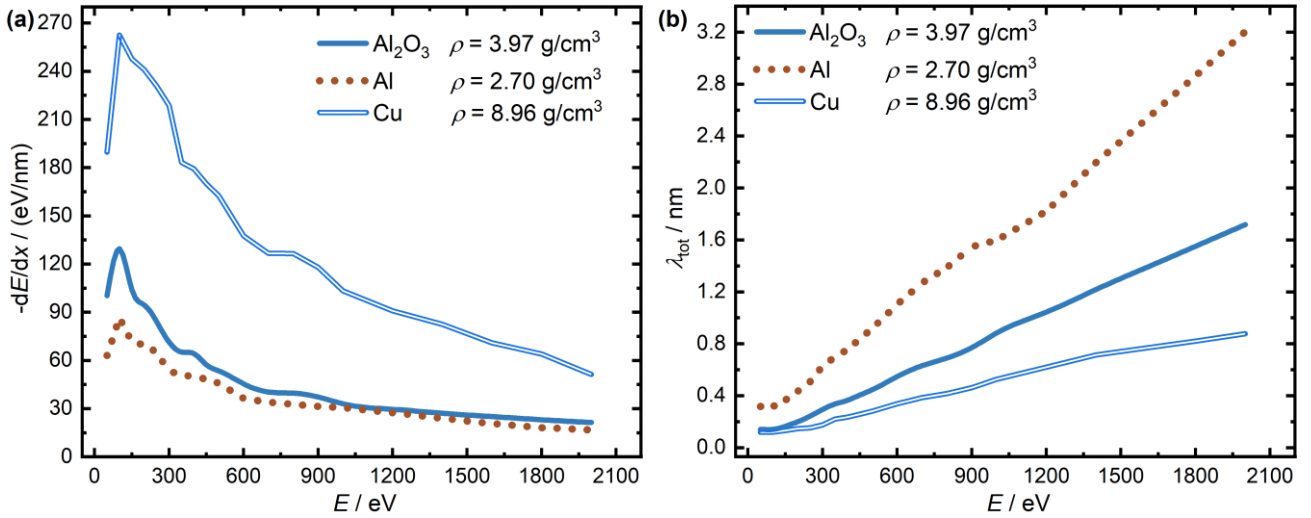


图 3. Al_2O_3 、Al 和 Cu 三种固体中，电子不同动能情况下的 (a)能量损失率 $-dE/dx$ 和(b)电子总平均自由程 λ_{tot}

Figure 3. (a) Energy loss rate, $-dE/dx$ and (b) total mean free path, λ_{tot} at different electron kinetic energy for Al_2O_3 , Al, and Cu bulks

对于图 2 所示的 SEE 过程，内部二次电子产率与初始电子能量之间的关系如图 4 所示，这里以 Al_2O_3 为例，展示出内部二次电子产率与初始电子能量 E_p 呈线性关系。图 4 中的关系表明，在非弹性散射过程中，每激发一个内部二次电子，初始电子损失的能量约为 13 eV。

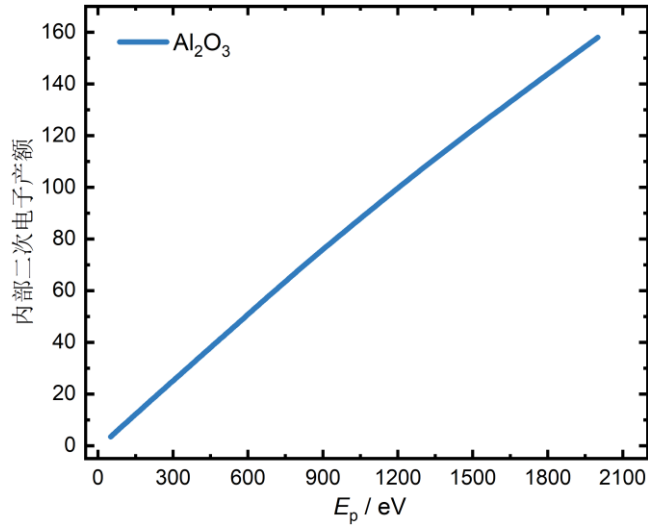


图 4. 不同电子初始能量 E_p 下, Al_2O_3 固体内部激发的内部二次电子产额

Figure 4. Internal secondary electron yield excited inside the Al_2O_3 bulk under different initial electron energies E_p

与 MicroElec 的材料专用低能轨迹结构模型不同, 本文工作的重点并非建立新的第一性原理截面数据库, 而是在 Geant4 标准电磁框架中组合单次弹性散射、低能非弹性电离和界面势垒透射, 并将其扩展到块体、纳米薄膜镀层和表面微观结构。该方法强调模型组件的可配置性和复杂几何适用性。如图 5 所示, MicroElec 模型^[22]、散射截面模型与实验数据^[32]的定量比较, 可以看出 MicroElec 模型在低能下 SEY 上升的斜率大于散射截面模型与实验数据, 而散射截面模型与实验数据的上升斜率十分接近, 说明 MicroElec 模型在低能量区域的描述存在不足。

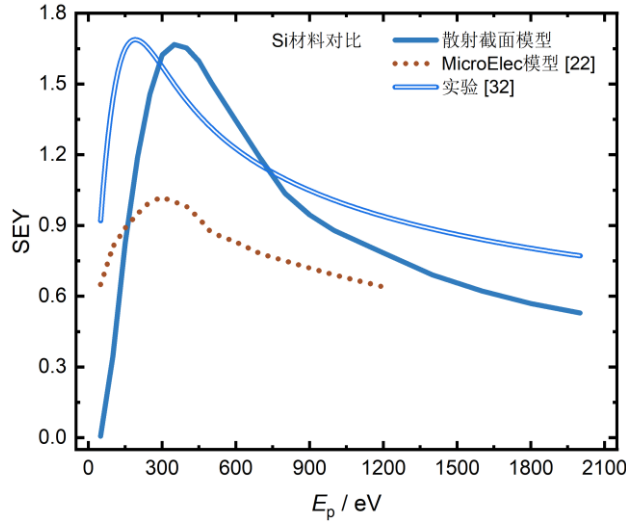


图 5. MicroElec 模型、散射截面模型与实验数据的定量比较

Figure 5. Quantitative comparison of the MicroElec model, the Scattering Cross-Section model, and experimental data

3 结果与讨论

3.1 关键仿真参数

在 SEE 的 MC 模型中, 激发二次电子的截止能量 E_c 和界面势垒 E_L 是库中无法提供的参数, 需要自行设置。对于 SEE 仿真, E_c 值应小于 20 eV, 因为仿真涉及能量很低的电子与固体的相互作用, 否则入射电子的能量将很快沉积在固体中, 并且很难观察到内部二次电子的激发。 E_L 需要用户提供特定值, 理论上, 对于给定的固体, E_L 是其固有特性, 受到晶格结构、表面缺陷、粗糙度和杂质污染等因素的影响。在仿真过程中, 设置初级电子能量 E_p 在 50~2000 eV, 固体的边长与厚度均为 1 μm , 由于固体的体积足够大, 所以可以确保没有电子从侧面或背面射出。仿真过程中, 在每个初始电子能量 E_p 下, 模型中设置 10^4 个初级电子用于 SEE

的 MC 仿真，这些初始电子从块状固体的中心垂直入射。

图 6 展示了在不同 E_c 和 E_L 条件下，当初级电子能量 E_p 在 50~2000 eV 范围内时， Al_2O_3 块体的 SEY 的模拟结果。如图 6(a)所示，模拟结果表明， Al_2O_3 的 SEY 随 E_c 的增加而减小。事实上，更大的 E_c 意味着在每次非弹性散射事件中，有更多的能量转移到激发态的内层电子上，因此受到散射电子的残余能量较少，结果是，每个电子平均激发较少的内层电子。当 E_c 非常小时，内层电子的数量将显著增加，此时 SEY 的变化幅度随 E_c 的变化而更为显著。与此同时，与 SEY 最大值相对应的初级电子能量 E_p 随着 E_c 的增加从约 450 eV 逐渐降至 350 eV，这一波动范围总体上与实验获得的参考值 350 eV 一致。图 6(b)显示了在 $E_c=9$ eV 条件下 Al_2O_3 的 E_L 模拟结果。当 E_L 较大时，意味着为材料设置了更大的表面势垒，这使得内部二次电子更难从表面逸出，从宏观上看，这表现为 SEY 值的减小，如图 6(b)所示。值得注意的是，在 $E_p<200$ eV 的低能范围内，SEY 几乎不随 E_L 变化，这是由于当 E_p 较低时，初级电子的穿透深度较小所致。具体来说，在此情况下激发的内部二次电子更多地集中在表面附近，且这些内部二次电子在向表面移动时能量损失较小，并且具有相似的传输概率 T_q 。

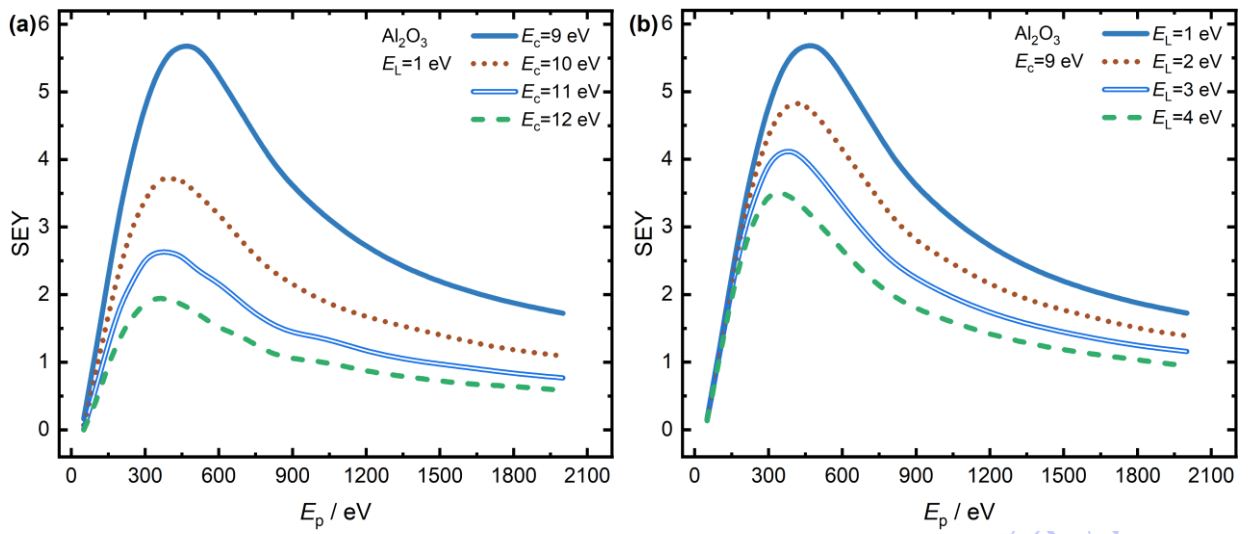


图 6. Al_2O_3 材料的 SEY 模拟结果，(a)不同截止能量 E_c ，(b)不同表面势垒能损耗 E_L

Figure 6. Simulation results of SEY curves of Al_2O_3 bulk at (a) different cut-off energy, E_c and (b) various surface barrier energy loss, E_L

通过对多种拟合计算获得的物理结果进行筛选，最终选取截止能量 $E_c=8.1$ eV 和界面势垒 $E_L=5.4$ eV 作为 Al_2O_3 固体的模型参数，该 E_L 值更接近实际 Al_2O_3 固体的表面势垒，且该情况下模拟得到的 SEY 值与实验结果接近^[32]。在这组参数下对仿真结果进行归一化后，将结果与实验测试结果进行比较，如图 7 所示。在初级电子的 $0 < E_p/E_m < 1.5$ 的归一化能量范围内，MC 模型的仿真结果与实际情况非常相似，归一化 SEY 差异小于 10%。当 $E_p/E_m > 2$ 时，仿真结果低于实验结果，仿真和实验 SEY 之间的差异逐渐变大，该差异主要是由于仿真过程中弱化了背散射电子的影响导致的。实际的电子发射过程中，在 $E_p/E_m > 2$ 的高能区由背散射电子产生的二次电子可占总二次电子的 30%以上，因此导致了 SEY 值的下降。图 7 中的数据对比结果表明，该模型在低能量范围内的适用性更好。

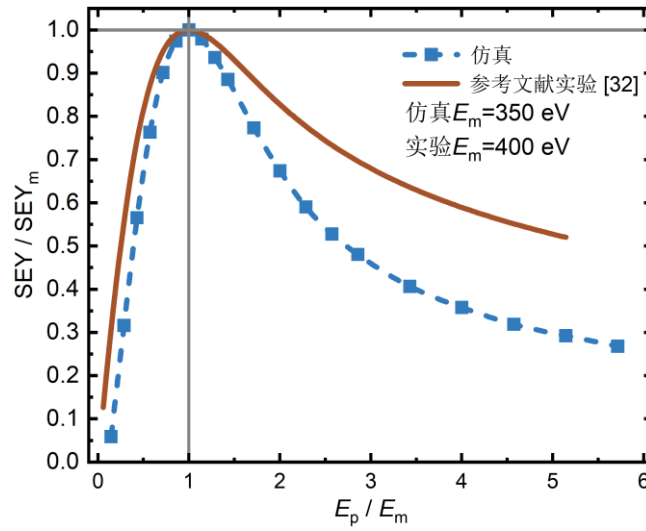


图 7. Al_2O_3 固体的归一化 SEY 模拟结果与实验结果对比

Figure 7. Comparison of normalized SEY simulation results and experimental results of Al_2O_3 bulk

3.2 不同固体材料的 SEY 仿真

通过对不同的固体材料设置符合其材料本征特性的截止能量和表面势垒等参数,本模型可以实现多种固体材料的 SEY 模拟。图 8 显示了各种固体材料的 SEY 仿真结果和实验结果的对比,包括图 8(a)中的四种化合物的仿真结果和实验结果以及图 8(b)中的两种单质的仿真结果和实验结果。表 1 列出了本次模拟中每种固体材料的 E_c 和 E_L 数值。如图 8 所示,仿真得到四种化合物固体和两种单质固体的 SEY 数值与实验结果大致相同。与实验结果相比,六种固体通过仿真计算获得的 SEY 曲线都显示出陡峭的趋势,当 $E_p > E_m$ 时,随着 E_p 的增加,SEY 曲线下落更快,说明当前模型对高能侧总出射电子贡献的描述仍不完整。主要原因是在高能区电子背散射效应占据主导,而低能区背散射效应忽略不计,模型未完整计入初级电子背散射及背散射电子诱发的级联二次电子,因此在高能区仿真 SEY 曲线更加陡峭。表 1 列出了不同文献中 SEY 测试结果与本研究仿真计算结果的对比^[32-38]。表 1 中的结果表明,在选取合适 E_c 和 E_L 的情况下,通过本工作中的仿真模型,能够实现部分固体材料 SEY 的计算,并且仿真结果与实验结果具有一致性,数值上存在微小差异。需要说明的是,因为 SEY 是一个统计量,没有统一的测量标准,不同设备不同环境测得的 SEY 均可能存在差异。所以通常在本工作领域内,学者们认为,在测试原理正确的情况下,同一批次同一设备同样条件测得 SEY 结果才是具有可比性的。如果测试设备或测试条件不同,测得的 SEY 数值大概率会存在明显差异,获得的结果也不具备可比性。由于针对各种固体材料 SEY 的报道非常多,所以本工作选取了部分测试结果,进行和仿真计算结果的对比分析。基于测试结果的多样性,认为 SEY 仿真在模型建立和参数设置正确的情况下,如果 SEY 仿真结果和实验结果在变化趋势上具有一致性,即认为仿真结果是对实验结果的合理预测。

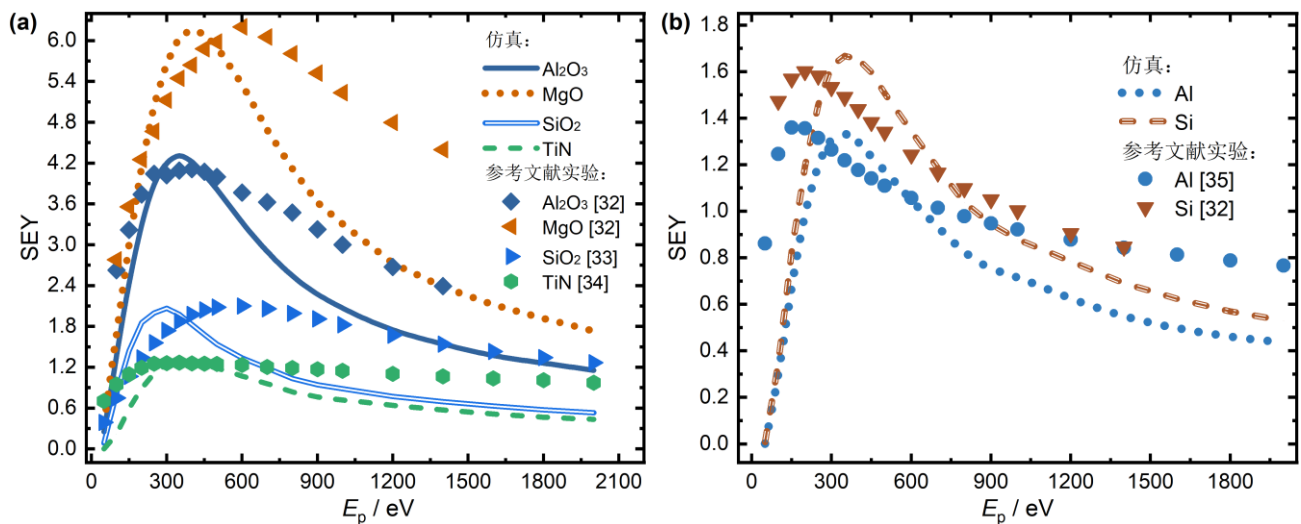


图 8. 仿真结果与实验结果的 SEY 曲线, (a)四种化合物, (b)单质

Figure 8. SEY curves for simulation results and experimental results, (a) four compounds, (b) two elements

表 1.通过仿真和实验获得的 6 种固体材料的 SEY 参数

Table 1. SEY parameters of six bulks obtained by simulation and experiment

固体材料	E_c/eV	E_t/eV	仿真		实验		参考 文献
			E_m/eV	SEY_m	E_m/eV	SEY_m	
Al_2O_3	8.1	5.4	350	4.31	400	4.11	[32]
					750	3.3	[36]
MgO	7.6	4.9	400	6.17	600	6.20	[32]
					250	6.4	[37]
SiO_2	9.1	5.2	300	2.07	600	2.10	[33]
					400	2.1-2.9	[2]
TiN	14.5	4.8	350	1.29	350	1.27	[34]
Al	13.3	4.2	350	1.34	150	1.36	[35]
					300	0.64	[38]
Si	13	4.3	350	1.68	200	1.60	[32]

3.3 SEY 受表面镀层影响的研究

在实际工程中, 表面镀层是改变 SEY 的常用方法。尽管一些实验研究中报告了各类 SEY 测试方法^[39,40]下镀层厚度对衬底表面 SEY 的影响规律^[32,41,42,43], 但在理论层面计算镀层厚度影响 SEY 的研究并不多。在本研究建立的 SEE 模型中, 可以添加表面镀层, 并设定镀层的类型和厚度。这里参考文献^[32]中报道的实验数据, 建立了 Si 衬底表面镀覆 Al_2O_3 和 MgO 纳米薄膜的仿真模型, 并进行了相应的 SEY 仿真计算, 结果如图 9 所示。图 9 所示结果显示, 纳米薄膜对 SEY 具有明显的调控效应, 并且仿真结果实验结果趋势相同, 即随着表面镀层厚度的增加, SEY 逐渐从纯硅的 SEY 过渡到相应纳米薄膜的 SEY。对于文献^[32]中的实验结果, 当纳米薄膜厚度达到 5 nm 以上时, 薄膜结构的 SEY 基本不再变化, 并且与几十 nm 厚的 Al_2O_3 或 MgO 表面 SEY 水平相同。如图 9(a)的仿真结果所示, Si 衬底的 SEY_m 为 1.67, 加入 Al_2O_3 表面镀层后 SEY 增大, 并且 SEY 随厚度变化相对较快, 当薄膜厚度为 3 nm 时, SEY_m 为 4.36。图 9(b)中 Si 基 MgO 薄膜也显示出相同的 SEY 变化趋势, 随薄膜厚度增加, SEY 显著上升, 并且增速逐渐放缓, 当 MgO 薄膜厚度为 3 nm 时,

SEY_m 为 5.76。

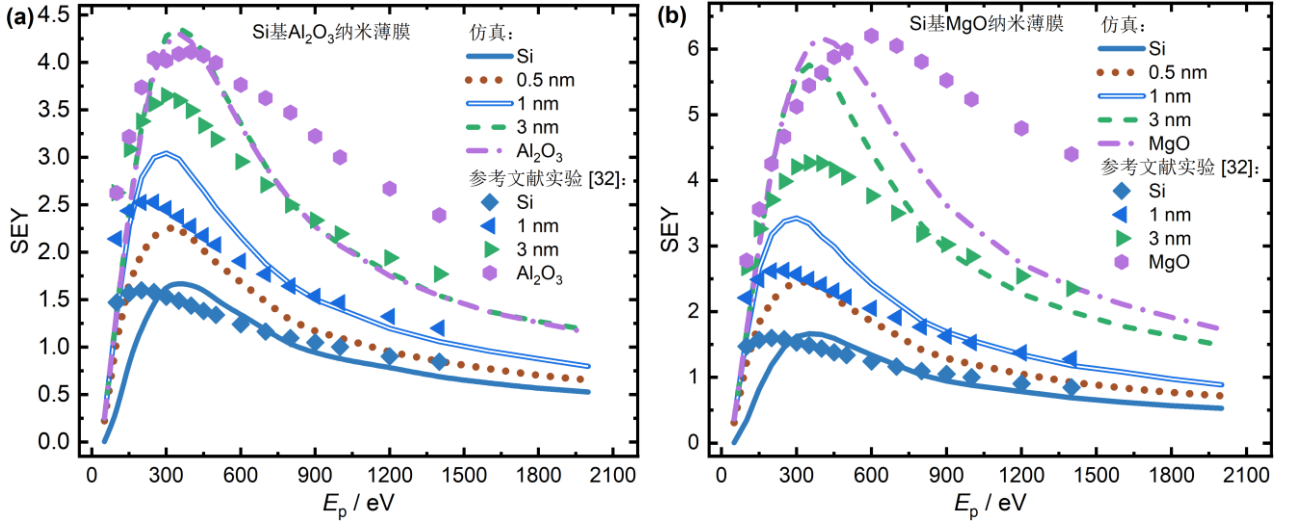


图 9. 不同薄膜厚度下的 Si 衬底 Al_2O_3 纳米薄膜的 SEY 曲线, (a) 仿真结果与实验结果; Si 衬底 MgO 纳米薄膜的 SEY 曲线, (b) 仿真结果与实验结果

Figure 9. SEY curves of Al_2O_3 nanomembranes on Si substrates with different film thicknesses, (a) simulation results and experimental results; SEY curves of MgO nanomembranes on Si substrates, (b) simulation results and experimental results

3.4 SEY 受微观结构影响的研究

对于特定固体材料,具有表面微观结构的表面与平坦表面的 SEY 存在显著差异。对于本工作建立的 SEE 模型,在表面存在微观结构的条件下,设置入射的初级电子均匀分布在微观结构表面,确保电子可能入射到表面的任何位置。建立电子轨迹追踪算法后,结合建立的 SEE 模型,实现固体表面具有微观结构时的 SEY 仿真。在仿真中,对每个电子持续追踪直至其进入真空或能量低于截止条件。电子每次到达界面时重新执行界面透射判定,因此规则结构侧壁之间的多次反射、再入射及其后续散射级联被纳入统计。模型通过修改圆柱和方柱阵列及其尺寸参数,能够区分不同结构形貌对于 SEY 的影响。这里针对具有圆柱形微观结构阵列的 Al_2O_3 和具有方柱形微观结构阵列的 TiN 进行仿真,样品具体尺寸参数可参考 Wang^[35]和 Lian^[34]的相关研究,尺寸具体在表 2 中列出(变化率数值为相较于原始平坦表面)。表 2 中的宽度分别代表圆柱形微观结构的直径以及方形微观结构的宽,间距代表相邻微观结构的中心点之间的距离。相关 SEY 仿真结果,及其与实验结果的对比如图 10 所示。关注图 10 中 SEY 的相对大小,可以发现微观结构会导致 SEY 降低,且表 2 中的 SEY 数值对比显示,6 组样品的仿真结果与实验结果相近。结合表 2 和参考文献可知^[34],随深宽比和表面孔隙率的增加,相同固体材料的 SEY 呈下降趋势。其中,样品#4 号的仿真结果与实验结果最接近。在实验结果中, $E_p > E_m$ 时 SEY 的降低并不明显,这可能是由于表面刻蚀带来的二次粗糙度导致的^[11],当前模型仅包含表 2 所列的理想化一级微米结构,未包含刻蚀产生的二级粗糙度。因此,二级粗糙度只能作为实验与仿真高能侧差异的可能来源,不能由本仿真直接证明。本文关于一级结构几何俘获导致 SEY 降低的结论不依赖该解释,但高能侧定量结果仍具有局限性。实际上,具有表面微观结构的固体 SEY 曲线通常表现出这种趋势,说明实际微观结构中的二级粗糙结构对于 SEY 有显著影响,尤其在能量逐渐升高的初始电子能量区域^[44,45]。

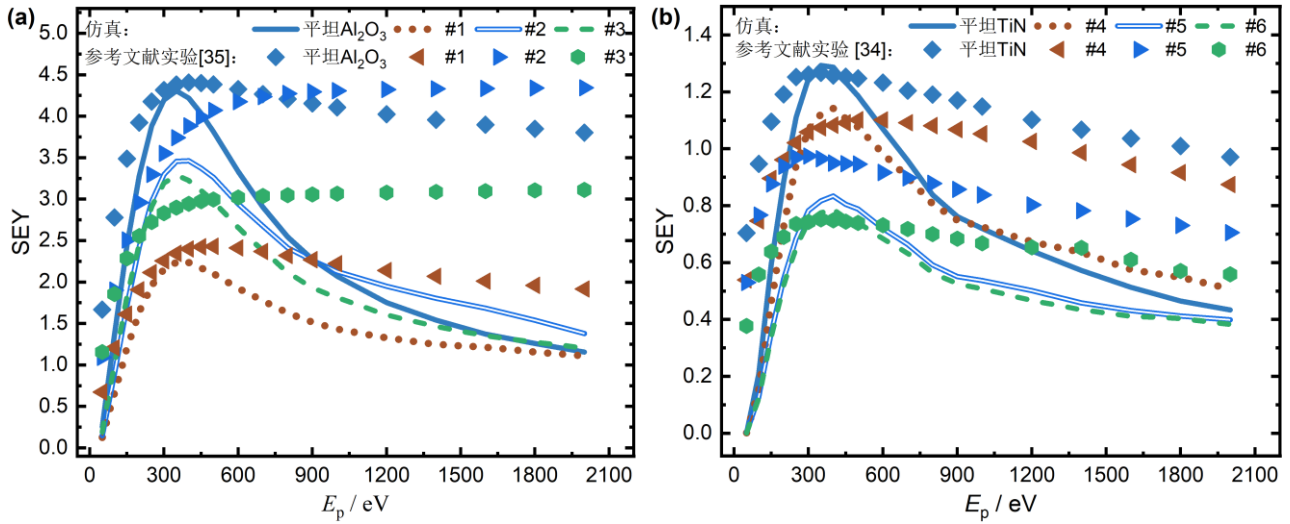


图 10. Al_2O_3 固体的微观结构特征的 SEY 曲线, (a) 仿真结果和实验结果; TiN 固体的微观结构特征的 SEY 曲线, (b) 仿真结果和实验结果

Figure 10. SEY curves of the microstructural characteristics of Al_2O_3 bulk, (a) simulation results and experimental results; SEY curves of the microstructural characteristics of TiN bulk, (b) simulation results and experimental results

表 2. Al_2O_3 和 TiN 固体的 SEY 最大值及相对平坦固体的变化率和微观结构的关系

Table 2. Relationship between the maximum SEY and rates of change relative to flat bulks, and microstructure of Al_2O_3 and TiN bulks

样品	宽度/ μm	深度/ μm	间距/ μm	仿真		实验		参考文献
				SEY _m	变化率	SEY _m	变化率	
#1	162	224	200	2.24	48.0%	2.43	44.8%	[35]
#2	157	34	200	3.46	19.7%	4.34	1.4%	[35]
#3	113	242	200	3.29	23.7%	3.11	29.3%	[35]
平坦 Al_2O_3	-	-	-	4.31	-	4.40	-	[35]
#4	255	40	400	1.14	11.6%	1.10	13.4%	[34]
#5	254	264	400	0.83	35.7%	0.97	23.6%	[34]
#6	258	429	400	0.79	38.8%	0.75	40.9%	[34]
平坦 TiN	-	-	-	1.29	-	1.27	-	[34]

4 结论

研究基于电子与物质相互作用的物理过程, 建立 SEE 的 MC 仿真模型, 模拟了不同模型参数、材料类型和表面结构的 SEY, 并与相关实验结果进行了比较研究, 分析各种因素对仿真结果的影响。通过研究可以得出以下结论。(1) 应用所建立模型能够实现多种单质和化合物材料的 SEE 仿真结果, 在小于 1.5 倍 E_m 的低能量范围内, 仿真与实验结果之间两者 SEY 数据差异小于 10%, 表明仿真结果与实验测得的 SEY 在趋势及数值吻合良好。(2) 所建立的 SEE 模型能够实现表面镀层和表面微观结构情况下, 样品表面 SEY 的定性预测。对于表面镀层样品, 镀层厚度增加会使得表面电子发射水平逐渐从衬底 SEY 水平向薄膜 SEY 水平演化, 随着 Si 衬底的 Al_2O_3 和 MgO 薄膜厚度从 0 增加到 3 nm, SEY_m 逐渐由衬底的 1.67 增加到 4.36 和 5.76; 表面构造微米级阵列结构会降低 SEY, 并且随着深宽比和表面孔隙率的增加而降低, 仿真结果与实验结果在演化趋势上一致性良好。对比仿真结果和实验结果可知, 实验测得的 SEY 最大值与仿真获得的 SEY 最大值平均差异低于 10%。本工作通过不同模型参数、材料类型和表面结构的 SEY 仿真结果与实验结果的对比较验证, 证明了所建立仿真模型的可靠性与适用性, 单个能量点平均机时低于 30 秒, 建模过程方便快捷, 可操作性高, 使得该模型在 SEE 调控研究以及涉及 SEE 过程的工程场景中具有潜在的应用价值。

参考文献

- [1] Sternglass E J 1957 *Phys. Rev.* **108** 1
- [2] Seiler H 1983 *J. Appl. Phys.* **54** R1
- [3] Sickafus E N 1980 *Surf. Sci.* **100** 3
- [4] Leskovar B 1977 *Phys. Today* **30** 42
- [5] O'mahony A, Craven C A, Minot M J, Popecki M A, Renaud J M, Bennis D C, Bond J L, Stochaj M E, Foley M R, Adams B W, Mane A U, Elam J W, Ertley C, Siegmund O H W 2016 *J. Vac. Sci. Technol. A* **34** 01A128
- [6] Lian Z X, Yao K W, Wang D, Zhang K Y, Wang R, He Y N 2025 *Vacuum* **238** 114270
- [7] Yang Z L, Wang X, Chen Z, Wang R, Cui W Z 2024 *Space Sci. Technol.* **4** 0108
- [8] Michizono S, Saito Y, Yamano S Y, Kobayashi S 2004 *Appl. Surf. Sci.* **235** 227
- [9] Wang C, Yang Y L, Shi X R, Li W D, Sun G Y, Chen S L, Ran S L, Zhang G J, Chen Z Q 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 121601
- [10] Montero I, Olano L, Aguilera L, Davila M E, Wochner U, Raboso D, Martin-Iglesias P 2020 *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **241**
- [11] Meng X C, Xu Y N, Lian Z X, Wang J Y, Wang D, Qi K C 2024 *J. Phys. D Appl. Phys.* **57** 265301
- [12] Wu D D, Ma J Z, Bao Y, Cui W Z, Hu T C, Yang J, Bai Y R 2017 *Sci. Rep.* **7** 43749
- [13] Frohlich H 1932 *Ann. Phys.* **13** 229
- [14] Dionne G F 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 3347
- [15] Vaughan J R M 1988 *IEEE Trans. Electron Dev.* **35** 1172
- [16] Furman M A, Pivi M T F 2002 *Phys. Rev. ST Accel. Beams.* **5** 124404
- [17] Mott N F 1929 *Proc. R. Soc. A.* **124** 425
- [18] Bethe H 1930 *Ann. Phys.* **5** 325
- [19] Penn D R 1987 *Phys. Rev. B.* **35** 482
- [20] Agostinelli S, Allison J, Amako, K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, Asai M, Axen D, Banerjee S, Barrand G, *et al.* 2003 *Nucl. Instrum. Meth. A* **506** 250
- [21] Kieft E, Bosch E 2008 *J. Phys. D Appl. Phys.* **41** 215310
- [22] Gibaru Q, Inguimberta C, Carona P, Raine M, Lambert D, Puech J 2021 *Nucl. Instrum. Meth. B* **487** 66
- [23] Ozok F, Yetkin T, Yetkin E A, Iren E, Erduran M N 2017 *J. Instrum.* **12** P07014
- [24] Physics Reference Manual[M/OL]. Geant4 Collaboration.
https://geant4.web.cern.ch/documentation/dev/prm_html/PhysicsReferenceManual/index.html. [2026-4-18].
- [25] Wentzel G. 1926 *Z. Angew. Phys.* **40** 590
- [26] Bethe H A. 1953 *Phys. Rev.* **89** 1256
- [27] Butkevich A V, Kokoulin R P, Matushko G V, Mikhayev S P 2002 *Nucl. Instrum. Meth. A* **488** 282
- [28] Messel H, Crawford D 1970 *Electron-Photon shower distribution* (Oxford: Pergamon Press)
- [29] Berger M J, Inokuti M, Anderson H H, Bichsel H, Dennis A, Powers D, Seltzer S M, Turner J E 1984 *ICRU report 37 Stopping Powers for Electrons and Positrons* Bethesda, MD, USA, January 1
- [30] Sternheimer R M, Peierls R F. 1971 *Phys. Rev. B.* **3** 3681
- [31] Cohen-Tannoudji C, Diu B, Laloe F 1977 *Quantum Mechanics* (Paris: Hermann)
- [32] Zhu X P, Wang D, Wang H, Zhou R D, Li X X, Hong, Y F, Jin C, Wei Y L, Luo C P, Zhao W 2022 *Chin. Sci. Bull.* **67** 2811 (in Chinese) [朱香平, 王丹, 汪辉, 周润东, 李相鑫, 洪云帆, 靳川, 韦永林, 罗朝鹏, 赵卫 2022 科学通报 **67** 2811]
- [33] Cai Y H, Wang D, Zhang W, He Y N 2023 *Surface Technology* **52** 369 (in Chinese) [蔡亚辉, 王丹, 张雯, 贺永宁 2023 表面技术 **52** 369]
- [34] Lian Z X, Xu Y N, Meng X C, Wang D, Chen J X, Qi K C, He Y H 2024 *J. Phys. D Appl. Phys.* **57** 315304
- [35] Wang D, Mao Z S, Ye Z, Cai Y H, Li Y, He Y N, Qi K C, Xu Y N, Jia Q Q 2022 *J. Phys. D Appl. Phys.* **55** 455301
- [36] Ushio Y, Banno T, Matuda N, Saito Y, Baba S, Kinbara A 1988 *Thin Solid Films* **167** 299
- [37] Dawson P H 1966 *J. Appl. Phys.* **37** 3644
- [38] Bronstein I M, Fraiman B C. 1969 *Secondary Electron Emission*. (Moscow: Nauka).
- [39] Wan X M, Yang J, Zhang N, He Y, Hu T C, Cui W Z 2026 *Space Sci. Technol.* **6** 0311

- [40] Cai Y H, Wang D, Qi K C, He Y N 2022 *Rev. Sci. Instrum.* **93** 055103
- [41] Qi X, Ma Y Z, Liu S S, Nie X Y, Zhang T, Wu Y, Peng W P, Hu G M 2024 *Coatings* **14** 13
- [42] Wei W L, Yan B J, Heng Y K, Liu S L, Zhang B T, Peng H X, Wang Y M, Wen K L 2023 *J. Instrum.* **18** P02002
- [43] Wan X M, Hu T C, Yang J, Zhang N, He Y, Cui W Z 2024 *Chin. Phys. B* **33** 113701
- [44] Meng X C, Xu Y N, Lian Z X, Wang J Y, Wang D, Qi K C 2024 *J. Phys. D Appl. Phys.* **57** 26
- [45] Wang D, Ye M, Feng P, He Y N, Cui W Z 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 067901 (in Chinese) [王丹, 叶鸣, 冯鹏, 贺永宁, 崔万照 2019 物理学报 **68** 067901]

录用稿件，非最终出版稿

Monte Carlo simulation of secondary electron emission from solid surfaces based on a modified scattering cross-section model

YAO Kaiwen¹, WANG Dan^{1,2,3*}, LI Yang^{1*}, WANG Xiaofei¹, LI Ruidong⁴, HE Yongning¹, ZHANG Guohe¹

1. School of Microelectronics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049

2. Shaanxi Provincial Key Laboratory of Electronic Devices and High-End Chips, Xi'an 710049

3. Xi'an Key Laboratory of Micro-Nano Electronics and System Integration, Xi'an 710049

4 Shandong Yunhai Guochuang Innovative Technology Co. Ltd., Jinan 250101

Secondary electron emission (SEE) is a fundamental physical phenomenon in solid-state physics and surface physics, playing critical roles in electron microscopes, energy spectrometers, electron multipliers and many vacuum-based scientific instruments. Nevertheless, in some engineering scenarios where electron avalanche multiplication occurs, SEE brings severe reliability risks for engineering systems such as particle accelerators and high-power microwave devices, where it may trigger multipactor discharge, electron cloud effect and electrostatic discharge, eventually degrading or even destroying functional hardware. Conventional experimental characterization of SEE yield (SEY) suffers from long testing cycles and high costs; moreover, it is difficult to quantitatively decouple and evaluate the contributions from complex surface modifications in practical engineering scenarios. Therefore, reliable numerical simulation tools are highly demanded to predict SEY for diverse materials and surface configurations. In this work, we presents a simulation method for SEY calculation that is adaptable to various application scenarios, specifically designed to model strategies for either suppressing or enhancing SEY on solid surfaces in practical engineering contexts. Based on three fundamental physical processes in electron–matter interactions including elastic scattering, inelastic scattering, and interface transmission, this approach integrates the Moller cross-section model, a single-scattering model, and an interface transmission model to establish the SEE process model. Using the Geant4 particle simulation platform, a Monte Carlo (MC) simulation method for SEE prediction has been developed. The SEY values are simulated for different model parameters, material types, and surface structures, and the results are compared with experimental data. Two key physical parameters, the secondary electron cutoff energy (E_c) and surface barrier energy loss (E_L), are introduced and calibrated to improve low-energy simulation accuracy within the incident electron energy range from 50 eV to 1000 eV. By tuning E_c and E_L , the calculation accuracy of the SEE model has been significantly improved. After normalization, in the low-energy regime (less than 1.5 times the most probable energy), the SEY discrepancy between simulation and experimental results remains within 10%. Furthermore, the simulated SEY values for both compound solids (including Al_2O_3 , MgO , SiO_2 , TiN) and elemental solids (including Al , Si) show well agreement with public experimental data. SEY calculations are also performed for typical SEY modulation methods including nanoscale surface coating engineering and surface microstructure engineering. The simulated trends closely align with those observed experimentally. Specifically, for coating thicknesses below 10 nm, increasing thickness causes the surface SEY to transition from the substrate level toward that of the thin film material. For the Si substrates coated with Al_2O_3 and MgO , when the thickness increases from 0 to 3 nm, the maximum SEY rises from 1.67 (bare Si) to 4.36 and 5.76, respectively. Periodic cylindrical and square pore microarray structures effectively suppress SEY for both Al_2O_3 and TiN samples; SEY decreases and becomes saturated with increasing aspect ratio and surface porosity. Across all tested microstructure samples, the average deviation of maximum SEY between simulation and experimental measurements remains below 10%. Merely, limited by idealized geometry setup, the current model does not incorporate secondary micro-roughness introduced by physical etching, which partly accounts for deviations observed at high incident-electron energies. The simulation method achieves acceptable computational efficiency, with the average computing time per energy point below 30 seconds. It supports flexible configuration for bulk materials, nanometer-thick films and complex micro-geometries. This validated Geant4-based SEE MC model provides an effective numerical approach for SEE-related engineering analysis and surface modification design, and showing promising application prospects for SEY prediction including multipactor suppression and secondary electron effect mitigation.

Keywords: Secondary electron; scattering cross section; Monte Carlo method; Geant4

*Project supported by the Integrated Circuit Manufacturing Materials Innovation Consortium Project of Gansu Province, China (Grant No. 25ZDGE004), Shaanxi Innovation Capacity Support Program - Science and Technology Innovation Team Project (No. 2026RS-CXTD-05), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (xtr062025004, xzy012025052), the Leading Innovation Research Program of China National Nuclear Corporation; the Shaanxi Provincial Natural Science Basic Research Program (2025JC-YBQN-076); and a grant from the Special Fund of the National Key Laboratory of Simulation and Effects of Strong Pulsed Radiation (NKLIPR2524).

*Corresponding author. E-mail: alexaustin@xjtu.edu.cn, yang.li@xjtu.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿