

# Monte Carlo 方法模拟低能电子束曝光电子散射轨迹

任黎明 陈宝钦

(中国科学院微电子中心 微光刻实验室, 北京 100029)

**摘要:** 建立了一个适用于描述低能电子散射的物理模型, 利用 Monte Carlo 方法对低能电子在多元多层介质中的散射过程进行模拟。低能电子弹性散射采用较严格的 Mott 截面描述, 为了节约机时, 利用查表与线性插值方法获得 Mott 截面值; 低能电子非弹性散射能量损失采用 Joy 修正的 Bethe 公式计算, 并对其进行改进, 引入多元介质平均电离电位、平均原子序数、平均原子量概念, 利用线性插值方法给出光刻胶 PMMA 对应的  $k$  值。对电子穿越多层介质提出一种新的边界处理方法。在此基础上运用 Monte Carlo 方法模拟高斯分布低能电子束在 PMMA-衬底中的复杂散射过程。模拟结果表明低能电子束曝光具有曝光效率高、邻近效应低、对衬底损伤轻等优点, 与 Lee、Peterson 等人通过实验得出的结论相符。该研究将为电子束曝光技术的定量研究提供一定的理论依据。

**关键词:** 电子束曝光; Monte Carlo 方法; 低能电子散射

**EEACC:** 2550G; 2570; 0240G

**中国分类号:** TN 305.7      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2001)12-1519-06

## 1 引言

随着微电子技术的不断进步, 集成电路日益向超高集成度、超高速、超低功耗方向发展, 对微细图形加工所能达到的特征尺寸的要求越来越高, 已经达到深亚微米、百纳米甚至纳米级。传统的光学曝光技术已经达到了  $0.13\mu\text{m}$  左右的分辨率极限, 难以满足这一要求, 目前人们正在加紧研究开发有可能取代它的下一代曝光技术。低能微阵列电子束直写技术是近几年发展起来的应用于纳米结构图形曝光的高新技术, 日益受到人们重视。目前, 国际上关于低能电子束曝光的实验研究正日益开展, Lee<sup>[1]</sup>、Peterson<sup>[2]</sup> 等人的实验结果表明: 与高能电子束相比, 低能电子束具有曝光效率高、邻近效应低等优点。他们还对其实验结果作了初步探讨, 然而, 却没有从理论上充分论证其结论, 关于低能电子散射机理等许多理论问题尚有待进一步深入。Monte Carlo 方法是人们对随机事件的一种数学模拟方法。电子散射

的 Monte Carlo 模拟对深入了解电子束曝光中邻近效应产生的原因、探讨邻近效应修正的途径可以起到理论指导的先行作用。为此, 本文运用 Monte Carlo 方法对低能电子束曝光中电子在靶体 PMMA-衬底中的复杂散射进行模拟, 并通过大量计算研究不同曝光条件对低能电子在固体中散射过程的影响, 旨在为电子束曝光技术的定量研究提供一定的理论依据。

## 2 散射模型

电子在固体中的散射是一个非常复杂的物理过程, 不可能用通常的解析方法求解, 目前较准确、方便的方法是 Monte Carlo 模拟方法。Monte Carlo 模拟计算的准确度主要取决于所选用的物理模型。电子在固体中的散射虽然复杂, 但总的说来, 可归结为两类散射事件: 弹性散射和非弹性散射, 前者改变电子运动方向, 后者则使电子损失能量。描述弹性散射的一个重要参数为散射截面, 凡是经过此截面的电

任黎明 女, 1972 年出生, 博士研究生, 从事电子束曝光及其模拟技术研究。

陈宝钦 男, 1942 年出生, 研究员, 博士生导师, 主要从事光掩模、电子束曝光和超微细加工技术研究。

2001-01-13 收到, 2001-05-24 定稿

©2001 中国电子学会

子均会受到碰撞。描述非弹性散射的一个重要参数是平均能量损失率。虽然实际的电子散射过程是一个离散的过程，电子在每次散射的终点处离散地损失能量。但是，由于电子束曝光过程中，并非一个电子入射固体，而是大量电子集体入射固体，所以完全可以用平均能量损失率表示大量电子的能量损失过程，而不必细究每个电子每次碰撞的情况。

电子散射过程的 Monte Carlo 模拟计算中，当入射电子能量为几十个 keV 时，电子在固体中的弹性散射通常用 Rutherford 散射截面<sup>[3]</sup>描述，非弹性散射能量损失通常用 Bethe 公式<sup>[4]</sup>计算，这种模型计算简便，既快速又准确，广泛用于早期的 Monte Carlo 模拟计算中。但是，这一模型是根据 Born 近似条件导出的，Born 近似条件可表示为<sup>[5]</sup>：

$$\beta \frac{v}{c} \gg \frac{Z}{137} \quad (1)$$

其中  $\beta$  为屏蔽参量； $v$  为电子速度； $c$  为光速； $Z$  为原子序数。

可以看出，只有当电子能量较大而且原子序数较低时，Born 近似条件才能得到很好的满足，因此，Rutherford-Bethe 模型仅适于高能电子和低原子序数材料。当电子能量为几个 keV 或更低时，该模型不再适用，且能量越低，固体原子序数越高，偏差越大。因此，有必要建立一个更为严格的低能电子散射模型。

因此，人们试图利用这种方法计算弹性散射截面，其中应用较多的是 Pendry 等人应用量子力学分波法求解非相对论 Schrödinger 方程得到的 Pendry 截面<sup>[6]</sup>和 Mott 等人应用量子力学分波法求解相对论 Dirac 方程方法得到的 Mott 截面<sup>[7]</sup>。与 Pendry 截面相比，Mott 弹性散射截面的计算在物理上更为严格，而且计算更为简便一些。因此，本文采用 Mott 截面描述低能电子弹性散射过程。Mott 微分截面为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2 \\ f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{h=0}^{\infty} \{(h+1)[\exp(2i\delta_h) - 1] \\ \quad + h[\exp(2i\delta_{-h-1}) - 1] p_h \cos\theta\} \\ g(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{h=1}^{\infty} [\exp(2i\delta_{-h-1}) \\ \quad - \exp(2i\delta_h)] p_h^l \cos\theta \end{array} \right. \quad (2)$$

其中  $\theta$  为散射角； $f(\theta)$  和  $g(\theta)$  是利用量子力学分波法求解相对论 Dirac 方程获得的入射波和散射波函数； $p_h, p_h^l$  分别为 Legendre 多项式及其连带多项式； $\delta_h$  为分波相移。

Mott 截面可通过下式计算：

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\phi \\ = 2\pi \int_0^\pi (|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2) \sin\theta d\theta \quad (3)$$

Mott 截面的计算相当繁复，需要进行大量的数值计算。在实际模拟中，不可能进行适时计算。本文利用查表与插值相结合的方法，获得 Mott 截面。在连续能量区间选取离散能量点，兼顾准确性与计算机内存两方面的要求，本文取 36 个能量格点，如表 1 所示。对每一能量格点，在  $\theta \in [0^\circ, 180^\circ]$  区间内，利用(2)和(3)式每隔  $2^\circ$  计算一弹性散射截面，可得到 90 个不同角度的 Mott 截面值。这样，对每种元

表 1 Mott 弹性散射截面能量格点的选取

Table 1 Energy Points Selected to Calculate Mott Elastic Scattering Cross Section

能量范围/eV	能量间隔/eV	格点数
$10 \leq E \leq 100$	$\Delta E = 10$	10
$100 \leq E \leq 1000$	$\Delta E = 50$	18
$1000 \leq E \leq 5000$	$\Delta E = 500$	8

素，可得到一个 36 行 90 列的 Mott 截面表。将不同元素的 Mott 截面表输入计算机，形成数据文件。在进行 Monte Carlo 模拟计算时，如果电子能量恰好落在能量格点上，可直接查表获得 Mott 截面值；如果电子能量落在格点能量之间，可通过下列线性插值方法计算：

$$\sigma(E) = \sigma(E_{\min}) + \frac{(E - E_{\min}) \times [\sigma(E_{\max}) - \sigma(E_{\min})]}{E_{\max} - E_{\min}} \quad (4)$$

其中  $E$  为电子能量； $E_{\min}$  为表中最接近于  $E$  但小于  $E$  的能量值； $E_{\max}$  为表中最接近于  $E$  但大于  $E$  的能量值。

对于单一元素介质，可直接采用 Joy 修正的 Bethe 公式<sup>[8]</sup>计算电子非弹性散射平均能量损失率：

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left[ \frac{1.166(E + kJ)}{J} \right] \quad (\text{keV/cm}) \quad (5)$$

其中  $\rho$  为介质密度;  $Z$  为原子序数;  $A$  为原子量;  $k$  为一修正系数. 模拟计算中对于衬底 Si, 采用 Joy 给出的修正系数  $k=0.822$ .

Joy 只给出了用于单一元素介质的修正公式(5), 但我们可以由多元介质非弹性散射能量损失 Bethe 公式推出与其对应的修正式.

通常, 如果靶体为单一元素介质, Bethe 公式可表示为

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left[ \frac{1.166E}{J} \right] \quad (\text{keV/cm}) \quad (6)$$

如果靶体为多元介质, 则 Bethe 公式可表示为:

$$\frac{dE}{dS} = -\frac{7.85 \times 10^4}{E} \sum_i \frac{\rho C_i Z_i}{A_i} \ln \left( \frac{1.166 E}{J_i} \right) \quad (\text{keV/cm}) \quad (7)$$

其中  $C_i, A_i, J_i$  分别为第  $i$  号元素的浓度、原子量和平均电离电位.

(7) 式较(6)式复杂, 为了简化计算, 我们引入多元介质的平均电离电位  $\bar{J} = \exp \left[ \sum_i (C_i Z_i / A_i) \ln J_i / \sum_i (C_i Z_i / A_i) \right]$ , 平均原子量  $\bar{A} = 1 / \sum_i (C_i / A_i)$ , 平均原子序数  $\bar{Z} = \sum_i (C_i Z_i / A_i) / \sum_i (C_i / A_i)$ , 则(7)式可简化为:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{\rho \bar{Z}}{AE} \ln \left( \frac{1.166 E}{\bar{J}} \right) \quad (\text{keV/cm}) \quad (8)$$

可见(8)式和(6)式具有相同的形式, 从而达到了简化计算的目的.

按照 Joy 的修正方法, 可将(8)式写为:

$$\frac{dE}{dS} = -7.85 \times 10^4 \frac{\rho \bar{Z}}{AE} \ln \left( \frac{1.166(E + k \bar{J})}{\bar{J}} \right) \quad (\text{keV/cm}) \quad (9)$$

上式可用于计算电子在多元介质中的非弹性散射平均能量损失率. 对于 PMMA ( $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ ), 容易算得  $\bar{Z} = 3.6008$ ,  $\bar{A} = 6.6767$ ,  $\bar{J} = 65.6 \text{ eV}$ . Joy 没有给出 PMMA 的  $k$  值, 但他给出的七种元素的  $k$  值作图, 可发现  $k$  在介质原子序数较低时与介质原子序数近似呈线性关系, 这样利用线性插值方法可求得 PMMA 对应的  $k=0.757$ .

### 3 电子散射 Monte Carlo 模拟计算方法

电子入射到固体后, 要发生多次散射. 电子与固

体原子不断发生碰撞, 结果是入射电子的能量不断减小, 并改变运动方向, 直到耗尽全部能量或从固体表面逸出. 如图 1 所示, 电子每次散射行为由四个变量决定: 散射起点处的能量  $E_n$ 、散射角  $\theta_n$  (散射电子第  $n$  次与第  $n-1$  次散射方向之间的夹角)、散射方位角  $\phi_n$ 、散射步长  $\Delta_n$ . Monte Carlo 方法模拟电子散射过程就是依据一定的物理模型, 通过计算上述各量, 对每个电子的每次散射行为进行模拟, 进而模拟出大量电子在固体中的运动轨迹.

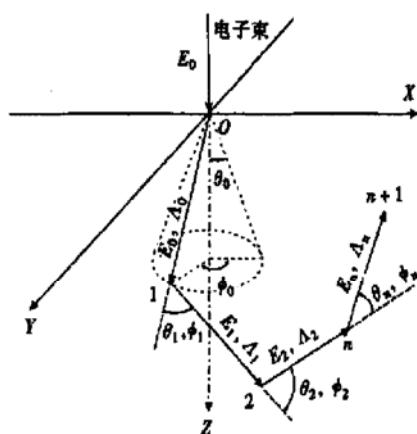


图 1 电子在固体中散射过程示意图

FIG. 1 Sketch of Electron Scattering Processes in Solid

电子在多元介质中散射, 本文采用概率随机抽样方法确定散射中心. 设电子在  $N$  种元素组成的介质中散射, 对每一散射事件, 电子受第  $h$  种原子散射的几率  $p_h$  可以表示为:

$$p_h = (c_h \sigma_h / A_h) / \sum_{i=1}^N (c_i \sigma_i / A_i) \quad (10)$$

其中  $\sigma_i$  为第  $i$  种原子的散射总截面;  $c_i, A_i$  分别为第  $i$  种元素的浓度和原子量.

按(10)式算得  $p_i$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ), 采用直接抽样方法, 取  $(0, 1)$  上的随机数  $R_0$ , 如果  $0 < R_0 \leq p_1$ , 则电子受第一种原子散射; 如果  $p_1 < R_0 \leq p_1 + p_2$ , 则电子受第二种原子散射. 依此类推, 直到第  $N$  种原子为止.

确定散射中心后, 计算弹性散射总截面  $\sigma_i$ , 则电子散射步长可由下式抽样得到:

$$\Delta = -\frac{A}{\rho N_0 \sigma_i} \ln R_1 \quad (11)$$

其中  $A$  为原子量;  $\rho$  为介质密度;  $N_0$  为阿佛加德罗常数;  $\sigma$  为弹性散射总截面.

电子散射角  $\theta$ 、散射方位角  $\phi$  同样由随机抽样方法产生:

$$R_2 = \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta / \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (12)$$

$$\phi = 2\pi R_3 \quad (13)$$

(11)–(13) 式中  $R_1, R_2, R_3$  均为 [0, 1] 内均匀分布的随机数.

对每一步散射, 只要知道上一次散射终点处的能量  $E_n$ 、散射步长  $\Lambda_n$ 、本次散射平均能量损失率  $|dE/dS|_{E_n}$ , 便可确定该步散射终点处的能量  $E_{n+1}$ .

$$E_{n+1} = E_n - |dE/dS|_{E_n} \cdot \Lambda_n \quad (14)$$

电子束曝光中, 靶体一般为多层介质, 对于低能电子散射穿越边界, 需要进行边界处理, 本文提出一种新的边界处理方法, 采用如下边界处理方程:

$$S - \overline{AO} - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \cdot \overline{OB} = 0 \quad (15)$$

如图 2 所示, 设电子由介质 I 穿越边界进入介质 II,  $S$  是以  $A$  点为起点的修正前电子散射步长,  $\lambda_1$  与  $\lambda_2$  分别是能量为  $E_A$  的电子在两种介质中的平均自由程,  $\overline{OB}$  为修正后电子在介质 II 中的散射长度, 由(15) 式计算得到,  $\overline{AO}$  不需要修正, 则修正后电子散射步长  $\Lambda = \overline{AO} + \overline{OB}$ , 散射方向不变.

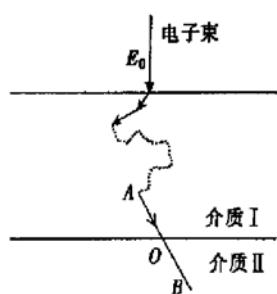


图 2 电子穿越边界路径示意图

FIG. 2 Sketch of Electron Path Crossing Boundary

电子在介质中的空间输运用随动坐标系矢量转换方法<sup>[9]</sup>计算.

## 4 模拟结果

本文应用 Monte Carlo 方法, 对高斯分布低能电子束在靶体 PMMA–衬底中的复杂散射进行了模拟计算, 图 3 给出了不同入射束能下的电子散射轨迹模拟图. 其中 PMMA 厚度为 66nm, 模拟电子数为 20000.

图 3 模拟结果表明: (1) 入射束能越低, 电子散射横向作用范围越小, 从而产生于图形线条间的邻近效应越低. (2) 入射束能越低, 电子散射越集中于胶中, 这样就可以使电子非弹性散射损失的大部分能量沉积于胶中, 提高曝光效率. (3) 入射束能越低, 电子散射纵向作用范围越小, 对衬底的损伤越轻.

因此, 低能电子束曝光技术中, 应尽可能地利用较低束能的电子束. 但是, 由于较低入射束能要求较薄的胶膜厚度, 受工艺中所能达到的胶膜厚度的限制, 入射束能也不可太低, 否则如图 3(f) 所示, 部分光刻胶将得不到充分曝光, 显影后在胶与衬底界面将残留下胶膜, 从而影响刻蚀精度.

## 5 结论

应用 Monte Carlo 方法, 本文对高斯分布低能电子束在靶体 PMMA–衬底中的复杂散射过程进行了模拟, 并通过大量计算研究不同入射束能对电子散射过程的影响. 模拟结果表明低能电子束曝光具有曝光效率高、邻近效应低、对衬底损伤轻等优点.

为了验证模拟结果的正确性, 我们与科技文献中相关实验结果进行了比较. 文献[1] 中显影后胶图形的扫描电镜结果表明: 2keV 时, 线条排列紧密与疏松区域的线宽差别小于 10nm, 这说明低束能时邻近效应很低. 文献[2] 中剂量与束能的关系实验则表明低束能时, 使用较小剂量即可达到充分曝光胶层的目的, 从而曝光效率高.

可见文献[1, 2] 通过实验得出的结论与本文通过 Monte Carlo 模拟得出的结论相符, 从而从实验上验证了本文模拟结果的正确性.

电子与固体的相互作用机理是电子束曝光理论研究的基础. 目前, 我们已将电子散射轨迹的模拟结果用于抗蚀剂沉积能密度的计算及显影剖面的模拟中, 有关结果将另文发表.

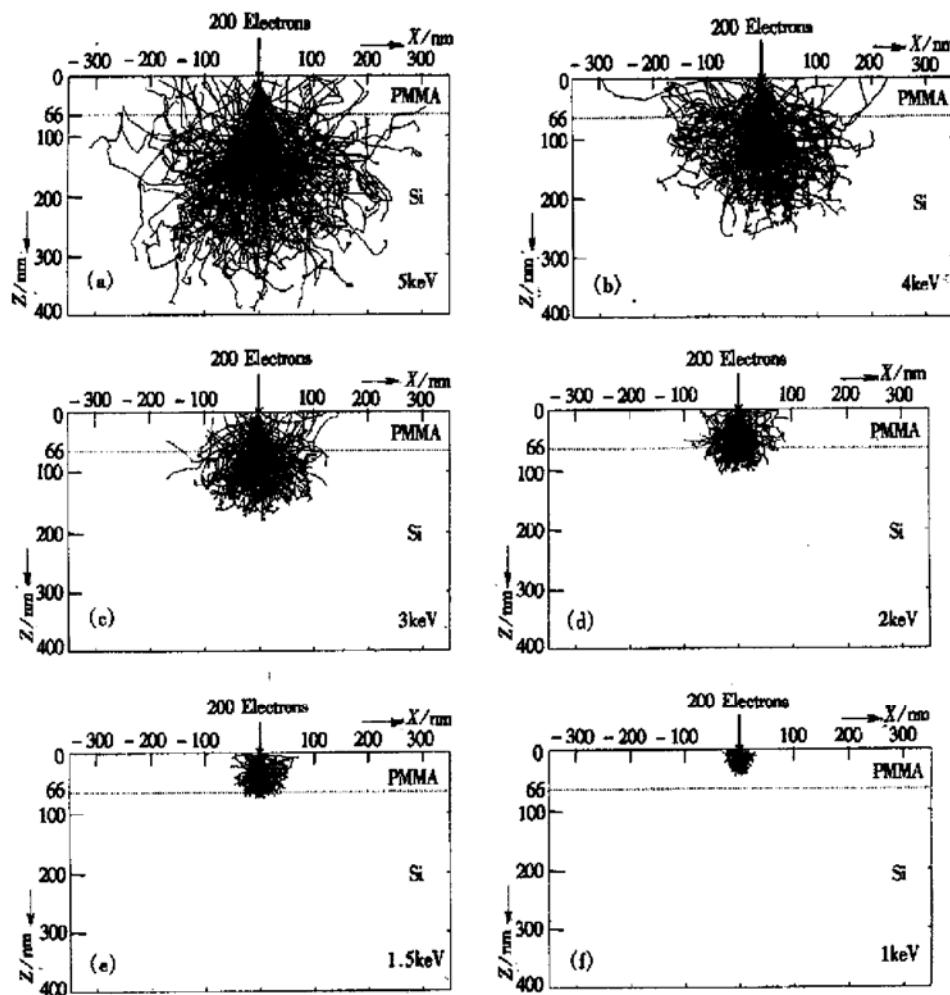


图3 不同入射束能下的电子散射轨迹模拟图 (a)  $E_0 = 5\text{keV}$ , (b)  $E_0 = 4\text{keV}$ , (c)  $E_0 = 3\text{keV}$ , (d)  $E_0 = 2\text{keV}$ , (e)  $E_0 = 1.5\text{keV}$ , (f)  $E_0 = 1\text{keV}$

FIG. 3 Simulation Plot of Electron Scattering Trajectories Under Different Incident Beam Energies

(a)  $E_0 = 5\text{keV}$ , (b)  $E_0 = 4\text{keV}$ , (c)  $E_0 = 3\text{keV}$ , (d)  $E_0 = 2\text{keV}$ , (e)  $E_0 = 1.5\text{keV}$ , (f)  $E_0 = 1\text{keV}$

## 参考文献

- [1] Y. H. Lee, R. Browning *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1992, **10**(6): 3094—3098.
- [2] P. A. Peterson, Z. J. Radzimski *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1992, **10**(6): 3088—3093.
- [3] K. Murata, *J. Appl. Phys.*, 1974, **45**(9): 4410—4117.
- [4] H. A. Bethe, *Handbook of Physics*, 1933, **24**: 273.

- [5] K. Murata, H. Kawata and K. Nagami, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1987, **5**(1): 124—128.
- [6] J. B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction*, Academic Press Inc. Ltd., 1974.
- [7] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd ed., Oxford University Press, 1965.
- [8] D. C. Joy and S. Luo, *Scanning*, 1989, **11**(4): 176—180.
- [9] H. Yan, M. M. El Gomati *et al.*, *Scanning*, 1998, **20**: 465—484.

## Monte Carlo Simulation of Electron Scattering Trajectories in Low-Energy Electron Beam Lithography

REN Li-ming and CHEN Bao-qin

(R&D Center of Microelectronics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

**Abstract:** A Monte Carlo simulation of low-energy electron scattering in multilayer and polybasic medium is performed on the basis of a physical model describing the low-energy electron scattering. The more rigorous Mott cross section is adopted for the elastic scattering of low-energy electrons. And the method of searching table and linear interpolation is used to save computer time. The Bethe formula modified by Joy is employed to calculate the energy-loss of low-energy electrons during inelastic scattering processes and improved in this work. The mean ionization potential, the mean atomic number and the mean atomic weight of polybasic medium are introduced, and the value of  $k$  of PMMA is given by means of linear interpolation. A new boundary treatment method used for low-energy electron passing across the boundary between two different medium layers is proposed. On this basis, the Monte Carlo method is utilized to simulate the complex scattering of Gauss-distribution low-energy electron beam in PMMA-substrate. The modeling results show that low-energy electron beam lithography has the advantage of high throughput, low proximity effects and small damage to the underlying substrate. It is in agreement with the conclusion got from Lee *et al*'s and Peterson *et al*'s experiments. This work would provide some theoretical basis for the quantitative investigation of electron beam lithography.

**Key words:** electron beam lithography; Monte Carlo method; low-energy electron scattering

**EEACC:** 2550G; 2570; 0240G

**Article ID:** 0253-4177(2001)12-1519-06

---

REN Li-ming female, was born in 1972, PhD candidate. She is engaged in electron beam lithography technology and modeling.

CHEN Bao-qin male, was born in 1942, professor, tutor for PhD candidate. He is mainly engaged in optical mask, electron beam lithography and microfabrication technology.

Received 13 January 2001, revised manuscript received 24 May 2001

©2001 The Chinese Institute of Electronics