

МАШИНОСТРОЕНИЕ

УДК 519.876.5

Т.Ю. Поздеева, А.А. Сметкин

T.Yu. Pozdeeva, A.A. Smetkin

Пермский национальный исследовательский политехнический университет

Perm National Research Polytechnic University

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ЛУЧА С ВЕЩЕСТВОМ

MONTE CARLO SIMULATION OF ELECTRON BEAM INTERACTION WITH MATTER

Приведены общие принципы взаимодействия электронного луча с веществом и компьютерного моделирования процессов рассеяния электронов в твердых телах методом Монте-Карло. Рассмотрены распространенные программные пакеты, позволяющие осуществлять на своей платформе моделирование статистических испытаний. Данный обзор обусловлен тем, что в научной среде развитие средств обработки, передачи и хранения информации, а также использование компьютерного анализа имеют важное значение в изучении имитационного моделирования электронных траекторий в твердых телах. Представлены результаты моделирования взаимодействия электронов со слоистой гетероструктурой на кремниевой подложке с использованием программного пакета CASINO.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, компьютерное моделирование, вторичные электроны, отраженные/обратно рассеянные электроны, рентгеновское излучение, траектории движения электронов, катодolumинесценция, ускоряющее напряжение.

The general principles of the interaction of an electron beam with matter and the computer simulation of the processes of electron scattering in solids by the Monte Carlo method are given in the article. Considered are the widespread software packages that allow the simulation of statistical tests on its platform – this review is due to the fact that in the scientific environment, the development of processing, transmission and storage facilities, as well as the use of computer analysis, is important in the study of simulation of electronic trajectories in solids. The results of modeling the interaction of electrons with a layered heterostructure on a silicon substrate using the CASINO software package are presented.

Keywords: the Monte Carlo method, computer simulation, secondary electrons, BSE backscattered electrons, X-ray radiation, electron trajectories, cathodoluminescence, accelerating voltage.

На данный момент существует широкий спектр научных работ, которые посвящены исследованиям, реализации соответствующего ПО и применению метода Монте-Карло для моделирования транспортировки электронов с учетом специфичности исследуемых сред, нюансов эксперимента,

теоретических начал, лежащих в основе физической модели процесса. Разные виды реализации способа случайных траекторий предлагаются в программах, которые дают возможность изучать поведение электронного пучка в твердом теле: Casino, WinXRay, Penelope и др. [1]. Целью представленной статьи является обзор современных методов компьютерного моделирования взаимодействия излучения с веществом. Приведен пример реализации метода Монте-Карло при взаимодействии электронного луча с гетероструктурой типа InGaAsP/InP.

Взаимодействие электронов с веществом. Вследствие взаимодействия ускоренных электронов с веществом происходят процессы, которые приводят к выходу из исследуемого образца электронов либо квантов электромагнитного излучения. Основными сигналами, которые регистрируются в сканирующем электронном микроскопе, являются вторичные электроны, отраженные электроны и рентгеновское излучение. Ускоренные электроны пучка (первичные электроны) попадают в материал на глубину порядка микрон, рассеиваясь.

Глубина проникновения определяется энергией первичных электронов и плотностью материала, в котором они рассеиваются [2].

Меньшее значение атомного номера и большая энергия электронов позволяют электронам попадать в образец на большую глубину, соответственно, становится меньше вероятность их отклонения от исходной траектории. Область взаимодействия конфигурацией напоминает грушу. В обратном случае (большой средний атомный номер и небольшая энергия) область взаимодействия напоминает форму полусферы (рис. 1).

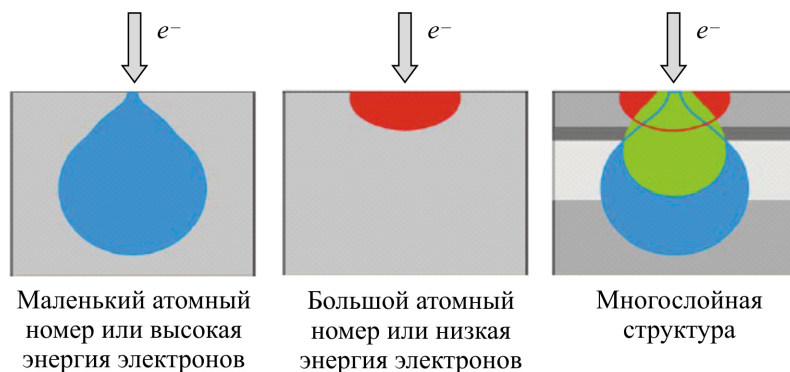


Рис. 1. Зависимость области взаимодействия от условий эксперимента [3]

В случае если исследуемый образец представляет из себя мультислойную композицию, то вероятно одновременное возбуждение нескольких слоев, находящихся на разной глубине. Изменение энергии электронного пучка

в эксперименте дает возможность исследовать мультислойные структуры по глубине, иными словами, устанавливать интенсивность сигналов (к примеру, катодолюминесценции либо характеристического рентгеновского излучения), связанных с разными слоями, в зависимости от глубины проникновения электронов в вещество (см. рис. 1) [3].

Вторичные электроны подобно электронам образца, выбитым первичным лучом, выходят с маленькой глубины ($\approx 1\text{--}10\text{ нм}$), на которой рассеяние пучка в плоскости изображения несущественно (рис. 2), поэтому они дают изображение с наибольшим разрешением.

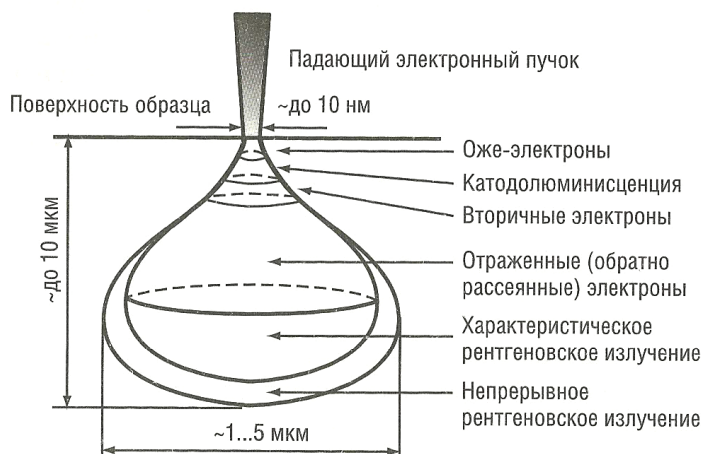


Рис. 2. Формирование продуктов взаимодействия первичного пучка электронов с веществом

Наклонные области плоскости на изображении во вторичных электронах представляются наиболее светлыми в сопоставлении с поверхностью перпендикулярной первичному пучку. Поблизости острых краев либо углов образца имеется увеличение выхода вторичных электронов, связанное с возможностью выхода через несколько поверхностей (краевой эффект) [2, 4].

Вводные положения моделирования траекторий электронов методом Монте-Карло. Методы Монте-Карло (М-К) – это численные способы решения математических задач прогнозированием случайных величин, т.е. прослеживания значений одной либо нескольких переменных, взятых случайно из очень большого числа равновероятных значений.

Единая схема имитационного моделирования прохождения частиц (электронов) через вещество способом М-К включает розыгрыш следующих величин и характеристик: точки нахождения частицы (ее координаты), направления ее перемещения, ее начальной энергии и потерь энергии после каждого столкновения, длины свободного пробега, вида столкновения, углов падения и рассеяния.

Отдельная траектория, которая хоть и может быть безошибочно рассчитана, никак не представляет абсолютной картины взаимодействия электрона с твердым телом, и по этой первопричине с целью достижения статистической достоверности следует рассчитать огромное количество траекторий (около 10^3 – 10^4). При вычерчивании многих десятков траекторий визуализируется конфигурация области взаимодействия электронов пучка с твердым телом. Данная область находится в зависимости от характеристик пучка и образца: энергии электронов пучка, атомного номера использованного материала объекта, наклона объекта и его структуры. Численные значения, описывающие область взаимодействия, считаются приближенными, пределы области взаимодействия нечетко установлены. Однако при применении значительного числа траекторий (вплоть до 10 000) и надежном подборе алгоритма расчетов способом Монте-Карло ключевые свойства взаимодействия определяются с точностью вплоть до 1–5 % [5].

Программные пакеты для расчетов методом Монте-Карло. Программа EISS (Electron beam Monte Carlo simulator) (электронно-лучевой симулятор методом Монте-Карло) имитирует взаимодействие между электронами и твердыми телами.

Взаимодействия «электрон – твердое тело» аппроксимируется моделью, в которой электрон-атомные взаимодействия эластичны, а потери энергии электронов непрерывны между упругими процессами. Упругие взаимодействия описываются релятивистским сечением Мотта, которое включает в себя спин-орбитальное взаимодействие и остается точным для энергий ближнего и дальнего порядка. Вторичные электроны генерируются и отслеживаются в «быстрой» вторичной модели.

Программа может управлять планарными образцами до трех слоев, с произвольной толщиной. Ряд материалов, характерных для электронно-лучевой литографии, заранее определены и содержатся во внутренней базе данных ПО, но программа позволяет пользователю определить новые материалы для всех трех слоев [6].

Программа CASINO была разработана с использованием ориентированного языка программирования C++. Детали работы программы описывают следующие разделы: моделирование проб, расчет траектории электронов, вывод и другие специальные функции. Представлены две базовые геометрии для представления образца: вертикальные и горизонтальные плоскости. Данные простые модели можно использовать для воспроизводства большого количества реальных образцов, таких как многослойные, гетероструктуры и границы зерен.

Программное обеспечение позволяет рассчитать среднюю плотность вещества на основе весовой доли каждого элемента, но рекомендуется использовать известные значения плотности в г/см^3 , если они имеются. Функ-

ция библиотеки позволяет пользователю хранить специальные составы для редких сплавов и соединений [7, 8].

Программа Win X-Ray является продолжением хорошо известной программы Casino, которая включает в себя статистические распределения для электронов обратного рассеяния, захваченных электронов и потери энергии. Новыми функциями являются полное моделирование спектра рентгеновского излучения, зарядный эффект для изоляции образца [9].

Программа MC X-Ray является продолжением программ Casino и Win X-Ray, при этом выигрывает у X-Ray по своим функциям, так как вычисляет полные спектры рентгеновского излучения от моделирования рассеяния электронов в твердых телах различных типов геометрии. MC X-Ray позволяет использовать до 256 различных материалов, имеющих форму шариков, цилиндров и комбинаций горизонтальной и вертикальной плоскостей. Все эти образцы могут иметь различный состав [9, 10].

Программа «Компьютерная лаборатория» (PCLab) создана для моделирования методом Монте-Карло процессов распространения электронов, позитронов, фотонов и протонов в веществе.

Программа создана на базе пакета программ EPHSA. В программе предусмотрены следующие разновидности взаимодействий: упругие, ионизационные столкновения, тормозное излучение – для электронов и позитронов (эффект аннигиляции для позитронов); эффект Комптона, фотоэффект, эффект образования электронно-позитронных пар – для фотонов; перенос протонов моделируется в отсутствие ядерных взаимодействий, разыгрываются только упругие и неупругие кулоновские столкновения.

Процесс генерации характеристического излучения предусмотрен для K и L оболочек атомов, как вследствие фотопоглощения, так и в результате ионизации атома заряженными частицами [11, 12].

Программа Geant4 представляет собой полный набор инструментов и библиотек, написанных на C++, что дает возможность пользователю моделировать прохождение частиц через вещество, а также собственную систему детектора. Задание геометрии детектора, система ПО автоматически переносит частицы, снятые в детектор путем моделирования взаимодействий частиц в веществе на основе метода Монте-Карло.

Geant4 полностью открыта, регулярно обновляется и может быть установлена на общих вычислительных платформах (Linux, Windows, Mac и т.п.) [13, 14].

Программа MCNP (Monte Carlo N-Particle) является универсальным методом, который обрабатывает произвольную трехмерную конфигурацию материалов в геометрических ячейках, ограниченных первой и второй степенью свободы плоской поверхности, также имеет возможность обработки эллиптической или тороидальной форм.

Точечные данные по сечениям, как правило, используются, хотя возможна работа с группированными данными. Для нейтронов учитываются все реакции, приведенные в той или иной оценке поперечного сечения. Тепловые нейтроны описываются как свободный газ. Для фотонов существуют код счета некогерентного и когерентного рассеяния, возможность флуоресцентного излучения после фотоэлектрического поглощения, поглощения в производстве в паре с локальным излучением аннигиляции излучения и тормозного излучения. Применяется модель непрерывного замедления для переноса электронов, которые включают позитроны, К-рентгеновские лучи, а также тормозное излучение, но не включают в себя внешние или самоиндукцию поля [15].

Программа PENELOPE (Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons) выполняет моделирование методом Монте-Карло в сочетании с электрон-фотонным переносом в произвольных материалах для широкого диапазона энергий, от нескольких сотен эВ до около 1 ГэВ. Транспортировка фотонов рассчитывается с помощью стандартной схемы, детального моделирования. Смешанная процедура используется для моделирования электронных и позитронных взаимодействий (упругое рассеяние, неупругое рассеяние и тормозное излучение), в котором «жесткие» взаимодействия (т.е. те, у которых угол отклонения и/или потери энергии больше, чем предварительно выбранный угол отклонения электрона) моделируются детальным образом, в то время как «мягкие» взаимодействия рассчитываются из нескольких подходов рассеяния. Фотонные взаимодействия (рэлеевское рассеяние, рассеяние Комптона, фотоэффект и рождение электрон-позитронной пары) и позитронная аннигиляция моделируются более детальным анализом. Пакет геометрии называется PENGEOМ и позволяет осуществлять генерацию случайных электронно-фотонных излучений в материальных системах, состоящих из однородных тел, ограниченных поверхностями, т.е. плоскостей, сфер, цилиндров и т.д. Данное программное расширение служит не только в качестве руководства кода системы PENELOPE, но и предоставляет пользователю необходимую информацию, чтобы понять детали алгоритма Монте-Карло [16, 17].

Программа SRIM представляет собой набор программных пакетов, которые вычисляют особенности переноса ионов в веществе. Включает в себя быстрые вычисления, которые производят таблицы тормозных способностей, диапазон распределений для любого иона при какой угодно энергии в той или иной элементарной мишени. Моделируются процессы ионной имплантации, ионного распыления, ионной передачи энергий, ионной лучевой терапии и т.д. В данном ПО имеет место программный пакет «Наука», в котором рассмотрены основные теории остановки ионов в веществе [18, 19].

Расчет траекторий движения электронов. При движении электрона совершается его взаимодействие, сопровождаемое обменом энергий электрона с атомами материала, изменением направления хода первичного электрона, генерацией вторичных электронов, возбуждением фононов, химическими процессами.

На базе эмпирических экспериментальных данных принято считать, что отклонение электрона на угол φ в диапазоне $(0, 10^\circ)$ равно 0,6, а в диапазоне $(10, 180^\circ) - 0,4$.

Расчет расстояния между взаимодействиями электрона с веществом невозможен без средней длины пробега:

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma}, \quad (1)$$

где A – атомный вес, г/моль; ρ – плотность, г/см³; N_A – число Авогадро, моль⁻¹.

Величина сечения рассеяния σ на угол φ , входящая в формулу (1), определяется исходя из величин Z (порядкового номера вещества) и E (энергии), кэВ, по модели Резерфорда:

$$\sigma = 1,62 \cdot 10^{-20} \frac{Z^2}{E^2} \operatorname{ctg} \left(\frac{\varphi}{2} \right). \quad (2)$$

Расстояние между столкновениями в каждом конкретном случае равно

$$d_{S_i} = -\lambda \cdot \ln(\gamma), \quad (3)$$

где γ – случайная величина в диапазоне $(0, 1)$, имеющая нормальное распределение вероятности. После каждого взаимодействия происходит расчет нового сечения упругого взаимодействия и остаточной энергии электрона по формуле

$$E_i = E_{i-1} - dE, \quad (4)$$

где dE – изменение энергии электрона в ходе одного взаимодействия, которая определяется исходя из модели непрерывного замедления по формуле Бете:

$$\frac{dE}{dS} = -7,85 \cdot 10^4 \frac{Z_p}{AE} \ln \left(\frac{1,166E}{J} \right), \quad (5)$$

где J – средний потенциал ионизации, за который примем среднюю потерю энергии на взаимодействие при учете всех возможных процессов потери энергии, эВ:

$$J = 9,76Z + 58,5Z^{-0,19}. \quad (6)$$

Используя формулы (1)–(6), а также пересчет координат электрона, нужные проверки нахождения электрона в определенном виде материала либо его выхода за границы облучаемой структуры, в работе был реализован способ Монте-Карло, на базе которого ведут расчет траекторий перемещения электронов в материале [20, 21].

Из уравнения Бете (5) можно найти полный траекторный путь, проходимый частицей до полной потери энергии (пробег по Бете R_B):

$$R_B = \int_{E=E_0}^{E=0} \left(\frac{dE}{ds} \right)^{-1} dE. \quad (7)$$

Для определения максимальной глубины проникновения электронов используют выражение Канай–Окаяма:

$$R_0 = \frac{0,0276AE_0^{1,67}}{\rho Z^{0,889}}, \quad (8)$$

где E_0 – энергия первичных электронов, кэВ.

На рис. 3 приведены рассчитанные по формуле (8) величины глубины проникновения электронов различных энергий для некоторых материалов.

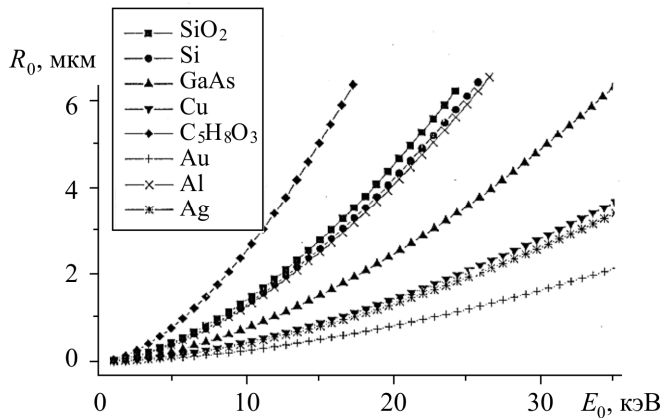


Рис. 3. Глубина проникновения электронов в различные материалы в зависимости от их энергии (расчет по формуле (8)) [5]

Моделирование методом Монте-Карло взаимодействия электронного луча с гетероструктурой типа InGaAsP/InP в ПО CASINO. Для демонстрации моделирования взаимодействия электронного луча с веществом нами была выбрана гетероструктура InGaAsP/InP на кремниевой подложке.

При проведении опыта считали, что толщина слоев составляет 10 нм для InGaAsP и 15 нм для InP, а ускоряющее напряжение U было равно 1, 3, 5 кэВ.

Сравнение полученных моделей электронных пучков и графиков максимальной глубины проникновения электронных траекторий в образце при различных ускоряющих напряжениях показало, что глубина выхода отраженных электронов при $U = 1$ кэВ составляет 10,3 нм в зоне границы между слоями InGaAsP/InP, что свидетельствует о невысокой глубине проникновения вследствие небольшого напряжения; для $U = 3$ кэВ глубина выхода находится на уровне порядка 50,4 нм, что соответствует подложке (Si); для 5 кэВ эта величина возрастает в 2,2 раза – 113,3 нм (рис. 4).

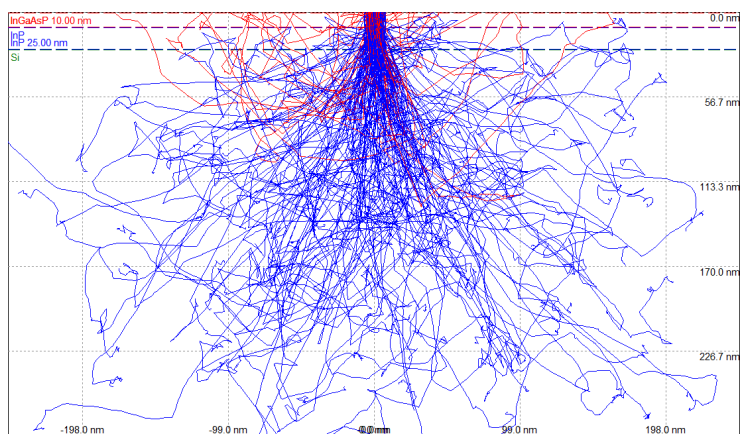


Рис. 4. Рассчитанная методом Монте-Карло траектория движения электронов в пучке при ускоряющем напряжении 5 кэВ

Если рассматривать глубину выхода первичных электронов, то, исходя из первого сравнения по глубине выхода отраженных электронов, очевидно, что подобная тенденция будет наблюдаться и в данном случае: при 1 кэВ – 30 нм с единичным проникновением электронов в субстрат, при 3 кэВ – 130 нм и при 5 кэВ – 290 нм.

Общим признаком полученных данных является то, что с увеличением глубины проникновения электронов уменьшается количество их траекторий. При ускоряющем напряжении 1 кэВ максимальное количество смещений траекторий электронов, которые покинут образец, наблюдается при глубине 1 нм и составляет 0,0405, тогда как наиболее плотное распределение потока электронов располагается на глубине до 5,7 нм с меньшим количеством потока электронов – 0,0135. Для 3 кэВ при максимальной глубине 50,4 нм – 0,0351 (глубина 15–40 нм), максимальное количество траектории находится на глубине от 0–30 нм и составляет порядка 0,0175. При 5 кэВ с наибольшей

глубиной проникновения 113,3 нм максимум соответствуют 0,0588 при глубине 10–20 нм, а при самой большой глубине – 0,0196.

Исходя из первых графиков по энергии обратно рассеянных электронов (ВЕ), покидающих поверхность образца, видно, что максимальная энергия с которой электроны вылетают из образца, немного меньше, чем величина первоначального ускоряющего напряжения. Так, при 1 кэВ энергия составляет 0,92 кэВ, при 3 кэВ – 2,71 кэВ, при 5 кэВ – 4,49 кэВ. Стоит отметить, что потеря энергии в среднем составляет всего 8–10 %, что не является столь существенным. Этот факт говорит о том, что при прохождении через материал электроны утрачивают собственную энергию при столкновении с иными электронами (в электронном пучке либо самом материале), а также с помощью изменения собственного направления. В течение всего времени, пока электроны пучка перемещаются внутри образца, разные процессы неупругого рассеяния приводят к передаче энергии атомам и электронам твердого тела и к сокращению энергии электронов пучка.

При рассмотрении радиального положения ВЕ, рассчитанного от точки падения первичного пучка на образец, видно, что при ускоряющем напряжении 1 кэВ радиус пучка в среднем составляет 13 нм с количеством электронов на 1 нм^2 в диапазоне от 0,0035–0,105, при этом на 1 нм^2 приходится энергии ВЕ 0,00328–0,0985 кэВ, для 3 кэВ радиус радиального положения ВЕ равен 25 нм, в котором количество электронов на 1 нм^2 составляет 0,000767–0,023, а на 1 нм^2 энергия ВЕ составляет 0,00208–0,0623 кэВ, а для ускоряющего напряжения в 5 кэВ радиус – 50 нм с плотностью электронного пучка на 1 нм^2 0,000114–0,00343 с энергией ВЕ в диапазоне 0,000558–0,0167 кэВ.

Исходя из анализа, следует вывод о том, что с увеличением ускоряющего напряжения радиальное положение ВЕ, рассчитанное от точки падения первичного пучка на образец, возрастает в среднем в 2 раза, при этом уменьшается плотность траекторий электронов, что свидетельствует о рассеянии энергии в материале; чем больше энергия, соответственно, тем больший радиус она способна охватить с равномерным распределением электронного пучка по площади изучаемой поверхности.

Что касается энергии ВЕ как функции радиального расстояния ВЕ, рассчитанного от точки падения первичного пучка на образец, то с возрастанием ускоряющего напряжения доля энергии на 1 нм^2 уменьшается, так как возрастают величина радиуса и вместе с тем площадь облучаемой поверхности.

Оценка зависимости углов обратного рассеяния электронов от ускоряющего напряжения и энергии показала, что с увеличением ускоряющего напряжения диапазон углов обратного рассеяния уменьшается. Так, для 1 кэВ диапазон равен 2–84°, для 3 кэВ охват составляет 8–84°, а при 5 кэВ – уже 16–77°.

Изолинии энергии, рассчитываемые от центра места падения первичного пучка при ускоряющем напряжении 1 кэВ, показывают, что 90 % всей энергии находится на глубине порядка 3 нм (в 1 слое – InGaAsP), далее 50 % на глубине 10 нм находятся на границе слоев InGaAsP/InP (рис. 5). Стоит отметить, что всего 5 % энергии достигает глубины проникновения в образец около 10–23 нм, при этом энергии не хватает даже на то, чтобы достичь кремниевой подложки. Ширина энергетического охвата составляет примерно 40 нм. При 3 кэВ 90 % энергии находится глубже, нежели при 1 кэВ – на границе слоев InGaAsP/InP, при этом энергии уже достаточно для того, чтобы в подложку дошло 25 % от общего количества энергии. Ширина энергетического охвата составляет около 200 нм. Для 5 кэВ 90 % энергии также рассеяно вдоль границы слоев, но в субстрате находится уже 50 % от первоначальной энергии электронного пучка. Ширина энергетического охвата составляет 420 нм. Общим для всех является условие того, что серое затемнение наложения плотности поглощенной энергии колеблется от светлого до темного, т.е. плотность увеличивается ближе к центру и началу падения пучка электронов, где процентное содержание первоначальной энергии составляет, как правило, 90 %. Приведенные зависимости процентного содержания энергии от глубины показывают взаимосвязь энергии и ускоряющего напряжения, благодаря которому энергия электронного пучка может рассеиваться в материале.

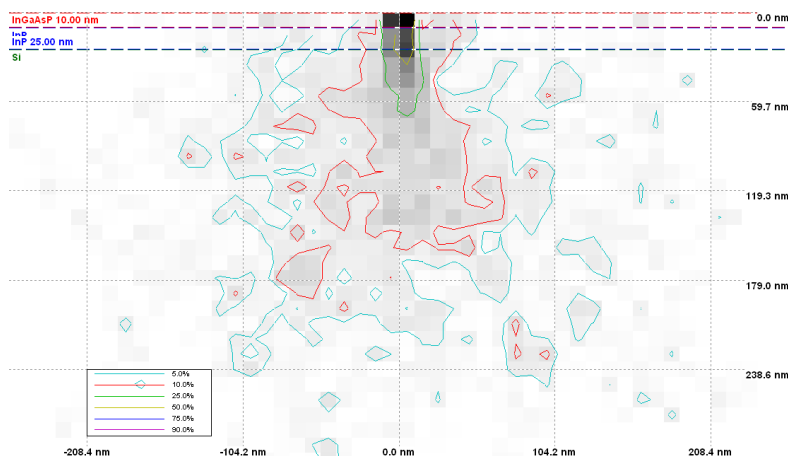


Рис. 5. Вид поперечного сечения поглощенной энергии в образце InGaAsP, показывающий контур энергетических линий при ускоряющем напряжении 5 кэВ

Катодолюминесценция по глубине и радиусу в образце InGaAsP показала общую тенденцию, характерную для всех трех величин ускоряющего на-

пряжения: при увеличении глубины или радиуса интенсивность (%) падает, т.е. при увеличении электронами глубины проникновения эффект катодной люминесценции затрудняется вследствие увеличения расстояния, которое необходимо преодолеть вторичным или оже-электронам для последующей эмиссии, и, как следствие, создается эффект люминесценции. Что касается радиуса, то, как было выяснено ранее, с увеличением радиуса рассеивается и первичная энергия рассеяния электронов, соответственно, возникает недостаток энергии для создания катодолюминесценции (рис. 6).

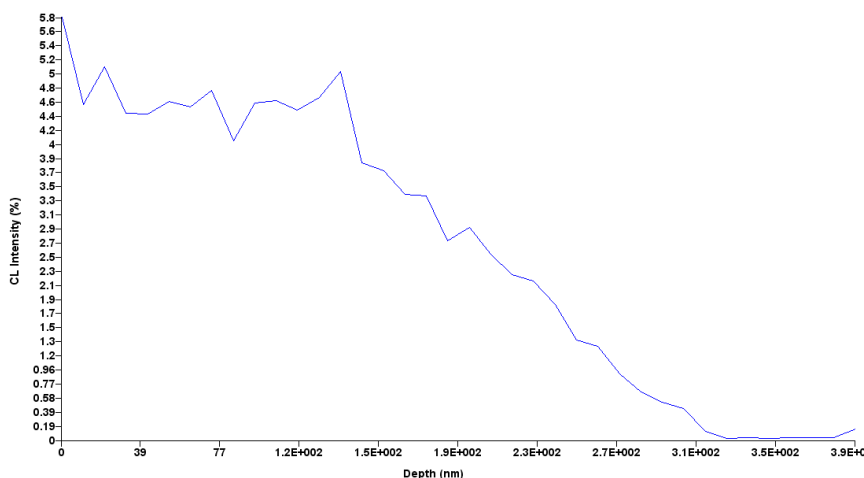


Рис. 6. Катодолюминесценция по глубине в образце при ускоряющем напряжении 5 кэВ

Величины ускоряющего напряжения 1 кэВ недостаточно для генерации рентгеновского излучения в каждом из химических элементов образца InGaAsP, так как глубина генерации рентгеновского излучения определяется глубиной проникновения в образец электронов зондирующего пучка. С увеличением напряжения с 3 до 5 кэВ отлично прослеживается тенденция того, что все рассматриваемые параметры также возрастают. Данное явление следует интерпретировать с точки зрения атомного строения химических элементов: все данные увеличиваются с возрастанием атомного номера элементов, начиная от самого минимального Si ($Z = 14$) и заканчивая In ($Z = 49$). Однако для In генерация рентгеновского излучения становится возможной лишь при значении ускоряющего напряжения 5 кэВ.

Радиальное расстояние от центра луча электронов генерации рентгеновского излучения уменьшается с увеличением атомного номера элемента. Это явление, скорее всего, связано со строением электронных оболочек химических элементов, с которых происходит характеристические рентгеновские переходы.

Таким образом, при взаимодействии первичных электронов с мишенью случается ряд явлений, регистрация которых позволяет получать информацию о локальных свойствах зондируемого объекта.

Оперативным и наглядным методом исследования области и характера взаимодействия электронов с твердым телом считается прогнозирование электронных траекторий способом Монте-Карло. Его преимущество перед иными способами определяется возможностью рассмотрения перенесения частиц в сколь угодно сложных по геометрическим характеристикам и по структуре средах в отсутствие необходимости применения значительных упрощений в вычислительном алгоритме.

Электронные траектории в объеме возбуждения рассчитываются и показываются на дисплее монитора компьютера в зависимости от задаваемых критериев опыта (кинетическая энергия первичных электронов, угол падения электронов относительно нормали к образцу, число электронов) и от характеристик объекта (атомный номер, плотность и атомный вес вещества мишени, массивный объект либо тонкая пленка, слоистые структуры на подложке с изменяемыми свойствами). Одновременно определяется глубина проникновения электронов в разные материалы, устанавливаются доля отраженных электронов и угла бомбардировки, а также энергетический спектр отраженных электронов.

Используя данные моделирования, находящиеся в памяти компьютера, есть возможность провести их статистический анализ.

Максимальное выделение энергии в материале идет по центру пятна взаимодействия потока электронов, потом первичные электроны равномерно утрачивают энергию, рассеивая ее в материале и меняя направления. Поскольку малоугловое рассеяние в диапазоне от 0 до 10° более вероятно, чем рассеяние электронов при углах $10\text{--}180^\circ$, то в образце появляется неширокий конус рассеяния энергии по центру. Потом электроны распространяются внутри материала и утрачивают энергию до того времени, пока не утратят ее. Стоит отметить, что часть электронов, изменяя направление перемещения, способны поменять направление на прямо противоположное от начального, образуя обратный поток электронов к плоскости, часть из которых имеет достаточно энергии для того, чтобы покинуть материал.

Список литературы

1. Масловская А.Г., Сивунов А.В. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло электронных траекторий в полярных диэлектриках при воздействии электронными пучками средних энергий // Электроника и приборостроение. Вестник СГТУ. – 2012. – № 1 (64), вып. 2. – С. 87–92.

2. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ в примерах практического применения / М.М. Криштал, И.С. Ясников, В.И. Полунин, А.М. Филатов, А.Г. Ульяненок. – М.: Техносфера, 2009. – 208 с.

3. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ / Дж. Гоулдстейн, Д. Джой, Э. Лифшин, Д. Ньюбери, Ч. Фиори, П. Эчлин. – М.: Мир, 1984. – Т. 1. – 303 с.

4. Dapor M. Computer simulation of electron transport in solids with applications to materials analysis and characterization: Doctoral Thesis // Doctoral School in Materials Science and Engineering XXV Cycle. – 2013. – P. 205.

5. Ryuichi S., Ding Z.J. Monte Carlo modeling of electron-solid interactions // Rep. Prog. Phys. – 1992. – Vol. 55. – P. 487–531.

6. URL: <http://nanonems.imb-cnm.csic.es> (дата обращения: 12.02.2017).

7. CASINO V2.42 – A fast and easy-to-use modeling tool for scanning electron microscopy and microanalysis users / D. Drouin, A. Real Couture [et al.] // Scanning. – 2007. – Vol. 29. – P. 92–101.

8. Demers H., Poirier-Demers N. Three-dimensional electron microscopy simulation with the CASINO Monte Carlo software // Scanning. – 2011. – № 3. – P. 135–146.

9. URL: <http://montecarlomodeling.mcgill.ca> (дата обращения: 12.02.2017).

10. Simulated X-ray spectra and X-ray maps: evaluation of models used in MC X-ray Monte Carlo simulation program and comparison with experimental data / P. Michaud, R. Gauvin, H. Demers, N. Brodusch, M. Guinel // Microscopy and Microanalysis. – 2012. – № S2. – P. 1022–1023.

11. Беспалов В.И. Компьютерная лаборатория (КЛ/PCLab) [Электронный ресурс]: описание программы: руководство по работе с программой (вер. 9.8). – Томск, 2016. – С. 126. – URL: <http://www.twirpx.com/file/1622448> (дата обращения: 12.02.2017).

12. PCLab – a software with interactive graphical user interface for Monte Carlo and finite element analysis of microstructure-based layered composites / Y. Liua, L. Cheng [et al.] // Advances in Engineering Software. – 2015. – P. 107–118.

13. URL: <http://geant4.web.cern.ch> (дата обращения: 12.02.2017).

14. Use of mathematical modelling in electron beam processing: a guidebook // IAEA Radiation Technology Series No. 1 / International Atomic Energy Agency. – Vienna, 2010. – P. 127.

15. URL: <https://mcnp.lanl.gov> (дата обращения: 12.02.2017).

16. PENELOPE–2014 a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport, Workshop. – Barcelona, 2015. – P. 248.

17. PENELOPE: an algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter / J. Baró, J. Sempau [et al.] //

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1995. – Vol. 100, № 1. – P. 31–46.

18. URL: <http://www.srim.org> (дата обращения: 12.02.2017).

19. Pavlovic M., Strašik I. Supporting routines for the SRIM code // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2007. – P. 601–604.

20. Подлипов В.В., Шабека А.С., Куприянов А.В. Моделирование взаимодействия электронного пучка с веществом методом Монте-Карло // Информационные технологии и нанотехнологии. – Самара, 2016. – С. 153–157.

21. Monte Carlo simulation study of electron beam interaction in multi-layered semiconducting materials / M. Shubhakanta Singh, R.K. Brojen Singh [et al.] // American Scientific Publishers Advanced Science Letters. – 2010. – Vol. 3, № 1. – P. 57–61.

Получено 05.10.2017

Поздеева Татьяна Юрьевна – магистрант, механико-технологический факультет, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, e-mail: pozdeevatu@gmail.com.

Сметкин Андрей Алексеевич – кандидат технических наук, доцент кафедры «Материалы, технологии и конструирование машин», механико-технологический факультет, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, e-mail: solid@pm.pstu.ac.ru.