

Monte-Carlo-Programm für die Simulation der Bildentstehung im Rasterelektronenmikroskop

Von der Fakultät für Maschinenbau
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig

zur Erlangung der Würde
eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von: Dipl.-Phys. Dominic Gnieser

aus: Gräfelfing

eingereicht am: 13.01.2012

mündliche Prüfung am: 08.05.2012

Gutachter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. R. Tutsch
Univ.-Prof. Dr. rer. nat M. Schilling
Dr. rer. nat. C.G. Frase

Schriftenreihe des Instituts für Produktionsmesstechnik

Band 6

Dominic Gnieser

**Monte-Carlo-Programm für
die Simulation der Bildentstehung
im Rasterelektronenmikroskop**

Shaker Verlag
Aachen 2013

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Braunschweig, Techn. Univ., Diss., 2012

Copyright Shaker Verlag 2013

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-1806-6

ISSN 1862-4456

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|----------|
| Einleitung | 1 |
| 1 Theoretische Grundlagen | 7 |
| 1.1 Aufbau eines SEM | 7 |
| 1.1.1 Elektronenemitter | 8 |
| 1.1.2 Elektronenoptik | 13 |
| 1.1.3 Rasterpulen, Rasterprinzip | 19 |
| 1.1.4 Vakuumkammer, Pumpensystem | 19 |
| 1.1.5 Euzentrischer Probenstisch | 20 |
| 1.1.6 Detektionssystem | 21 |
| 1.2 Wechselwirkung von Elektronen im Festkörper | 23 |
| 1.2.1 Elastische Streuung im Coulombfeld von Atomkernen | 23 |
| 1.2.2 Inelastische Streuung | 28 |
| 1.2.3 Elektronendiffusion und -emission | 29 |
| 1.2.4 SE-Erzeugung und Transport | 32 |
| 1.2.5 Kontrastarten von Sekundärelektronen | 34 |
| 1.3 Monte-Carlo-Simulation | 41 |
| 1.3.1 MC-Simulation im SEM | 44 |
| 1.4 Monte-Carlo-Programme | 46 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 1.5 | Grundlagen der Photogrammetrie | 52 |
| 1.5.1 | Transformation: Rotation | 53 |
| 1.5.2 | Zentralprojektion | 55 |
| 1.5.3 | Parallelprojektion | 57 |
| 2 | Das Monte-Carlo-Simulationspaket MCSEm | 61 |
| 2.1 | Einleitung | 61 |
| 2.2 | Allgemeines | 63 |
| 2.2.1 | Versionshinweis | 63 |
| 2.2.2 | Definition des Koordinatensystems . . . | 63 |
| 2.2.3 | Aufbau und Bestandteile von MCSEm . | 64 |
| 2.2.4 | Simulationsstrategie und Struktur . . . | 80 |
| 2.2.5 | Materialien aus mehreren Elementen . . | 87 |
| 2.3 | Modul: Elektronenbewegung und Wechselwirkungen | 88 |
| 2.3.1 | Rutherford-Streuung | 89 |
| 2.3.2 | Mott-Streuung | 92 |
| 2.3.3 | Continuous Slowing Down Approximation | 95 |
| 2.3.4 | SE-Erzeugung und Transport | 96 |
| 2.3.5 | Umrechnung der Winkel vom Elektro- nensystem ins Laborsystem | 99 |
| 2.4 | Modul 3D-Modell | 100 |
| 2.4.1 | Materialgrenzenannäherung | 107 |
| 2.4.2 | Dummy-Vakuum | 108 |
| 2.5 | Strahlformungs-Modul | 108 |
| 2.6 | Detektor-Modul | 110 |
| 2.7 | Zufallszahlen-Generator | 111 |
| 3 | Test und Anwendung der Simulation | 113 |
| 3.1 | Vergleich des Rückstreukoeffizienten | 113 |
| 3.2 | Vergleich des SE-Signalverlaufs | 122 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.3 | Test des SE-Detektormoduls | 126 |
| 3.4 | Anwendungsbeispiel Nanopartikel | 130 |
| 4 | Photogrammetrische Anwendungen | 133 |
| 4.1 | Mikro-Stufenpyramide mit Nanomarkern | 135 |
| 4.2 | Korrekturen durch Simulation | 138 |
| 4.3 | Positionsbestimmung der Nanomarker | 144 |
| 4.4 | SEM Messung und Auswertung | 146 |
| 5 | Zusammenfassung und Ausblick | 155 |
| 5.1 | Zusammenfassung | 155 |
| 5.2 | Ausblick | 158 |
| 5.2.1 | Erweiterung und Verbesserung des Programms | 158 |
| 5.2.2 | vREM | 160 |
| 6 | Anhang | 165 |
| 6.1 | Herleitung der Gleichungen für die Rutherford- streuung | 165 |
| 6.2 | Rutherfordstreuung: Streuwinkel | 169 |
| 6.3 | Ausgleichsrechnung | 169 |
| | Abkürzungsverzeichnis | 185 |
| | Eigene Veröffentlichungen zum Thema | 187 |