



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 99 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Волков Ю.А., Иноземцева К.К.,
Марков М.Б., Тараканов И.А.

Математическая модель
радиационного нагрева
изделий микроэлектроники

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Математическая модель радиационного нагрева изделий микроэлектроники / Ю.А.Волков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 99. 12 с. doi:[10.20948/prepr-2018-99](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-99)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-99>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. КЕЛДЫША
Российской академии наук**

Ю.А. Волков, К.К. Иноземцева, М.Б. Марков, И.А. Тараканов

**Математическая модель радиационного нагрева
изделий микроэлектроники**

Москва – 2018

Ю.А. Волков, К.К. Иноземцева, М.Б. Марков, И.А. Тараканов

Математическая модель радиационного нагрева изделий микроэлектроники

Рассмотрен радиационный нагрев полупроводникового кристалла. Построена модель передачи энергии кристаллу избыточными носителями заряда, образующимися при рассеянии ионизирующего излучения. Вычислено распределение энергии, теряемой падающим излучением в кристалле, между электронами проводимости и фононами кристаллической решетки.

Ключевые слова: ионизирующее излучение, носитель заряда, фонон.

Yu.A. Volkov, K.K. Inozemtseva, M.B. Markov, I.A. Tarakanov

Mathematical model of radiation heating of microelectronic device

Radiation heating of a semiconductor crystal is considered. A model is constructed for transferring energy to the crystal by excess charge carriers, which are formed during the scattering of ionizing radiation. The energy distribution lost by the incident radiation in the crystal is calculated between the conduction electrons and phonons of the crystal lattice.

Key words: ionizing radiation, charge carrier, phonon.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 17-01-00301).

Содержание

Введение.....	3
1. Кинетическая модель радиационной проводимости.....	4
2. Неупругое рассеяние на оптических фононах.....	.6
3. Алгоритм.....	8
4. Результаты.....	9
Заключение.....	11
Список использованных источников.....	11

Введение

Стойкость радиоэлектронной аппаратуры к воздействию ионизирующих излучений космического происхождения является важным показателем качества и надежности любого космического аппарата. Радиационно-индуцированный нагрев, обусловленный передачей энергии ионизирующих излучений конструкционным материалам, может изменять характеристики кристаллических структур изделий микроэлектроники, применяемых в космических аппаратах, и влиять на уровень радиационной стойкости [1]. Организация мероприятий по обеспечению стойкости уже на этапе проектирования аппаратов требует исследования радиационного нагрева.

Лабораторные, а тем более натурные эксперименты по исследованию воздействия излучений космического пространства являются технически сложными и затратными мероприятиями. Математическое моделирование способно эффективно описать набор физических явлений, связанных с радиационно-индуцированным нагревом. Модель должна рассматривать всю последовательность взаимосвязанных физических процессов взаимодействия ионизирующего излучения с кристаллом. Среди них перенос падающего излучения, генерация избыточных носителей заряда, их рассеяние с передачей энергии кристаллической решетке, выделение тепла, распространение термомеханических нагрузок [2]. Свободные электроны с высокой энергией, фотоны и протоны неупруго рассеиваются в кристалле, выделяя в его объеме энергию. В результате в кристалле образуются избыточные (медленные) носители заряда – электроны проводимости и дырки валентной зоны. Носители заряда взаимодействуют с неидеальностями решетки. Рассеяние электронов проводимости и дырок валентной зоны приводит к образованию фононов – колебаний атомов решетки, «аккумулирующих» тепловую энергию.

Математические модели кинетики падающего излучения и избыточных носителей заряда построены в работах [3,4]. Перенос падающего излучения рассматривается в рамках классического стационарного уравнения переноса. Моделирование движения и рассеяния электронов проводимости и дырок валентной зоны производится совместным решением квантовых кинетических уравнений и самосогласованных уравнений Максвелла. В работе [4] предложено рассматривать распространение тепловых и механических возмущений в кристаллах как процесс переноса фононов кристаллической решетки в поле деформаций. Это дает возможность рассматривать весь комплекс радиационных, электромагнитных и термомеханических последствий воздействия ионизирующего излучения в рамках единой кинетической модели. Энергия, теряемая мед-

ленными носителями заряда, является источником в кинетическом уравнении для фононов.

Данная работа излагает математическую модель, предназначенную для вычисления плотности мощности энергии, передаваемой носителями заряда фононам кристаллической решетки. Модель основана на квантовых кинетических уравнениях, построенных для вычисления радиационной проводимости полупроводников [5], и вычисляет правую часть для кинетического уравнения для фононов [6].

Алгоритм расчета плотности энергии основан на статистическом методе частиц [7,8]. Стохастическое моделирование рассеяния носителей заряда сочетается с методом частиц для вычисления их траекторий во внешнем и самосогласованном электромагнитном поле.

1. Кинетическая модель радиационной проводимости

Распределение электронов проводимости и дырок валентной зоны в невозмущенном кристалле описывается равновесным распределением Максвелла.

Выделение энергии электронами отдачи, образующимися при рассеянии фотонов ионизирующего излучения в материалах полупроводников, нарушает равновесие носителей заряда в кристалле. Рождающиеся под действием ионизирующего излучения носители заряда обладают энергией $\varepsilon \gg k_B T$, где k_B – постоянная Больцмана, T – температура кремния. Неравновесные избыточные носители заряда распределяются в пространстве неравномерно и взаимодействуют друг с другом посредством среднего самосогласованного электромагнитного поля, т.е. образуют электрон-дырочную плазму. Распределения электронов проводимости и дырок валентной зоны описываются нестационарными неоднородными функциями распределения $f_{e,h} = f_{e,h}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ в фазовом пространстве координат \mathbf{r} и квазиимпульсов $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Здесь \mathbf{k} – волновое число электрона, \hbar – константа Планка [9].

Полное кинетическое уравнение должно учитывать рассеяние электронов проводимости или дырок валентной зоны на дефектах решетки

$$\frac{\partial f_{e,h}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{p}} = I[f, f] + Q_{e,h}. \quad (1)$$

где e – заряд электрона, c – скорость света, \mathbf{E} – напряженность электрического поля, \mathbf{H} – напряженность магнитного поля.

Электрическое поле в (1) в общем случае создается как рабочим напряжением прибора, так и движением всех заряженных носителей заряда: свободных электронов и носителей заряда в кристалле.

Уравнение (1) дополняется уравнениями Максвелла с соответствующими начальными условиями.

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \mathbf{j} &= e \left(\int \mathbf{v} f_p(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int \mathbf{v} f_e(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) + \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_{ext}. \end{aligned} \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части (2) описывает плотность тока электронов проводимости и дырок. Свободные электроны генерируют в кремнии плотность тока \mathbf{j}_0 . Она, так же как и источник неравновесных носителей Q , вычисляется как функционал функции распределения свободных электронов. Электрическое поле прибора устанавливается плотностью тока \mathbf{j}_{ext} , определяющей ток заряжения прибора в его внешней цепи.

Так как скорость носителей заряда гораздо меньше скорости света, $v/c \ll 1$, можно пренебречь релятивистскими поправками для потенциалов и, в большинстве случаев, магнитным полем. Правая часть уравнения (1) описывает изменение функции распределения за счет рассеяния. Здесь $I[f, f]$ – квадратичный оператор, действующий на функцию распределения по переменной квазиимпульса (переменные \mathbf{r} и t при описании рассеяния являются параметрами и не указываются).

В невырожденном электронном (дырочном) газе интеграл рассеяния имеет вид:

$$I[f] = \int \{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) - W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}')\} d\mathbf{p}' / (2\pi\hbar)^3, \quad (3)$$

где W – скорость рассеяния. Подробно интеграл рассеяния рассмотрен в [5].

Электроны проводимости и дырки валентной зоны испытывают упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы); неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах; упругое рассеяние на заряженных примесях (для сильно легированных полупроводников); неупругое рассеяние на поляр-

ных оптических фононах (ЛО-фононы). Подробно рассеяние на АС-фононах и заряженных примесях рассмотрено в [6].

Рассмотренный в [5] вид интеграла рассеяния, в отличие от приближения непрерывного торможения [10], позволяет выделить энергии, теряемые отдельно электронами или дырками.

2. Неупругое рассеяние на оптических фононах

Рассеяние состоит в переходе электрона из состояния с квазиимпульсом \mathbf{p}' и энергией ε' в состояние с квазиимпульсом \mathbf{p} и энергией ε . При неупругом рассеянии изменение энергии электрона квантуется величиной $\hbar\omega_{opt}$, где ω_{opt} – частота оптического фонона. Заметим, что неупругие процессы подразумевают как поглощение, так и испускание фононов. В соответствии с принципом детального равновесия [9] отношение вероятностей поглощения и испускания зависит от разности энергий начального и конечного состояний электрона при заданной температуре кристалла $T: W^{abs} / W^{emis} \approx \exp\{-\hbar\omega_{opt} / \kappa_B T\}$, κ_B – постоянная Больцмана. Подставляя сюда характерные значения энергии оптического фонона для кремния и диоксида кремния $\hbar\omega_{opt} = 0.1 \text{ эВ}$ [11] и тепловой энергии электрона $\kappa_B T = 1/40 \text{ эВ}$, получим $W^{abs} / W^{emis} \approx 0,02$. По этой причине для быстрых ($\varepsilon \gg \kappa_B T$) электронов вклад поглощения в рассеяние мал по сравнению с испусканием. Пренебрежем поглощением по сравнению с испусканием. При неупругих столкновениях импульс теряется одновременно с энергией. Поэтому

$$\frac{1}{\tau_i} = 2\pi \int W_i(\varepsilon, \varepsilon', \mu) g(\varepsilon') d\varepsilon' d\mu, \quad (4)$$

где μ – косинус угла рассеяния.

Из теории Фрелиха [12] можно определить вид скорости рассеяния и, соответственно, частоту рассеяния для продольных оптических фононов:

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{\pi e^2 \hbar^2 \omega_{lo}}{8m_e \chi} g(\varepsilon) (N_p + 1) \frac{1}{\varepsilon} \ln \left[\frac{1 + (1 - \hbar\omega_{lo}/\varepsilon)^{1/2}}{1 - (1 - \hbar\omega_{lo}/\varepsilon)^{1/2}} \right]$$

в случае испускания и

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{\pi e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{8m_e \chi} g(\varepsilon) N_p \frac{1}{\varepsilon} \ln \left[\frac{(1 + \hbar \omega_{LO} / \varepsilon)^{1/2} + 1}{(1 + \hbar \omega_{LO} / \varepsilon)^{1/2} - 1} \right]$$

в случае поглощения. Здесь $\hbar \omega_{LO}$ – энергия продольного оптического фонона, $N_p = (\exp(\hbar \omega_{LO} / \kappa_B T) - 1)^{-1}$ – числа заполнения состояний, ε_∞ и ε – оптическая и статическая диэлектрические проницаемости соответственно, $1/\chi = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon$ – скачок диэлектрической проницаемости. Рассеяние изотропно по азимутальному углу, но сильно зависит от полярного угла

$$P(\theta) = \frac{1}{c} \ln \left\{ \frac{\varepsilon + 2\sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - \hbar \omega_{LO}} \cdot \cos(\theta) + \varepsilon - \hbar \omega_{LO}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - \hbar \omega_{LO}})^2} \right\},$$

$$c = \ln \left\{ \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - \hbar \omega_{LO}}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - \hbar \omega_{LO}}} \right\}.$$

Рис. 1 и рис. 2 представляют угловые распределения электронов после рассеяния на первой или второй ветви оптических продольных фононов.

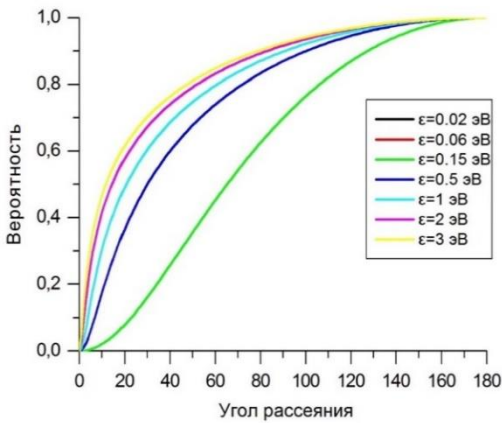


Рис. 1 – Угловое распределение электронов после рассеяния электронов на продольных оптических фононах первой ветви в SiO_2 для различных энергий электрона

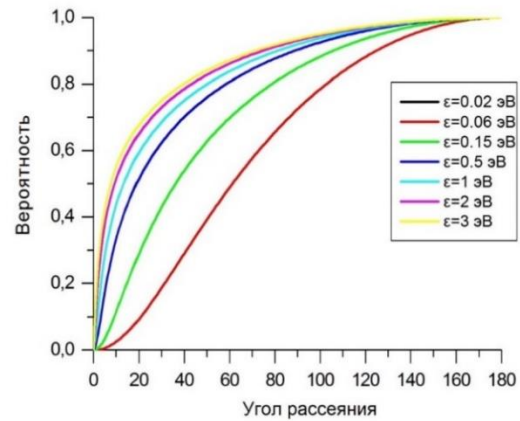


Рис. 2 – Угловое распределение электронов после рассеяния электронов на продольных оптических фононах второй ветви в SiO_2 для различных энергий электрона

В рамках теории деформационного потенциала можно определить частоту рассеяния для поперечных оптических фононов [13]:

$$\frac{1}{\tau_{TO}(\varepsilon)} = \frac{\pi(DK_{opt})^2}{\rho\omega_0} g(\varepsilon) \left[N(1 + \hbar\omega_0/\varepsilon)^{1/2} + (N+1)(1 - \hbar\omega_0/\varepsilon)^{1/2} \right],$$

где $N = (\exp(\hbar\omega_0/\kappa_B T) - 1)^{-1}$ – числа заполнения фононных состояний, DK_{opt} – усредненная по всем поляризациям фононов константа.

3. Алгоритм

Статистический метод частиц рассматривает процессы рассеяния носителей заряда в кристалле, а именно, рассеяние электронов и дырок на акустических и оптических фононах, а также на заряженных примесях. Плотность энерговыделения носителей заряда вычисляется непосредственно из потерь энергии отдельных частиц при рассеянии на оптических фононах.

Следует отметить, что приближение времени релаксации [10] также позволяет моделировать рассеяние носителей заряда на неоднородностях решетки. Однако в этом приближении невозможно выделить энергии, теряемые отдельно электронами или дырками. Следовательно, нельзя вычислить источник для решения задачи кинетики фононного газа.

Также следует отметить отличие предлагаемого подхода от метода Монте-Карло, предполагающего независимость испытаний. После того как носитель заряда пройдет всю свою траекторию и внесет вклад в показания детектора, например, в ток радиационной проводимости через заданную поверхность, его можно исключить из рассмотрения. В действительности электрическое поле определяется текущей плотностью тока всех носителей заряда, что не позволяет рассчитывать траектории частиц отдельно друг от друга.

Схема алгоритма изображена на рис. 3.

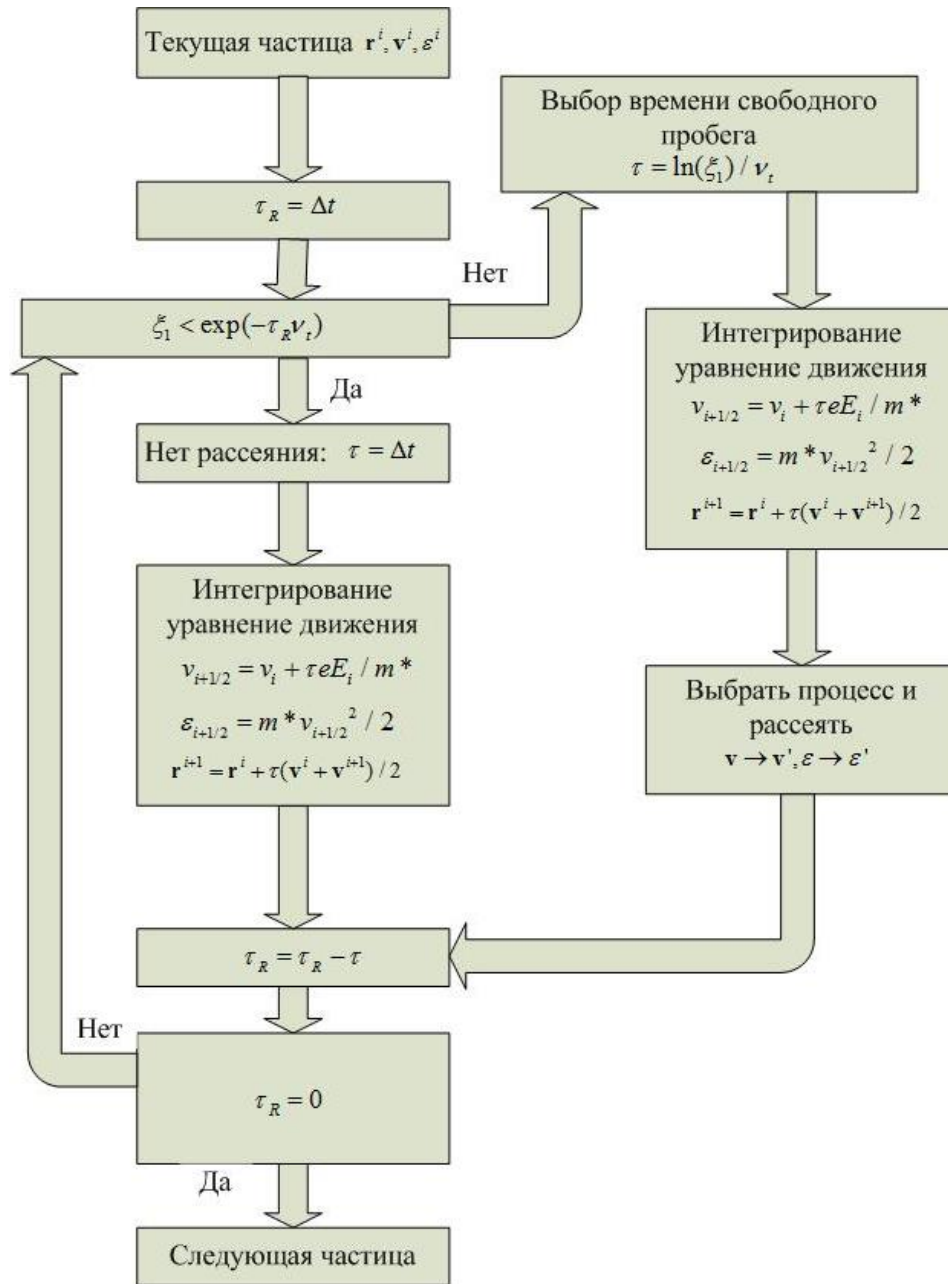


Рис. 3 – Схема алгоритма статистического метода частиц

Подробно алгоритм представлен в работе [14].

4. Результаты

Рассмотрен процесс облучения кремниевой преграды размерами $1 \times 1 \times 0.1$ см тормозным излучением ускорителя РИУС-5. Излучение падает в направлении нормали к поверхности 1×1 см (направление z). Спектр тормозного излучения ускорителя РИУС-5 представлен на рис. 4. Вычислительный экс-

перимент по моделированию тормозного излучения ускорителя подробно описан в [15].

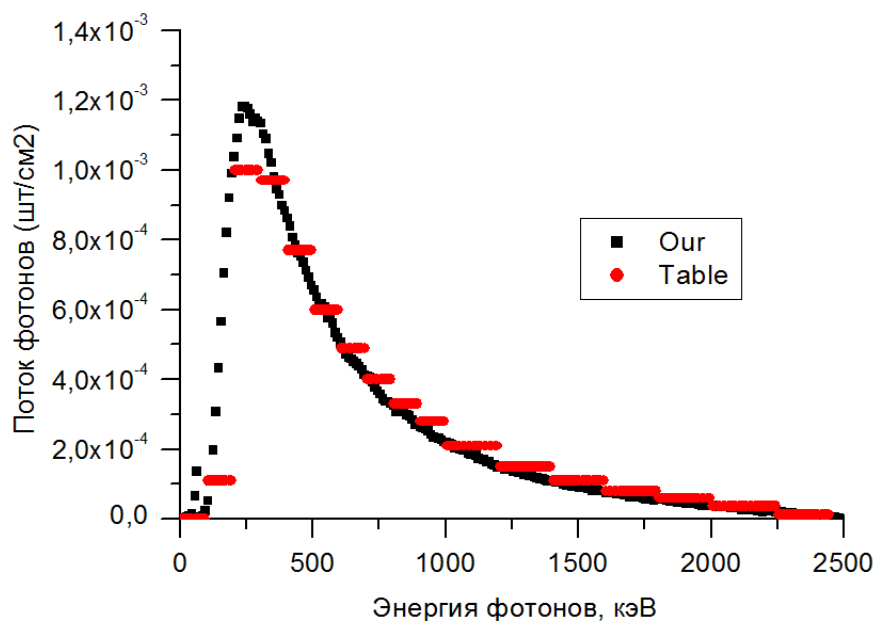


Рис. 4 – Сравнение относительной доли фотонов по энергии на выходе из мишени с экспериментальными данными

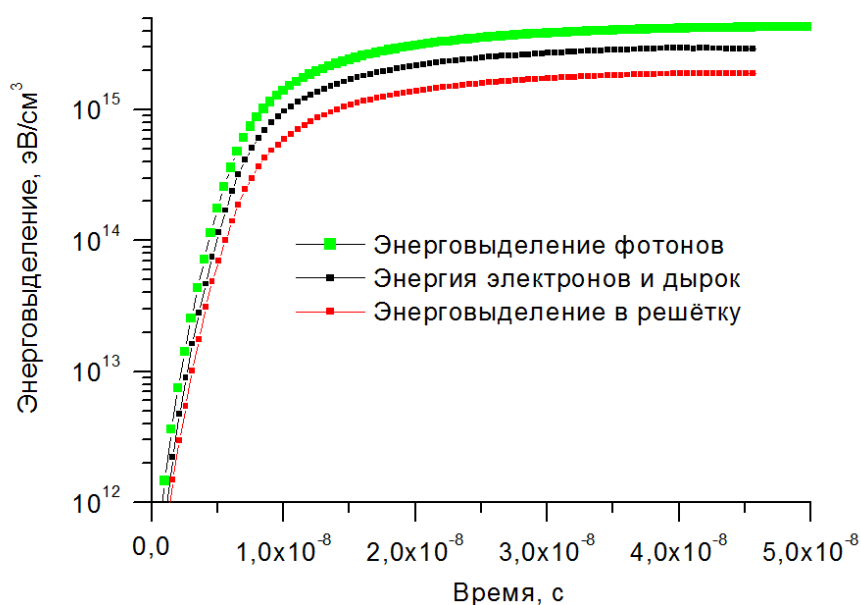


Рис. 5 – Энергобаланс системы

На рис. 5 представлены результаты расчета энергобаланса системы, включающего:

- энерговыделения фотонов и быстрых электронов;

- энергии электронов проводимости и дырок валентной зоны;
- энерговыделения носителей заряда в кристаллическую решетку кремния.

Часть энерговыделения фотонов и быстрых электронов расходуется на создание электронно-дырочных пар, небольшая остальная часть энергии заключена в электрическом самосогласованном поле. Около $2/3$ энергии электронов проводимости и дырок валентной зоны передается решетке, остальная часть энергии на момент окончания действия импульса остается у носителей заряда.

Заключение

Представлены численный алгоритм и результаты модельных расчетов по вычислению плотности энергии, выделяемой электронами проводимости при рассеянии в решетке кристалла. Численный алгоритм основан на решении квантовых кинетических уравнений статистическим методом крупных частиц. Модель взаимодействия носителей заряда построена на тех же принципах, которые успешно использованы для моделирования рассеяния падающего излучения в изотропной среде. В рамках модельных расчетов показано, что энергия образования электронно-дырочной пары в кремнии (3,6 эВ) идет на преодоление ширины запрещенной зоны (1,1 эВ) и непосредственно на разогрев решетки кристалла. Анализ полученных результатов говорит о том, что метод вычисления плотности энергии, переданной носителями заряда кристаллической решетке, можно использовать как составную часть технологии суперкомпьютерного моделирования функционирования изделий микроэлектроники в условиях воздействия ионизирующих излучений космического пространства.

Список использованных источников

- 1 Чумаков А.И. Действие космической радиации на интегральные схемы. – М.: Радио и связь, 2004, 319 с.
- 2 Fischetti Massimo V., Vandenberghe William G. Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures. Springer, 2016.
- 3 Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. Модель индивидуальных соударений для описания переноса электронов в веществе // Математическое моделирование, Том 23, № 6, стр. 147-160, 2011.
- 4 Волков Ю.А., Воронин Ф.Н., Марков М.Б. Приближение Власова для газа фононов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2015, № 114, 24 с.

- 5 Березин А.В., Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Модель радиационно-индуцированной проводимости кремния // Матем. моделирование, 28:6, 2016, С. 18-32.
- 6 Волков Ю.А., Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость в кремнии и оксиде кремния. Времена релаксации // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 84. 27 с.
- 7 Баннов Н.А., Рыжий В.И., Волков Ю.А. Методы макрочастиц в математическом моделировании элементов интегральных схем // Микроэлектроника. 1987, т. 16, № 3, С. 210-219.
- 8 Березин А.В., Воронцов А.С., Жуковский М.Е., Марков М.Б., Паротькин С.В. Метод частиц для электронов в рассеивающей среде // ЖВМ И МФ, 2015, т. 55, № 9, С. 1566-1578.
- 9 Волков Ю.А., Полюдов А.Н. Дискретная модель уравнения Фоккера-Планка // ЖВМ и МФ. 1987, т. 27, №3, С. 428-440.
- 10 Березин А.В., Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость кремния // *Mathematica Montisnigri*, Vol XXXIII, 2015, С. 69-87.
- 11 Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников / Пер. с англ. – М., 1978.
- 12 Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials // *Rev. Mod. Phys.* 1983, 55 (3), 645.
- 13 Fischetti M.V., Laux S.E. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band structure and space-charge effects // *Phys. Rev. B*, 1988, 38. pp. 9721-9745.
- 14 Березин А.В., Волков Ю.А., Казымов Ш.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Моделирование радиационной проводимости статистическим методом частиц // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. № 9. 20 с.
- 15 Zhukovskiy M.E., Markov M.B., Podolyako S.V., Tarakanov I.A., Uskov R.V., Chlenov A.M., Zinchenko V.F. Researching the spectrum of bremsstrahlung generated by the RIUS-5 electron accelerator // *Mathematica Montisnigri*, Vol. XXXV, 2016, pp. 54-67.