



·粒子束及加速器技术·

CCD 电子辐照效应三维蒙特卡罗模拟研究*

谭 群^{1,2}, 范杰清¹, 赵 强², 张 芳², 李 尧^{1,2}, 郝建红¹, 董志伟²

(1. 华北电力大学 电气与电子工程学院, 北京 102206; 2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘 要: CCD 易受空间环境中高能电子辐射的影响, 造成性能下降和工作异常, 针对此问题, 选取某国产 N 沟道 3 相多晶硅交迭栅、帧转移结构 CCD 开展了电子辐照效应研究。采用三维蒙特卡罗软件 FLUKA 建立电子辐照 CCD 的组成材料 Si 和 SiO₂ 模型, 仿真模拟电子和材料相互作用的物理过程, 计算不同能量电子在 Si 和 SiO₂ 中的总质量阻止本领和射程, 与文献理论计算结果对比验证了本文仿真方法的正确性。建立 CCD 像元阵列的三维模型, 模拟计算不同能量电子在 CCD 中能量沉积过程的影响, 以及像元间有无边界对电子在 CCD 像元中平均原子离位 (DPA) 的影响, 分析了辐照损伤差异产生的机理。结果表明, 靠近入射点的像元能量沉积最大处对应的入射电子能量较小; 对于无边界像元, 电子辐照产生的 DPA 随入射深度的增加先增加后减小, 而在有边界像元中产生的 DPA 随入射深度的增加先减小后增加, 并且随入射深度的增加无边界像元中产生的 DPA 与有边界像元中产生的 DPA 差值越来越小。

关键词: 电荷耦合器件; 电子辐照; FLUKA; 阻止本领; 射程; 能量沉积; 平均原子离位

中图分类号: TN386.5, O242.1

文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202234.210390

Three-dimensional Monte Carlo simulation of electron radiation effects on CCD

Tan Qun^{1,2}, Fan Jieqing¹, Zhao Qiang², Zhang Fang², Li Yao^{1,2}, Hao Jianhong¹, Dong Zhiwei²

(1. School of Electrical and Electronics Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China;

2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract: As a key component, CCD has been widely used in space-based CCD cameras. However, it is vulnerable to the impact of high-energy electron radiation in space environment, resulting in performance degradation and abnormal operation. For this problem, a domestic N-channel three-phase polysilicon CCD with an overlapping gate and frame-transfer structure is selected to study the effect of electron irradiation. The models were established by FLUKA for Si and SiO₂ irradiated with electrons, which are the composition material of CCD. We simulated the physical process of electrons and material interaction and calculated the total mass stopping power and range of different energy electron beams in Si and SiO₂, then compared them with the theoretical results, and the correctness of the simulation method is verified. A three-dimensional model of CCD pixel array was established. The effects of electron irradiation with different energy on the energy deposition process of electrons in CCD and the effect of between pixels on DPA (Displacement Per Atom) of electrons in CCD pixels were simulated and calculated. The mechanism of radiation damage difference is analyzed respectively.

Key words: CCD, electron irradiation, FLUKA, stopping power, range, energy deposition, displacement per atom

电荷耦合元件 (CCD) 因其体积小、分辨率高等优点被广泛应用于航天领域中。但是工作在低地球轨道 (LEO) 的航天器将面临宇宙射线、地球捕获辐射等多种辐射源影响, 其 CCD 器件暴露在大量电子的辐照环境下^[1-2]。在长期的空间环境任务中, 电子将与 CCD 相互作用, 使其组成材料受到不同程度的辐照损伤, 影响材料的性能, 从

* 收稿日期: 2021-09-01; 修订日期: 2021-11-24

基金项目: 国家自然科学基金联合项目 (U1730247); 高功率微波技术重点实验室项目 (6142605200301)

联系方式: 谭 群, tanqun0809@163.com。

通信作者: 赵 强, zhaq@iapcm.ac.cn。

而导致其功能退化甚至失效^[2-5]。

K.D.Stefanov 等人^[6]研究了两相电荷耦合器件的表面和体辐射损伤效应;在辐射强度为 4.3×10^{16} 电子/cm² 的辐照条件下,计算了剂量率,研究了器件的暗电流和 CTI。李豫东等人^[7]通过开展不同注量率电子辐照试验,在辐照与退火过程中考察 CCD 的光响应灵敏度、暗电流、参考电平等特性参数的变化规律。目前,国内外对于电子辐照 CCD 的研究多为辐照试验方法,而采用粒子输运计算方法研究电子辐照诱发 CCD 性能退化的工作较少。本文建立了 CCD 像元阵列的三维模型,用蒙特卡罗软件 FLUKA^[8-9]对组成 CCD 像元模型的材料 Si 和 SiO₂ 进行电子辐照,分析电子在这两种材料中的能量沉积过程,计算 Si 和 SiO₂ 对电子的阻止本领和电子在 Si 和 SiO₂ 中的射程,并以此为基础开展 CCD 电子辐照效应的三维蒙特卡罗模拟研究,为空间环境下 CCD 的安全运行提供了理论参考。

1 电子辐照 CCD 像元物理模型

本文选择 N 沟道 3 相多晶硅交迭栅、帧转移结构 CCD 为研究对象,建立空间电子辐照 CCD 像元阵列的简化模型,阵列包含 9 个像元,给予每个像元编号 1~9,如图 1 所示。电子束位于中间像元正上方,其入射方向垂直于像元表面;单个像元模型^[10]分为 3 层,分别为栅氧化层、N 埋沟层、P 型外延层,厚度分别为 h_1 、 h_2 和 h_3 ,各层截面长、宽分别为 a 、 b ,其中栅氧化层的组成材料为 SiO₂,其余两层的组成材料为 Si。

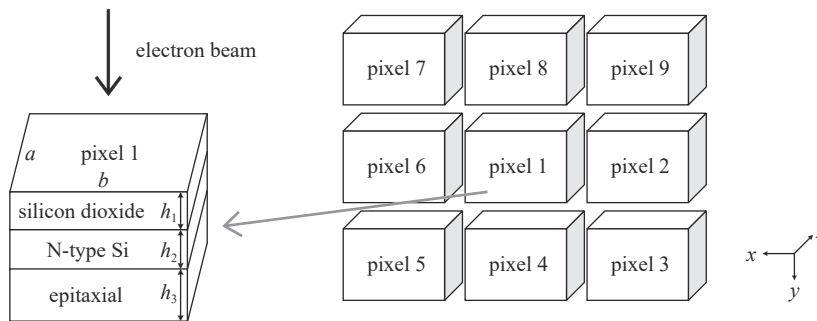


Fig. 1 Simplified image of pixel array of electron irradiation on CCD

图 1 电子辐照 CCD 像元阵列简化图

图 1 中,当电子穿过 CCD 栅氧化层、N 埋沟层、P 型外延层时,电子会与靶原子核外电子发生库仑碰撞而损失能量,即核外电子从入射高能电子获得的动能大于原子核对其的束缚能量时,核外电子被电离或激发。这种能量损失过程称为电离损伤,为本文主要考虑的辐照损伤。而电子与原子发生大角度弹性散射并传递足够的能量使得原子发生移位的事件(位移损伤)发生概率非常小,故本文不予考虑。

2 Si 和 SiO₂ 的电子辐照模拟

电子在 Si(SiO₂) 靶中运动时,会与其中的粒子相互作用,不断地损失能量。入射电子的能量较小时,电子能量将在靶中耗尽,最终沉积在靶中,否则将穿透靶。图 2、图 3 和图 4 分别给出了能量为 1 MeV 的电子入射 Si 靶后的运动轨迹、产生的光子轨迹及在靶中的能量沉积过程。



Fig. 2 Trajectories of electrons in silicon at the electron energy of 1 MeV

图 2 1 MeV 电子在硅中的运动轨迹

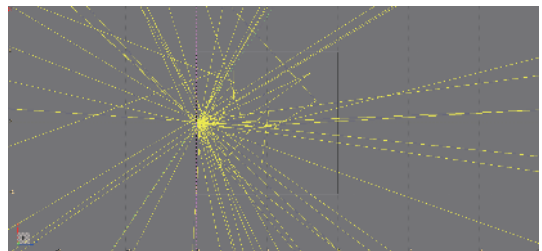


Fig. 3 Schematic diagram of photon generation in silicon

图 3 硅中产生光子的示意图

电子在靶中运动时将自身的一部分能量传递给靶原子,即电子在靶中的能量沉积。从图 2、图 3 和图 4 可以看出:(1)电子从指定点向硅靶打入,少部分电子在硅靶表面被弹回真空中,其余电子入射 Si 靶后,其运动方向不断改变,这是由于入射电子与核外电子发生库仑碰撞,前者将自身部分能量传递给后者(最多可转移本身能量的一

半), 产生了类康普顿散射, 改变了其运动方向; (2) 结合图 3 和图 4, 越靠近靶中央(即入射点位置)能量沉积越大, 也越可能产生光子, 原因是该位置附近电子的能量高、密度大, 与靶原子相互作用的几率也高, 故处于不稳定的激发态的核外电子也多, 这些电子通过向外辐射光子的形式降低自身能量回到基态。

一束均匀、平行的给定类型单能带电粒子束入射到厚靶上, 其注量率为 φ 。厚靶中给定深度 x 下的剂量率 \dot{D} 可表示为^[11]

$$\dot{D} = \varphi \left(-\frac{dE}{\rho dx} \right) \quad (1)$$

式中: $-(dE/dx)$ 为粒子束在 x 深度通过厚靶时的阻止本领; ρ 是靶物质密度。

一般来说, 剂量率表示单位时间内的能量沉积, 再通过式(1)可以得到能量沉积与阻止本领之间的关系。此外, 阻止本领的倒数可表示损失单位能量所走的距离, 其与射程 $R(T)$ 关系式如下^[11]

$$R(T) = \int_0^T \left(-\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE \quad (2)$$

式中: T 为粒子的动能。故能量沉积和阻止本领与射程相关, 因此后文计算了 Si 和 SiO₂ 对电子的阻止本领以及电子在 Si 和 SiO₂ 中的射程。

2.1 Si 和 SiO₂ 对电子的阻止本领模拟

电子在 Si 和 SiO₂ 中的能量损失主要分为两个部分: (1) 电子与靶原子核外电子碰撞(电离和激发), 可用碰撞阻止本领来描述; (2) 电子在原子核库仑场中的辐射(轫致辐射)可用辐射阻止本领描述。在电子能量比较低时, 损失的能量主要由电离和激发导致的; 随着能量的提高, 轫致辐射成为能量损失的主要途径。

带电粒子在物质中的一切能量损失, 用总质量阻止本领 S/ρ 来表示, 为碰撞阻止本领和辐射阻止本领的总和。当电子能量 $E < 10$ MeV 时, 主要能量损失为电离损失和辐射损失, 其他过程的能量损失可以忽略不计, S/ρ 可表达为^[12]

$$\frac{S}{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{dl} \quad (3)$$

式中: dE/dl 为电子穿过路程 dl 时, 所损失的一切能量 dE 。

在 FLUKA 中, 模拟计算不同能量电子打入硅靶和二氧化硅靶中的总质量阻止本领, 并与文献 [13] 对比结果见表 1 与表 2。可以看出, 本文采用的仿真方法的计算结果与由 Estar 网站^[13]计算的结果相对误差都小于 10%。

表 1 硅对电子的阻止本领

energy/ MeV	simulation result/ (MeV/cm)	estar value/ (MeV/cm)	error/%
0.8	3.870 1	3.609 2	7.2
0.9	3.746 9	3.581 2	4.6
1	3.606 9	3.567 2	1.1
1.25	3.488 1	3.562 6	2.1
1.5	3.416 6	3.583 5	4.7

表 2 二氧化硅对电子的阻止本领

energy/ MeV	simulation results/ (MeV/cm)	estar value/ (MeV/cm)	error/%
0.8	4.015 5	3.698 1	8.6
0.9	3.909 1	3.663 3	6.7
1	3.828 8	3.646 2	5.0
1.25	3.579 2	3.626 2	1.3
1.5	3.480 1	3.633 1	4.2

2.2 电子在 Si 和 SiO₂ 中的射程模拟

射程为带电粒子在物质中运动时损失单位能量所前进的距离, 单位为 g/cm², 该参数在原子组成相似的不同材料中大致相同。材料中电子射程 R 可由公式(4)求解^[14]

$$R = 0.412E^{1.265-0.0954\ln E} \quad (4)$$

式中: 动能 E 单位为 MeV, 其值范围为 $0.01 \leq E \leq 2.5$ MeV。

本文通过 FLUKA 模拟获得不同能量入射电子进入物质后在其运动方向上穿过的最大距离, 通过选取合适的

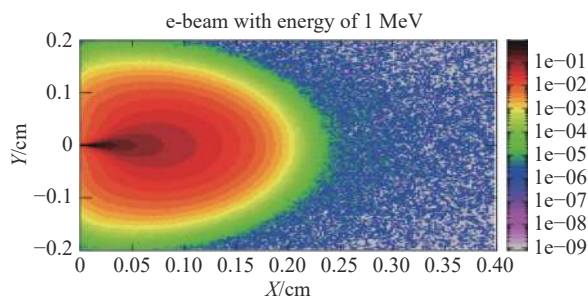


Fig. 4 Energy deposition of electrons in silicon at the electron energy of 1 MeV

图 4 1 MeV 电子在硅中的能量沉积

平均电子运动距离(约为最大距离的0.69倍)及单位转换获得射程,并与公式(4)的理论计算对比,结果如图5所示,运用FLUKA得到的数据计算结果与公式结果基本吻合。综合表1、表2和图5可以预测:在一定入射电子能量范围内,随着入射电子能量的增大,CCD像元中的能量沉积会减少。

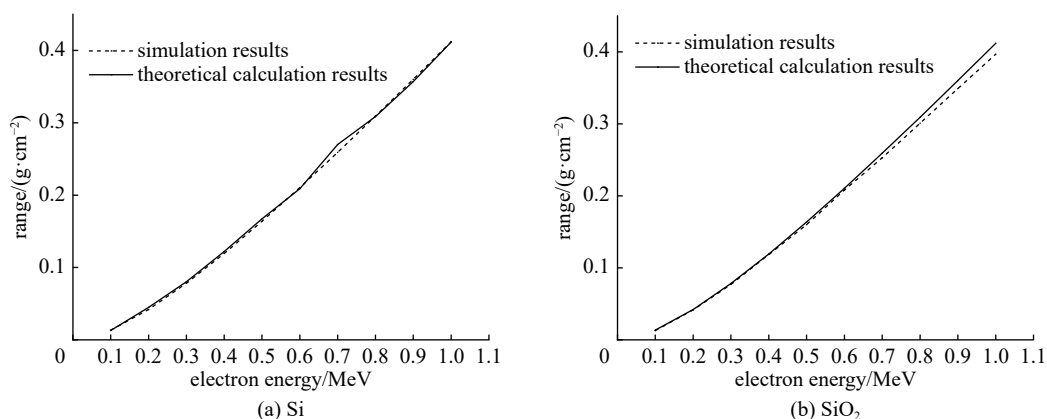


Fig. 5 Range of electrons in silicon and silicon dioxide

图5 电子在硅和二氧化硅中的射程

3 CCD像元中电子辐照模拟

图1中,电子沿着 z 轴方向传输,其入射方向垂直于像元表面(沿着 z 轴像元模型分别为栅氧化层、N埋沟层、P型外延层),入射位置于像元1的中心处。像元尺寸为 $12\ \mu\text{m}\times 12\ \mu\text{m}$ ($a\times b$),栅氧化层的厚度为 $h_1=90\ \text{nm}$,N埋沟层的厚度为 $h_2=0.5\ \mu\text{m}$,P型外延层的厚度为 $h_3=10\ \mu\text{m}$ 。

3.1 能量沉积模拟

图6为能量为30 keV的电子辐照CCD单个像元模型的能量沉积过程,图7给出了5 keV到1 MeV能量的电子辐照在CCD单个像元模型上的能量沉积情况。可以看出:(1)入射电子能量低于28 keV时,入射电子未穿透像元,电子最终全部沉积在其中,能量沉积随入射电子能量增大而增大;(2)入射电子能量超过35 keV时,将有部分电子穿透CCD像元模型,入射至真空中,沉积在像元内的电子数量和能量均快速减少;(3)入射电子能量超过600 keV时,绝大多数入射电子将直接穿透材料,能量沉积下降速率将逐渐趋于平滑,最终将基本保持不变。

接下来对图1所示CCD像元阵列进行电子辐照,LEO空间辐射环境主要由3部分组成:银河宇宙射线、地球捕获辐射、太阳粒子事件,其中地球捕获辐射外带以电子为主,电子能量范围为 $0.04\sim 4\ \text{MeV}$ ^[15]。本文对此部分模拟计算选定的电子能量范围为 $50\sim 150\ \text{keV}$,由于电子垂直于像元表面打入,像元2、4、6、8(像元3、5、7、9)受到的辐射情况基本相同,故本文以不同能量电子辐照在像元2和像元3上的能量沉积为例开展模拟研究,结果如图8和图9所示。由图7可知,仅辐照一个像元时,能量沉积随着电子束能量的增大有一个先增大再减小的过程,在辐照像元1时,像元2中的能量沉积仅有下降的过程,而像元3能量沉积的变化趋势类似于图7。

出现上述现象的原因可以解释为:电子入射像元1时,周围像素元受到的电子能量、入射角度不同,故每个像元受到的影响是有差异的。对于像元2,随着电子能量增大能量沉积减小,该像素在电子能量较低时更易受到伤害;对于像元3,虽然其能量沉积值比像元2的小,但是其易受到伤害时电子的能量要比像元2的大。

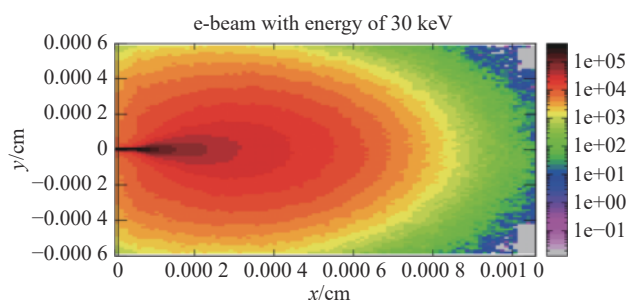


Fig. 6 Energy deposition of CCD pixel irradiated by the 30 keV electron beam

图6 30 keV能量电子在CCD像元中的能量沉积

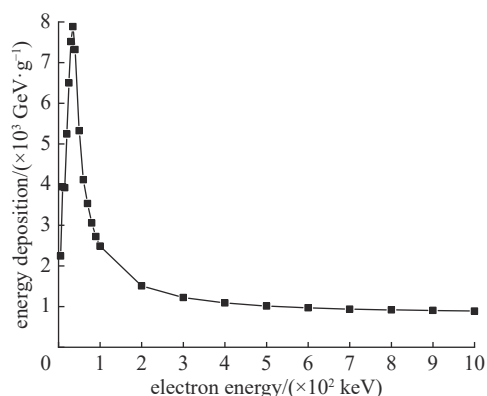


Fig. 7 Energy deposition of CCD pixel irradiated by 5 keV to 1 MeV electron beams

图7 5 keV到1 MeV能量电子在CCD像元中的能量沉积

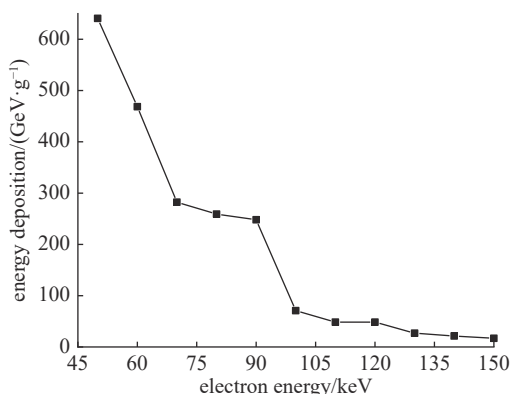


Fig. 8 Energy deposition in pixel 2

图 8 像元 2 中的能量沉积

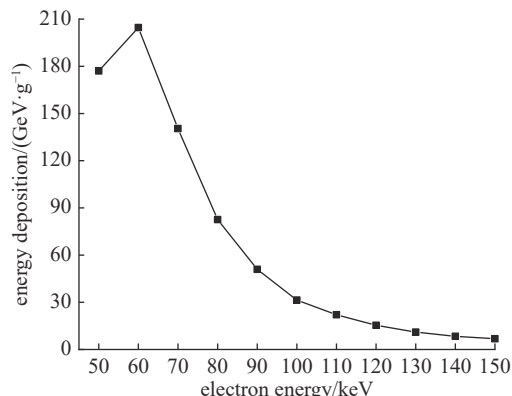


Fig. 9 Energy deposition in pixel 3

图 9 像元 3 中的能量沉积

3.2 边界对平均原子离位 (DPA) 的影响

在辐照损伤研究中, DPA 是衡量材料辐照损伤程度的一种方法, 其表示辐照累计到一定剂量时, 在被辐照的固体内每个点阵原子被击中而发生平均离位的次数。DPA 值越大, 表明靶材料受到的情况越严重。

已知入射粒子的质量、能量和靶材料的情况下, 在靶材料内深度为 x 处, 厚度为 Δd 的区域内产生的 DPA 计算方法如下^[16-17]

$$DPA(x) = \frac{(\phi v(x)\Delta d)}{N\Delta d} = \frac{(\phi v(x))}{N} \quad (5)$$

式中: ϕ 为入射粒子剂量, 单位为 ions/cm^2 , N 为材料的原子数密度, $v(x)$ 为平均每个入射离子在 x 深度处单位距离内产生的离位原子数 (即空位数), 其与入射电子能量以及材料对粒子能量的吸收 (能量损失或能量沉积) 相关, 随着入射电子能量的降低, 产生空位的几率也会降低。

选取 1 MeV 能量电子束辐照 CCD 像元阵列, 计算分析有、无边界对电子在 CCD 像元 2 的左侧界面 DPA 的影响, 结果如图 10、图 11 所示。其中图 10 为不同 z 时 DPA 的变化曲线, 图 11 为有、无边界时像元内电子运动轨迹。

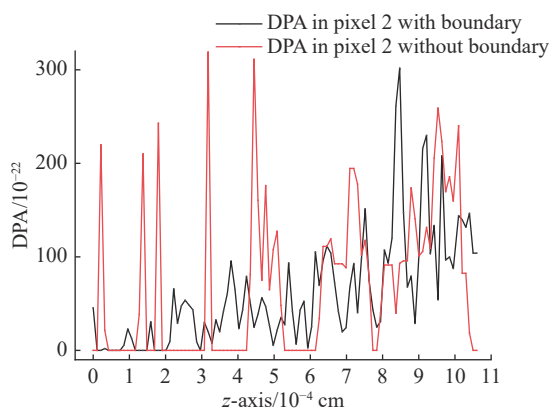


Fig. 10 Comparison results of DPA in pixel 2 with and without boundary

图 10 有无边界时像元 2 中 DPA 的对比

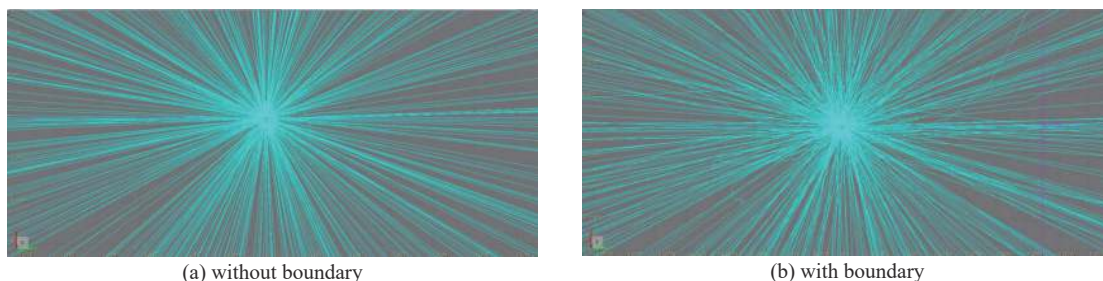


Fig. 11 Trajectories of electrons in CCD without and with boundary

图 11 有无边界时电子在 CCD 中的运动轨迹

结合图 10 和图 11 可以看出: 当 z 值小于 $5 \mu\text{m}$ 时, (1) 无边界 CCD 像元 DPA 曲线的“峰”、“谷”非常明显, 这是由于入射电子能量为 1 MeV, 能量相对较高, 电子在穿过无边界 CCD 像元模型后, 绝大部分电子沿各自原方向运动, 不同 z 值处 DPA 差异较大 (“峰”对应的 z 值处有大量电子经过, DPA 较高; “谷”对应的 z 值处没有电子经过, DPA 为零或趋近零); (2) 有边界 CCD 像元 DPA 曲线较为缓和, 是由于电子在边界处运动方向发生变化, 运动到不同 z 值处的电子数随之改变; (3) 有边界 CCD 像元 DPA 曲线“峰”值比无边界 CCD 像元 DPA 曲线的“峰”值小, 是因为电子在穿过像元边界时运动方向改变, 部分电子打入真空中或其他像元, 能进入像元 2 边界的电子数少于无边界的情况。随着向 z 轴正方向深入: (1) 电子能量下降, 与靶中原子碰撞时运动方向发生变化, 此时电子的能

量和数量共同影响无边界 CCD 像元的 DPA, 其曲线逐渐缓和且“峰”值减小; (2) 有边界 CCD 像元 DPA 曲线“峰”值增大, 这是由于随着 z 值增大, 电子数也越来越多, 靶中点阵原子被击中发生离位的概率增大, DPA 增大。

4 结 论

本文针对近地轨道空间环境中电子辐照 CCD 的情况, 利用三维蒙特卡罗软件 FLUKA 分析了电子在 Si 和 SiO₂ 中能量沉积过程, 模拟了不同能量电子在 Si 和 SiO₂ 中的阻止本领和射程, 模拟计算与理论结果对比验证了本文方法的适用性。选取某国产 CCD 器件, 在 FLUKA 中建立了 CCD 像元阵列物理模型, 实现了对电子束在 CCD 像元阵列中辐照损伤的模拟计算。结果表明, 辐照单个像元时, 电子束能量低于 28 keV 时, 没有电子能够穿透像元, 其能量全部沉积在像元中, 电子束能量超过 600 keV 时, 绝大多数入射电子会穿透像元, 沉积在像元中的能量开始迅速减小。辐照像元阵列时, 能量沉积的模拟结果表明, 靠近入射点的像元能量沉积最大处对应的入射电子能量较小。同时 DPA 的分布特征表明, 电子辐照在无边界像元中产生的 DPA 随入射深度的增加先增加后减小, 在有边界像元中产生的 DPA 随入射深度的增加先减小后增加, 并且随入射深度的增加无边界像元中产生的 DPA 与有边界像元中产生的 DPA 差值越来越小, 甚至某些位置有边界像元中产生的 DPA 还大于无边界像元中产生的 DPA。本文获得了该型 CCD 像元电子辐照损伤的一些关键参数, 实现了基于蒙特卡罗方法的电子辐照 CCD 的损伤程度初步评估。

参考文献:

- [1] Perinati E, Tenzer C, Santangelo A, et al. LEO radiation environment and the design of the micro-channel-plate X-ray telescope camera on-board the SVOM mission[J]. International Society for Optics and Photonics, 2012, 8443: 84434T.
- [2] 陈国珍, 林国成. 低地球轨道空间带电粒子辐射环境及其对航天器的影响[J]. 航天器工程, 1993(1): 30-36. (Chen Guozhen, Lin Guocheng. Low earth orbit space charged particle radiation environment and its influence on spacecraft[J]. Spacecraft Engineering, 1993(1): 30-36)
- [3] Hopkinson G R. Radiation effects on solid state imaging devices[J]. Radiation Physics and Chemistry, 1994, 43(1/2): 79-91.
- [4] 薛利军, 段晓峰, 卫俊霞, 等. 航天 CCD 相机辐照测量技术[J]. 电子技术, 2011, 38(12): 61-62, 58. (Xue Lijun, Duan Xiaofeng, Wei Junxia, et al. Research on the measurement of radiation effect on CCD space camera[J]. Electronic Technology, 2011, 38(12): 61-62, 58)
- [5] Brau J E, Igonkina O B, Potter C T, et al. Investigation of radiation damage in the SLD CCD vertex detector[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2004, 51(4): 1742-1746.
- [6] Stefanov K D, Tsukamoto T, Miyamoto A, et al. Electron and neutron radiation damage effects on a two-phase CCD[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2000, 47(3): 1280-1291.
- [7] 李豫东, 郭旗, 陆妩, 等. CCD 在不同注量率电子辐照下的辐射效应研究[J]. 原子能科学技术, 2012, 46(3): 346-350. (Li Yudong, Guo Qi, Lu Wu, et al. Research on electron irradiation damage effects of charge coupled device[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2012, 46(3): 346-350)
- [8] Ferrari A, Sala P R, Fassò A, et al. FLUKA: A Multi-Particle Transport Code[R]. CERN-2005-10, 2005.
- [9] Böhlen T T, Cerutti F, Chin M, et al. The FLUKA code: developments and challenges for high energy and medical applications[J]. Nucl Data Sheets, 2014, 120(jun.): 211-214.
- [10] 薛院院, 王祖军, 刘静, 等. CCD 质子辐照损伤效应的三维蒙特卡罗模拟[J]. 强激光与粒子束, 2018, 30: 044001. (Xue Yuanyuan, Wang Zujun, Liu Jing, et al. Three-dimensional Monte Carlo simulation of damage effects of photon radiation on CCD[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2018, 30: 044001)
- [11] Turner J E, Kelsey, Charles A. Atoms, radiation and radiation protection[J]. Phys Today, 1996, 49(1): 126-127, 380.
- [12] 李星洪, 吴学超. 辐射防护基础[M]. 北京: 原子能出版社, 1982: 9-10. (Li Hongxing, Wu Xuechao. Fundamentals of radiation protection[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1982: 9-10)
- [13] Anderson H H, Berger M J, Bichsel H, et al. NIST: Introduction of ESTAR, PSTAR, and ASTAR[EB/OL]. <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>.
- [14] 汲长松. 核辐射探测器及其实验技术手册[M]. 北京: 原子能出版社, 1990. (Ji Changsong. Handbook of nuclear radiation detectors & their experiment techniques [M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1990)
- [15] 沈自才, 夏彦, 杨艳斌, 等. 航天器空间辐射防护材料与防护结构[J]. 宇航材料工艺, 2020, 50(2): 1-7. (Shen Zicai, Xia Yan, Yang Yanbin, et al. Protection of materials and structures from space radiation environments on spacecraft[J]. Aerospace Materials & Technology, 2020, 50(2): 1-7)
- [16] Hengstler-Eger R, Baldo P, Beck L, et al. Heavy ion irradiation induced dislocation loops in AREVA's M5[®] alloy[J]. Journal of Nuclear Materials, 2012, 423(1/3): 170-182.
- [17] Burchell T. Radiation effects in graphite and carbon-based materials[J]. MRS Bulletin, 1997, 22(4): 29-35.