

文章编号: 2095-4980(2021)06-1126-08

电离损伤效应漂移扩散模型的数值算法和应用

马召灿¹, 李鸿亮^{*2}, 卢本卓¹

(1.中国科学院 计算数学研究所, 北京 100190; 2.四川师范大学 数学科学学院, 四川 成都 610066)

摘要: 针对半导体器件中的氧化物由于辐射电离损伤所产生的界面陷阱和体缺陷的模型, 采用向后欧拉方法处理时间离散, 采用线性化的方法处理带反应项的非线性漂移扩散反应方程, 完成了氧化金属-绝缘层-半导体结构(MIS)中二氧化硅层产生界面缺陷和体缺陷的数值模拟。该算法在三维并行自适应有限元软件平台(PHG)上编程实现, 模拟的数值结果与电离损伤实验中所出现的低剂量增强效应和在不同氢气浓度条件下的数据相符合。针对模拟结果给出了对应模型的结果分析。

关键词: 电离损伤效应; 氧化物缺陷; 界面缺陷; 并行有限元

中图分类号: TN914.42

文献标志码: A

doi: 10.11805/TKYDA2020047

High-performance parallel algorithm for multi-component drift diffusion reaction model and its application on ionization effects

MA Zhaocan¹, LI Hongliang^{*2}, LU Benzhuo¹

(1.LSEC, Institute of Computational Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; 2.Department of Mathematics, Sichuan Normal University, Chengdu Sichuan 610066, China)

Abstract: The model of interface traps and body defects caused by radiation ionization damage in oxides in semiconductor devices is studied. Using the Backward Euler method to deal with the time discretion and using the linearity method to deal with the nonlinear drift-diffusion reaction equation, the numerical simulation of the interface traps and body traps generated by the silica layer in the Metal-Insulator-Semiconductor(MIS) structure is completed. The algorithm is implemented on the high-performance parallel finite element software—Parallel Hierarchical Grid(PHG). The numerical results of the simulation are consistent with the Enhanced Low Dose Rate Sensitivity(ELDRS) in the ionization damage experiment and the data under different hydrogen ambient conditions. The corresponding models are analyzed aiming for the simulation results.

Keywords: ionizing dose effect; oxide traps; interface traps; parallel finite element

高能光子在半导体内部发生电离作用诱导形成非平衡电子—空穴对。非平衡电子、空穴在器件内部自建电场作用下发生复合、漂移扩散, 并且与钝化层内的缺陷发生一系列复杂的反应过程。随着辐照剂量增加, 钝化层陷阱电荷和界面陷阱电荷不断累积, 导致器件阈值电压漂移和表面复合作用增强, 并引起器件电学性能降低或永久失效。上述器件损伤过程称为电离损伤总剂量效应(Total Ionizing Dose Effects, TID)。一旦器件接受辐射剂量超过它的 TID 阈值, 就会引起器件的永久性故障的效应^[1-2]。文献[3-4]报道, 双极器件电离损伤表现出强烈的低剂量率辐照损伤增强效应(ELDRS), 即在保持总辐照剂量不变的条件下, 辐照损伤随辐照剂量率降低而增加。ELDRS 效应使得常规的等效加速评估实验技术不再可靠, 对特种器件的可靠性造成极大的影响。因此对电离损伤 TID 效应和 ELDRS 效应进行建模与模拟是学界重点关注的问题^[5]。如何建模和分析上述 2 种效应是学界的重要课题^[6]。

收稿日期: 2020-02-04; 修回日期: 2020-05-01

基金项目: 国家重点研发计划基金资助项目(2016YFB0201304)

*通信作者: 李鸿亮 email:lihongliang@mtrc.ac.cn

很多学者尝试建立总剂量效应定量模型。Boch 在文献[7]的模型中引入了一种未注明的反应物作为反应中心，成功地在数量和趋势上模拟了 ELDRS 效应，指出 SiO₂ 中缺陷作为捕获空穴陷阱的重要作用。Pease 和 Hjalmarson 在文献[8-9]中指出了 H₂ 分子的碰撞作用和含氢缺陷 (VoH) 作为另一种反应中心在电离损伤效应中的作用，但是 Pease 和 Hjalmarson 的模型中只考虑了一类含氢缺陷，而事实上氧化物中存在多种含氢缺陷，且缺陷捕获空穴的能力与缺陷的能级位置相关^[10]，这导致了反应系数的不准确。采用的 Rowsey N L^[11]的模型不但包含了以上 2 种模型的优点，而且引入了深能级的缺陷 V_{oy} 和浅能级缺陷 V_{os} ，其反应参数从第一性原理计算得到并进行了仔细的校验，相较于前 2 种模型相对准确。以上 3 种模型均是在 1D 和 2D 的氧化金属-绝缘层-半导体结构(MIS 结构)上实现，缺少在三维实现算例，对于总剂量效应的分析工作更是少之又少。

针对以上问题，在考虑模型时，选取了文献[1]中的反应物和参数，在三维并行自适应有限元平台(PHG)^[11]上，采用有限元方法进行空间离散，采用隐式时间方法来进行时间推进，并结合线性化方法处理非线性项，给出了针对该模型的并行方法。在算例设计上，同样选取了经典的三维 MIS 结构来考察总剂量效应的定量结果，从而检测算法的可行性。

1 电离损伤模型和算法设计

SiO₂ 的总剂量效应经过 30 年的研究，基本可以归结为^[12]：

- 1) 电子-空穴对(EHPs)由于射线照射产生；
- 2) 内部电场作用下，空穴(p)向界面移动，电子(n)向电极移动；
- 3) 空穴与氧空位(V_{oy} 等)结合，电子可以进一步与被困的空穴结合；
- 4) H₂由于工艺原因存在于氧化物之间，它与带正电的缺陷反应(V_{oy}^+ 等)，产生质子(H⁺)。质子在电场作用下进行漂移扩散运动，同时可以与缺陷进一步反应生成氢化缺陷($V_{oy}H^+$ 等)；
- 5) 带正电的氢化缺陷($V_{oy}H^+$ 等)也可以直接释放出质子(H⁺)；
- 6) 质子(H⁺)与悬挂键(Si-H)反应产生界面陷阱(N_{it})。

该模型可以由含时的运输反应方程描述。

Poisson 方程描述电场：

$$\epsilon \nabla^2 \phi = -Q \quad (1)$$

$$Q_{SiO_2} = q(p + H^+ + V_{os}^+ + V_{os}H^+ + V_{os}H_2^+ + V_{oy}^+ + V_{oy}H^+ + V_{oy}H_2^+ - n) \quad (2)$$

电运输反应方程描述漂移扩散粒子：

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (e\mu_n n \mathbf{E} + D_n \nabla n) + U_{\text{radiation}} + G_n - R_n \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot (e\mu_p p \mathbf{E} - D_p \nabla p) + U_{\text{radiation}} + G_p - R_p \quad (4)$$

$$\frac{\partial H^+}{\partial t} = -\nabla \cdot (e\mu_{H^+} H^+ \mathbf{E} - D_{H^+} \nabla H^+) + G_{H^+} - R_{H^+} \quad (5)$$

$$\frac{\partial H_2}{\partial t} = D_{H_2} \nabla H_2 + G_{H_2} - R_{H_2} \quad (6)$$

式中：电场强度 $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ ；扩散系数和迁移率之间满足爱因斯坦关系： $D = \mu k_b T$ ， k_b 为 Boltzmann 常数。

常微分方程描述固定缺陷的反应：

$$\frac{dT_i}{dt} = G_i - R_i \quad (7)$$

(T_i 为各种缺陷，如： $V_{oy}, V_{oy}^+, V_{os}, V_{os}^+, V_{oy}H, V_{oy}H^+, V_{os}H, V_{os}H^+, V_{oy}H_2, V_{os}H_2, V_{oy}H_2^+, V_{os}H_2^+$)

$U_{\text{radiation}}$ 表示辐射的产生项：

$$U_{\text{radiation}} = Y(\mathbf{E}) g_0 g \quad (8)$$

式中： Y 为电子空穴随电场强度的产率，即电子空穴对的生成率，取 0~1 之间的值； g_0 为单位辐射剂量所产生的电子和空穴对数； g 为剂量率(rad(SiO₂/s))。

G 和 R 分别表示生成项和湮灭项，下面着重介绍生成项和湮灭项的表示方法。考虑缺陷、载流子、氢杂质和质子之间的反应：



以 A 粒子为例，其生成项和湮灭项分别为：

$$G_A = k_{r0}[C] + k_{r1}[C][N] \tag{11}$$

$$R_A = k_{f0}[A][B] + k_{f1}[A][M] \tag{12}$$

k_f, k_r 分别为正向和反向反应的速率，下标 0,1 对应不同的反应 0 和反应 1。这里采用文献[13]中的数据给出的反应方程和反应速率。

为了实现数值模拟，还需要给出漂移扩散反应的粒子(n, p, H^+, H_2)所对应的边界条件，如图 1 所示。

a) 在二氧化硅与栅极接触的区域(Γ_u)和与硅接触区域(Γ_l)电子(n)和空穴(p)均采用自由边界条件；

b) 质子(H^+)在二氧化硅与栅极接触区域(Γ_u)采用自由边界条件，与硅接触区域(Γ_l)采用吸收边界条件；

c) 氢气(H_2)在二氧化硅与栅极接触区域(Γ_u)采用反射边界条件，与硅接触区域(Γ_l)采用反射边界条件；

d) 所有粒子在与空气接触界面均采用反射边界条件。

界面处悬挂键与质子的反应： $H^+ + Si-H \rightleftharpoons N_{it} + H_2$ ，该反应正反应速度远大于逆反应，可以认为只发生正反应，但是需要把质子的单位从三维量纲($/cm^3$)转变为二维量纲($/cm^2$)，引入质子流和悬挂键的反应方程来刻画界面态的生成，其中 σ_{im} 为捕获系数：

$$\frac{dN_{it}}{dt} = \sigma_{im} J_{H^+} \cdot n [SiH] - [N_{it}] \tag{13}$$

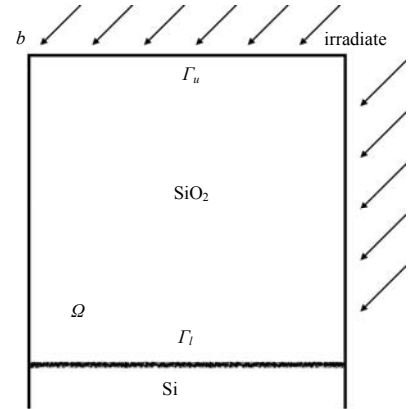


Fig.1 Total ionizing effect on MIS
图 1 电离损伤对 MIS 影响示意图

2 算法设计流程

本文需要求解 17 个方程，包括 Poisson 方程，4 个连续性方程，12 个固定缺陷的连续性方程，和 1 个界面态连续性方程，由于模型记号比较复杂，首先进行适当的简化^[14]：

$$-\nabla \cdot \epsilon \nabla \phi = \sum_i q_i c_i + \sum_j q_j c_j, \tag{14}$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot D_i (\nabla c_i + \beta q_i c_i \nabla \phi) + F_i(c_i, c_j), c_i = p, n, H^+, H_2 \tag{15}$$

$$\frac{dc_j}{dt} = F_j(c_i, c_j), c_j = V_{or}, V_{or}^+, V_{od}, V_{od}^+, V_{or}H, V_{or}H^+, V_{od}H, V_{od}H^+, V_{or}H_2, V_{od}H_2, V_{or}H_2^+, V_{od}H_2^+ \tag{16}$$

式中： q 为粒子的带电量 $q_i = z_i e$ ； β 为爱因斯坦关系 $\frac{1}{k_b T}$ ，设 $u = e\beta\phi$ ，则原方程可简化为：

$$-\nabla \cdot \epsilon \nabla u = e\beta \sum_i z_i c_i + e\beta \sum_j z_j c_j \tag{17}$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot D_i (\nabla c_i + z_i c_i \nabla u) + F(c_i, c_j), c_i = p, n, H^+, H_2 \tag{18}$$

$$\frac{dc_j}{dt} = F_j(c_i, c_j), c_j = V_{or}, V_{or}^+, V_{od}, V_{od}^+, V_{or}H, V_{or}H^+, V_{od}H, V_{od}H^+, V_{or}H_2, V_{od}H_2, V_{or}H_2^+, V_{od}H_2^+ \tag{19}$$

在完成上述简化过程后，给出针对该模型的并行有限元算法：

Step1 初始化剂量率 g ，并给出各离子的初始浓度。

Step2 对应时间层变量 n ，读入当前计算参数，利用有限元离散 Poisson 方程后求解 $n+1$ 时间层的电势：

$$\int_{\Omega} \epsilon \nabla u^{n+1} \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} \sum_i z_i c_i^n v d\Omega = 0 \tag{20}$$

式中 v 为有限元测试函数。

Step3 初始化内循环变量 k ，这里设置最大迭代次数 $K=1000$ ， $[u^{n+1,0}, c_i^{n+1,0}] = [u^n, c_i^n]$ ，顺次求解漂移扩散方程和常微分方程：

$$\int_{\Omega} \frac{c_i^{n+1,k} - c_i^n}{\delta t} \cdot v d\Omega = \int_{\Omega} (\nabla \cdot D_i (\nabla c_i^{n+1} + z_i c_i^{n+1} \nabla u^{n+1}) + F_i(c_i, c_j)) \cdot v d\Omega \tag{21}$$

$$\frac{c_j^{n+1,k} - c_j^{n,k}}{\delta t} = F_j(c_i, c_j) \tag{22}$$

其中 $F_i(c_i, c_j), F_j(c_i, c_j)$ 为需要处理的非线性项，采用线性化方法来处理非线性问题：

$$F_i(c_i^{n,k}; \hat{c}_j^{n,k}) = J_{F_i}(c_i^{n,k}; \hat{c}_j^{n,k})c_i^{n+1} + F_i(c_i^{n,k}; \hat{c}_j^{n,k}) - J_{F_i}(c_i^{n,k}; \hat{c}_j^{n,k})c_i^{n,k} \tag{23}$$

Step4 更新 $n+1$ 时间层的电势，计算当前内循环 k 层的 Poisson 方程：

$$\int_{\Omega} \nabla u^{n+1,k} \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} \sum_i z_i c_i^{n,k} v d\Omega = 0 \tag{24}$$

Step5 判断内循环收敛条件： $\|u^{n+1,k} - u^{n+1,k-1}\|_{L_2} < tol \cdot \|u^{n+1,k}\|_{L_2}$ ；

是，则进入 Step6；否，则回到 Step3， $k=k+1$ ；若 $k>K$ 则跳出循环，同时报错；

Step6 根据界面方程计算该时刻的界面缺陷浓度：

$$\frac{dN_{it}}{dt} = \sigma_{int} \mathbf{J}_{H^+} \cdot \mathbf{n} ([SiH] - [N_{it}])$$

Step7 判断外循环条件 $ng < Total\ Dose$ ；是，则跳出循环；否，则回到 Step2， $n=n+1$ 。

给出该算法的并行效率测试。首先定义并行效率为：

$$E = \frac{36T_{36}}{pT_p} \tag{25}$$

其中 T_p 表示使用了 p 个进程求解方程需要的运行时间。将 32 个进程作为基准，测试总剂量为 1 krad (SiO_2)，剂量率为 10 rad(SiO_2/s)，测试网格为 MIS 结构，包括 1 418 778 个顶点和 8 637 254 个四面体，得到的并行效率如表 1 所示，576 核的并行效率达到了 150%，可见算法具有较好的扩展性。注意到，并行效率从 512 个进程到 1 024 个进程时有一个明显的下降，这与 InfiniBand 网络的拓扑有关，不依赖于算法和并行代码本身。电离损伤模型算法流程如图 2 所示。

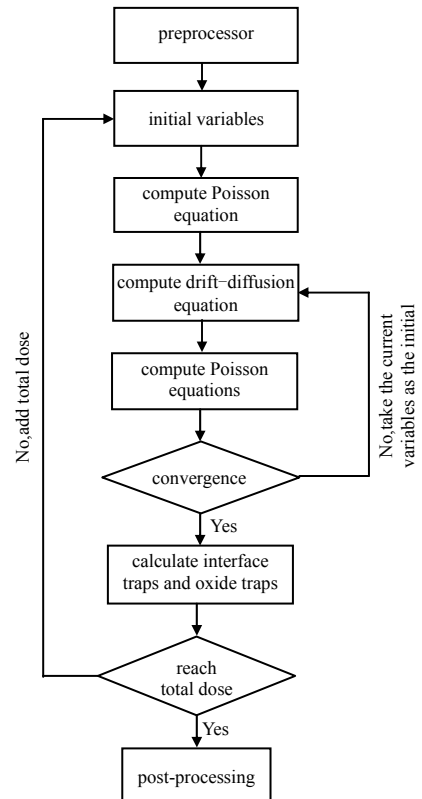


Fig.2 Flow chart of TID effect
图 2 电离损伤模型算法流程图

3 数值结果与讨论

本算法的实现基于并行自适应有限元软件平台 PHG，测试的结构包括三维的 MIS 结构。由于电离损伤效应主要发生于氧化物区域，所以三维 MIS 结构可以反映整个辐射带电过程并且方便对产生的带电缺陷进行定量研究，是目前仿真的经典器件结构^[3-12]。针对电离损伤效应，ELDRS 效应和外界氢气浓度的关系是学界所关注的，有大量的实验数据作为支撑^[2-8]，所以三维数值模拟主要展示针对以上 2 种现象进行考察，并采用 MIS 结构给出电离损伤的数值结果。针对三维 MIS 结构，采用的网格由 Tetgen 产生，如图 3 所示，包括 159 721 个顶点，874 389 个自由度，模拟区域二氧化硅厚度为 1 μm 。

3.1 电离损伤模拟低剂量增强效应

1991 年，Enlow 等^[15]发现当总辐射剂量固定时，双极器件中 TID 效应产生的损耗状况会随着剂量率的降低而升高，这一现象被称为低剂量率辐照损伤增强效应(ELDRS)。为了实际测试评估 ELDRS 对双极器件产生的损伤，必须将半导体置于实际辐射下，并在较长时间内一直维持较低的剂量率。在三维 MIS 结构中模拟的在 10 krad(SiO_2)辐射环境下界面缺陷随剂量率的变化如图 4 所示，数值结果与实验数量级和趋势吻合。

表 1 并行效率

| number of process | t/s | parallel efficiency/% |
|-------------------|-------------------------|-----------------------|
| 36 | 5.201 6×10 ² | 100 |
| 72 | 1.552 0×10 ² | 167 |
| 144 | 6.394 6×10 | 203 |
| 288 | 5.157 0×10 | 126 |
| 576 | 2.171 8×10 | 149 |
| 1152 | 5.504 5×10 ² | 29 |

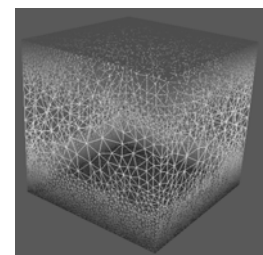


Fig.3 Mesh structure of MIS
图 3 MIS 网格结构

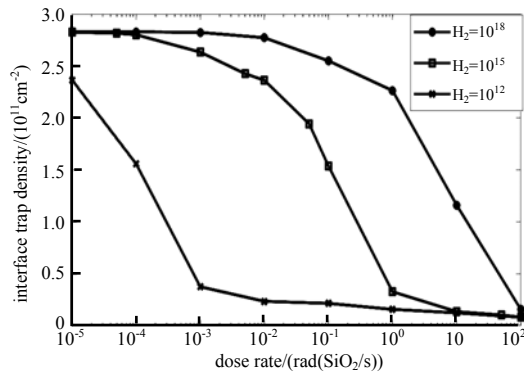


Fig.4 Simulation of ELDRS effect in different hydrogen ambients, total dose=10 krad(SiO₂)

图 4 总剂量为 10 krad(SiO₂),在不同氢气浓度条件下仿真得到的 ELDRS 效应

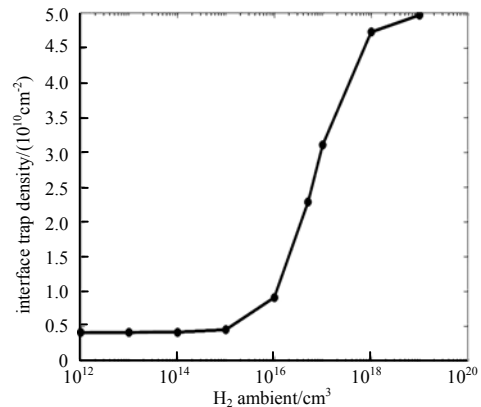


Fig.5 Simulation of interface traps in different H₂ ambients

图 5 总剂量为 10 krad(SiO₂), 剂量率为 10 rad(SiO₂/s) 计算得到随 H₂ 浓度的分布

3.2 电离损伤模拟氢气的影晌

另一方面, 由于半导体生产工艺中需要在氢气氛围下进行封装, 不同氢气浓度也会极大影响界面缺陷和固定缺陷的产生。文献[4-6]都报告了氢气在该效应中的重要地位。在三维 MIS 结构的测试中给出了不同的 H₂ 浓度下界面缺陷的密度如图 5 所示, 该结果与文献[4]中实验给出的数量级和趋势相吻合。

4 TID 模型的理论分析

4.1 电离损伤饱和效应分析

采用稳态分析法来分析数值结果的正确性。这里假设在含时反应中极低剂量率的长时间反应的每一步都是平衡的, 系数达到稳定, 只考虑其中的深能级缺陷, 即下标为 γ (浅能级缺陷, 下标为 δ , 可做类似分析)。在原始的方程组中, 假设原有的不带电缺陷即 $V_{oy}, V_{oy}H, V_{oy}H_2$ 和二氧化硅中残余的氢气浓度都是常数, 不随时间变化(事实上不带电缺陷的变化量相对初值也是极小的), 将原始的非线性方程尽可能简化, 只保留其带电项 $V_{oy}^+, V_{oy}H^+, V_{oy}H_2^+$ 。这里得到关于剂量率 g 的函数, 即空穴产率的函数:

$$\frac{dp}{dt} = \epsilon_0 g - r_p p = 0 \tag{26}$$

$$\frac{dn}{dt} = \epsilon_0 g - r_n n = 0 \tag{27}$$

式中 $p = \frac{\epsilon_0 g}{r_p}$, $n = \frac{\epsilon_0 g}{r_n}$, 即空穴和电子是随剂量率(g)线性分布。

再考虑带电缺陷的方程组:

$$\frac{d[V_{oy}^+]}{dt} = k_0[V_{oy}][p] + k_1[V_{oy}H][H^+] + k_2[V_{oy}H_2^+] - k_3[H_2][V_{oy}^+] - k_4[V_{oy}^+][n] = 0 \tag{28}$$

$$\frac{d[V_{oy}H_2^+]}{dt} = k_5[V_{oy}H_2][p] + k_6[V_{oy}H][H^+] + k_7[H_2][V_{oy}^+] - k_8[V_{oy}H_2^+] - k_9[V_{oy}H_2^+][n] = 0 \tag{29}$$

$$\frac{d[V_{oy}H^+]}{dt} = k_{10}[V_{oy}H][p] + k_{11}[V_{oy}][H^+] - k_{12}[V_{oy}H^+] - k_{13}[V_{oy}H^+][n] = 0 \tag{30}$$

$$\frac{dH^+}{dt} = k_{14}[V_{oy}^+][H_2] + k_{15}[V_{oy}H^+] + k_{16}[V_{oy}H_2^+] - k_{17}[H^+][V_{oy}^-] - k_{18}[H^+][V_{oy}H] = 0 \tag{31}$$

在缺陷的复合中由于电子是极少量的(电子扩散系数大, 在电场作用下更快地移动出计算区域, 即 r_n 极大), 其浓度大概在 $10^5/cm^3$ 这个数量级。所以电子对于带电缺陷的作用基本可以忽略不记。

其中针对 V_{oy}^+ , $k_3[H_2] = 1.92 \times 10^{-19} [H_2] \approx 10^{-7} \sim 10$, 远远大于 $k_4[n] = 1.97 \times 10^{-14} [n] \approx 2 \times 10^{-9}$; 针对 $V_{oy}H_2^+$, $k_9[n] = 2.06 \times 10^{-7} [n] \approx 2 \times 10^{-2}$, 远远大于 $k_8 = 3.81 \times 10^5$ 。而针对 $V_{oy}H^+$ 需要单独考虑。略去电子对应项带入求解得到带电缺陷的解:

$$[V_{oy}^+H] = \frac{k_8}{(k_3k_8 - k_2k_7)[H_2]} \left\{ \left(k_0[V_{oy}] + \frac{k_2k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] \right) \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \left(k_1 + \frac{k_2k_6}{k_8} \right) [V_{oy}H][H^+] \right\} \quad (32)$$

$$[V_{oy}H_2^+] = \left\{ \frac{k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] + \frac{k_7}{k_8k_3 - k_2k_7} \left(k_0[V_{oy}] + \frac{k_2k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] \right) \right\} \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \left(\frac{k_6}{k_8} + \frac{k_7}{k_8k_3 - k_2k_7} \frac{k_1k_8 + k_2k_6}{k_8} \right) [V_{oy}H][H^+] \quad (33)$$

$$[V_{oy}H^+] = \frac{k_{10}}{k_{12}} [V_{oy}H] \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \frac{k_{11}}{k_{12}} [V_{oy}][H^+] \quad (34)$$

将其带入质子的方程得到：

$$\frac{k_{14}k_8}{(k_3k_8 - k_2k_7)} \left(k_0[V_{oy}] + \frac{k_2k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] \right) \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \frac{k_{13}k_{10}}{k_{12}} [V_{oy}H] \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \left\{ \frac{k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] + \frac{k_{16}k_7}{k_8k_3 - k_2k_7} \left(k_0[V_{oy}] + \frac{k_2k_5}{k_8}[V_{oy}H_2] \right) \right\} \frac{\epsilon_0g}{r_p} = \left\{ k_{17}[V_{oy}] + k_{18}[V_{oy}H] - \frac{k_{14}k_8}{(k_3k_8 - k_2k_7)} \left(k_1 + \frac{k_2k_6}{k_8} \right) [V_{oy}H] - k_{15} \frac{k_{11}}{k_{12}} [V_{oy}] - k_{16} \left(\frac{k_6}{k_8} + \frac{k_7}{k_8k_3 - k_2k_7} \frac{k_1k_8 + k_2k_6}{k_8} \right) [V_{oy}H] \right\} [H^+] \quad (35)$$

求解方程组(35)，带入各个反应系数，可以得到各个离子随剂量率(g)的变化基本是线性的，在对数坐标系下，可以看到这 2 种离子($V_{oy}^+, H^+, V_{od}^+, V_{od}H^+, V_{od}H_2^+$)的变化趋势，图 6 和图 7 中其斜率也基本是 1，即是线性增长。

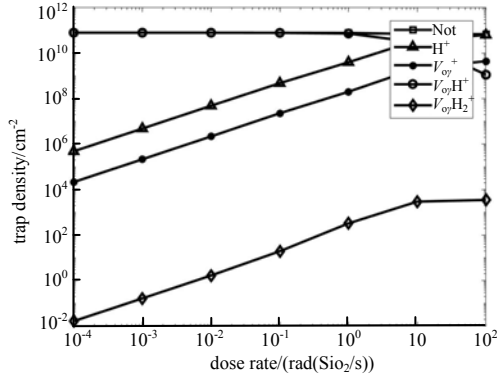


Fig.6 Simulated deep energy oxide charge density and proton density versus dose rate

图 6 深能级带电缺陷和质子密度随剂量率的分布

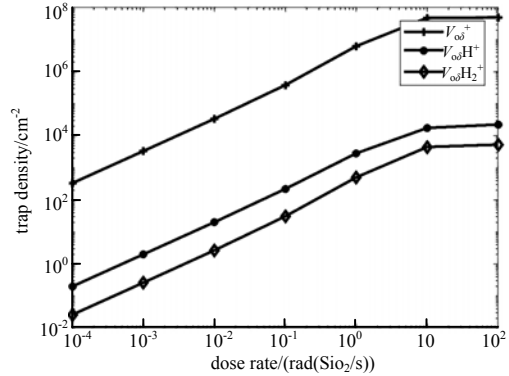


Fig.7 Simulated shallow energy oxide charge density and proton density versus dose rate

图 7 浅能级带电缺陷的密度随剂量率的分布

注意到图 6 中 $V_{oy}H^+$ 基本不随剂量率变化，因为对于这种粒子，电子的影响不可忽略 ($k_{12}=5.04 \times 10^{-22}$ 远远小于 $k_{13}=2.06 \times 10^{-7}$)，此时

$$[V_{oy}H^+] = \frac{k_{10}}{k_{12} + k_{13} \frac{r_n}{\epsilon_0g}} [V_{oy}H] \frac{\epsilon_0g}{r_p} + \frac{k_{11}}{k_{12} + k_{13} \frac{r_n}{\epsilon_0g}} [V_{oy}][H^+] \quad (36)$$

事实上如果假设 $H^+ = kg$ ，即假设质子的浓度是随剂量率呈线性关系， $V_{oy}H^+$ 的量应该为常数，这与仿真相吻合。

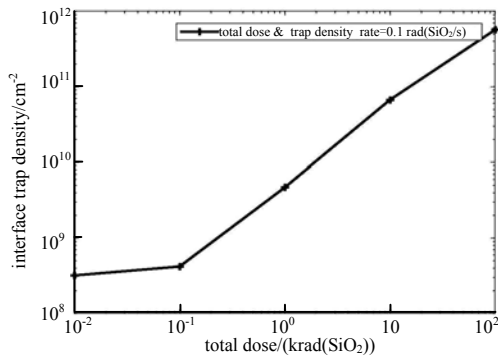


Fig.8 Simulated interface traps versus total dose

图 8 界面缺陷浓度随总剂量的仿真结果

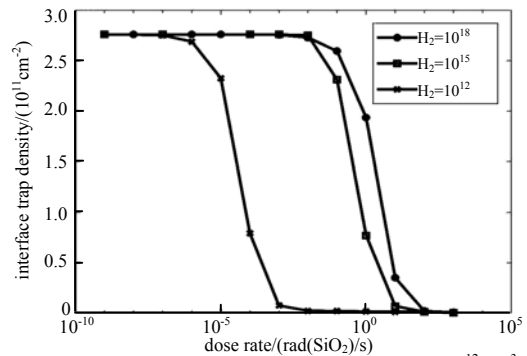


Fig.9 Simulated interface traps in H_2 ambient $10^{12}/cm^3$, $10^{15}/cm^3$, $10^{18}/cm^3$

图 9 总剂量为 $10 \text{ krad}(\text{SiO}_2)$ ，氢气浓度为 $10^{12}/\text{cm}^3$, $10^{15}/\text{cm}^3$, $10^{18}/\text{cm}^3$ 条件下界面缺陷浓度

另外可以得到界面缺陷随剂量率变化的函数：

$$N_{it} = \sigma_{int} \Sigma(\Delta t H^+) = \sigma_{int} \Sigma(\Delta t k g) = \sigma_{int} k g \Sigma(\Delta t) = \sigma_{int} k g T = \sigma_{int} k (\text{TotalDose}) \quad (37)$$

即在低剂量率下，固定质子和 Si-H 键的结合率 σ_{int} ，界面缺陷随总剂量的变化也是线性的，如图 8 所示，而且不依赖于 H_2 的浓度。这同时解释了为什么固定总剂量，在一定低剂量的情况下界面缺陷会出现稳定不再增长的现象。在模拟 10 krad(SiO_2) 的辐射时将剂量率缩小到 10^{-9} rad(SiO_2/s)，如图 9 所示，数值仿真得到的结果与理论分析的结果一致。

4.2 H_2 浓度不同引发界面缺陷的分布

由前文分析，氢气浓度的影响大部分发生于高剂量率的条件下。事实上在低氢情况($10^{12}/cm^3$)下，即使所有的质子全部由 H_2 产生也达不到 $10^{10}/cm^2$ 的数量级(Si-H 键的结合率的缘故)，此时氢气浓度并不能直接反映在质子的变化上，应该考虑含 H 缺陷($V_o H^+$) 的直接释放，如图 10 所示，给出主要带电缺陷随外界氢气密度变化的关系并给出解释。

在低氢气浓度条件下，非 H 带电缺陷占据了带电体缺陷主体，且远远高于质子浓度，因为没有足够的 H_2 发生反应而处于高位，而此时质子主要源于含 H 带电缺陷，所以含 H 带电缺陷处于低位；而在高氢气条件下，非 H 带电缺陷则可与氢气加速反应，发生碰撞，不断释放质子，数量下降，含 H 带电缺陷的释放则处于次要地位，反而由于逆反应增强导致含 H 不带电缺陷不断捕获质子而增多；当 H_2 浓度饱和，整个体系达到稳定状态，非 H 带电缺陷几乎消失，此时含氢带电缺陷占据了带电缺陷的主体，质子流也达到饱和状态。

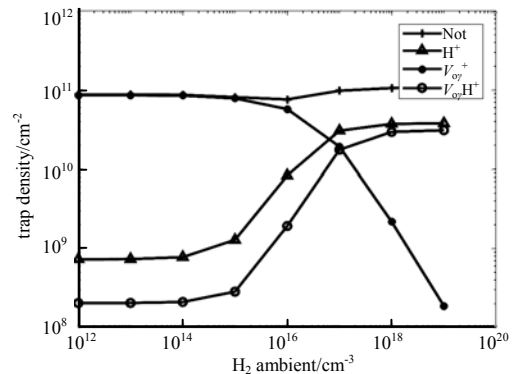


Fig.10 Simulated oxide charge density and proton density versus H_2 ambient, total dose=10 krad(SiO_2), dose rate=10 rad(SiO_2/s)

图 10 总剂量为 10 krad(SiO_2), 剂量率为 10 rad(SiO_2/s), 带电缺陷和质子随氢气浓度分布

5 结论

本文采用现有电离损伤模型，给出了其对应三维结构上的数值解法，基于高性能计算软件 PHG 进行电离损伤的仿真模拟，得到的数值结果在趋势与数量级上与文献中给出的实验结果相吻合，说明电离损伤效应存在着低剂量增强效应，工艺中残留的 H_2 对于电离损伤也有重要影响。另外，针对该模型进行相关分析工作，并基于系数大小对于方程的影响给出电离损伤的饱和效应、体内残留的 H_2 浓度对于带电缺陷的影响的分析。

参考文献：

- [1] ROWSEY N L. Quantitative modeling of total ionizing dose reliability effects in device silicon dioxide layers[M]. Gainesville, USA:University of Florida, 2012.
- [2] 李沫,孙鹏,宋宇,等. 半导体器件辐射电离效应的激光模拟方法[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2015,13(1):160-168. (LI Mo,SUN Peng,SONG Yu,et al. Basic principles and research progress of laser simulation of ionization radiation effect in semiconductor devices[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2015,13(1):160-168.)
- [3] HJALMARSON H P,PEASE R L,DEVINE R A. Calculations of radiation dose-rate sensitivity of bipolar transistors[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2009,55(6):3009-3015.
- [4] CHEN X,BARNABY H,VERMEIRE B,et al. Mechanisms of enhanced radiation-induced degradation due to excess molecular hydrogen in bipolar oxides[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2007,54(6):1913-1919.
- [5] OLDHAM T R. Ionizing radiation effects in MOS oxides[M]. Singapore:World Scientific Press, 1999.
- [6] RASHKEEV S,FLEETWOOD D,SCHRIMPF R,et al. Defect generation by hydrogen at the Si-SiO₂ interface[J]. Physical Review Letters, 2001,87(16):165506.
- [7] BOCH J,SAIGN F,SCHRIMPF R D,et al. Physical model for the low-dose-rate effect in bipolar devices[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2006,53(6):3655-3660.
- [8] PEASE R L,ADELL P C,RAX B G,et al. The effects of hydrogen on the Enhanced Low Dose Rate Sensitivity(ELDRS) of bipolar linear circuits[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2008,55(6):3169-3173.

- [9] HJALMARSON H P, PEASE R L, WITCZAK S C, et al. Mechanisms for radiation dose-rate sensitivity of bipolar transistors[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2003,50(6):1901–1909.
- [10] GRISCOM D L, FRIEBELE E J. Fundamental radiation-induced defect centers in synthetic fused silicas: atomic chlorine, delocalized E0 centers, and a triplet state[J]. Physical Review B, 1986,34(11):7524–7533.
- [11] ZHANG Linbo. A parallel algorithm for adaptive local refinement of tetrahedral meshes using bisection[J]. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications, 2009(1):69–93.
- [12] ESQUEDA I S. Modeling of total ionizing dose effects in advanced complementary metal oxide-semiconductor technologies[D]. Arizona State, USA: Arizona State University, 2011.
- [13] ROWSEY N L, LAW M E, SCHRIMPF R D, et al. A quantitative model for eldrs and degradation effects in irradiated oxides based on first principles calculations[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2011,58(6):2937–2944.
- [14] XU Jingjie, MA Zhaocan, LI Hongliang, et al. A multi-time-step finite element algorithm for 3D simulation of coupled drift-diffusion-reaction process in total ionizing dose effect[J]. IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, 2018,31(1):183–189.
- [15] ENLOW E W, PEASE R L, COMBS W, et al. Response of advanced bipolar processes to ionizing radiation[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 1991,38(6):1342–1351.

作者简介：

马召灿(1992–)，男，河南省开封市人，在读博士研究生，主要研究方向为电离损伤数值模拟。email: zhaocanma@lsec.cc.ac.cn.

李鸿亮(1987–)，男，成都市人，博士，副研究员，主要研究方向为有限元数值方法。

卢本卓(1970–)，男，北京市人，博士，研究员，主要研究方向为数值方法和高性能计算。

(上接第 1125 页)

- [9] 王晓东. 单电源运放的偏置原因分析与偏置方法[J]. 现代电子技术, 2006(16):123–125. (WANG Xiaodong. Analysis and approach of single-supply op amp bias[J]. Modern Electronic Technology, 2006(16):123–125.)
- [10] 高同强, 孔卓, 杨海钢. 一种单电源高集成度蔡氏振荡器[J]. 微电子学, 2016,46(5):680–684. (GAO Tongqiang, KONG Zhuo, YANG Haigang. A single supply highly-integrated Chua's oscillator[J]. Microelectronics, 2016,46(5):680–684.)
- [11] 蒋志洁, 阳生红, 张曰理. 混沌现象的仿真演示[J]. 物理实验, 2018,38(S1):7–10. (JIANG Zhijie, YANG Shenghong, ZHANG Yueli. Simulation of chaos using Matlab GUI[J]. Physics Experimentation, 2018,38(S1):7–10.)
- [12] 徐遵, 汪遵基. 有源模拟电感的研究[J]. 苏州丝绸工学院学报, 1999(5):22–25,58. (XU Zun, WANG Zunji. Study on active analog inductor[J]. Journal of Suzhou Institute of Silk Textile Technology, 1999(5):22–25,58.)
- [13] 朱恒. 有源电感的分析与设计[D]. 成都: 电子科技大学, 2017. (ZHU Heng. The analysis and design of active inductor[D]. Chengdu, China: University of Electronic Science and Technology of China, 2017.)

作者简介：

段晓飞(1997–)，男，山西省忻州市人，在读硕士研究生，主要研究方向为 CMOS 集成电路设计。email: 3062573955@qq.com.

高同强(1970–)，男，河北省磁县人，博士，副研究员，主要研究方向为射频/模拟集成电路设计。