

用蒙特卡罗法计算 X 射线在重金属界面的剂量增强系数

牟维兵¹⁾ 陈盘训²⁾

¹⁾ 中国工程物理研究院西南核物理与化学研究所, 绵阳 919 信箱 213 分箱, 绵阳 621900)

²⁾ 中国工程物理研究院电子工程研究所, 绵阳 919 信箱 522 分箱, 绵阳 621900)

(2000 年 5 月 15 日收到, 2000 年 8 月 19 日收到修改稿)

当 X 射线射入不同材料组成的界面时, 在低 Z 材料的一侧将产生剂量增强. 介绍了界面剂量增强效应的基本原理, 并用蒙特-卡洛程序计算了钨-硅、钽-硅、钨-二氧化硅和钽-二氧化硅界面的剂量增强系数.

关键词: X 射线, 界面, 辐射损伤, 剂量增强系数

PACC: 2520, 0270, 0290

1 引 言

在大规模和超大规模 CMOS 电路制造工艺中, 为了加快器件的工作速度, 常在 CMOS 器件的栅中加一层钨、钽等重金属材料, 双极器件也使用一些重金属作为欧姆接触材料, 以提高器件的导电性能. 因此, 在集成电路和器件中存在高 Z 材料和低 Z (Si 或 SiO₂) 材料形成的界面. 一些大型超高压设备运行时会在其周围产生强 X 射线场. 当这种强 X 射线进入电子系统时, 会在电子器件的界面附近产生很大的剂量增强, 对器件产生辐射损伤而使电子系统失效, 这种 X 射线对器件造成的损伤比相同剂量的 γ 射线要严重得多^[1].

由于大规模集成电路和其他器件的体积太小, 很难用实验方法准确测量出其界面的剂量增强. 一般采用理论方法来计算剂量增强系数. 美国 LOS-ALAMOS 国家实验室耗费巨资开发了 Monte-Carlo 程序 (MCNP). 它可以处理任意三维几何结构问题, 几何区的界面可以是平面, 二阶以及某些特殊的四阶曲面. 计算目标区的剂量, 具有较高的精度和可信度^[2]. 本工作用此程序来计算钨-硅、钽-硅、钨-二氧化硅和钽-二氧化硅界面的剂量增强系数.

2 剂量增强的产生

当 X 射线或低能 γ 射线辐照到一种材料时, 其

能量会被材料吸收, 剂量就定义为单位质量的物质吸收的能量. 光子通过和电子相互作用而失去能量, 能量从光子传到电子. 电子通过和材料中的其他电子相互碰撞而失去获得的能量, 产生大量各种各样能量的次级电子. 次级电子失去获得的能量则需要运动一定的距离.

X 射线和低能 γ 射线与原子序数高的物质相互作用时, 光电效应占优势, 并且 K 层的光电效应截面占总光电效应截面的 80%. 在非相对论情况下, 即光子能量远小于电子的静止能量时, K 层的光电截面 σ_K 为

$$\sigma_K = (32)^{1/2} \alpha^4 \left(\frac{m_0 c^2}{h\nu} \right)^{3/2} Z^5 \sigma_{Th}, \quad (1)$$

其中, $\alpha = 1/137$ 为精细结构常数, $m_0 c^2$ 为电子的静止能量, $h\nu$ 是 X 射线光子能量, $\sigma_{Th} = 6.65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$.

在相对论情况下, 即光子能量远大于电子的静止能量时,

$$\sigma_K = 1.5 \alpha^4 \frac{m_0 c^2}{h\nu} Z^5 \sigma_{Th} \approx Z^5 \frac{1}{h\nu}. \quad (2)$$

所以在两种情况下, 都有 σ_K 正比于 Z^5 的关系. 随着 Z 的增大, 光电截面迅速增大. 这是因为光电效应是 X 射线或 γ 光子和束缚电子的作用, Z 越大, 则电子在原子中束缚得越紧, 就越容易使原子核参与光电过程来满足能量和动量守恒要求, 因而产生光电效应的概率就越大. 光电效应主要发生在 K 层就是这个道理.

由于钽、钨的原子序数比二氧化硅的大 5 倍多，在相同能量的 X 射线作用下，其光电截面比二氧化硅的大上千倍。因而在钽、钨和硅（二氧化硅）形成的界面中，钽和钨中产生的光电子也远远多于硅（二氧化硅）中产生的光电子。金属中产生的光电子从界面进入硅（二氧化硅）中，引起硅（二氧化硅）中的剂量增强。以金/硅界面为例，图 1 说明了在 X 射线辐射条件下金硅界面的剂量分布特性^[3]。在远离界面的地方（大于最大能量光电子的射程），电子是平衡的，剂量也是均匀的。在距界面一个最高能量电子射程的范围内，电子是不平衡的。剂量增强系数 DEF 定义为

$$DEF = \text{器件灵敏区的平均剂量} / \text{平衡剂量} \quad (3)$$

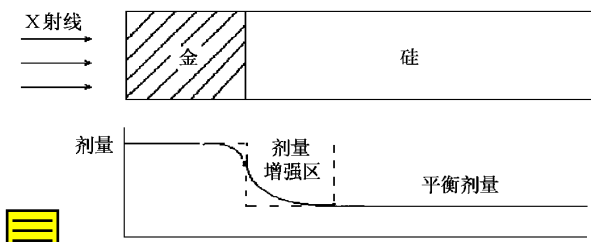


图 1 X 射线在金、硅界面附近的剂量分布

3 计算方法

蒙特卡洛法是概率论和计算机技术相结合而产生的一种计算方法。MCNP 根据源的分布抽出一个粒子，跟踪它的轨迹和沿途发生反应生成的次级粒子的运动。假定几何条件如图 2 所示：

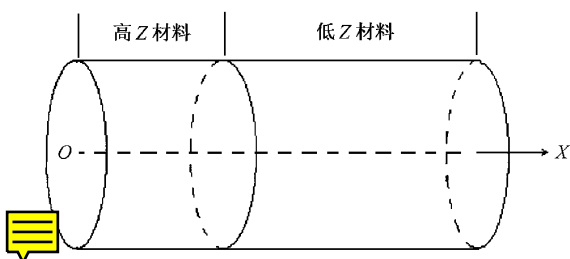


图 2 计算几何条件示意图

材料为一圆柱形，高 Z 材料分别是钨和钽，厚度为 20 μm；低 Z 材料是硅和二氧化硅，计算在 x 轴上距离界面 0.2, 2.5, 10 和 30 μm 处的剂量增强系数。入射的 X 射线为一在 x = 0 处的均匀平面源，沿 x 轴方向进入高 Z 材料中。圆柱半径为 2 cm，远远大于光电子的最大射程。

X 射线和钨或钽的主要作用是光电效应，二氧化硅和硅中的剂量增强就是高 Z 材料中光电效应产生的电子进入二氧化硅或硅中引起的。在计算时采用光子-电子联合输运模型，在计算时既考虑光子的输运，又考虑电子的输运，而不是认为电子就在其产生处损失能量而消失^[2]。

光子满足一个严格的三维与时间相关的输运方程，即玻尔兹曼方程^[4]。X 射线的无源玻尔兹曼方程可写作

$$\Omega \times \nabla \Psi + \sigma_t \Psi = \iint \alpha(r, E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) \cdot \Psi d\Omega' dE', \quad (4)$$

式中 $\Psi(r, E, \Omega)$ 是光子在位置为 r，能量为 E，飞行方向为 Ω 处的注量率， σ_t 是光子的总作用截面。

$\alpha(r, E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)$ 是光子在位置 r 处发生作用后由能量 E'、飞行方向 Ω' 转到能量为 E、飞行方向为 Ω 的概率。

考虑弹性散射，电子满足 Spencer-Lewis 输运方程

$$\Omega \times \nabla \Psi + \sigma_t \Psi = \iint \sigma_{\text{elastic}}(r, \Omega' \rightarrow \Omega) \Psi d\Omega' + \frac{d}{dE} [S(E) \Psi], \quad (5)$$

式中 $\sigma_{\text{elastic}}(r, \Omega' \rightarrow \Omega)$ 是电子在位置 r，飞行方向从 Ω' 转到 Ω 的弹性散射截面， $S(E)$ 为电子在材料中单位路程的能量损失。

对于光子-电子联合输运，光子不直接沉积能量（能量低于散射截止能量的光子除外），剂量几乎完全由电子通量决定。电子能量可以通过求解电子的微分输运方程而得到，r 处的剂量通过能量沉积截面乘以电子通量积分而得^[4]：

$$\text{Dose}(r) = \iint \sigma_E(r, E') \Psi(r, E', \Omega') \cdot dE' d\Omega'. \quad (6)$$

电子的能量沉积截面基本上是电子的阻止能量。

4 计算结果

对每一个位置的剂量，用 MCNP 计算两个小时，统计误差小于 5%。按照剂量增强因子的定义，计算出了钨-硅、钨-二氧化硅、钽-硅和钽-二氧化硅界面的剂量增强系数。图 3 和图 4 给出了钨-硅、钽-硅的剂量增强系数随能量变化的曲线，图 5 和图 6 是钨-二氧化硅、钽-二氧化硅的剂量增强系数随能量变化的曲线。

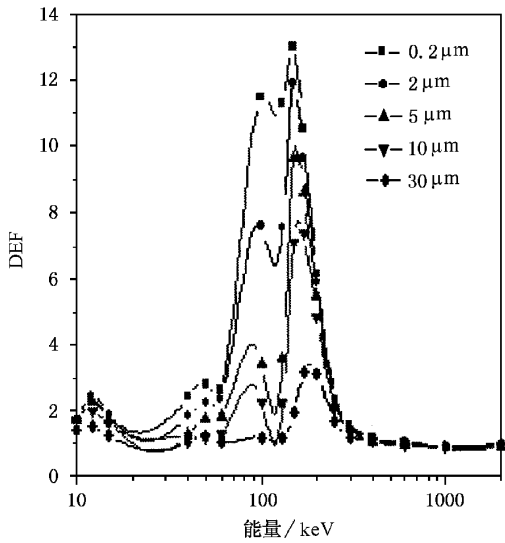


图 3 钨-硅界面一侧的剂量增强系数和入射的 X 射线能量的关系

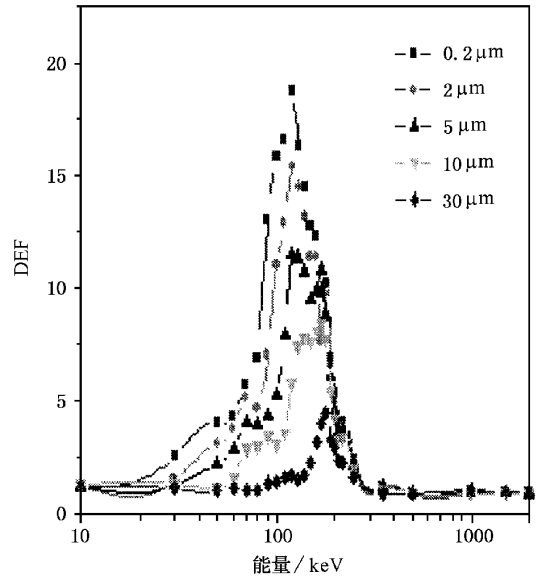


图 5 钨-二氧化硅界面一侧的剂量增强系数和入射的 X 射线能量的关系

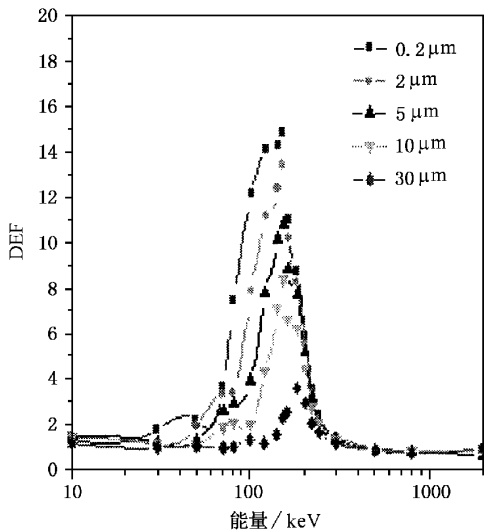


图 4 钽-硅界面一侧的剂量增强系数和入射的 X 射线能量的关系

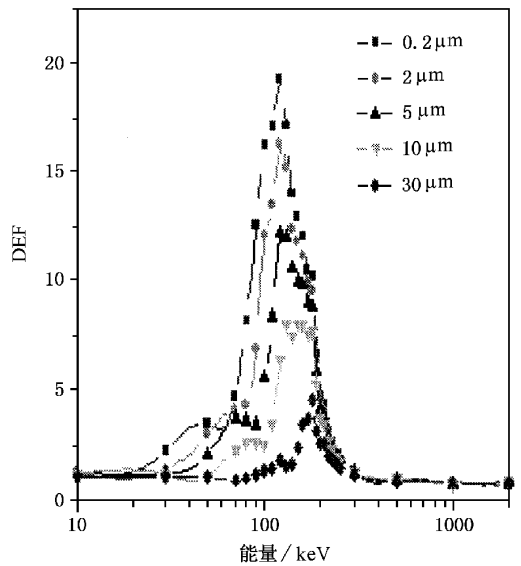


图 6 钽-二氧化硅界面一侧的剂量增强系数和入射的 X 射线能量的关系

5 结 论

1. 计算表明 X 射线在钨-硅、钽-硅、钨-二氧化硅和钽-二氧化硅界面产生极强的剂量增强,这几种界面的剂量增强系数随能量都有相似分布特性。

2. 从计算的剂量增强系数可以看出,增强的能量范围是 100—150 keV. 当光子能量超过 1 MeV 时,光子和物质的主要作用是康普顿效应,因而计算

出的 DEF 值小于 1,不产生剂量增强。

3. 钨-硅界面的最大剂量增强系数是 13,钨-二氧化硅界面最大的剂量增强系数为 19,钽-硅界面的最大剂量增强系数是 15,钽-二氧化硅界面的最大剂量增强系数为 17。

4. 目前尚未见有关 W/Si, Ta/Si, W/SiO₂ 和 Ta/SiO₂ 界面的剂量增强系数的报道,只能和已发表的 Au/Si 界面的剂量增强进行类似比较. 从国外文献的 Au/Si 界面的剂量增强系数图形形状(见图

7)³和图3、图4的比较可以看出,它们的形状是相似的.这说明它们的剂量增强机理是相同的,从这个方面可以看出计算方法是可靠的.

图7中,由上至下五条曲线表示距金/硅界面距离分别是0,2,5,10,30 μm 远处硅中的剂量增强系数.

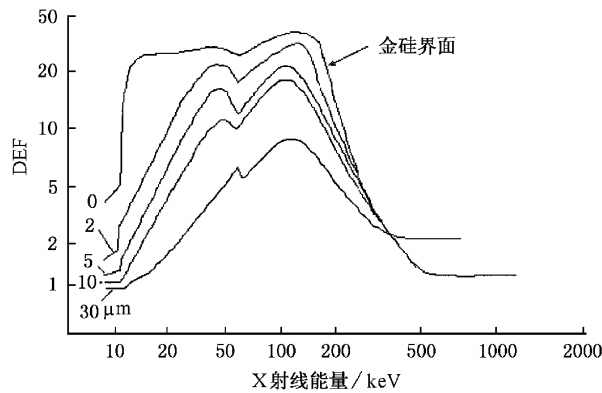


图7 距金/硅界面不同距离处硅一侧的剂量增强系数

- [1] P.X.Chen *et al.*, *Physica*, **26**(1997),725(in Chinese [陈盘训等 物理 **26**(1997),725]).
- [2] F.Judith, Briesmeister, *The Manual of MCNP/3B* (1989).
- [3] J. R. Srouf, *Radiation Effect on and Dose Enhancement of Elec-*

tronic Materials, Noyes Publication (1984).

- [4] David E. Beutler, *Radiation Transport Phenomena and Modeling*, IEEE NSREC Short Course (1997).

MONTE-CARLO CALCULATION OF X-RAY DOSE ENHANCEMENT FACTOR NEARBY HIGH Z METAL CONNECTED INTERFACE

MU WEI-BING¹⁾ CHEN PAN-XUN²⁾

¹⁾ Nuclear Physics and Chemistry Institute, China Academy of Engineering Physics, Mianyang P. O. Box 919-204, Mianyang 621900, China)

²⁾ Electricity Engineering Institute, China Academy of Engineering Physics, Mianyang P. O. Box 919-522, Mianyang 621900, China)

(Received 15 May 2000; revised manuscript received 19 August 2000)

ABSTRACT

The dose would be enhanced on the low-*Z* material side when X-ray enters the interface constructed with two different materials. The mechanism of dose enhancement has been discussed and the Dose Enhancement Factors of W-Si, W-SiO₂, Ta-Si and Ta-SiO₂ interfaces are calculated by the Monte-Carlo method.

Keywords: X-ray, interface, radiation impairment, dose-enhancement-factor

PACC: 2520, 0270, 0290