



HAL
open science

Simulation multiéchelle pour la microélectronique sous radiation : du matériau au circuit

Nicolas Richard, Damien Lambert, Neil Rostand, J. Lomonaco, Julien Parize, G. Charbonnier, Thomas Jarrin, Chloé Simha, Mélanie Raine, Sebastien Martinie, et al.

► To cite this version:

Nicolas Richard, Damien Lambert, Neil Rostand, J. Lomonaco, Julien Parize, et al.. Simulation multiéchelle pour la microélectronique sous radiation : du matériau au circuit. Chocs, 2023, 53, pp.15. hal-04486870

HAL Id: hal-04486870

<https://laas.hal.science/hal-04486870v1>

Submitted on 24 Apr 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Simulation multiéchelle pour la microélectronique sous radiation : du matériau au circuit

Auteurs

**N. Richard, D. Lambert
N. Rostand, J. Lomonaco
J. Parize, G. Charbonnier
T. Jarrin, C. Simha, M. Raine**
CEA – DAM,
centre DAM Île-de-France

S. Martinie
CEA – Leti, Grenoble

A. Bournel
Centre de nanosciences
et de nanotechnologies (C2N),
UMR 9001 CNRS – Université
Paris-Saclay

C. Inguibert
Onera, Toulouse

V. Goiffon
ISAE-Supaero, Toulouse

A. Hemeryck, A. Jay
Laboratoire d'analyse
et d'architecture des systèmes
(LAAS), CNRS, université
de Toulouse, Toulouse

**L. Martin-Samos
G. Herrero-Saboya**
Istituto Officina dei Materiali
(IOM), Trieste, Italie

Abstract

Multiscale simulation for microelectronics under radiation: from material to circuit level

In order to better understand and master the fundamental phenomena taking place in electronic components submitted to a radiation environment, the CEA – DAM has been developing for several years a multiscale and multiphysics numerical simulation approach, ranging from the interaction between ionizing radiation and material up to its effects on complex electronic circuits. This approach takes advantage of the increasing power of CEA – DAM supercomputers, the development of new models of physics and collaborations with the best French and foreign laboratories in the field. It provides valuable support to CEA – DAM engineers for the development of radiation hardened integrated circuits by providing them physical data to improve their models and facilitates the integration of new generations of components. This article details this approach by giving examples of results at each scale.

Afin de mieux comprendre et maîtriser les phénomènes fondamentaux se déroulant dans les composants électroniques soumis à un environnement radiatif, le CEA – DAM a mis en place depuis plusieurs années une approche multiéchelle et multiphysique de simulation numérique allant de l'interaction entre le rayonnement ionisant et le matériau jusqu'à ses conséquences dans des circuits électroniques complexes. Cette approche tire profit de l'augmentation de la puissance des supercalculateurs du CEA – DAM, du développement de nouveaux modèles, à la pointe de la physique, et de collaborations avec les meilleurs laboratoires français et étrangers dans le domaine. Elle apporte une aide précieuse aux ingénieurs du CEA – DAM pour le développement des **circuits intégrés durcis** aux radiations, en leur fournissant des données physiques pour améliorer leurs modèles de conception et facilite l'intégration de nouvelles générations de composants. Cet article décrit cette approche en donnant des exemples de résultats pour chacune des échelles.

Les composants microélectroniques fonctionnant en environnement radiatif sont soumis à des flux importants de particules énergétiques. Celles-ci transmettent leur énergie cinétique à la matière constituant les composants microélectroniques, avec deux conséquences principales : l'excitation d'électrons par ionisation et le déplacement d'atomes. Au niveau d'un composant semi-conducteur, cela se traduit par quatre effets électriques possibles définis dans l'**encadré 1**. Ils peuvent modifier le comportement des composants et des circuits électroniques, et remettre en cause leur bon fonctionnement. Pour s'en prémunir dans un contexte d'évolution permanente des technologies de la microélectronique, il est important de maîtriser les phénomènes à chacune des échelles où leurs conséquences apparaissent, depuis les mécanismes les plus fondamentaux jusqu'aux conséquences observées dans les circuits.

Dans ce contexte et pour contribuer à la garantie de fiabilité des têtes nucléaires, le CEA – DAM a mis en place une approche basée sur la simulation multiéchelle et multiphysique afin de mener des études paramétriques permettant de faire varier la nature de l'environnement et des matériaux ou encore l'architecture des composants. Le principal défi consiste en la mise en œuvre de modèles physiques à la pointe de l'état de l'art, ayant des caractéristiques de temps et de dimensions balayant jusqu'à dix-huit ordres de grandeur, allant de l'attoseconde à la seconde et de l'ångström au centimètre, tout en permettant à ces méthodes de communiquer au travers

de données physiques échangées d'un niveau d'échelle à l'autre.

Dans cet article, la simulation aux différentes échelles est décrite et illustrée au travers d'exemples de résultats. La première partie s'intéresse à l'interaction des particules avec le matériau, la deuxième partie à leurs impacts sur sa structure atomique et, enfin, la dernière partie décrit leurs conséquences dans les composants et les circuits en intégrant les données physiques obtenues aux échelles inférieures. L'articulation entre les échelles et le lien avec les autres articles de ce numéro sont représentés schématiquement sur la [figure 1](#).

Interaction rayonnement-matière

L'étude de l'interaction rayonnement-matière a pour but de convertir un environnement radiatif en niveaux de déplacement atomique, de **dose ionisante**, d'**effets singuliers** et de **débit de dose** (voir [encadré 1](#)). Si la dose est bien définie comme l'énergie déposée dans le matériau rapportée à la masse de celui-ci, les rayonnements qui en sont à l'origine sont divers. Ainsi, certains, comme les neutrons, ont une masse mais pas de charge et créent donc des défauts par collision avec les atomes. D'autres, comme les électrons ou les photons, sont chargés ou ionisants, mais ont une masse faible ou nulle et créent surtout des charges et des courants. D'autres encore cumulent masse et charge, comme les ions lourds du rayonnement cosmique. Le comportement réel d'un composant en environnement radiatif est

la résultante d'un ensemble de considérations, comme le type de matériaux, l'agencement du composant et les caractéristiques de l'irradiation (type de particules incidentes, énergie, **flux**, **fluence**). Lorsqu'une particule interagit avec la matière, elle perd de l'énergie principalement selon deux modes : le déplacement atomique non ionisant et l'ionisation. L'ionisation peut être directe, le dépôt d'énergie se fait alors le long du parcours de la particule incidente dans la matière, ou indirecte, la particule interagit avec un atome de la cible, créant des particules secondaires qui déposent de l'énergie. Certaines particules, les protons par exemple, peuvent ioniser le milieu de manière directe et indirecte. Dans cette première partie est présentée la façon dont est évaluée par simulation l'interaction de différentes particules [1](#) avec les matériaux constituant les composants de la microélectronique.

Dépôt d'énergie dans la matière lors du passage d'un ion

Lorsqu'un ion pénètre dans la matière, il interagit essentiellement sous l'action des forces coulombiennes avec les électrons des atomes du matériau et, plus rarement, avec le noyau atomique. L'ion transfère son énergie aux électrons primaires qui, à leur tour, créent une cascade d'électrons secondaires qui perdent aussi leur énergie par ionisation. Pour mesurer cette perte d'énergie, le CEA - DAM a d'abord intégré un modèle pour le silicium dans le code d'interaction rayonnement-matière Geant4 [1](#), dans le cadre de la collaboration internationale autour de son développement. Cela a été complété récemment pour une dizaine de matériaux [2](#) en collaboration avec l'Onera et l'université Paris-Saclay.

Il s'agit alors d'évaluer le pouvoir d'arrêt, ou LET (*Linear Energy Transfer*), d'un ion dans une cible. Le LET représente la perte d'énergie de l'ion par unité de longueur rapportée à la masse volumique du matériau irradié. Évaluer la distribution spatiale de cette perte ([figure 2a](#)) est capital compte tenu des dimensions de plus en plus petites de l'électronique avancée. Concernant sa valeur, le LET se caractérise par la somme de deux composantes ([figure 2b](#)) :

- ▶ une composante électronique (LET_{elec}), provenant de l'interaction de l'ion incident avec les électrons de la cible ; les électrons sont arrachés des atomes de la cible, provoquant ainsi l'ionisation du milieu ;
- ▶ une composante nucléaire (LET_{nuc}), provenant de l'interaction de l'ion avec les noyaux des atomes de la cible ; la particule incidente cède une partie de son énergie aux noyaux du milieu, qui peuvent être déplacés et créer des défauts.

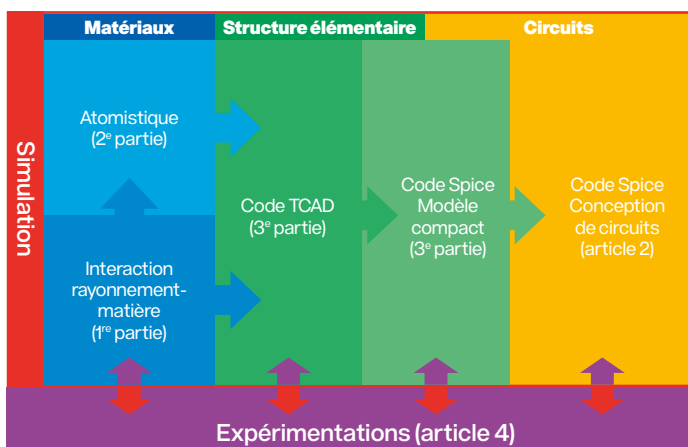


figure 1

Représentation schématique de la simulation numérique multi-échelle mise en place au CEA - DAM pour l'électronique en lien avec les différentes parties de cet article et les autres articles de ce numéro. TCAD et Spice signifient « Technology Computer Aided Design » et « Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis » respectivement.

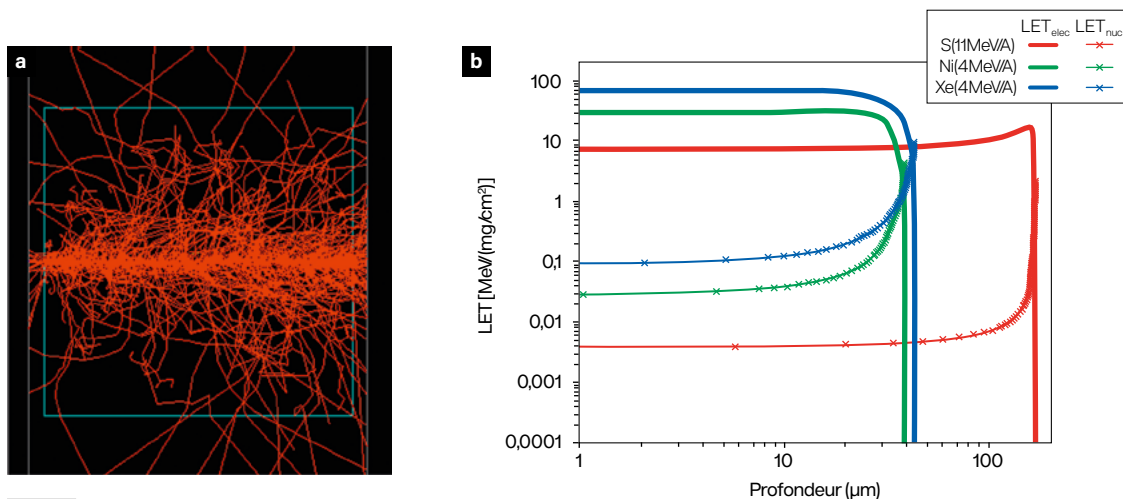


figure 2

Illustration du dépôt d'énergie des ions dans la matière. **A** Visualisation du résultat d'une simulation Monte-Carlo du passage d'un ion dans du silicium, montrant les nombreux électrons secondaires mis en mouvement (en rouge). **B** LET_{elec} et LET_{nuc} en fonction de la profondeur de matériau traversé pour trois types d'ions d'énergies cinétiques différentes. Le LET_{nuc} est inférieur au LET_{elec} sauf en fin de parcours de la particule.

Le LET_{nuc} quantifie le déplacement atomique du matériau cible et le LET_{elec} la création des paires électron-trou par ionisation du matériau cible. Leur calcul permet au CEA – DAM d'évaluer la répartition entre les effets ionisants et non ionisants pour les codes de calcul utilisés aux échelles supérieures.

Les interactions des photons avec la matière

Dans la gamme d'énergie d'intérêt pour le CEA – DAM, les photons interagissent principalement avec les électrons atomiques, par le biais des effets classiques dits photoélectrique, Compton et de production de paires, et avec les noyaux par des excitations et des réactions nucléaires. Les différentes cascades photoniques mettent en jeu une multitude de particules secondaires, principalement des électrons et des photons.

Les photons, comme les ions, engendrent un dépôt d'énergie qui varie en fonction du matériau cible et de l'énergie incidente des photons. Son évaluation par calcul permet de construire des tables de correspondance entre les dépôts et l'énergie des photons, pour différentes natures de matériaux cibles (figure 3). Ces tables permettent au CEA – DAM d'établir des liens entre la dosimétrie des différentes machines d'irradiation photonique (voir article 4) et les niveaux de dépôt ionisant dans les éléments sensibles de l'électronique 3.

Les interactions des neutrons avec la matière

Quand un neutron (ou un proton de forte énergie) interagit avec un noyau, différentes réactions nucléaires peuvent se produire : des collisions élastiques où le neutron transmet une partie de

son énergie cinétique au noyau cible en le mettant en vol, des interactions inélastiques où le noyau cible est excité et peut se désexciter soit en émettant des particules comme des noyaux légers, des gamma ou des neutrons, soit, dans le cas de l'interaction de neutrons avec des noyaux lourds, en fissionnant et en produisant deux fragments de masse intermédiaire et quelques particules.

Différents outils et bases de données faisant autorité parmi les experts du domaine sont utilisés au CEA – DAM pour décrire la variation de la perte d'énergie non ionisante (figure 4a) ainsi

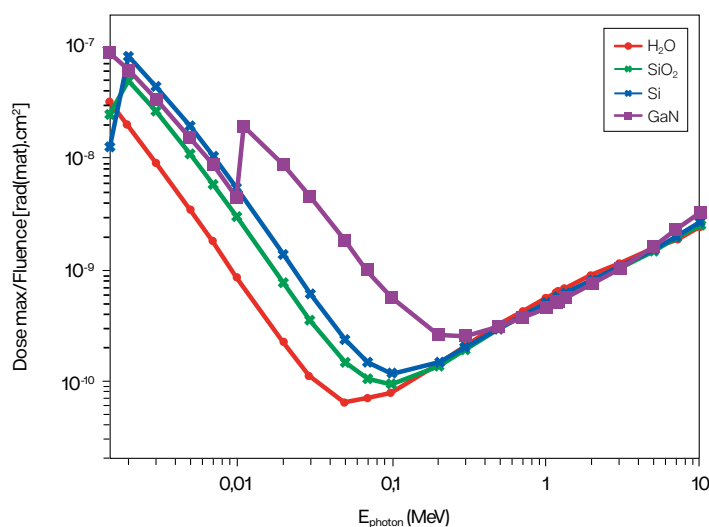


figure 3

Maximum de dose ionisante rapporté à la fluence en fonction de l'énergie des photons pour quatre matériaux de référence : l'eau (H_2O), la silice (SiO_2), le silicium (Si) et le nitrure de gallium (GaN). Au-dessus du MeV, les quatre courbes sont quasi identiques alors qu'à plus basse énergie, les raies de fluorescence entraînent des différences pouvant atteindre plusieurs décades.

ENCADRÉ 1

Les quatre effets des radiations dans les matériaux de l'électronique

Différents effets physiques des radiations dans les matériaux de composants ou de circuits sont à l'origine d'effets électriques observés dans l'électronique. Ces effets physiques varient selon la nature de l'environnement radiatif qui se caractérise par les propriétés des particules, comme leur spectre énergétique ou leur charge. Ils sont classés en deux grandes familles : les effets cumulatifs et les **effets transitoires**. Les premiers proviennent de l'accumulation localisée de défauts ou de charges électriques dans les matériaux constituant l'électronique. Les seconds sont de nature aléatoire et de courte durée et sont produits lors du passage d'une ou plusieurs particules. Tous ces effets et leurs conséquences sur la microélectronique sont détaillés dans l'[article 5](#) de ce numéro.

Les effets cumulatifs

Les effets cumulatifs perturbant l'électronique sont usuellement classés suivant leur nature : effet ionisant pour l'**effet de**

dose ionisante et effet non ionisant pour celui dit de dose non ionisante, appelée également **effet de dose de déplacement atomique**.

Dose ionisante

La dose ionisante est causée par ionisation du matériau sous l'effet de particules chargées incidentes ou secondaires du type électron, proton ou ion plus lourd. Pour l'électronique, cet effet se produit dans les matériaux diélectriques à base d'oxyde qui servent d'isolant. Les charges générées par ionisation peuvent se recombiner sous l'action de la température. *A contrario*, si le composant est actif, le champ électrique présent réduit la probabilité de recombinaison en séparant les charges négatives (les électrons) des charges positives (les trous), et en conduisant aux piégeages de ces dernières dans l'oxyde et à l'interface oxyde-semi-conducteur. Cet effet est représenté sur la [figure E1a](#).

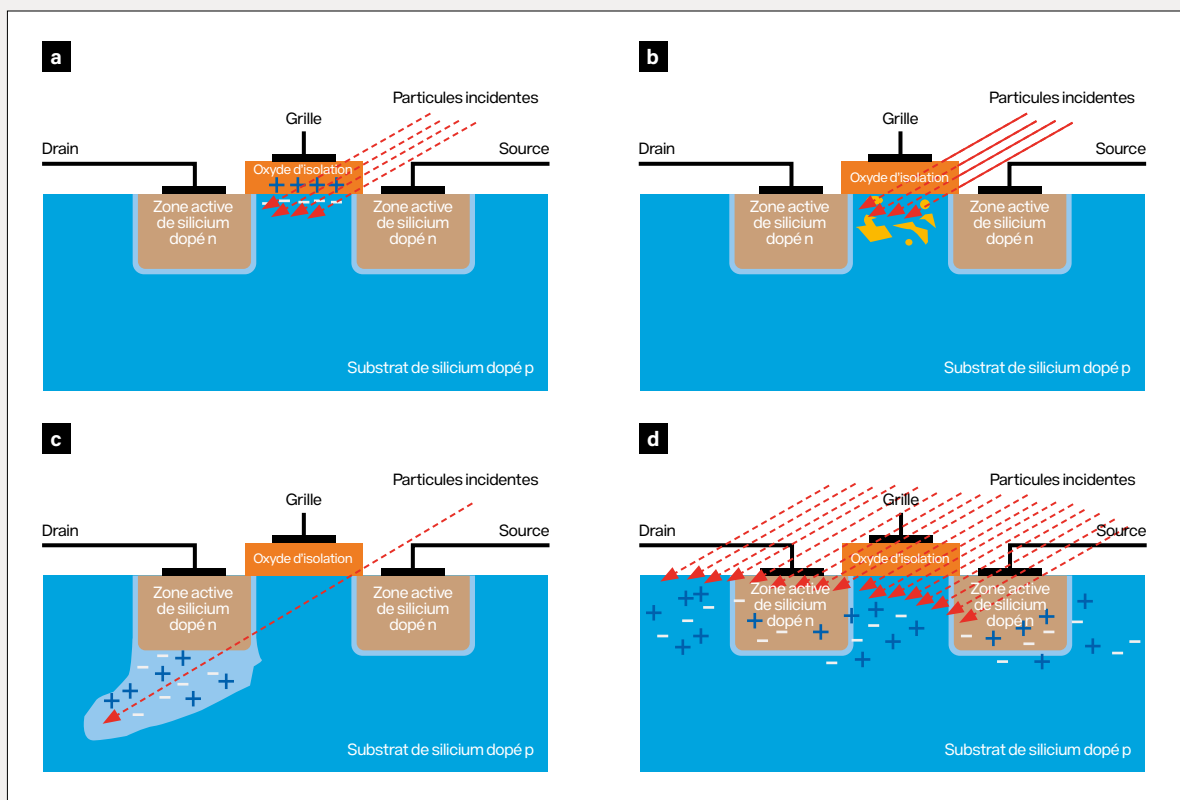


figure E1

Représentation schématique des quatre effets des radiations dans des composants de type planaire pour **a** les effets de dose totale ionisante, **b** les effets de dose de déplacement, **c** les effets singuliers et **d** les effets de débit de dose. La description de l'architecture du composant est donnée dans l'[article 5](#).

Dose de déplacement atomique

La dose de déplacement atomique a pour conséquence de déloger des atomes de leur site cristallin sous l'impact d'une particule du type neutron, proton ou ion lourd. La zone la plus sensible est le canal du transistor constitué d'un semi-conducteur où passe le courant. Comme dans un billard à l'échelle atomique, l'atome déplacé va déloger d'autres atomes du cristal, créant ainsi d'autres défauts dans la structure cristalline. Les défauts alors générés auront tendance à capter les porteurs (trous et électrons) et à diminuer leur durée de vie ou à générer des courants parasites. Cet effet est représenté sur la [figure E1b](#).

Les effets transitoires

Il existe deux types d'effets transitoires : les **effets singuliers** issus d'une seule particule, et les **effets de débit de dose**, issus d'une impulsion brève de plusieurs particules.

Effets singuliers

Les événements singuliers sont issus du passage d'une particule ionisante unique (ion, électron, photon, etc.) dans un volume sensible qui peut être un composant électronique ou une partie d'un composant. Cette particule ionise le matériau et donc excite et éjecte des électrons qui vont créer des charges parasites dans certaines zones actives du semi-conducteur. Cet effet est représenté sur la [figure E1c](#).

Débit de dose

Le phénomène de débit de dose est associé au passage prompt de plusieurs particules ou rayonnements, comme les photons et électrons. Ce phénomène impulsionnel est associé à un dépôt de charge dans le matériau qui ionise le matériau. Cet effet peut s'étendre à plusieurs composants et est représenté sur la [figure E1d](#).

que les occurrences et caractéristiques des particules secondaires pouvant causer des événements singuliers et des effets de déplacement. Une étude dédiée a permis d'identifier ces particules secondaires pour le silicium ([figure 4b](#)) ou d'autres matériaux utilisés dans les composants comme le GaN [4](#).

L'interaction rayonnement-matière permet donc d'évaluer l'effet des particules incidentes dans les matériaux de l'électronique et

notamment la nature, l'énergie et le nombre des particules secondaires générées et la prédominance entre les effets.

Effets des rayonnements dans les matériaux

Comme discuté dans l'[encadré 1](#), les radiations entraînent la création de défauts structuraux à l'échelle des atomes dans les matériaux constituant les composants. Dans

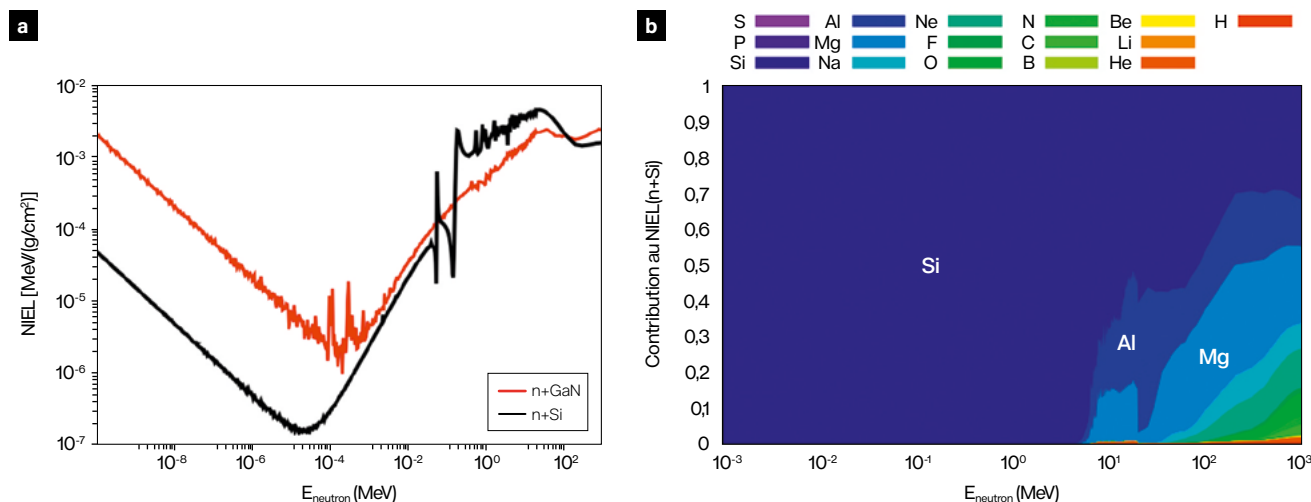


figure 4

a Variation de la perte d'énergie non ionisante (NIEL) dans le Si et le GaN en fonction de l'énergie des neutrons incidents. Les valeurs obtenues varient fortement en fonction de l'énergie des neutrons et du type de matériau cible. **b** Répartition des types d'ions secondaires générant des effets de déplacement, contribuant ainsi à la perte d'énergie non ionisante, dans le silicium en fonction de l'énergie des neutrons incidents. Parmi les particules secondaires générées par l'interaction neutron-silicium, le silicium est le premier contributeur en deçà de quelques MeV. Au-delà, l'aluminium et le magnésium sont aussi à prendre en compte [4](#).

les matériaux cristallins comme le silicium, ces défauts proviennent de l'absence d'atome, on parle de **lacune** ou d'amas de lacunes, ou au contraire de la présence d'un atome à un emplacement normalement inoccupé, on parle d'**interstitiel** ou d'amas d'interstitiels. Ces modifications dans le bon agencement de la matière modifient les propriétés des matériaux. Par exemple, un matériau isolant perd sa fonction d'isolant à cause de la présence de défauts qui piègent des charges. Une fuite de courant apparaît alors et augmente la consommation du système électrique de façon incontrôlée. Après avoir simulé l'environnement radiatif et son interaction avec le matériau, il s'agit maintenant de comprendre l'action des radiations sur la structure atomique constituant les matériaux pour l'électronique et leurs conséquences à l'échelle macroscopique. Dans ce cadre, le CEA - DAM a développé plusieurs méthodologies pour simuler la création de ces défauts pour les différents effets décrits dans l'**encadré 1**. L'objectif dans chaque cas est

d'informer les ingénieurs chargés du **durcissement radiatif** de l'électronique au moyen d'indicateurs de sensibilité des matériaux et de leur fournir des données physiques permettant d'améliorer les modèles de composants et de circuits, lesquels seront abordés dans la troisième partie.

Une méthodologie de simulation pour les effets de déplacement

Une des méthodologies utilisées par le CEA - DAM sert à évaluer par la simulation la dose de déplacement atomique et consiste en l'enchaînement de différents codes, aux échelles caractéristiques de temps et de tailles très variées, permettant de décrire les différentes étapes physiques détaillées sur la **figure 5**. Cette méthodologie a été développée avec le Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes (LAAS) de Toulouse dans le cadre du laboratoire de recherche conventionné Licur **5**, ainsi qu'avec l'ISAE-Supaero et l'Istituto Officina dei Materiali (IOM) de Trieste en Italie **6,7**.

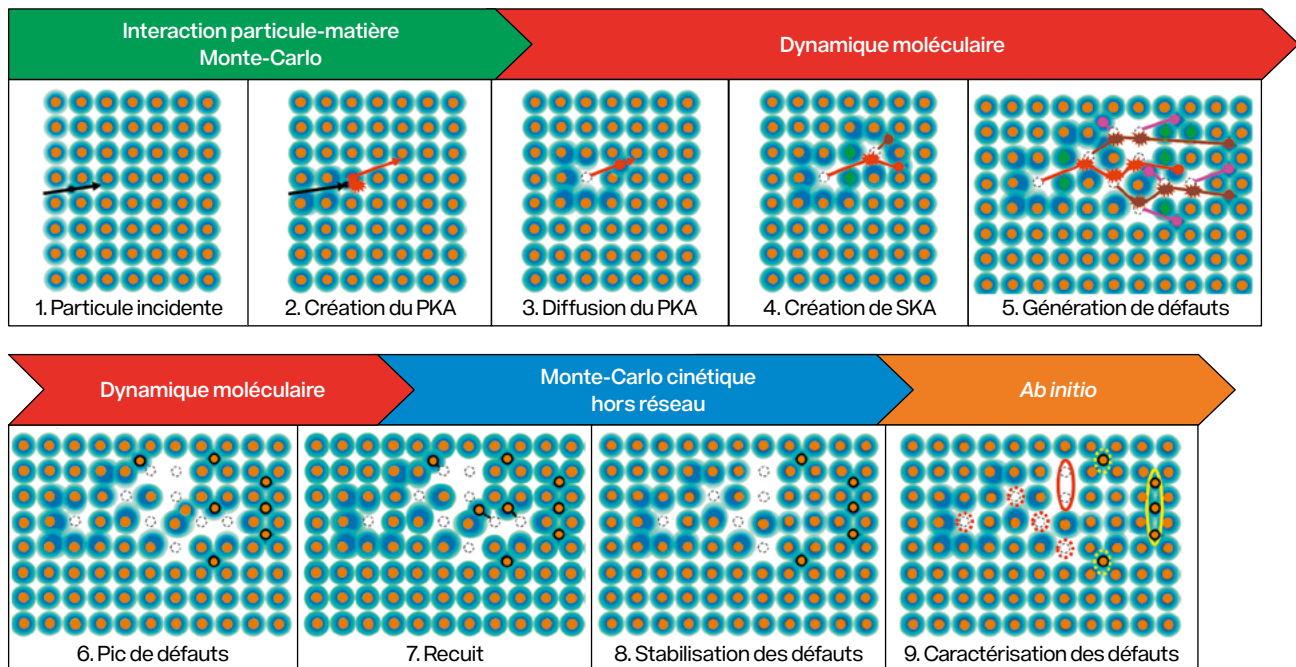


figure 5

Représentation schématique de la méthodologie développée au CEA - DAM pour décrire les dommages de déplacement. Les noyaux sont en orange, leur nuage électronique en bleu et la particule incidente en noir. (1) Cette dernière pénètre la matière. Si elle est chargée, elle interagira avec le nuage électronique. (2) Cette particule déplace un des atomes du réseau, en rouge, appelé premier atome frappé (PKA pour *Primary Knock-on Atom*). (3) Le PKA bouge en étant freiné par le nuage électronique et (4) passe entre certains atomes qui se mettent à vibrer sans quitter leur position (en vert) puis impacte une deuxième génération d'atomes (en marron) appelés seconds atomes frappés (SKA). (5) Ces atomes se déplacent et impactent une troisième génération d'atomes (en rose). (6) Quand tous les atomes se déplaçant ont perdu leur énergie cinétique, un pic du nombre de défauts est atteint. (7) En fonction des vibrations du réseau atomique et de la température, certains défauts diffusent et recréent le cristal. On parle de recuit. (8) Le cristal est alors dans un état quasi stable et contient un certain nombre de défauts de différents types. (9) On caractérise alors les propriétés des différents défauts restants pour évaluer leurs impacts sur le fonctionnement du composant.

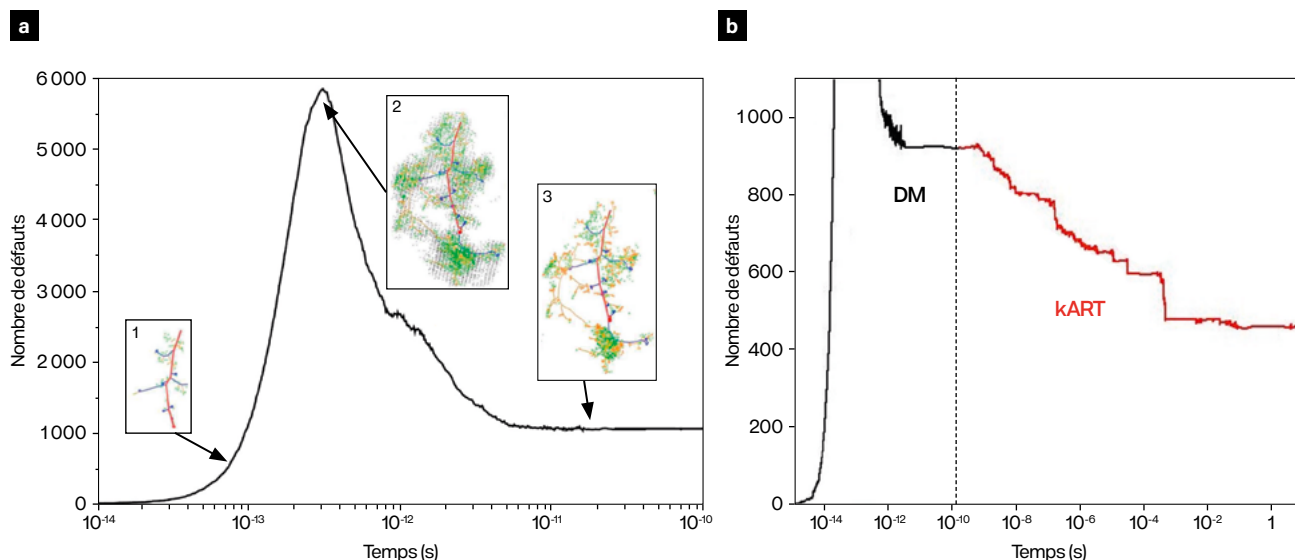


figure 6

Évolution temporelle du nombre de défauts pendant une simulation de dynamique moléculaire. **a** Particule incidente de silicium d'une énergie de 10 keV dans du silicium avec, en médaillon, les évolutions de la structure atomique : 1) dans la phase balistique du premier atome frappé, le nombre de défauts augmente fortement ; 2) jusqu'au pic de nombre de défauts et 3) avec un début de réorganisation de la structure associée à une diminution du nombre de défauts. Seuls les atomes ayant bougé de leur site sont représentés. Positions au cours du temps : en rouge du premier atome frappé ; en bleu des atomes frappés dans un deuxième temps ; en orange des autres atomes choqués ayant une vitesse élevée ; en vert de ceux ayant des vitesses faibles. **b** Évolution du nombre de défauts pendant une simulation de dynamique moléculaire (DM, en gris), puis avec la technique d'activation-relaxation cinétique kART (en rouge) qui permet de restituer la décroissance du nombre de défauts aux temps longs.

L'interaction entre la particule énergétique incidente et la matière est simulée avec les outils présentés dans la première partie. Cette première étape permet d'identifier les numéros atomiques et les énergies des premiers atomes frappés (PKA, pour *primary knock-on atom*) en fonction de l'énergie et du type de particules incidentes présentes dans l'environnement radiatif. La dynamique moléculaire est ensuite utilisée pour la simulation atomique et dynamique de la propagation de la cascade de collisions, en prenant comme données d'entrée les informations obtenues dans l'étape précédente. La dynamique moléculaire est une méthode discrétisée en temps, dans laquelle la dynamique des atomes est régie par la résolution des équations du mouvement à chaque pas de temps pour chaque atome de la boîte de simulation. Pour résoudre ces équations et connaître les forces s'exerçant sur ces atomes, on définit un potentiel interatomique avec des formules analytiques donnant l'énergie potentielle résultant de l'interaction entre les atomes en fonction de la position relative des atomes dans la boîte de simulation. Le choix du potentiel est capital, car il doit contenir toute la physique du problème, en particulier dans le cas des processus hors équilibre tels que les cascades de déplacements. De plus, la représentativité des résultats obtenus doit être examinée en tenant compte de la stochasticité de ces phénomènes : suivant l'interaction avec la particule incidente,

le PKA peut prendre des directions différentes, conduisant à des cascades de collisions très variées en matière de densité et de taille. Afin d'obtenir des résultats significatifs, un grand nombre de simulations avec des PKA ayant des directions initiales distinctes doivent être effectuées, comme nous l'avons démontré dans le silicium [8](#). Enfin, les électrons peuvent avoir un impact important sur la dynamique moléculaire, notamment au travers du pouvoir d'arrêt électronique, et il convient donc de les traiter avec des méthodes adaptées [9](#).

Comme illustré sur la [figure 6a](#) dans le cas du silicium [10](#), la dynamique moléculaire permet de simuler la propagation de la cascade et donc l'évolution du nombre de défauts créés dans le matériau au cours du temps. Alors que le PKA se déplace, la cascade se forme ([figure 6a-1](#)) et un nombre maximum de défauts formés est atteint au bout d'une demi-picoseconde ([figure 6a-2](#)). Après ce pic, toute l'énergie cinétique du système a été épuisée et la matière se recristallise par diffusion des défauts dans le matériau. Les lacunes rencontrent des interstitiels et reforment le réseau cristallin ou, de façon plus rare, rencontrent d'autres lacunes et forment des amas. Le nombre de défauts a donc tendance à fortement diminuer à partir de cette étape ([figure 6a-3](#)), on parle alors de recuit. Par contre, il est difficile d'aller au-delà de quelques dizaines de picosecondes en dynamique moléculaire.

Cependant, expérimentalement, la réorganisation par diffusion des défauts créés suite à une cascade de collisions est observée sur des temps longs, de l'ordre de la seconde ou de la minute, voire plus. Ainsi, pour que les structures de matériaux simulées correspondent à celles apparaissant à ces échelles de temps, il est nécessaire de les faire évoluer sur des temps plus longs. C'est précisément le rôle de la technique d'activation-relaxation cinétique (kART) [11](#) qui permet d'observer les processus de diffusion activés, responsables de la réorganisation des défauts et de la guérison partielle de la structure endommagée, sur des temps de l'ordre de la seconde et plus. kART ([figure 6b](#)) est un code Monte-Carlo cinétique, non restreint aux positions cristallines et qui construit son catalogue d'événements à la volée par la technique d'activation-relaxation nouveau (ARTn) [12](#). Au fur et à mesure que la simulation avance, le code classe les structures qu'il découvre dans un catalogue et n'aura ainsi plus besoin de les recalculer. Au cours de son avancée, la simulation aura donc tendance à accélérer.

Dans la quatrième étape de notre méthodologie, les structures de défauts et d'amas de défauts sont utilisées comme données d'entrée de calculs quantiques *ab initio*. À cette étape, les caractéristiques calculées des défauts sont comparées à des signatures observées expérimentalement, comme notamment la résonance paramagnétique électronique, la position dans la bande interdite du semi-conducteur ou de l'isolant de niveaux d'énergie introduits par les défauts, la propension de ces derniers à capturer et à libérer une charge ou encore leur énergie de diffusion, qui permet de déduire leur temps de vie [13](#). Ce type de calcul permet d'accéder à une caractérisation fine des défauts et de produire des données physiques précises, qui servent à bâtir les modèles utilisés dans le cadre des études sur les technologies (voir [troisième partie](#)).

Effets des radiations dans les structures élémentaires et les circuits

Les simulations décrites jusqu'ici permettent de fournir des données physiques alimentant directement les simulations à l'échelle des structures élémentaires comme les **transistors** ou les condensateurs, et à l'échelle des **circuits intégrés**.

Compréhension de la physique à l'échelle du composant : simulations TCAD

Si l'on se restreint à une structure élémentaire isolée, par exemple un transistor, on fait appel à la conception technologique assistée par ordinateur,

appelée TCAD pour *Technology Computer Aided Design*. Les codes TCAD sont des codes commerciaux utilisés et validés par les industriels du domaine, résolvant par des méthodes de type éléments finis les équations de la physique des semi-conducteurs. Le logiciel Sentaurus TCAD de la société Synopsys® utilisé au CEA – DAM permet par exemple d'étudier les effets de dose ionisante (voir l'[encadré 2](#)).

Les simulations TCAD effectuées à l'échelle d'un transistor unique sont trop complexes pour être utilisées dans le cadre de la remontée d'échelle vers le circuit intégré, ce dernier pouvant contenir des centaines de milliers de transistors. Pour cela, le CEA – DAM développe des modèles dits compacts qui reprennent des données venant de la simulation TCAD.

Simulation à l'échelle du circuit : modèles compacts et simulations Spice

Modéliser un phénomène physique de manière compacte signifie en proposer une formulation mathématique simplifiée à l'aide d'une ou de plusieurs équations. Ces modèles sont implémentés dans les simulateurs de circuits appelés Spice pour *Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis* utilisés dans l'industrie de la microélectronique pendant les phases de conception des circuits intégrés. Par exemple, le fonctionnement des transistors dits **MOS** peut être décrit par toute une gamme de modèles compacts. Ces modèles sont reconnus internationalement, car respectant un certain nombre de standards industriels, comme PSP [14](#) et L-UTSOI [15](#), dont le CEA – Leti a la charge du développement.

En s'appuyant sur ces standards et en collaboration avec le CEA – Leti, le CEA – DAM développe des modèles compacts d'effets radiatifs pour assister les concepteurs de circuits intégrés durcis : un concepteur fait appel à ces modèles compacts validés lors des simulations électriques Spice reproduisant le fonctionnement électrique du circuit. Ce faisant, le concepteur est en mesure de tester différents choix de schéma électrique en évaluant les conséquences des effets radiatifs directement sur son ordinateur et avant même la fabrication du circuit, sans devoir passer systématiquement par des expérimentations lourdes et coûteuses.

Lors de la création de son environnement de simulation, le concepteur charge de façon habituelle une librairie pour chaque composant et notamment le modèle compact de son fonctionnement électrique. L'idée pour réaliser les simulations sous irradiation est de générer de nouvelles librairies, incluant les effets radiatifs et pouvant

ENCADRÉ 2

Simulation des effets des radiations par conception de technologie assistée par ordinateur

L'outil de simulation TCAD (pour *Technology Computer-Aided Design*) est idéal pour simuler et étudier les effets des radiations dans les transistors MOS. La suite logicielle Sentaurus TCAD, commercialisée par la société américaine Synopsys, possède par exemple un module « Radiation », développé par le CEA - DAM, qui permet de simuler une irradiation uniforme par des photons. Dans un diélectrique, la dose ainsi déposée conduit à la création de paires électron-trou. Le modèle utilisé actuellement pour décrire le taux de génération de paires électron-trou dans un matériau dépend d'un facteur dit de génération, du débit de dose et de la fonction de non-recombinaison des paires électron-trou dépendante du champ électrique.

Les porteurs libres générés peuvent ensuite être piégés dans des niveaux d'énergie introduits dans la bande interdite par les défauts occasionnés lors du procédé de fabrication ou sous irradiation. La bande interdite sépare la bande de valence où les électrons sont stockés et la bande de conduction dans laquelle ils se déplacent librement et peuvent générer le courant. La dynamique de piégeage des électrons et des trous est représentée sur la **figure E2-1**. Il s'agit alors d'évaluer l'influence de ces charges piégées sur la génération de courants parasites et sur le fonctionnement des transistors.

Sur la **figure E2-2a** sont exposés des résultats TCAD de la distribution de trous piégés dans l'oxyde enterré d'un transistor au terme d'une irradiation de 100 secondes au débit de dose de

100 rad·s⁻¹. Cette charge piégée induit alors un décalage négatif de **tension de seuil**, visible sur les courbes de courant de sortie en fonction de la tension d'entrée du transistor simulées avec TCAD sur la **figure E2-2b**.

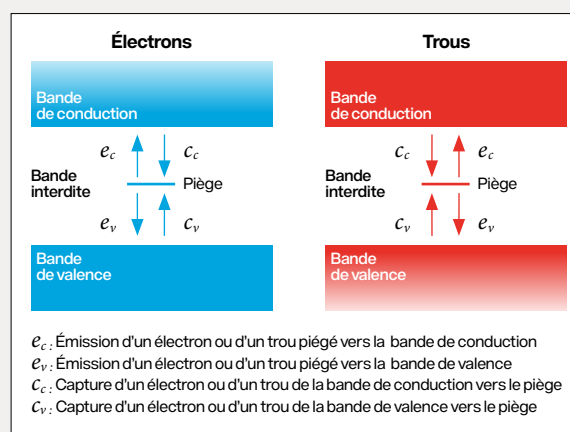


figure E2-1

Illustration des différents mécanismes impliqués dans le piégeage des porteurs libres dans des niveaux d'énergie situés dans la bande interdite du diélectrique pour les électrons (en bleu) et les trous (en rouge).

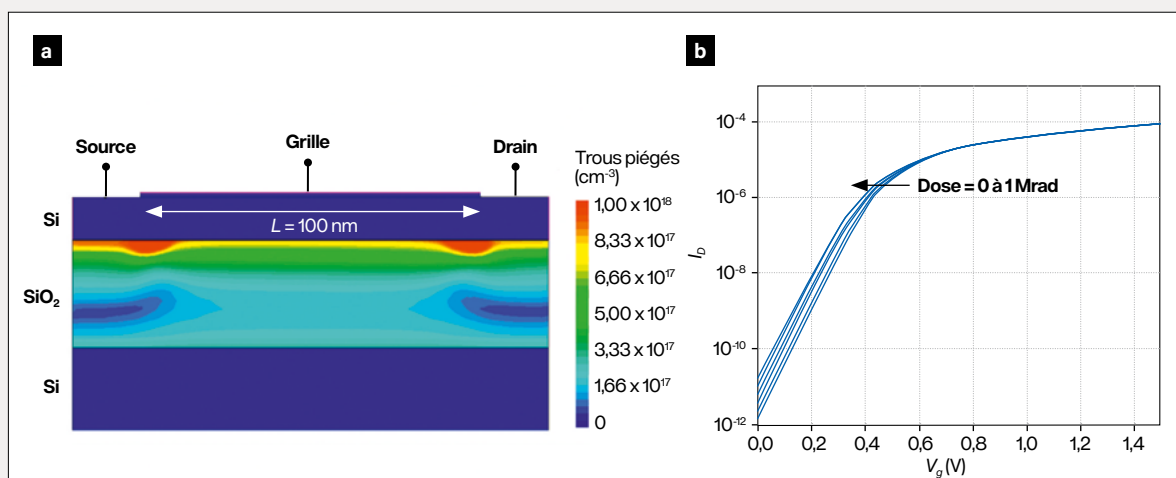


figure E2-2

a Visualisation de la distribution de trous piégés dans l'oxyde enterré d'un transistor au terme d'une irradiation de 100 secondes au débit de dose de 100 rad·s⁻¹. **b** Courbes donnant le courant de sortie I_b en fonction de la tension d'entrée V_g simulées avec TCAD pour différentes doses cumulées allant de 0 à 1 Mrad.

être ensuite utilisées par le concepteur comme une librairie usuelle. Deux approches de modélisation sont alors possibles selon les effets : la modification des paramètres d'entrée du modèle compact du transistor MOS, pour reproduire les effets permanents, et l'ajout de composants électroniques équivalents fictifs, particulièrement adaptés aux événements transitoires.

Le simulateur Spice est un code de résolution de systèmes d'équations différentielles ordinaires non linéaires. L'idée, pour simuler les circuits, consiste à formuler une ou plusieurs équations différentielles décrivant le phénomène physique à modéliser et à rajouter ces équations au système d'équations initial. Ces équations ainsi rajoutées décrivent alors le fonctionnement d'un circuit électronique équivalent au phénomène physique modélisé.

Le CEA - DAM a par exemple développé un modèle compact appelé *Transient Ionizing Radiation Responses* (TIRR) [16](#) pour les effets transitoires. Ce modèle compact repose sur la résolution hors équilibre et en régime transitoire des équations de la physique des semi-conducteurs dans l'approximation du transport dit ambipolaire [17](#). L'effet des particules ionisantes incidentes se traduit par la création de paires électron-trou qui, une fois séparées dans les zones de fort champ électrique, contribuent à un courant parasite au niveau de la **source** et du **drain**. On calcule alors

le taux de génération de paires électron-trou en le décomposant en une composante d'espace et une composante de temps, ainsi que les différents courants générés. On en déduit ensuite une fonction qui est solution d'une équation différentielle ordinaire.

Cela permet de construire le circuit électronique équivalent de la [figure 7](#), où le nombre N correspond à l'ordre d'une série, à ajuster selon la précision recherchée dans les équations donnant les courants. La nature de l'**effet transitoire** est alors entièrement définie par cette série, qui inclut les informations sur la distribution spatiale et la distribution temporelle du stimulus dû aux radiations. Cela permet de créer une nouvelle librairie, qui sera incluse dans la simulation Spice.

Conception assistée par la simulation radiative d'une référence de tension

Une référence de tension est un circuit permettant de délivrer une tension de sortie dans une certaine gamme de courant. La [figure 8](#) illustre les résultats de simulations de référence de tension durcie et non durcie, réalisées avec une librairie de transistors incluant le modèle TIRR. Ces résultats montrent que la version durcie de la référence de tension, conçue grâce au savoir-faire des équipes du CEA - DAM, est bien moins affectée pendant et après le flash que la version non durcie.

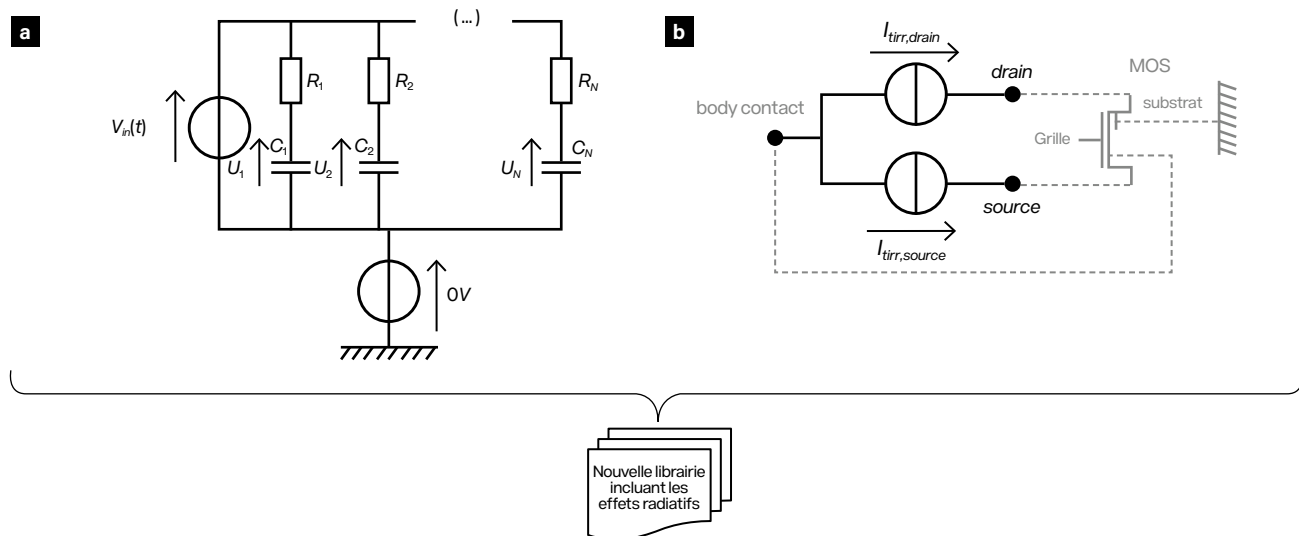


figure 7

a Schéma électronique équivalent du modèle compact TIRR défini par sa tension d'entrée en fonction du temps $V_{in}(t)$ et constitué principalement par une série de résistances R_N , de capacités C_N , de tensions U_N . **b** Schéma (en noir) du circuit équivalent au transistor MOS (en gris), où deux courants appelés $I_{tirr,drain}$ et $I_{tirr,source}$ sont ajoutés pour prendre en compte le modèle développé par le CEA - DAM pour les effets transitoires. Cela permet de créer une nouvelle librairie intégrant ces effets, qui remplacera celle du transistor dans le modèle Spice utilisé par les concepteurs de circuits.

Conclusion

En collaboration avec d'autres organismes de recherche, le CEA – DAM a mis en place une approche de simulation numérique reproduisant les effets des radiations depuis l'arrivée de la particule jusqu'à l'effet électrique créé dans le circuit, en passant par l'effet sur le matériau et dans le composant, et ce pour des échelles d'espace et de temps qui s'étendent de l'angström (10^{-10} m) au centimètre et de l'attoseconde (10^{-18} s) à la seconde respectivement. Cette approche permet de modéliser puis de simuler le fonctionnement des composants électroniques en environnement radiatif pour garantir leur fiabilité. Il offre aux concepteurs de circuits intégrés durcis l'accès à des modèles plus précis afin de diminuer le nombre de cycles de fabrication décrits dans l'article 2 et aide les expérimentateurs à optimiser le nombre d'expériences radiatives décrites dans l'article 4. Des données issues de ces expériences seront elles-mêmes comparées aux résultats de simulation afin de valider ces derniers. Dans les années à venir, l'effort sera poursuivi pour renforcer le lien entre les différentes échelles de cette approche et pour la rendre plus robuste en maîtrisant mieux les incertitudes liées aux différents modèles et codes utilisés.

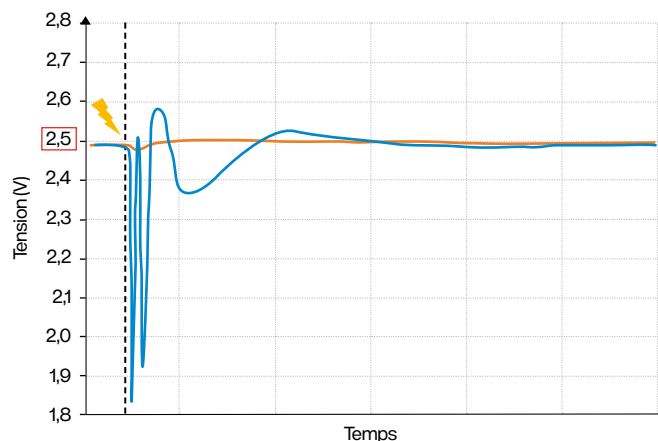


figure 8

Comparaison de la variation en tension avec le temps de deux références de tension de 2,5 V, l'une durcie (en orange) et l'autre non durcie aux radiations (en bleu), après irradiation par un flash photonique (simulation). Le moment du déclenchement du flash photonique est indiqué schématiquement par un éclair et un trait vertical en pointillé. La référence de tension durcie n'est quasiment pas affectée par le flash alors que celle non durcie subit de fortes variations de tension avant de retrouver sa valeur normale.

RÉFÉRENCES

- 1 M. Raine *et al.*, « Improved simulation of ion track structures using new Geant4 models – Impact on the modeling of advanced technologies response », *IEEE TNS*, **59**, p. 2697 (2012).
- 2 Q. Gibaru *et al.*, « Geant4 physics processes for microdosimetry and secondary electron emission simulation: Extension of MicroElec to very low energies and 11 materials (C, Al, Si, Ti, Ni, Cu, Ge, Ag, W, Kapton and SiO₂) », *Nucl. Inst. Meth. B*, **487**, p. 66 (2021).
- 3 D. Lambert *et al.*, « TID effects induced by ARACOR, ⁶⁰Co, and ORIATRON photon sources in MOS devices: Impact of geometry and materials », *IEEE TNS*, **68**, p. 991 (2021).
- 4 D. Lambert *et al.*, « Evaluation of neutron-GaN displacement damage cross-section », accepté dans *IEEE TNS*, DOI 10.1109/TNS.2023.3265463.
- 5 <https://www.laas.fr/projects/licur/>
- 6 M. Raine *et al.*, « Simulation of single particle displacement damage in silicon–Part I: Global approach and primary interaction simulation », *IEEE TNS*, **64**, p. 133 (2016).
- 7 T. Jarrin, *Modélisation des effets de déplacements atomiques induits par irradiation dans les matériaux pour la microélectronique*, thèse soutenue le 20 octobre 2021 et délivrée par l'université Paul-Sabatier Toulouse III.
- 8 T. Jarrin *et al.*, « Coping with the stochasticity of collision cascades in molecular dynamics simulations », *Nucl. Inst. Meth. B*, **500-501**, p. 1 (2021).
- 9 T. Jarrin, N. Richard *et al.*, « Integration of electronic effects into molecular dynamics simulations of collision cascades in silicon from first-principles calculations », *Phys. Rev. B*, **104**, 195203 (2021).
- 10 A. Jay, M. Raine, N. Richard *et al.*, « Simulation of single particle displacement damage in silicon–Part II: Generation and long-time relaxation of damage structure », *IEEE TNS*, **64**, p. 141 (2016).
- 11 L. K. Béland *et al.*, « Kinetic activation-relaxation technique », *Phys. Rev. E*, **84**, 046704 (2011).
- 12 G. T. Barkema, N. Mousseau, « Event-based relaxation of continuous disordered systems », *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 4358 (1996).
- 13 G. Herrero-Saboya, *Les défauts dans le silicium: revisiter les modèles théoriques pour guider les calculs ab initio*, thèse soutenue le 19 novembre 2020 et délivrée par l'université Paul-Sabatier Toulouse III.
- 14 PSP Support <http://www.cea.fr/cea-tech/leti/pspsupport>.
- 15 L-UTSOI Support <https://www.cea.fr/cea-tech/leti/l-utsoisupport>.
- 16 N. Rostand, D. Lambert, « Unified SPICE model for transient ionizing radiation response of SOI MOSFET » 2021 *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, 272 (2021).
- 17 N. Rostand, *Modélisation compacte de l'effet des radiations naturelles sur les dispositifs sub-28nm pour des applications automobiles et aéronautiques*, thèse soutenue le 19 novembre 2019 et délivrée par l'ISAE.