

УДК 621.382.017.71:621.384.3:519.3

Математическое моделирование тепловых режимов многослойных фотоприемных структур

А. А. Мельников

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики
(Технический университет), Москва, Россия

Предложены тепловые модели монолитных и гибридных многослойных фотоприемных структур (МФС). Изложена методика численного моделирования тепловых режимов МФС. Методика иллюстрирована примером моделирования тепловых режимов гибридного матричного фотоприемника ИК-диапазона на основе узкозонных твердых растворов $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ).

Развитие полупроводниковой микрофотоэлектроники стимулирует появление множества приборов, которые представляют собой сложные неоднородные многослойные конструкции. Это, например, фотоприемники и фотоприемные устройства для видимой, УФ- и ИК-областей спектра на основе различных полупроводниковых материалов (Si, Ge, GaAs, PbS, PbSe, InAs, $Cd_xHg_{1-x}Te$). Разработка этих приборов невозможна без детального анализа их тепловых режимов.

Точные расчеты тепловых режимов работы МФС, в состав которых входят детектирующая и считывающая структуры, в ряде практических случаев не могут быть выполнены из-за отсутствия приемлемых аналитических методов решения задач теплопередачи в этих структурах, сложности их конструктивных форм, характера граничных условий, разнообразия теплофизических характеристик применяемых полупроводниковых материалов, сложных законов распределения источников тепла внутри структур. Поэтому актуальна проблема разработки эффективных методик численного моделирования тепловых режимов МФС. В основу разработанной методики моделирования тепловых режимов МФС положен метод конечных элементов (МКЭ).

Обобщенные тепловые модели МФС

Несмотря на многообразие конструктивных форм и функциональных особенностей фотоприемных структур, можно предложить несколько обобщенных тепловых моделей, охватывающих широкий круг приложений.

Рассмотрим две обобщенные тепловые модели, из которых первая соответствует многослойной области без аномальных границ раздела сред, а вторая — многослойной области с аномальными границами раздела сред.

Обобщенная тепловая модель, представленная на рис. 1, включает ряд практических задач расчета температурных полей в монолитных МФС.

В монолитных МФС детектирующая и считывающая структуры изготавливаются из одного полупроводникового материала.

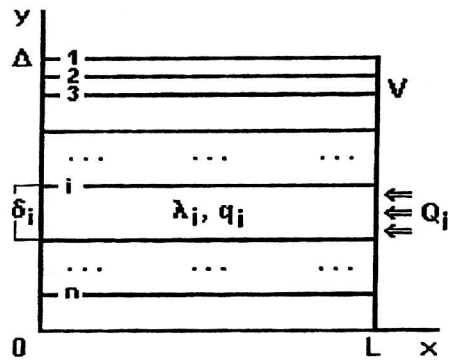
Рассматриваемая область V шириной L и толщиной Δ состоит из n слоев, причем i -й слой характеризуется толщиной δ_i , коэффициентом теплопроводности λ_i . Источниками теплового поля являются внутренние источники тепла с удельной мощностью q_i и тепловые потоки на поверхности структуры с

плотностью Q_i . Модель, изображенная на рис. 1, состоит из однородных параллельных слоев и не содержит аномальных границ раздела сред, так как:

все границы слоев совпадают с одноименным семейством координатных поверхностей $y = \text{const}$;

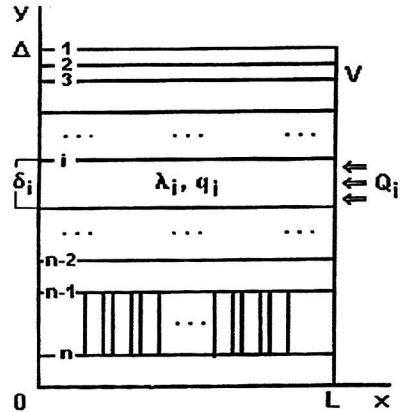
теплопроводность слоев λ_i не изменяется вдоль указанных границ.

Рис. 1. Обобщенная тепловая модель МФС без аномальных границ раздела сред



Обобщенная тепловая модель, изображенная на рис. 2, относится к гибридным МФС. В этих структурах детектирующая и считывающая структуры изготавливаются из различных материалов.

Рис. 2. Обобщенная тепловая модель МФС с аномальными границами раздела сред



Эта модель содержит две аномальные границы раздела сред, являющиеся границами раздела слоев $n-2$, $n-1$ и $n-1$, n . Такие границы характерны, например, для гибридных матричных фотоприемников ИК-диапазона.

Математическое описание температурного поля в МФС

В наиболее общем виде температурное поле в МФС, обобщенные тепловые модели которых представлены на рис. 1 и рис. 2, определяется из уравнения теплопроводности

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + q \quad (1)$$

при следующих граничных условиях:

$$T = T_s \quad \text{на } S_1; \quad (2)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} + Q = 0 \quad \text{на } S_2; \quad (3)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} + \alpha(T - T_0) = 0 \quad \text{на } S_3 \quad (4)$$

и начальном условии

$$T = T^* \quad \text{при } t = t_0. \quad (5)$$

Кроме того, температурное поле в МФС удовлетворяет условиям сопряжения на границах раздела слоев i и j :

$$T|_{s_i} = T|_{s_j}; \quad (6)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{s_i} = \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{s_j}, \quad (7)$$

где T — температура;

ρ — плотность материала;

c — теплоемкость;

λ — коэффициент теплопроводности;

q — удельная мощность источников тепла, которая считается положительной, если тепло подводится к структуре;

Q — поток тепла на части границы S , который считается положительным, если тепло теряется структурой;

α — коэффициент теплообмена с окружающей средой с температурой T_0 ;

T_s — температура на части границы S ;

T^* — начальное распределение температуры;

$S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$ — полная граница многослойной области V ;

n — внешняя нормаль к границе S .

Модель (1)–(7) является общей математической моделью для расчета температурных полей в МФС. При расчете температурных полей в МФС будем пользоваться частными моделями, соответствующими общей.

Отметим, что в ряде практических случаев на отдельных частях поверхности S конвективный теплообмен отсутствует и поток тепла равен нулю. В этом случае вместо граничного условия (4) можно использовать условие

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0. \quad (8)$$

Если температурное поле в МФС стационарно, т. е. процесс установившийся, то уравнение (1) преобразуется к виду

$$\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + q = 0. \quad (9)$$

В случае, когда теплофизические характеристики являются только функциями декартовых координат, из (9) получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q = 0. \quad (10)$$

В большинстве практических случаев для определения температурного поля в МФС возможно использование более простого уравнения, которое получается из (10). Это уравнение имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + q = 0. \quad (11)$$

Уравнение (11) будем использовать для решения двумерных задач расчета температурных полей в МФС с плоскостной симметрией с граничными условиями (2) — (4) и условиями сопряжения (6), (7).

Таким образом, задача расчета температурных полей в МФС сводится к решению сопряженной задачи теплопроводности при разнородных граничных условиях, заданных на различных участках границы S многослойной области V .

Методика численного моделирования температурных полей в МФС методом конечных элементов

В основу методики решения задачи (11), (2)—(4), (6)—(7) положен МКЭ. Можно показать, что решение краевой задачи (11), (2)—(4), (6)—(7) эквивалентно минимизации функционала [1, 2]:

$$F = \int_V \left\{ \frac{1}{2} \lambda \left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 \right] - qT \right\} dV + \int_{S_2} QT dS + \int_{S_3} \frac{1}{2} \alpha (T - T_0)^2 dS. \quad (12)$$

Для упрощения дальнейших преобразований введем рассмотрение матрицы

$$\{b\} = \begin{pmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{pmatrix}; \quad (13)$$

$$[c] = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}. \quad (14)$$

С учетом (13), (14) и после преобразований функционал (12) можно записать в виде

$$F = \int_V \left\{ \frac{1}{2} \{b\}^T [c] \{b\} - qT \right\} dV + \int_{S_2} QT dS + \int_{S_3} \frac{1}{2} \alpha (T - T_0)^2 dS. \quad (15)$$

Предположим, что область V разбита на непересекающиеся конечные элементы с системой базисных функций N_i , $i = 1, 2, 3$. Введем в рассмотрение функции $T^{(i)}$, определенные на отдельных конечных элементах. Элементарный вклад конечного элемента $V^{(i)}$ в общую величину функционала (15) определяется равенством

$$F^{(i)} = \int_{V^{(i)}} \frac{1}{2} \{b^{(i)}\}^T [c^{(i)}] \{b^{(i)}\} dV - \int_{V^{(i)}} q^{(i)} T^{(i)} dV + \int_{S_2^{(i)}} Q^{(i)} T^{(i)} dS + \int_{S_3^{(i)}} \frac{1}{2} \alpha^{(i)} (T^{(i)} - T_0)^2 dS. \quad (16)$$

С учетом (16) выражение (15) можно переписать следующим образом:

$$F = \sum_{i=1}^N F^{(i)}, \quad (17)$$

где N — общее число элементов, на которые разбита многослойная область V .

Для того чтобы минимизировать функционал F , необходимо продифференцировать выражение (15) по $\{T\}$ и результат приравнять нулю, т. е.

$$\frac{\partial F}{\partial \{T\}} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial F^{(i)}}{\partial \{T\}} = 0, \quad (18)$$

где $\{T\}$ — узловые значения искомой функции T .

Искомая функция T может быть определена для каждого конечного элемента через базисные функции N_i следующим образом: $T^{(i)} = [N^{(i)}]\{T\}$.

Таким образом,

$$\{b\} = \begin{pmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1^{(i)}}{\partial x} & \frac{\partial N_2^{(i)}}{\partial x} & \frac{\partial N_3^{(i)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^{(i)}}{\partial y} & \frac{\partial N_2^{(i)}}{\partial y} & \frac{\partial N_3^{(i)}}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix} = [D^{(i)}]\{T\}. \quad (19)$$

После дифференцирования выражения (17) по $\{T\}$ с учетом выражений (16) и (19) и приравнивания результата к нулю получим результирующую систему уравнений:

$$[G]\{T\} = \{F\}; \quad (20)$$

$$[G] = \sum_{i=1}^N [g^{(i)}]; \quad (21)$$

$$[F] = - \sum_{i=1}^N [f^{(i)}]; \quad (22)$$

$$[g^{(i)}] = \int_{V^{(i)}} \{D^{(i)}\}^T [C^{(i)}] \{D^{(i)}\} dV + \int_{S_3^{(i)}} \alpha [N^{(i)}]^T [N^{(i)}] dS; \quad (23)$$

$$[f^{(i)}] = - \int_{V^{(i)}} q^{(i)} [N^{(i)}]^T dV + \int_{S_2^{(i)}} Q^{(i)} [N^{(i)}]^T dS - \int_{S_3^{(i)}} \alpha^{(i)} T_0 [N^{(i)}]^T dS. \quad (24)$$

Для учета граничных условий Дирихле (2) систему уравнений (20) преобразуем с помощью следующего алгоритма. Пусть для определенности задано численное значение температуры T_i , тогда все преобразования матричного уравнения (20) сводятся к следующему: все коэффициенты i -й строки матрицы $[G]$, за исключением диагонального, приравниваются нулю, i -я компонента вектора $[F]$ заменяется на произведение $G_{ii}T_i$; все остальные уравнения преобразуются вычитанием произведения $G_{ji}T_i$ из F_j и подстановкой $G_{ji} = 0$, $j = 1, 2, 3, \dots, n; j \neq i$.

Структура программного обеспечения численного моделирования тепловых режимов МФС

Численное моделирование тепловых режимов МФС включает три этапа: описание геометрии, физических характеристик, генерацию сети конечных элементов; расчет с помощью МКЭ;

визуализацию и интерпретацию результатов расчета.

Эти три этапа на уровне программного обеспечения выполняются отдельными модулями:

- модулем ввода данных (препроцессором);
- модулем вычислений (процессором счета);
- модулем вывода результатов (постпроцессором).

Препроцессор предназначен для ввода и подготовки информации, необходимой для моделирования тепловых режимов в МФС на ПЭВМ методом конечных элементов. Он осуществляет следующие функции:

- описание геометрии МФС;
- генерация конечно-элементной сетки;
- указание областей и границ.

Генерация конечно-элементной сетки в области заключается в формировании совокупности узлов и совокупности конечных элементов, обеспечивающих приемлемую дискретизацию области. Узлы определяются их координатами, тогда как элементы характеризуются их типом и перечнем их узлов.

Операция указания областей и границ позволяет уточнить следующую информацию:

- описание физических характеристик материалов;
- описание источников;
- описание граничных условий.

Процессор счета получает на входе описание конечно-элементной сетки, физические характеристики и граничные условия. На выходе он выдает значения искомого величин в каждом узле сети. Модуль вычислений выполняет следующие функции:

- построение подматриц и подвекторов на каждом конечном элементе;
- объединение этих подматриц и подвекторов для формирования матрицы и правой части линейной системы уравнений;
- учет граничных условий;
- решение линейной системы уравнений.

Постпроцессор:

- извлекает значащую информацию;
- представляет численную информацию в графической форме для облегчения ее восприятия и интерпретации.

Комплекс программ FIELDMFS состоит из отдельных пакетов программ, каждый из которых выполняет вполне определенные функции. Пакет программ MESH предназначен для генерации конечно-элементной сетки в расчетной области; пакет FIELDMFS — для решения задач расчета распределения температурных полей в МФС; пакет GRAPH — для визуализации результатов расчета в виде картин распределения температурных полей.

Численное моделирование тепловых режимов гибридной МФС ИК-диапазона на основе узкозонных твердых растворов $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ)

Рассмотрим задачу моделирования тепловых режимов гибридного матричного фотоприемника ИК-диапазона на основе узкозонных твердых растворов $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ), расчетная схема которого представлена на рис. 3.

Матричный фотоприемник состоит из фотодиодной матрицы формата $N \times N$, выполненной в эпитаксиальном слое КРТ, и кремниевой интегральной схемы (ИС) первичной обработки сигнала. Освещение фоточувствительного элемента осуществляется через подложку, на которую для снижения оптиче-

ских потерь нанесено просветляющее покрытие. Каждый фотодиод соединен с кристаллом кремниевой ИС металлическим столбиком-контактом, выполненным из индия. Вся конструкция гибридного матричного фотоприемника приклеена к холодильнику, имеющему температуру жидкого азота.

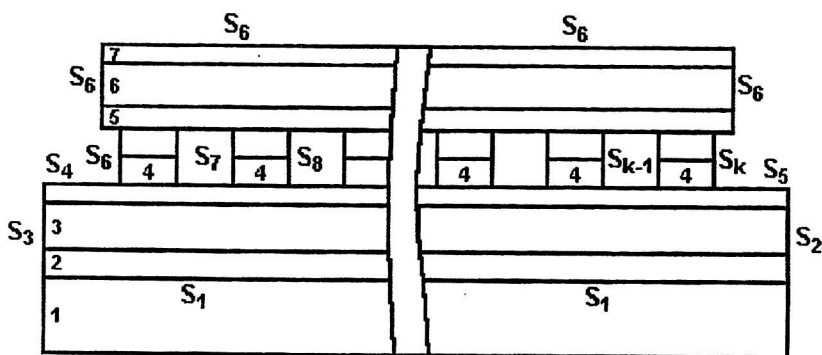


Рис. 3. Расчетная схема гибридной МФС:

1 — холодильник; 2 — слой клея; 3 — кремниевая интегральная схема первичной обработки сигнала; 4 — индиевые столбики-контакты; 5 — слой КРТ; 6 — слой CdTe; 7 — просветляющее покрытие

Расчет тепловых режимов проводился для матричного фотоприемника с размером кристалла фотодиодной матрицы 7×7 мм и размером кристалла кремниевой ИС 10×10 мм. Высота индиевых межсоединений составляла 10 мкм, площадь сечения — 50×50 мкм.

С помощью разработанного комплекса программ FIELDMFS были рассчитаны тепловые режимы гибридной МФС, изображенной на рис. 3, с учетом геометрических размеров кристаллов, индиевых межсоединений, тепловыделений в кремниевой ИС первичной обработки сигнала и известных теплопритоков через границы S_4 и S_5 .

При этом решалось уравнение теплопроводности (11) с граничными условиями

$$T = 77 \text{ К} \quad \text{на } S_1; \tag{25}$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} + Q = 0 \quad \text{на } S_4, S_5; \tag{26}$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad \text{на } S_2, S_3, S_6, \dots, S_k \tag{27}$$

и условиями сопряжения на границе раздела слоев i и j (6), (7).

В результате расчетов были получены зависимости максимальной температуры рабочего слоя КРТ от тепловыделений в кремниевой ИС, от теплопроводности клея, теплопритоков через проволочные межсоединения кремниевой ИС с выводами корпуса и величины рассогласования индиевых столбиков-контактов. Результаты расчетов показаны на соответствующих рисунках.

На рис. 4—7 показаны графики зависимости максимальной температуры рабочего слоя КРТ соответственно от тепловыделений в кремниевой ИС при мощности теплопритоков через проволочные межсоединения кремниевой ИС с выводами корпуса $P_S = 0$, толщине клеевого слоя $\delta_{кл} = 0$; от теплопроводности клея при мощности, выделяемой в кремниевой ИС, равной 0,5 Вт,

мощности теплопритоков через проволочные межсоединения кремниевой ИС с выводами корпуса $P_S = 0,1$ Вт, $\delta_{кл} = 10$ мкм; от мощности теплопритоков через проволочные межсоединения кремниевой ИС с выводами корпуса при $P_V = 0,5$ Вт, $\delta_{кл} = 10$ мкм, $\lambda_{кл} = 0,2$ Вт/(м·К); от величины рассогласования индиевых столбиков-контактов при $P_V = 0,5$ Вт, $\delta_{кл} = 10$ мкм, $\lambda_{кл} = 0,2$ Вт/(м·К).

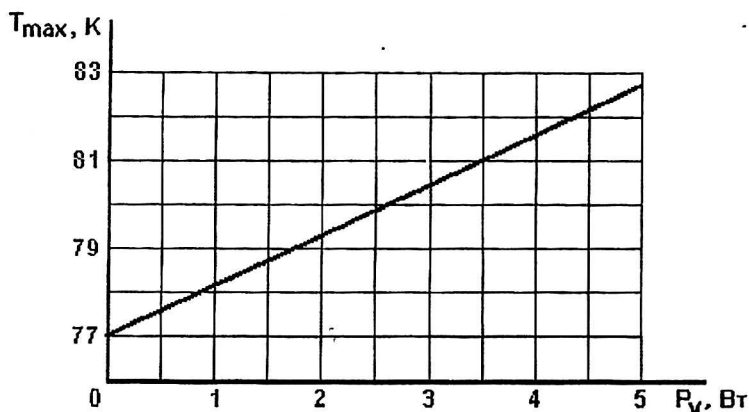


Рис. 4. Зависимость максимальной температуры рабочего слоя КРТ от тепловыделений в кремниевой ИС

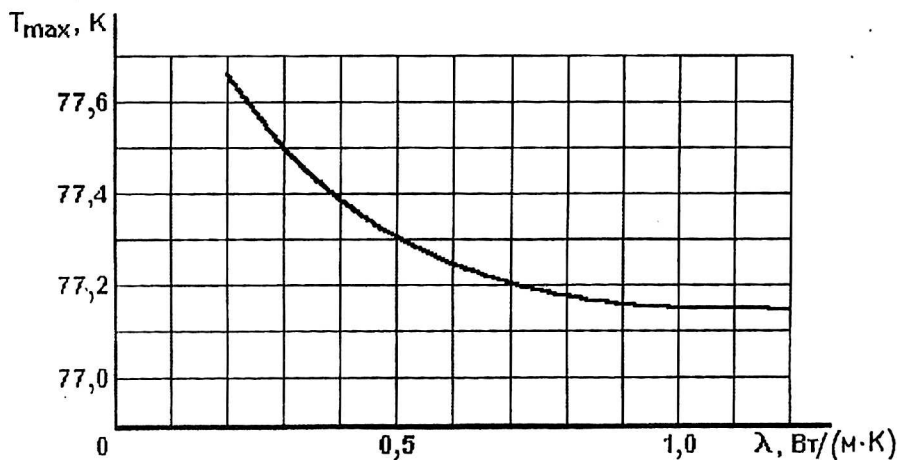


Рис. 5. Зависимость максимальной температуры рабочего слоя КРТ от теплопроводности клея

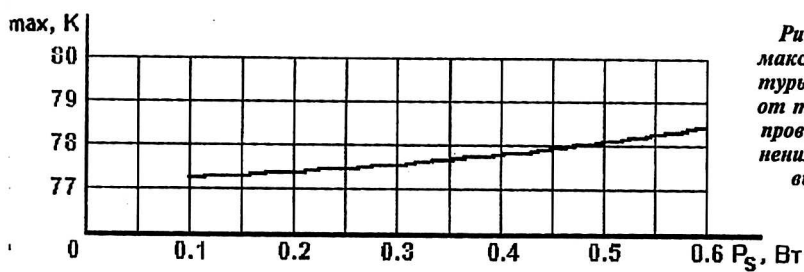


Рис. 6. Зависимость максимальной температуры рабочего слоя КРТ от теплопритоков через проволочные межсоединения кремниевой ИС с выводами корпуса

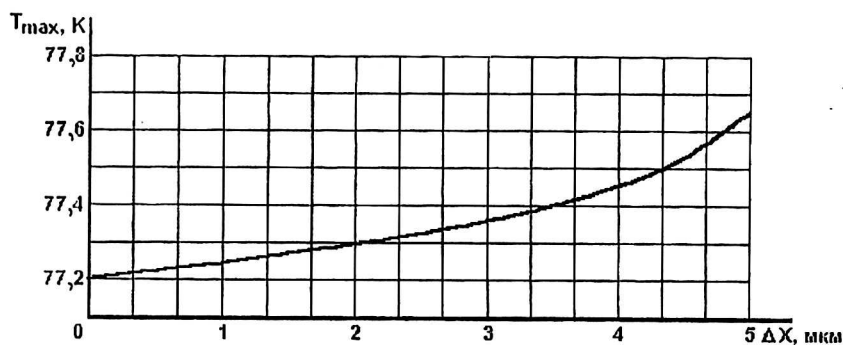


Рис. 7. Зависимость максимальной температуры рабочего слоя КРТ от величины рассогласования индиевых столбиков-контактов

На рис. 8 приведено распределение температурного поля в рабочем слое КРТ при $P_y = 0,5$ Вт, $\delta_{кж} = 10$ мкм, $\lambda_{кж} = 0,2$ Вт/(м·К), $P_s = 0,1$ Вт.

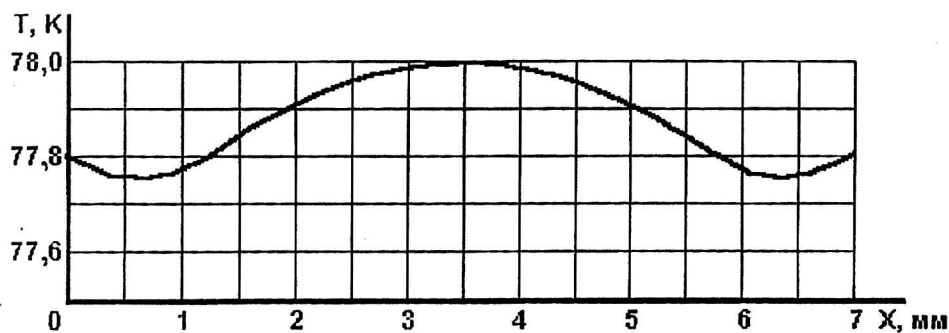


Рис. 8. Распределение температуры в рабочем слое КРТ

Результаты расчетов показали, что величина рассогласования индиевых столбиков-контактов при сборке гибридных многослойных фотоприемных структур не должна превышать 3 мкм, в противном случае рабочий слой КРТ будет иметь недопустимо высокую температуру, так как ухудшается его охлаждение.

В заключение отметим, что использование разработанной методики позволяет отказаться от дорогостоящих и часто невозможных экспериментов, определить целесообразность той или иной технологии изготовления приборов на основе многослойных полупроводниковых структур, повысить качество и надежность изделий микрофотоелектроники.

Л и т е р а т у р а

1. Melnikov A. A., Kulchitsky N. A. and Khryapov V. T. Temperature field mathematical modeling in multilayer semiconductor structures being produced and functioning in microgravity//Hydromechanics and Heat/Mass Transfer in Microgravity. Reviewed Proceedings of the First International Symposium on Hydromechanics and Heat/Mass Transfer in Microgravity. Gordon and Breach Science Publishers. 1992. P. 363—366.

2. Мельников А. А., Кульчицкий Н. А., Хряпов В. Т. Расчет температурных полей в многослойных полупроводниковых структурах//Вопросы оборонной техники. Сер. 11. Приемники и преобразователи излучения оптического диапазона. Приборы ночного видения. 1995. Вып. 3(146)—4(147). С. 34—38.

Mathematical modeling of thermal modes of multilayer photodetector structures

A. A. Melnikov

Moscow State Institute of Radioengineering, Electronics and Automation (Technical University),
Moscow, Russia

Thermal modes calculation of multilayer photodetector structures (MFS) is a critical point in the devices development and optimization of the device design. Problem of development of thermal models MFS and effective numerical techniques of calculation of thermal modes MFS thus is actual. For modeling of thermal modes MFS the generalized multilayer thermal models have been developed. The finite element method (FEM) is used to calculate thermal modes MFS. Software package FIELDMFS for thermal fields calculation in MFS with arbitrary geometry, arrangement of heat release sources, thermal and physical parameters of layers was developed. Using the developed method and software package the temperature fields of the IR spectral range photodetector were calculated.