

文章编号: 2095-4980(2021)01-0176-05

## Geant4 模拟质子入射 InP 产生的位移损伤

白雨蓉, 贺朝会, 谢 飞, 李永宏, 臧 航

(西安交通大学 核科学与技术学院, 陕西 西安 710049)

**摘 要:** 磷化铟(InP)作为重要的第二代半导体材料, 禁带宽度大, 电子漂移速度快, 抗辐照性能比 Si,GaAs 好, 可作为制备空间飞行器上电学器件的备选材料。随着半导体器件的尺寸纳米化, 空间环境中低能质子辐照元件所导致的位移损伤成为影响元件电学性能的主要因素之一。本文使用 Geant4 模拟得到低能质子入射 InP 产生的初级撞出原子(PKA)种类及占比和不同能量质子的非电离能量损失(NIEL)的深度分布。结果表明: 质子俘获和核反应的概率随质子能量的增加而增加, 进而使弹性碰撞产生的反冲原子 In,P 的占比减少, 其他反冲原子占比增加; NIEL 峰值随质子能量的增加而降低, 且 NIEL 峰有向前移动的趋势, 即随着质子能量增加, 位移损伤严重区域逐渐由材料末端移至材料表面。

**关键词:** 非电离能量损失模型; Geant4; 空间质子辐射; 磷化铟

**中图分类号:** TN304.2<sup>+</sup>3

**文献标志码:** A

**doi:** 10.11805/TKYDA2019383

## Geant4 simulation of displacement damage induced by proton irradiation in InP

BAI Yurong, HE Chaohui, XIE Fei, LI Yonghong, ZANG Hang

(School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an Shaanxi 710049, China)

**Abstract:** As an important second-generation semiconductor material, indium phosphide has wide bandgap, fast electron drift and better radiation resistance than Si and GaAs. It can be used as an alternative material for the preparation of electrical devices on space vehicles. With the nano-size of semiconductor devices, the displacement damage caused by low-energy proton irradiation in space environment is one of the main factors affecting the electrical properties of components. In this paper, the types and proportions of Primary Knock-on Atom(PKA) produced by low energy protons irradiation and the depth distribution of Non-Ionizing Energy Loss(NIEL) of protons with different energies are obtained by Geant4 simulation. The results show that the probability of proton capture and nuclear reaction increases with the increase of proton energy, which decreases the proportion of recoil atoms In and P and enhances other recoil atoms in elastic collision. The NIEL peak tends to move forward in depth of the bulk material with the increase of proton energy, which means the area of serious displacement damage gradually shifts from the end of the material to the surface of the material.

**Keywords:** Non-Ionizing Energy Loss; Geant4; space proton irradiation damage; InP

对半导体器件的位移损伤研究始于 20 世纪 70 年代, 主要以地面辐照试验为主, M Yamaguchi, R J Walters 等<sup>[1-4]</sup>对 InP,GaAs,GaN 等 III-V 族化合物半导体材料做了一系列的粒子束辐照实验, 得到位移损伤对 III-V 族半导体器件电学性能的影响规律。其影响机理是离子与物质相互作用, 产生 Frenkel 缺陷对, 长时间演变后, 形成点缺陷、团簇或位错环等晶格缺陷。这些缺陷多处于半导体器件的深能级处, 可以俘获载流子, 影响少数载流子数目和寿命, 使半导体器件开路电压、短路电流、暗电流等电学特性发生变化, 改变器件的电学性能。

辐照产生的位移损伤(点缺陷、团簇、位错环)尺寸过小, 短时间内变化快, 因此对位移损伤缺陷进行观察、定性和定量具有很大难度。使用软件模拟方法获取离子辐照材料的位移损伤数据成为一种新的、可靠的研究方法<sup>[5-7]</sup>。InP 作为第二代半导体材料, 禁带宽度大, 电子漂移速度快, 抗辐照性能优于 Si,GaAs<sup>[1]</sup>, 是制备空间环

收稿日期: 2019-10-10; 修回日期: 2019-11-14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11775167)

作者简介: 白雨蓉(1996-), 女, 在读硕士研究生, 主要研究方向为材料的辐照效应模拟。email:baiyur@stu.xjtu.edu.cn

境中电子器件的优越材料。国内外对 InP 的辐照损伤模拟研究进展缓慢,相关位移损伤特性研究需要完善。本文使用 Geant4 模拟质子在 InP 中的位移损伤,探究离位原子数和非电离能量损失(NIEL)与质子能量的关系,以及不同质子能量的 NIEL 深度分布,对于研究不同能量质子辐照 InP 产生的位移损伤规律有重要意义。

## 1 计算方法及仿真模型

### 1.1 物理过程

质子与物质的相互作用分为弹性碰撞、非弹性碰撞(质子俘获反应、核反应等)两部分。其中弹性碰撞为质子与靶原子核碰撞产生 Frenkel 对,可能形成  $V_{In}, V_P, InP, P_{In}, I_{In}, I_P$  等点缺陷,改变晶格结构。同时,非弹性散射过程中也会产生较高能量的反应产物,由于其在材料中产生位移损伤的物理机理与弹性散射的初级撞出原子(PKA)一致,故统称为 PKA。能量较高的 PKA 在靶材料中进行级联碰撞,产生更多的 Frenkel 对,进而形成位移损伤<sup>[1-2]</sup>。因此,模拟级联碰撞过程,得到 PKA 数目、种类及其在材料中的能量沉积,是判断质子辐照 InP 产生位移损伤大小的关键。

### 1.2 非电离能量损失(NIEL)

NIEL 是指 PKA 在单位质量厚度上的非电离能量损失,单位为  $MeV \cdot cm^2/g$ 。不同种类、能量的粒子辐照靶材料产生的位移损伤可以使用 NIEL<sup>[3]</sup>进行统一比较。NIEL 的计算方式如下:

$$NIEL = \frac{N_A}{A} \sum_i \sigma_i(E) E_{dam}(T) \quad (1)$$

式中:  $N_A$  为阿伏伽德罗常数;  $A$  为靶原子质量数;  $\sigma_i(E)$  为原子的反应截面;  $E_{dam}(T)$  为能量为  $T$  的反冲原子的位移损失能量部分。

进一步推导得:

$$NIEL = \frac{E_{dam}(T)}{\rho h} \quad (2)$$

式中:  $\rho$  为靶材料密度;  $h$  为材料厚度。

使用 Robinson 和 Akkerman 等<sup>[8-9]</sup>修正的 Linhard 分离函数可得  $E_{dam}(T)$ :

$$E_{dam}(T) = \frac{T}{1 + k_d g(\varepsilon_d)} \quad (3)$$

$$k_d = \frac{0.0793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} A_1^{3/2} A_2^{1/2}} \quad (4)$$

$$\varepsilon_d = \frac{T}{30.724 Z_1 Z_2 \sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} (1 + A_1 / A_2)} \quad (5)$$

$$g(\varepsilon_d) = \begin{cases} \varepsilon_d + 0.40244 \varepsilon_d^{3/4} + 3.4008 \varepsilon_d^{1/6} & (T > 200 \text{ keV}) \\ 0.742 \varepsilon_d + 1.6812 \varepsilon_d^{3/4} + 0.90565 \varepsilon_d^{1/6} & (T < 200 \text{ keV}) \end{cases} \quad (6)$$

式中  $A_1, A_2$  和  $Z_1, Z_2$  分别为 PKA 和靶原子的原子序数及质量数。对于化合物,原子序数和质量数取化合物组成元素的加权平均数,即:

$$Z_{2,average} = \frac{\sum_i n_i Z_i}{\sum_i n_i}, \quad A_{2,average} = \frac{\sum_i n_i A_i}{\sum_i n_i} \quad (7)$$

式中  $n_i$  为元素  $i$  在化合物中的原子密度。将  $Z_{2,average}=42, A_{2,average}=97$  代入式(4)~(5),可以计算 NIEL。

### 1.3 离位原子数

离位原子数是指每个点阵原子平均被击发生离位的数目,通过计算离位原子数目,可以预测位移损失的大小。可由 NRT<sup>[10]</sup>(Norgett Robinson Torrens)模型计算得到:

$$N_d = 0.8 \times \frac{E_{dam}(T)}{2E_d} \quad (8)$$

式中  $E_d$  为原子的离位阈能。对磷化铟进行 NRT 计算,取  $E_d=32 \text{ eV}$ <sup>[11]</sup>。

## 1.4 程序设计

利用 Geant4 软件和程序库, 使用 G4LElastic, G4CascadeInterface, G4hIonisation, G4ionIonisation, G4BinaryLightIonReaction 等物理模型, 模拟不同能量的质子与 InP 产生 PKA 的弹性散射和非弹性散射过程, 得到 PKA 的种类、数目及  $E_{\text{dam}}(T)$ 。代入式(2)可得 NIEL, 代入式(9)可得离位原子数。最后得到  $N_d$ , NIEL 与质子能量的关系, 以及不同能量的质子入射 InP 产生的 NIEL 深度分布。

InP 的密度  $\rho=4.56 \text{ g/cm}^3$ 。材料厚度的设置需大于质子射程, 保证质子能量在材料中完全耗尽, 得到完整的 NIEL 深度分布图, 本文材料厚度的设置如表 1 所示。

## 2 结果与讨论

### 2.1 PKA 信息分析

模拟 1~500 MeV 质子入射 InP, 得到 PKA 种类、能损及占比等信息, 如表 2 所示。

表 2 质子入射 InP 产生的 PKA 信息汇总表  
Table2 Summary of PKA information produced by proton irradiation

energy/MeV	element	recoil atoms	energy range	$E_{\text{dam}}(T)$	percentage/%
1	P	$^{31}\text{P}$	3 097 eV-0.12 MeV	2 653 eV-0.059 MeV	84.4
	In	$^{113,115}\text{In}$	298 eV-0.033 MeV	288 eV-0.029 MeV	15.6
50	P	$^{30,31}\text{P}$	1 163 eV-3.32 MeV	1 033 eV-0.24 MeV	47.1
	In	$^{111-115}\text{In}$	245 eV-1.09 MeV	237 eV-0.58 MeV	35.5
	proton	$^1\text{H}$	1.68-47.2 MeV	557-593 eV	8.0
	Si	$^{28-30}\text{Si}$	0.023-4.32 MeV	0.016-0.23 MeV	2.5
	Sn	$^{109-112}\text{Sn}$	0.064-0.99 MeV	0.055-0.5 MeV	5.8
	others	$^{112}\text{Cd}, ^4\text{He}, ^{25}\text{Mg}, ^2,3\text{H}$	0.56-8.46 MeV	5 918 eV-0.34 MeV	1.1
100	P	$^{39,31}\text{P}$	3 122 eV-5.81 MeV	2 674 eV-0.27 MeV	36.8
	In	$^{107-113,115}\text{In}$	116 eV-2.07 MeV	113 eV-0.92 MeV	34.5
	proton	$^1\text{H}$	1.52-91.8 MeV	555-1 622 eV	15.9
	Sn	$^{107-110,112}\text{Sn}$	0.097-2.86 MeV	8 246 eV-1.14 MeV	6.7
	Cd	$^{105,107-110,113}\text{Cd}$	0.24-3.3 MeV	0.16-1.21 MeV	1.0
others	$^2,3\text{H}, ^4\text{He}, ^{22}\text{Ne}, ^{24,25}\text{Mg}, ^{27}\text{Al}, ^{31}\text{S}, ^{28-30}\text{Si}, ^{117}\text{Ag}$	0.18-17 MeV	5 870 eV-0.22 MeV	5.1	
500	P	$^{27,31}\text{P}$	14 eV-40 MeV	14 eV-2.9 MeV	7.2
	In	$^{101-115}\text{In}$	1.6 eV-17.1 MeV	1.6 eV-2.6 MeV	16.5
	proton	$^1\text{H}$	0.2-495 MeV	445-603 eV	53.4
	Cd	$^{98-114}\text{Cd}$	1 873 eV-18.6 MeV	1 781 eV-2.6 MeV	6.0
	others	$^2,3\text{H}, ^3,4\text{He}, ^8,9\text{Be}, ^{10,11}\text{B}, ^{12-14}\text{C}, ^{13-15}\text{N}, ^{15-20}\text{O}, ^{17-23}\text{F}, ^{19-25}\text{Ne}, ^{21-27}\text{Na}, ^{22-29}\text{Mg}, ^{26-29}\text{Al}, ^{25-30}\text{Si}, ^{29-31}\text{S}, ^{30}\text{Cl}, ^{79,80}\text{Kr}, ^{81,84}\text{Rb}, ^{85-92}\text{Y}, ^{84-91}\text{Zr}, ^{87-96}\text{Nb}, ^{88-98}\text{Mo}, ^{89-104}\text{Tc}, ^{90-110}\text{Ru}, ^{94-110}\text{Rh}, ^{95-112}\text{Pd}, ^{97-113}\text{Ag}, ^{102-115}\text{Sn}, \text{etc}$	434 eV-66.5 MeV	391 eV-2.1 MeV	16.9

1 MeV 质子入射, 仅产生钢、磷 2 种位移原子, 质子与 InP 发生弹性碰撞, 即不改变原子种类, 只发生能量传递。磷原子占比大, 原因在于磷原子离位阈能低, 更易形成离位原子。

50 MeV 质子入射, 核反应产生的 PKA 占比增至 9.4%, 相较于 1 MeV 有明显的增加。同时, 可以产生次级 PKA 的质子占比也显著增加。随着质子能量的增加, 非弹性散射反应几率逐渐增大, 可能取代弹性散射过程, 占据主体地位。

100 MeV 质子入射, 质子俘获或核反应产生的 PKA 种类增加至 10 种, 占比约为 12.8%。虽然磷原子和钢原子的占比仍大于 50%, 但相较于 50 MeV 的情况, 非弹性碰撞产生的 PKA 种类、数目和能量表现出了随能量增加而增加的趋势。

对于高能质子 500 MeV, 磷和钢数目占比下降到 23.7%, 非弹性碰撞产生的 PKA 数目占比增加到 22.9%, 与弹性碰撞产生的磷、钢原子占比几乎持平。次级质子的占比大幅度增加至 53.4%, 但其非电离能量损失少, 故次级质子数目的增加对于 NIEL 的分布影响小。由于非弹性碰撞产生的 PKA 的能量和非电离能量损失最小值远大于弹性碰撞产生的磷、钢原子, 因此在数目占比相近的情况下, 核反应和质子俘获产生的 PKA 在对 NIEL 的

贡献中占主体地位。

综上所述,随着质子能量的增加,非弹性碰撞概率增加,逐渐取代弹性碰撞,成为质子与 InP 相互作用的主要方式。

### 2.2 $N_d$ , NIEL 与质子能量的关系

根据式(2)和式(9),计算不同能量下的  $N_d$  与 NIEL,两者随质子能量变化的趋势如图 1 所示。由图 1 可知,随着入射质子能量的增加,总的离位原子数目增加,但在单位区间内的非电离能量沉积降低。原因在于:a)材料厚度随质子能量的增加而增加,材料厚度增加的速率大于非电离能损增加的速率,导致 NIEL 降低;b)质子能量越大,发生非电离反应的概率越低,导致非电离能损增加速率降低。

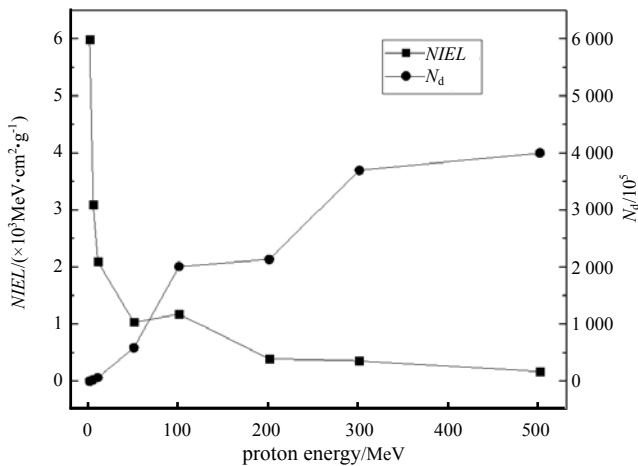


Fig.1 Variation of  $N_d$  and NIEL with proton energy 1 MeV  
图 1  $N_d$  与 NIEL 随质子能量的变化图

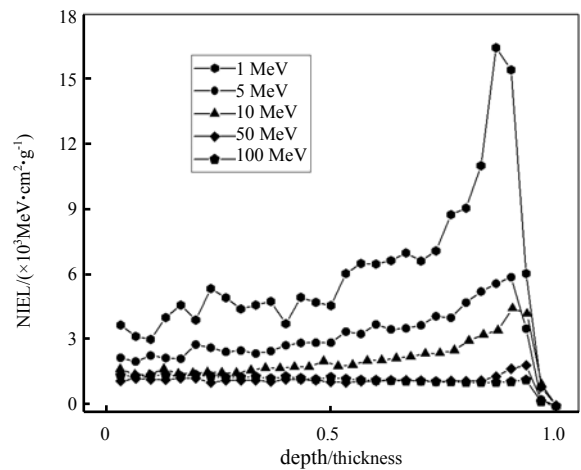


Fig.2 NIEL depth distribution with different proton energies in InP  
图 2 不同能量的质子入射 InP 的 NIEL 深度分布图

### 2.3 不同能量质子在 InP 中的 NIEL 深度分布

将质子入射深度与材料厚度的比作为横坐标,划分 30 个区间,分别计算区间内 1~500 MeV 的质子产生的 NIEL 值,得到随深度占比变化的 NIEL 分布图,如图 2 所示。由图 2 可知:

1) NIEL 随深度的增加缓慢上升,在射程末端达到最大值后,有一个巨大的回落,形成明显的 Bragger 峰。原因在于质子能量损失与质子运动速度的平方成反比,接近射程末端,质子速度最小,能量损失最大。

2) 比较相同深度占比(质子入射深度与射程的比值)处的 NIEL 值,发现 NIEL 值随质子能量的增加而减小。推论可知,对于相同厚度的薄靶材料,1 MeV 质子产生的 NIEL 值恒大于 5~100 MeV 质子产生的 NIEL 值。在纳米尺寸半导体器件的抗辐射加固设计中,低能质子导致的位移损伤不容忽视,这与 ZHAO Xiaohong 等<sup>[7]</sup>的观点相同,不同的是文献[7]通过 SRIM 获取数据,仅获得了 NIEL 随质子衰减能量的分布,并不能直接比较不同能量的质子对于同一材料某一深度处的 NIEL 值。

3) 在材料末端,Bragger 峰峰值随着质子能量的增加有明显的下降,而材料前端与末端的 NIEL 差值随着质子能量的增加而逐渐减小。图 3 为 100 MeV 的 NIEL 深度分布图,NIEL 峰值与前端值几乎相平,两者差值远小于 1 MeV 时的差值。

图 4 为 200 MeV, 300 MeV, 500 MeV 质子入射 InP 产生的 NIEL 深度分布,横坐标为质子入射深度,纵坐标为 NIEL。对于 200 MeV 及更高能量的质子,NIEL 不存在 Bragger 峰。随着质子能量的增加,NIEL 峰由材料末端向前端移动,即辐照损伤严重区域从材料末端移至材料表面。原因在于:非弹性碰撞产生的 PKA 数目随质子能量增加逐渐占主导地位,而此类 PKA 的活动区域主要在材料表面。

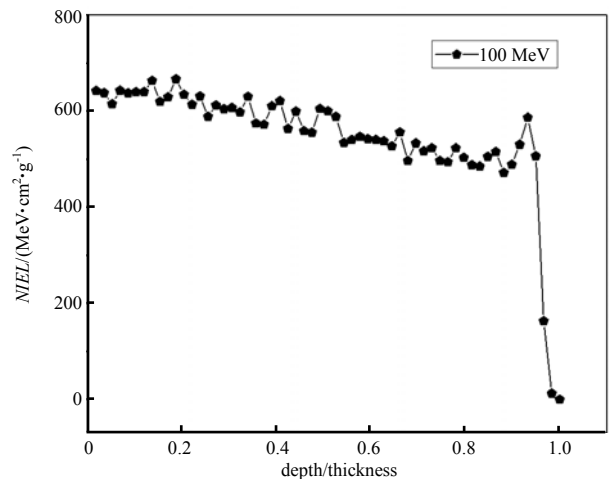


Fig.3 NIEL depth distribution of 100 MeV proton  
图 3 100 MeV 的 NIEL 深度分布

### 3 结论

本文使用 Geant4 模拟计算不同能量的质子入射 InP 产生的位移损伤, 得出如下结论:

1) 质子能量越大, 发生质子俘获和核反应的几率越大, 由此产生的 PKA 占比越多, 使 NIEL 峰由材料末端迁移至前端, 在宏观上表现为高能质子的辐照损伤严重区域分布在材料表面。

2) 质子能量越大, 总的离位原子数目越大, NIEL 值越小。原因在于材料厚度的增加率大于非电离能量损失的增加率。

3) 比较相同深度占比处的 NIEL 值, NIEL 随质子能量的增加而减小。此结论适用于  $\mu\text{m}$  量级的 InP 材料, 对于  $\text{nm}$  级别 InP 材料的质子辐照机理需进一步模拟验证。

#### 参考文献:

- [ 1 ] YAMAGUCHI M, ANDO K. Mechanism for radiation resistance of InP solar cells[J]. Journal of Applied Physics, 1988, 63(11):5555–5562.
- [ 2 ] WALTERS R J. A review of radiation effects in InP solar cells[J]. Microelectronics Journal, 1995, 26(7):697–704.
- [ 3 ] WALTERS R J, MESSENGER S R, COTAL H L, et al. Electron and proton irradiation-induced degradation of epitaxial InP solar cells[J]. Solid-State Electronics, 1996, 39(6):797–805.
- [ 4 ] ROMERO M J, WALTERS R J, ARAÚJO D, et al. Proton-induced damage in p–n InP solar cells: the role of electron capture at high fluences[J]. Materials Science and Engineering, 2001, 80(1–3):294–298.
- [ 5 ] RAINE M, JAY A, RICHARD N, et al. Simulation of single particle displacement damage in silicon—part I: global approach and primary interaction simulation[J]. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2017, 64(1):133–140.
- [ 6 ] 申帅帅, 贺朝会, 李永宏. 质子在碳化硅中不同深度的非电离能量损失[J]. 物理学报, 2018, 67(18):25–33. (SHEN Shuai-shuai, HE Chaohui, LI Yonghong. Non-ionization energy loss of proton in different regions in SiC[J]. Acta Physica Sinica, 2018, 67(18):25–33.)
- [ 7 ] ZHAO Xiaohong, LU Hongliang, ZHANG Yuming, et al. Model of phonon contribution to Non-Ionizing Energy Loss(NIEL) for InP/InGaAs heterojunction[J]. Microelectronics Reliability, 2017(78):156–160.
- [ 8 ] ROBINSON M T, TORRENS I M. Computer simulation of atomic displacement cascade in solids in the binary collision approximation[J]. Physical Review B, 1974, 9(12):5008–5024.
- [ 9 ] AKKERMAN A, BARBAK J. Partitioning to elastic and inelastic process of the energy deposited by low energy ions in silicon detectors[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 2007, 260(2):529–536.
- [ 10 ] NORDLUND K, ZINKLE S J, SAND A E, et al. Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models[J]. Nature Communication, 2018, 9(1):1084.
- [ 11 ] CAMPESATO, BAUR C, CASALE M, et al. Effects of irradiation on triple and single junction InGaP/GaAs/Ge solar cells[C]// Proceedings of the 35th European PV Solar Energy Conference. Brussels:[s.n.], 2018:24–28.

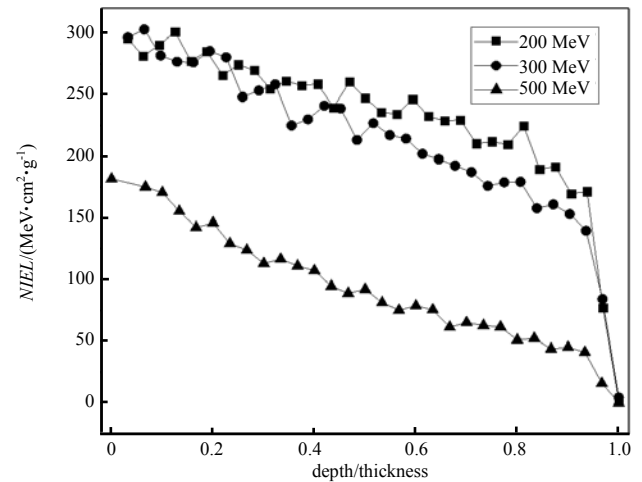


Fig.4 NIEL depth distribution of 200–500 MeV proton  
图 4 200–500 MeV 的 NIEL 深度分布