

300 eV—1 GeV 质子在硅中非电离能损的计算

朱金辉^{1)2)†} 韦源¹⁾²⁾ 谢红刚¹⁾²⁾ 牛胜利¹⁾²⁾ 黄流兴¹⁾

1) (西北核技术研究所, 西安 710024)

2) (强脉冲辐射环境模拟与效应国家重点实验室, 西安 710024)

(2013年9月22日收到; 2013年11月28日收到修改稿)

非电离能损 (NIEL) 引起的位移损伤是导致空间辐射环境中新型光电器件失效的主要因素. 引起质子在硅中 NIEL 的作用机理有库仑相互作用和核相互作用, 质子能量范围从位移损伤阈能到 1 GeV. 当质子能量位于低能区时, 库仑相互作用占主导地位, 采用解析方法和 TRIM 程序计算 NIEL; 当质子能量位于高能区时, NIEL 主要来自质子与靶原子核的弹性和非弹性相互作用, 使用 MCNPX/HTAPE3X 进行模拟仿真计算由核反应引起的 NIEL. 实现了能量范围为 300 eV—1 GeV 的质子入射硅时 NIEL 的计算. 计算结果表明, MCNPX/HTAPE3X 可用于计算高能质子在材料中产生的反冲核所引起的 NIEL, 结合解析方法和 TRIM 程序可计算得到由于库仑相互作用引起的 NIEL.

关键词: 质子, 非电离能损, 库仑相互作用, 核反应

PACS: 61.80.-x, 24.10.Lx, 25.40.Cm, 25.40.Ep

DOI: 10.7498/aps.63.066102

1 引言

非电离能损 (NIEL) 引起的位移损伤是导致空间辐射环境中新型光电器件失效的主要因素. 传统的金属氧化物半导体器件是表面器件, 电离辐射是其主要问题, 现代仪器中光电器件越来越多, 对 NIEL 的研究也就更加重要, 近十多年来, 不少空间科学研究者在进行 NIEL 的研究^[1-3]. 许多文献表明, 在大多数情况下位移损伤引起的半导体器件及光学器件性能的变化与位移损伤碰撞过程中传递的 NIEL 的沉积量成正比. 我们通过计算 NIEL 可以得知衰变情况, 进而反映器件的性能.

通常采用蒙特卡罗方法, 利用相关商业程序进行 NIEL 的计算. 国内学者多采用 TRIM 程序^[4] 或 SHIELD 程序^[5] 等. 国外关于这方面的研究已有相当的基础, Akkerman 等^[1] 用理论方法、Summers 等^[2] 用解析方法和 TRIM 程序、Jun 等^[6] 用 MCNPX 程序开展关于 NIEL 的计算研究工作.

对 NIEL 的研究发现, 引起 NIEL 的物理机理

主要有以下两种: 一是库仑相互作用, 在入射粒子能量低于 10 MeV 时, 对 NIEL 的贡献占主要地位; 另一种是核相互作用, 包括入射粒子与靶材料原子核的弹性相互作用、非弹性相互作用, 入射粒子能量在 50 MeV 以上时其占主导地位.

本文计算了 300 eV—1 GeV 质子入射硅靶的 NIEL 值, 不仅考虑了库仑相互作用, 还考虑了高能时质子与硅原子发生的核反应对 NIEL 的贡献. 其中, 库仑相互作用的贡献由 TRIM 程序和解析方法计算给出; 核反应的贡献由 MCNPX 程序计算给出. 综合二者结果给出了能量在 300 eV—1 GeV 范围内质子在硅中的 NIEL.

2 库仑作用引起的 NIEL 计算

当入射粒子能量低于 10 MeV 时, 库仑相互作用占主导地位. 可以采用解析方法对库仑作用引起的 NIEL 进行计算.

在用解析方法计算库仑作用引起的 NIEL 时, 一般用传统的卢瑟福微分散射截面计算库仑作用

* 国家自然科学基金 (批准号: 11175271) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: prodigyjh@163.com

对NIEL的贡献,但它没有考虑核外电子(主要考虑内层电子)库仑屏蔽的影响.对于轻离子(如质子),只有在低能(低于1 MeV)部分才考虑库仑屏蔽作用;而对于重离子,无论在低能部分还是高能部分都要考虑库仑屏蔽.屏蔽库仑势有很多种,应用较多的是基于大量实验结果的Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL)普适势,基于相关截面参数、碰撞转移能计算以及反冲核造成的NIEL比例函数,可以用解析方法计算得到质子由库仑作用引起的NIEL,详细计算方法可参见文献[7].

除了解析方法,也可以采用粒子输运程序进行计算.本文选用TRIM程序对库仑作用引起的NIEL进行计算.TRIM程序是计算离子在物质中输运的蒙特卡罗软件,其采用量子力学处理离子-原子相互作用,适用于计算能量在10 eV—2 GeV的带电粒子在各种物质中的能量沉积.由于TRIM程序不考虑入射粒子与原子核的直接反应,因此其不能给出由核反应引起的NIEL.

在采用TRIM程序计算库仑作用引起的NIEL时,首先设置粒子参数和靶材料参数,计算完成后生成IONIZ.txt和VACANCY.txt两个文件.这两个文件把射程划分为100等份.IONIZ.txt给出了每一等份射程内由入射离子和反冲原子分别产生的电离能量损失率.VACANCY.txt给出了每一等份射程内由入射离子和反冲原子分别引起的空位产生率.文献[8]给出了关于NIEL的一种计算方法,根据VACANCY.txt可以得到NIEL随深度的分布,再结合IONIZ.txt可以得到总能量损失随深度的分布,进一步得到入射粒子剩余动能随深度的分布,通过NIEL随深度的分布和总能量损失随深度的分布,最终可得到NIEL与离子能量的关系曲线.但这种方法存在以下问题:一是需要去头尾.采用特定能量入射时NIEL曲线的首尾与解析法的结果相差较大,这是因为在初始时刻入射离子能量较高,在最初的若干等份中入射粒子与靶材料发生的相互作用较少,得不到具有统计意义的结果;而在末尾时,由于将入射离子剩余能量近似作为入射能,因而具有很大的歧离性.二是在低能(不高于10 keV)时,这种方法去头尾后的结果仍与解析法有较大差异.

因此,本文通过使用TRIM计算单能入射质子在薄靶中产生的空位数,并将其换算为NIEL,再除以靶厚度和靶密度得到当前能量质子在硅材料中的NIEL值.这里靶厚选取为当前能量质子连续减速近似(CSDA)射程的5%—10%^[9],这样既可以

使得质子在穿透薄靶后能量损失尽可能少,同时薄靶又足够厚,从而使得蒙特卡罗方法有合理的统计性.通过计算具有不同能量质子的NIEL值得到NIEL与能量的关系曲线.注意到晶体硅中最近两个硅原子的间距为2.7 Å,这意味着靶厚的选择必须至少大于2倍该间距才可能得到有意义的统计信息.因此,根据低能质子在硅中的射程,本文方法能计算质子最低能量为300 eV的情况.

本文分别采用解析方法和TRIM程序计算了能量为300 eV—1 GeV的质子入射硅时由库仑作用引起的NIEL,计算结果如图1所示.图1中Ziegler, Classic, Relativistic, ZBL表示不同的库仑散射计算模型,其中Ziegler表示采用了文献[10]中的计算方法,Classic表示采用了经典卢瑟福散射方程,Relativistic表示在高能段考虑了相对论效应,ZBL表示采用ZBL屏蔽势来考虑库仑相互作用.从图1可以看出,使用TRIM程序的计算结果与采用源自实验的ZBL屏蔽势的解析法的结果符合得较好.

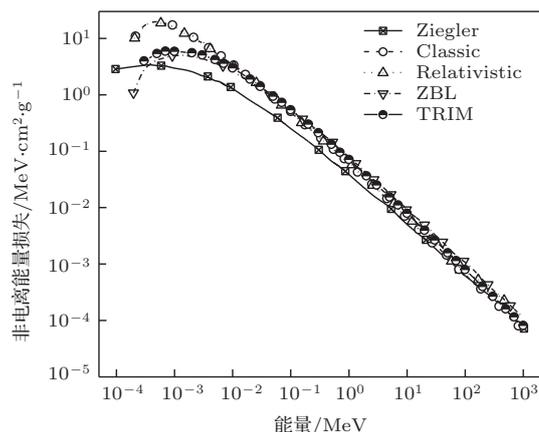


图1 库仑相互作用对NIEL的贡献

3 核反应引起的NIEL计算

采用解析法和TRIM程序计算NIEL时,均没有考虑质子与靶原子核直接作用引起的NIEL.而当入射粒子能量在30—50 MeV时,NIEL主要来自质子与靶原子核的弹性散射和非弹性相互作用,此时必须考虑由核反应引起的NIEL.采用MCN-PX/HTAPE3X程序能够计算得到由核反应引起的NIEL.

MCNPX是一款旨在进行大能量范围内多粒子输运的蒙特卡罗模拟程序,在其2.6.0版本^[11]中,能模拟的粒子类型多达42种,包括中子、质子、 α 粒

子、重离子以及各种轻子和重子等. HTAPE3X^[11]是与MCNPX配合使用的数据后处理程序.

由质子与靶原子核反应产生的NIEL (E_{NIEL})可以表示为

$$\begin{aligned} E_{\text{NIEL}} &= \frac{N_A}{A} \sigma_d = \frac{N_A}{A} \frac{E_d}{N_v x} \\ &= \frac{E_d}{\rho x} = \frac{E_r L(E_r)}{\rho x}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中, N_A 为阿伏伽德罗常数, σ_d 为位移损伤截面, A 为靶原子质量数, N_v 为靶材料的原子密度, ρ 为材料密度(单位为 g/cm^3), x 为靶的厚度(单位为 cm), E_d 为位移损失能量(单位为 MeV), E_r 为反冲核的反冲能, $L(E_r)$ 为Lindhard函数.

Lindhard函数有不同的形式,在HTAPE3X程序中由以下公式计算得到:

$$L(E_r) = \sum_i^n \frac{f_i}{1 + k_i g(\varepsilon_i)}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} k_i &= \frac{0.133745 Z_r^{2/3} Z_i^{1/2} (A_r + A_i)^2}{A_r^{3/2} A_i} \\ &\times \left(\frac{2}{Z_r^{2/3} + Z_i^{2/3}} \right)^{3/4}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$g(\varepsilon_i) = \varepsilon_i + 0.40244 \varepsilon_i^{3/4} + 3.4008 \varepsilon_i^{1/6}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_i = \frac{0.03252 A_i E_r}{(A_r + A_i) Z_r Z_i (Z_r^{2/3} + Z_i^{2/3})^{1/2}}, \quad (5)$$

其中, k_i , ε_i 和 $g(\varepsilon_i)$ 为无量纲量, A_i 和 A_r 分别表示第 i 种靶原子的原子量和反冲核的原子量, Z_i 和 Z_r 分别表示第 i 种靶原子的原子序数和反冲核的原子序数, f_i 为靶材料中的原子数份额.

在采用MCNPX/HTAPE3X程序计算由核反应引起的NIEL时,需采用薄靶近似模型以保持在输运过程中质子能量无显著变化.采用MCNPX可计算得到发生弹性散射和非弹性散射时反冲核的动能,HTAPE3X程序则利用上述结果计算得到相应的位移损失能量 E_d 等参数.通过对大量反冲核的统计计算,利用(1)式得到给定能量质子的NIEL值.改变入射质子能量,即可得到 E_{NIEL} 随能量变化的关系曲线,计算结果如图2所示.从图2可以看出,本文结果与文献[6]计算结果基本一致.在4—1000 MeV能量范围内,质子与硅的非弹性相互作用产生的NIEL占主要部分,且远远大于弹性作用所占的比例,随着入射质子能量的增加,NIEL先上升后下降并趋于平缓.

4 总NIEL

综上所述可知,解析方法和TRIM程序能够给出由库仑作用引起的NIEL,但由于其物理模型中不包含核反应,因此不能给出核反应引起的NIEL;MCNPX/HTAPE3X程序能够给出由核反应引起的NIEL,但由于MCNPX对于质子等重离子的截止能量较高(质子为1 MeV),从而以库仑作用为主的能量区间不能利用MCNPX进行模拟计算,因此其不能给出由库仑作用引起的NIEL.

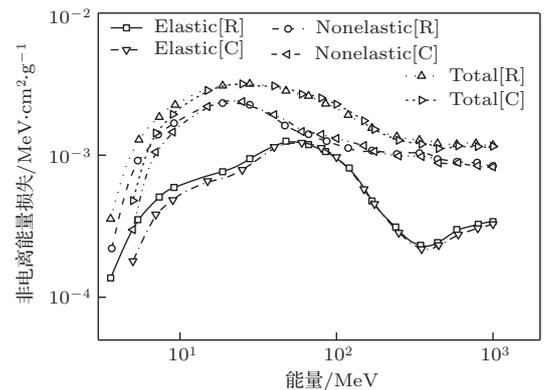


图2 计算得到核相互作用对NIEL的贡献 Elastic表示质子与硅的弹性相互作用产生的NIEL, Nonelastic表示质子与硅的非弹性相互作用产生的NIEL, Total表示质子与硅的弹性相互作用和非弹性相互作用共同产生的NIEL, [R]表示文献[6]计算结果, [C]表示本文计算结果

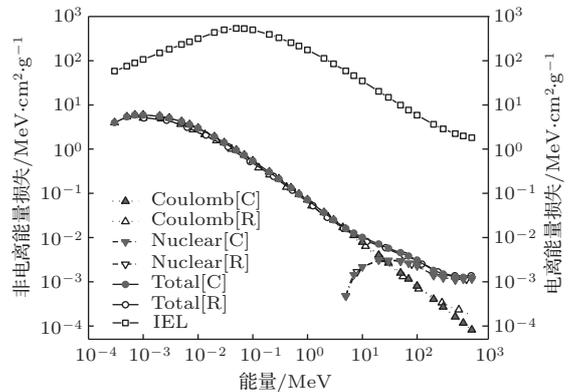


图3 计算得到300 eV—1 GeV质子在硅中的NIEL及电离能量损失(IEL)曲线 Coulomb表示由库仑作用引起的NIEL, Nuclear表示核反应引起的NIEL, Total表示由库仑作用和核反应共同引起的NIEL, [R]表示文献[6]计算结果, [C]表示本文计算结果

综合上述两种方法能够给出总NIEL,计算结果如图3所示.文献[6]使用ZBL屏蔽库仑势考虑低能部分库仑相互作用对NIEL的贡献,在高能部分则采用MCNPX计算核反应的贡献.在计算高能部分时,本文采用的方法与文献[6]采用的方法

类似,但在计算低能部分时采用 TRIM 程序. 这种方法的优点是 TRIM 程序还可以给出产生空位的分布、反冲核分布、粒子径迹等信息. 这对于研究材料辐射损伤是十分重要的,也是解析公式法无法给出的.

从图 3 可以看出,本文计算结果与文献 [6] 计算结果符合得较好. 比较图 3 的各条曲线可知,在低能部分库仑相互作用对 NIEL 的贡献占主导地位,并且随着入射质子能量的增加, NIEL 基本呈下降趋势,范围在 10^{-2} — 10 MeV·cm²/g 之间. 在 高能部分核的弹性相互作用和非弹性相互作用

对 NIEL 起到关键作用,但量级很小,基本在 10^{-4} — 10^{-2} MeV·cm²/g 之间.

图 3 还给出了质子在硅中的电离能损曲线. 从图 3 还可以看出,随着入射质子能量的逐渐增大, NIEL 占总能量损失的份额越来越小. 当质子能量高于 7 keV, NIEL 的份额低于 1%, 电离能损成为入射质子最主要的能量损失方式. 各能量质子穿透薄靶 (CSDA 射程的 5% 或 10%) 后的 NIEL 所占份额列于表 1. 由表 1 可知,质子的 NIEL 占总能损的比例很小. 在 高能部分其能量损失的主要方式是电离能量损失.

表 1 质子穿透薄靶后 NIEL 占总能损的份额

质子能量/keV	射程/ μm	靶厚/ μm	NIEL 比例/%
3.00×10^{-1}	6.30×10^{-3}	6.30×10^{-4}	1.98
5.00×10^{-1}	9.70×10^{-3}	9.70×10^{-4}	1.79
7.00×10^{-1}	1.29×10^{-2}	6.45×10^{-4}	1.72
1.00	1.77×10^{-2}	8.85×10^{-4}	1.77
3.00	4.74×10^{-2}	2.37×10^{-3}	1.32
5.00	7.43×10^{-2}	3.72×10^{-3}	1.07
7.00	9.94×10^{-2}	4.97×10^{-3}	8.98×10^{-1}
1.00×10^1	1.34×10^{-1}	6.71×10^{-3}	7.10×10^{-1}
3.00×10^1	3.16×10^{-1}	1.58×10^{-2}	2.56×10^{-1}
5.00×10^1	4.70×10^{-1}	2.35×10^{-2}	1.66×10^{-1}
7.00×10^1	6.25×10^{-1}	3.12×10^{-2}	1.32×10^{-1}
1.00×10^2	8.69×10^{-1}	4.35×10^{-2}	1.05×10^{-1}
3.00×10^2	3.02	1.51×10^{-1}	6.28×10^{-2}
5.00×10^2	5.99	3.00×10^{-1}	5.06×10^{-2}
7.00×10^2	9.67	4.84×10^{-1}	4.39×10^{-2}
1.00×10^3	1.63×10^1	8.17×10^{-1}	3.99×10^{-2}
3.00×10^3	9.21×10^1	4.60	2.91×10^{-2}
5.00×10^3	2.16×10^2	1.08×10^1	2.59×10^{-2}
7.00×10^3	3.83×10^2	1.92×10^1	2.40×10^{-2}
1.00×10^4	7.09×10^2	3.55×10^1	2.23×10^{-2}
3.00×10^4	4.91×10^3	2.46×10^2	1.77×10^{-2}
5.00×10^4	1.22×10^4	6.09×10^2	1.56×10^{-2}
7.00×10^4	2.22×10^4	1.11×10^3	1.48×10^{-2}
1.00×10^5	4.16×10^4	2.08×10^3	1.34×10^{-2}
3.00×10^5	2.74×10^5	1.37×10^4	9.27×10^{-3}
5.00×10^5	6.20×10^5	3.10×10^4	7.11×10^{-3}
7.00×10^5	1.03×10^6	5.15×10^4	5.82×10^{-3}
1.00×10^6	1.72×10^6	8.60×10^4	4.48×10^{-3}

5 结 论

本文通过解析方法和 TRIM 程序计算了质子入射硅时由库仑作用引起的 NIEL, 采用 MCNPX/HTAPE3X 程序计算得到了在 高能部分由核反应引起的 NIEL, 实现了 300 eV—1 GeV 能量的质子入射硅时总 NIEL 的计算, 计算得到的结果与相关文献符合得较好. 本文提供的方法可以推广到不同重离子 (如 α 粒子) 入射不同材料的 NIEL 研究.

参考文献

- [1] Akkerman A, Barak J, Chadwick M B, Levinson J, Murat M, Lifshitz Y 2001 *Radiat. Phys. Chem.* **62** 301
- [2] Summers G P, Burke E A, Shapiro P, Messenger S R, Walters R J 1993 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **40** 1372
- [3] Jun I 2001 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **48** 162
- [4] Luo W Y, Wang C Z, He X F, Fan S, Huang X L, Wang C S 2006 *High Energy Phys. Nucl. Phys.* **30** 1088 (in Chinese)[罗文芸, 王朝壮, 贺新福, 樊胜, 黄小龙, 王传珊 2006 高能物理与核物理 **30** 1088]
- [5] Tang X X, Luo W H, Wang C Z, He F X, Zha Y Z, Fan S, Huang X L, Wang C S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1266 (in Chinese)[唐欣欣, 罗文芸, 王朝壮, 贺新福, 查元梓, 樊胜, 黄小龙, 王传珊 2008 物理学报 **57** 1266]
- [6] Jun I, Xapos M A, Messenger S R, Burke E A, Walters R J, Summer G P, Jordan T 2003 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50** 1924
- [7] Messenger S R, Burke E A, Xapos M A, Summers G P, Walters R J, Jun I, Jordan T 2003 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50** 1919
- [8] Messenger S R, Burke E A, Summers G P, Xapos M A, Walters R J, Jackson E M, Weaver B D 1999 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **46** 1595
- [9] Jun I, Xapos M A, Burke E A 2004 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **51** 3207
- [10] Fudan Univ., Tsinghua Univ., Peking Univ. 1997 *Experimental Method of Nuclear Physics* (Beijing: Atomic Energy Press) p47 (in Chinese) [复旦大学, 清华大学, 北京大学 1997 原子核物理实验方法 (北京: 原子能出版社) 第 47 页]
- [11] Pelowitz D B 2008 *MCNPX User's Manual Version 2.6.0* (Los Alamos: Los Alamos National Laboratory)

Numerical investigation of non-ionizing energy loss of proton at an energy range of 300 eV to 1 GeV in silicon*

Zhu Jin-Hui^{1)2)†} Wei Yuan¹⁾²⁾ Xie Hong-Gang¹⁾²⁾ Niu Sheng-Li¹⁾²⁾ Huang Liu-Xing¹⁾

1) (Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China)

2) (State Key Laboratory of Intense Pulsed Radiation Simulation and Effect, Xi'an 710024, China)

(Received 22 September 2013; revised manuscript received 28 November 2013)

Abstract

The displacement damage due to non-ionizing energy loss (NIEL) is the main reason of photo-electronic device failure in space radiation environment. The basic mechanisms of NIEL are Coulomb and nuclear interactions of silicon atoms with incident protons at energies ranging from threshold to 1 GeV. In the low energy region where the Coulomb interaction is dominant, the NIEL can be calculated by analytical method and TRIM code. MCNPX/HTAPE3X is used to calculate NIEL when the nuclear elastic and non-elastic interactions between proton and target atoms are significant in the high energy range. The results show that it is reasonable to use MCNPX/HTAPE3X to evaluate the NIEL by recoiling nucleus caused by high energy protons. The combination of analytical method and TRIM code can calculate NIEL induced by Coulomb interaction in low energy range, which gives the NIEL of proton in silicon in an energy range from 300 eV to 1 GeV.

Keywords: proton, non-ionization energy loss, Coulomb interaction, nuclear interaction

PACS: 61.80.-x, 24.10.Lx, 25.40.Cm, 25.40.Ep

DOI: [10.7498/aps.63.066102](https://doi.org/10.7498/aps.63.066102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11175271).

† Corresponding author. E-mail: prodigyjh@163.com