

硅单粒子位移损伤多尺度模拟研究

唐杜 贺朝会 臧航 李永宏 熊涔 张晋新 张鹏 谭鹏康

Multi-scale simulations of single particle displacement damage in silicon

Tang Du He Chao-Hui Zang Hang Li Yong-Hong Xiong Cen Zhang Jin-Xin Zhang Peng Tan Peng-Kang

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 084209 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.084209

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.084209>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于 4 晶体管像素结构的互补金属氧化物半导体图像传感器总剂量辐射效应研究

Total ionizing dose radiation effects in four-transistor complementary metal oxide semiconductor image sensors

物理学报.2016, 65(2): 024212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.024212>

质子与中子辐照对电荷耦合器件暗信号参数的影响及其效应分析

Effects of proton and neutron irradiation on dark signal of CCD

物理学报.2015, 64(19): 194208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194208>

In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子阱与体材料的 1 MeV 电子束辐照光致发光谱研究

Photoluminescence spectra of 1 MeV electron beam irradiated In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum well and bulk materials

物理学报.2015, 64(15): 154217 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154217>

电荷耦合器件在质子辐照下的粒子输运仿真与效应分析

Particle transport simulation and effect analysis of CCD irradiated by protons

物理学报.2015, 64(11): 114214 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.114214>

质子辐射下互补金属氧化物半导体有源像素传感器暗信号退化机理研究

Dark signal degradation in proton-irradiated complementary metal oxide semiconductor active pixel sensor

物理学报.2015, 64(8): 084209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.084209>

硅单粒子位移损伤多尺度模拟研究*

唐杜 贺朝会[†] 臧航 李永宏 熊涔 张晋新 张鹏 谭鹏康

(西安交通大学核科学与技术学院, 西安 710049)

(2015年9月1日收到; 2015年12月27日收到修改稿)

本文结合分子动力学方法和动力学蒙特卡罗方法, 研究了单个粒子入射硅引起的位移损伤缺陷的产生和演化过程; 基于 Shockley-Read-Hall 理论计算了单个粒子入射引起的位移损伤缺陷导致的泄漏电流增加及其演化过程, 比较了缺陷退火因子与泄漏电流退火因子之间的差异, 并将计算结果与实验值进行了对比. 结果表明, 计算泄漏电流时, 仅考虑一种缺陷的情况下缺陷退火因子与泄漏电流退火因子相同, 考虑两种缺陷类型情况下二者在数值上有所区别, 但缺陷退火因子仍能在一定程度上反映泄漏电流的退火行为. 分子动力学模拟中采用 Stillinger-Weber 势函数和 Tersoff 势函数时缺陷退火因子和泄漏电流退火因子与实验结果一致, 基于 Stillinger-Weber 势函数的计算结果与实验值更为接近.

关键词: 位移损伤, 缺陷, 退火因子, 泄漏电流**PACS:** 42.88.+h, 61.72.Cc, 61.80.-x, 85.30.-z**DOI:** 10.7498/aps.65.084209

1 引言

空间环境中的载能粒子入射到航天器的电子系统中, 以电离或非电离方式沉积能量, 在半导体器件中引起多种辐射效应, 严重影响航天器的可靠性和寿命^[1-3]. 其中, 载能粒子沉积非电离能量能够在器件中产生位移损伤缺陷, 在材料禁带中引入缺陷能级, 它们具有俘获和发射载流子的能力^[3-7]. 当缺陷能级位于禁带中心附近时, 这些缺陷将成为有效的载流子产生-复合中心. 泄漏电流作为反映器件性能的重要参数, 直接受到位移损伤缺陷的影响^[8,9]. 在超低泄漏电流二极管^[10,11]及图像传感器^[12]中, 单个粒子入射到器件的敏感区能够使泄漏电流增加到不可接受的状态. 这种低剂量率辐照条件下单个粒子入射产生的电学性能退化被称为单粒子位移损伤(single particle displacement damage, SPDD)效应^[10-12].

由于位移损伤的产生及演化过程跨越多个时间尺度, 要充分理解单粒子位移损伤电流的产生

及其退火行为, 需要采用多种方法相结合进行研究. 对长时间辐照引起的累积位移损伤, 可采用 NIEL(non-ionizing energy loss)标尺理论预测器件受到的位移损伤, 然而 NIEL 标尺不适用于低剂量率辐照诱导的位移损伤效应的评估和预测^[10,11]. BCA 方法被广泛用于模拟入射粒子在半导体器件中的非电离能量沉积分布, 然而 BCA 方法未考虑碰撞原子与周围其他原子之间的相互作用, 只适用于描述 100 eV 以上能量的弹性碰撞过程. 多体相互作用在低能碰撞过程中变得明显, 这导致 BCA 方法在描述级联碰撞引起的缺陷空间分布方面略显不足^[14]. 分子动力学(molecular dynamics, MD)方法能够精确描述多体之间的相互作用, 凸显出其在级联碰撞模拟方面的优势. 20世纪90年代后, 许多研究者采用 MD 方法对硅中的级联碰撞过程进行了大量模拟研究^[13-16], 但 MD 方法只适用于 nm 空间尺度和 ps 时间的模拟计算, 其模拟结果难以与宏观的实验结果进行比较. 近年来, 有诸多研究采用了动力学蒙特卡罗(kinetic Monte

* 国家自然科学基金(批准号: 11175138)、国家自然科学基金重点项目(批准号: 11235008)、国家重点实验室项目(批准号: 20140134)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20130201120090)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: hechaohui@mail.xjtu.edu.cn

Carlo, KMC)方法来模拟离子注入引起损伤的退火行为^[17,18]. 随着计算机技术的飞速发展,采用MD和KMC结合的多尺度模拟研究位移损伤效应的方法也越来越受到关注^[19],但国内外尚未见到将MD和KMC方法相结合模拟硅的辐照位移损伤并利用位移损伤模拟结果来估计硅器件的电学参数变化的相关报道.

本文以有源像素传感器(active pixel sensor, APS)中的光电二极管为研究对象,采用多尺度模拟方法研究了中子辐照在耗尽区中产生的PKA引起的SPDD电流退火行为. 首先采用分子动力学方法对ps时间量级的级联碰撞过程进行了研究;然后,将MD计算结果作为输入参数引入KMC模拟中,研究了位移损伤缺陷在硅中的长时间演化过程,通过两种方法的结合,基于Shockley-Read-Hall(SRH)理论详细地分析了位移损伤缺陷的产生和演化对器件泄漏电流的产生和演化过程的影响;最后对APS二极管中的单粒子位移损伤电流的退火行为进行了研究. 特别地,本文中的辐射诱导泄漏电流是指无光照条件下反偏二极管由于辐照引起的反向电流增加的份额.

2 位移损伤缺陷产生与演化过程的多尺度模拟

2.1 级联碰撞模拟条件设置

采用美国Sandia国家实验室开发的分子动力学程序LAMMPS^[20]对级联碰撞过程进行模拟. 硅原子之间的相互作用采用Tersoff势函数^[21]进行描述,短程相互作用采用Ziegler-Biersack-Littmark势函数^[22]进行描述. 选取了三个能量点的初级撞出原子(primary knock-on atom, PKA)作为入射粒子,分别为2, 5和10 keV,对应的模拟体系大小分别为 $28a_0 \times 28a_0 \times 25a_0$, $40a_0 \times 40a_0 \times 28a_0$, $50a_0 \times 50a_0 \times 40a_0$,对模拟体系中除上表面(即(001)面)以外的最外 $4a_0$ 厚度的原子采用Langevin热浴控温,内部级联碰撞区采用正则系综. 体系上表面为自由表面, x , y 和 z 方向均采用周期性边界条件以减小尺寸效应. 本文对级联碰撞过程的模拟采用分阶段变步长的方法^[23]: 1)初始碰撞阶段,时长0.3 ps,时间步长为0.01 fs; 2)中间弛豫阶段,时长5 ps,时间步长为0.1 fs; 3)最终平衡阶段,时长200 ps,时间步长为1 fs.

因此,本文选取的级联碰撞及演化模拟的总时长为205.3 ps. 对于每一个能量点PKA入射,重复六次模拟.

采用最近邻原子判据(nearest neighbor criterion, NN判据)^[13,15]提取间隙原子(I)和空位(V)缺陷的位置信息. 基于NN判据采用FORTRAN编程提取缺陷坐标信息后,这些信息作为KMC模拟的输入参数对缺陷的长时间演化行为进行模拟.

2.2 KMC计算条件设置

采用KMC软件MMonCa^[18,24]对缺陷的长时间演化行为进行模拟计算,模拟体系大小为 $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$,对 x , y 和 z 方向均采用周期性边界条件. 对于I和V两种类型的缺陷,模拟的事件包括迁移、复合、发射和解离,所有事件的发生频率遵从Arrhenius方程^[18]:

$$\nu_{ij} = \nu_0 \cdot \exp[-E_{ij}/(k_B T)], \quad (1)$$

其中, ν_0 为指前因子, E_{ij} 为某粒子从状态 i 转变为状态 j 所需越过的势垒. 与所有事件相关的参数及验证见文献^[18].

3 辐射诱导的泄漏电流及其退火行为

少数载流子寿命代表了某种载流子在复合之前存在的平均时间. 根据SRH理论,缺陷对少子寿命的影响采用(2)式进行计算^[11]:

$$\tau_{n,p} = (\nu_{th} \sigma_{n,p} N_t)^{-1}, \quad (2)$$

其中, ν_{th} 表示载流子热运动速度, $\sigma_{n,p}$ 表示缺陷对电子(空穴)的俘获截面, N_t 表示缺陷密度. 首先考虑辐射引起仅一种缺陷的产生情况. 假设辐照前体积为 Ax_d 的耗尽区内存在 N_d 个缺陷,则载流子寿命采用(3)式、(4)式进行计算:

$$\tau_n^{-1} = \nu_{th} \sigma_n \frac{N_d}{Ax_d}, \quad (3)$$

$$\tau_p^{-1} = \nu_{th} \sigma_p \frac{N_d}{Ax_d}, \quad (4)$$

在耗尽区中产生的缺陷将在很长时间内发生演化,因此缺陷的数目不是固定值,而是随时间变化的量,因此载流子寿命也随着时间发生变化. 考虑缺陷随时间的演化,引入时间量 t ,则粒子入射后 t 时刻少子寿命采用(5)式、(6)式进行计算:

$$\tau_n^{-1}(t) = \nu_{th} \sigma_n \frac{N_d + N'_d(t)}{Ax_d}, \quad (5)$$

$$\tau_p'^{-1}(t) = v_{th}\sigma_p \frac{N_d + N_d'(t)}{Ax_d}, \quad (6)$$

其中, $N_d'(t)$ 表示粒子入射后 t 时刻缺陷数目的增加量. 载流子产生寿命 (generation lifetime) 代表了载流子从缺陷中发射的速率^[11]. 粒子入射到耗尽区后缺陷数目的变化将影响载流子产生寿命. 考虑载流子发射的电场增强效应时, 粒子入射前和入射后载流子产生寿命分别采用 (7) 式和 (8) 式进行计算^[11]:

$$\tau_g = \tau_n \exp \left[\frac{E_i - (E_t + \delta E_{act,n})}{k_B T} \right] + \tau_p \exp \left[\frac{(E_t - \delta E_{act,p}) - E_i}{k_B T} \right], \quad (7)$$

$$\tau_g'(t) = \tau_n'(t) \exp \left[\frac{E_i(E_t + \delta E_{act,n})}{k_B T} \right] + \tau_p'(t) \exp \left[\frac{(E_t - \delta E_{act,p}) - E_i}{k_B T} \right], \quad (8)$$

其中, E_t 和 E_i 分别表示缺陷能级和本征能级; k_B 是玻尔兹曼常量; T 是热力学温度; $\delta E_{act,n(p)}$ 表示电场引起的载流子从缺陷中发射所需势垒的降低量, 采用 $\delta E_{act,n,p} = \sqrt{q\varepsilon/(\pi\varepsilon_{Si})}$ 进行计算^[25], 其中 q 表示基本电荷, ε 表示电场, ε_{Si} 表示硅材料介电常数. 在一个反偏二极管中, 电流成分包括中性区的扩散电流及耗尽区的产生电流. 由于耗尽区存在电场, 粒子在材料中形成缺陷后, 在耗尽区中形成的缺陷对泄漏电流的贡献远大于中性区中的缺陷的贡献^[11], 因此仅考虑耗尽区内的缺陷对泄漏电流的贡献, 计算公式为^[11]

$$I_R = \frac{qn_i Ax_d}{\tau_g}. \quad (9)$$

对粒子入射前后的泄漏电流求差即可计算单个粒子入射引起的位移损伤电流增加量, 称为 SPDD 电流, 用 (10) 式表示^[11]:

$$I_{SPDD}(t) = \Delta I_R(t) = qn_i Ax_d \left[\frac{1}{\tau_g'(t)} - \frac{1}{\tau_g} \right]. \quad (10)$$

前文已用 MD 方法和 KMC 方法耦合模拟了缺陷的产生和演化过程, 结合 (10) 式可以获得不同时刻的 SPDD 电流, 因而能够计算 SPDD 电流随时间的演化过程. 采用 (11) 式计算 SPDD 电流的归一化退火因子^[12]:

$$AF_{SPDD}(t) = \frac{I(t) - I(0)}{I(t_n) - I(0)} = \frac{\Delta I(t)}{\Delta I(t_n)} = \frac{I_{SPDD}(t)}{I_{SPDD}(t_n)}, \quad (11)$$

其中, $I_{SPDD}(t)$ 表示粒子入射后 t 时刻缺陷引起的 SPDD 电流, $I_{SPDD}(t_n)$ 表示 t_n 时刻的 SPDD 电流. 通过 (11) 式的定义, 将 SPDD 电流归一化到 t_n 时刻, 由此可以比较每次粒子入射后 SPDD 电流的退火行为. 类似地, 定义缺陷的归一化退火因子:

$$AF_d(t) = \frac{N_d'(t) - N_d(0)}{N_d'(t_n) - N_d(0)} = \frac{N_d'(t)}{N_d'(t_n)}. \quad (12)$$

(2) 式—(10) 式是仅考虑一种缺陷类型时所作的推导. 然而, 入射粒子入射引起的位移损伤主要是通过使原子移位实现的, 因此粒子入射后至少存在两种缺陷, 即间隙原子和空位. 这两种缺陷为单粒子位移损伤过程中的主要缺陷, 在计算 SPDD 电流时主要考虑这两种缺陷的共同作用, 则 (3) 式、(4) 式分别改写为 (13) 式和 (14) 式:

$$\tau_n^{-1} = v_{th}\sigma_{n,vac} \frac{N_{vac}}{Ax_d} + v_{th}\sigma_{n,int} \frac{N_{int}}{Ax_d}, \quad (13)$$

$$\tau_p^{-1} = v_{th}\sigma_{p,vac} \frac{N_{vac}}{Ax_d} + v_{th}\sigma_{p,int} \frac{N_{int}}{Ax_d}, \quad (14)$$

其中, $\sigma_{n,vac(int)}$ 表示空位 (间隙原子) 缺陷对电子的俘获截面, $\sigma_{p,vac(int)}$ 表示空位 (间隙原子) 缺陷对空穴的俘获截面, N_{vac} , N_{int} 分别表示辐照前耗尽区空位缺陷和间隙原子缺陷的数目. 采用 (15) 式、(16) 式计算粒子入射后载流子寿命^[11]:

$$\tau_n'^{-1}(t) = v_{th}\sigma_{n,vac} \frac{N_{vac} + N_{vac}'(t)}{Ax_d} + v_{th}\sigma_{n,int} \frac{N_{int} + N_{int}'(t)}{Ax_d}, \quad (15)$$

$$\tau_p'^{-1}(t) = v_{th}\sigma_{p,vac} \frac{N_{vac} + N_{vac}'(t)}{Ax_d} + v_{th}\sigma_{p,int} \frac{N_{int} + N_{int}'(t)}{Ax_d}, \quad (16)$$

其中, $N_{vac}'(t)$, $N_{int}'(t)$ 分别表示粒子入射后 t 时刻耗尽区中增加的空位缺陷和间隙原子缺陷数目. 在考虑两种缺陷的情况下, 载流子产生寿命计算公式改写为 (17) 式所示形式:

$$\frac{1}{\tau_g} = \frac{1}{\tau_{g,int}} + \frac{1}{\tau_{g,vac}}, \quad (17)$$

式中, 等式右边的分母项需分别单独采用 (7) 式及 (8) 式进行计算, E_t 分别采用对应的 E_{vac} 和 E_{int} 代入式中进行计算. 最后, 采用 (10) 式计算 SPDD 电流, 计算中所采用的参数及取值见表 1^[26]. 表中, E_c , E_v 分别代表导带底能量和价带顶能量.

表1 计算SPDD电流的参数

Table 1. Parameters used in the calculations of SPDD currents.

参数	值	参数	值
ϵ_{Si}	11.8	$\sigma_{n,vac}/cm^2$	9×10^{-16} [26]
$\epsilon_0/F \cdot cm^{-1}$	8.85×10^{-14}	$\sigma_{p,vac}/cm^2$	9×10^{-16} [26]
q/C	1.6×10^{-19}	$\sigma_{n,int}/cm^2$	2×10^{-15} [26]
$k_B/J \cdot K^{-1}$	1.38×10^{-23}	$\sigma_{p,int}/cm^2$	1×10^{-13} [26]
$\nu_{th}/cm \cdot s^{-1}$	1×10^7	E_{int}/eV	$E_c - 0.44$ [26]
π	3.1416	E_{vac}/eV	$E_v + 0.47$ [26]
n_i/cm^{-3}	1.45×10^{10}	E_i/eV	$E_c - 0.56$

4 结果及讨论

图1示出了一个10 keV PKA入射硅产生的缺陷在不同时刻的空间分布. 图2给出了2 keV PKA入射硅产生的缺陷数目随时间的变化(每个能量点进行6次计算), 5和10 keV PKA入射的情况类似, 只是缺陷数目上有所差别, 因此文中未示出.

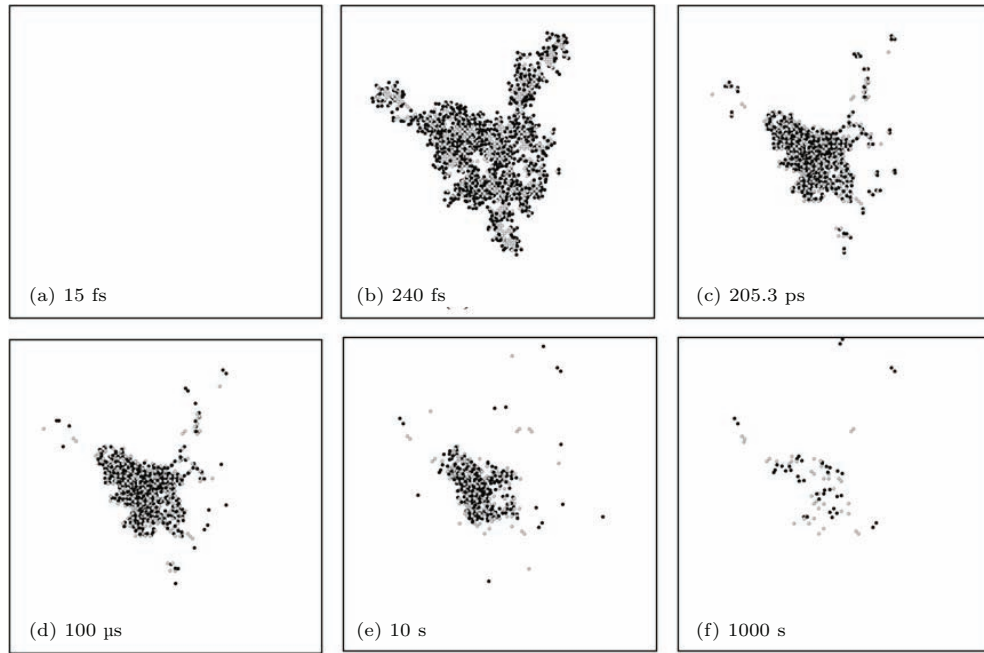


图1 一个10 keV PKA入射硅在不同时刻位移损伤缺陷形态俯视图 (a)—(c): MD 计算结果; (d)—(f): KMC 计算结果
 Fig. 1. Topviews of displacement defects induced by a PKA with energy of 10 keV: Results extracted from (a)—(c): MD simulation; (d)—(f): KMC simulation.

图4示出了10 ms—1000 s时间内2 keV PKA入射产生的缺陷归一化退火因子(实线)和SPDD电流归一化退火因子(虚线). 从图4中可见, 两种退火因子存在一定差别. 类似地, 5和10 keV

图1和图2中, $t \leq 205.3$ ps的数据来源于MD计算结果, $t > 205.3$ ps的数据来源于KMC计算结果. 由图1可见, 从MD模拟衔接至KMC模拟时, 缺陷的形态并未发生明显变化, 且图2中MD和KMC模拟衔接处(205.3 ps)缺陷数目并未发生变化, 说明MD模拟和KMC模拟衔接效果较好. 从图2可知, MD模拟级联碰撞过程中缺陷数目在0.2 ps左右达到峰值, 而后迅速恢复, 约2 ps即趋于稳定, 这与Nordlund等模拟的结果相符[15]. 在随后的缺陷长时间演化中, 缺陷数目约在10 ms后发生显著下降, 这一过程持续数十秒至数千秒. 图3给出了基于MD和KMC模拟结果的SPDD电流的产生和演化计算结果. 对比图2和图3可以看出, SPDD电流与缺陷数目随时间演化的曲线具有相似的形状, 但仔细对比可发现, 曲线形状并不完全相同, 而是有着细微的差别. 为了进一步探讨SPDD电流的退火行为和缺陷退火行为之间的区别和联系, 基于(11)式和(12)式分别计算了SPDD电流归一化退火因子和缺陷归一化退火因子, 归一化时刻 $t_n = 100$ s, 并将两种退火因子进行比较.

PKA入射条件下的两种退火因子也具有微小的差别, 因此文中未予示出. 本文在(2)式—(9)式中推导了仅考虑一种缺陷类型时引起SPDD电流的计算公式, 通过公式推导可以证明这种情况下

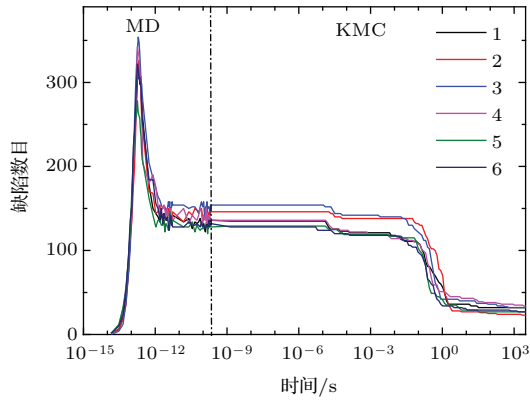


图2 (网刊彩色) 缺陷数目随时间的变化
Fig. 2. (color online) The number of defects evolves with time.

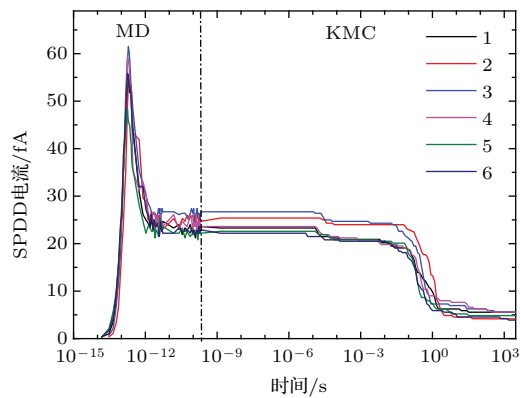


图3 (网刊彩色) SPDD 电流随时间的变化
Fig. 3. (color online) The SPDD currents evolve with time.

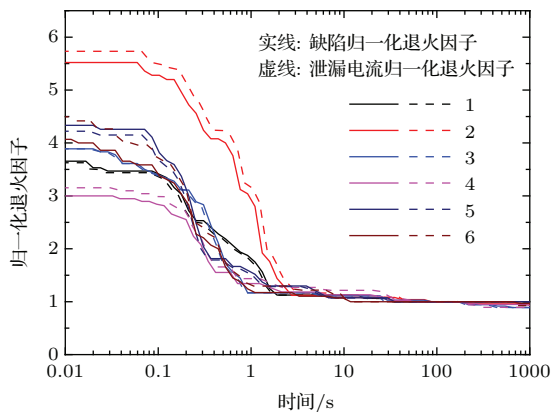


图4 (网刊彩色) 2 keV PKA 入射条件下缺陷和 SPDD 电流归一化退火因子
Fig. 4. (color online) Normalized annealing factors of defects and SPDD currents for the case of 2 keV PKA.

$AF_{SPDD}(t) = AF_d(t)$. 因此, 仅考虑一种缺陷时, SPDD 电流退火行为与缺陷退火行为是一致的, SPDD 电流增加量与缺陷数目成正比关系. 当考虑两种及两种以上缺陷类型时, 由于不同缺陷类型

的数目、载流子俘获截面和缺陷能级均不相同, 而 SPDD 电流不仅与缺陷数目有关, 还与载流子俘获截面和缺陷能级有关, 因此 SPDD 电流与缺陷数目不是简单的正比关系, 且 $AF_{SPDD}(t) \neq AF_d(t)$. 图 5 给出了对 2, 5 和 10 keV PKA 入射后的缺陷归一化退火因子和 SPDD 电流归一化退火因子求平均后的结果. 从图中可见, 两种退火因子虽然有一定差别, 但是差异很小, 因此缺陷退火因子能够较好地反映 SPDD 电流的退火行为.

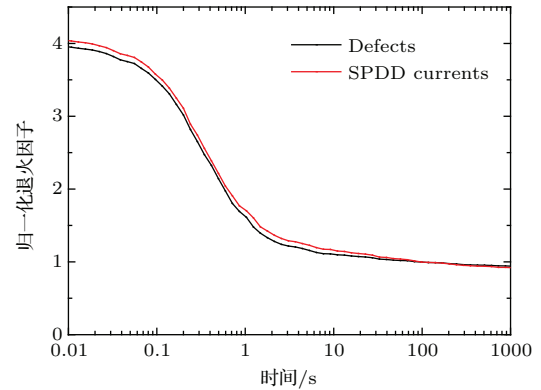


图5 (网刊彩色) 缺陷和 SPDD 电流平均归一化退火因子
Fig. 5. (color online) The mean normalized annealing factors of defects and SPDD currents.

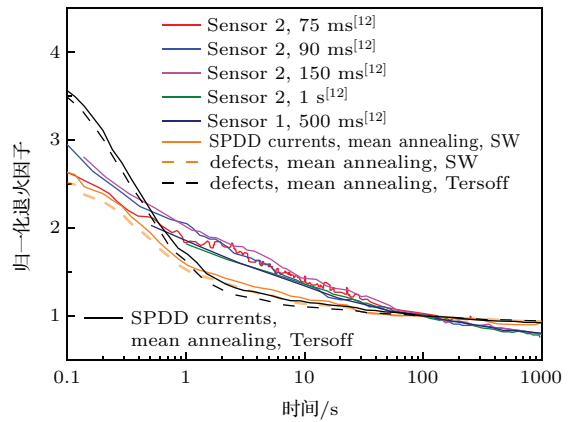


图6 (网刊彩色) 基于 Tersoff 势函数与 SW 势函数的计算结果与实验结果比较
Fig. 6. (color online) The normalized annealing factors based on MD simulations with Tersoff potential and SW potential compared with experimental results.

将本文中计算的 $AF_{SPDD}(t)$ 和 $AF_d(t)$ 平均值与 Ranie 等^[12] 采用中子辐照 APS 在二极管中引起的单粒子位移损伤电流实验结果进行比较, 并将之前基于 Stillinger-Weber (SW) 势函数的级联碰撞 MD 模拟结合 KMC 模拟的计算结果^[27] 与之对比, 如图 6 所示. 从图中可知, 不同实验条件下的 SPDD 电流归一化退火因子初始值介于 2.5—3 之

间, 基于 Tersoff 势函数和基于 SW 势函数计算的结果与实验结果都较为符合. 相比之下, 基于 SW 势函数的计算结果与实验结果更为接近, 偏小约 10%; 基于 Tersoff 势函数计算的退火因子初始值约为 3.5, 而后缺陷和 SPDD 电流退火速度与实验结果相比更快, 约 0.5 s 后基于 Tersoff 势函数的计算结果与实验结果相比偏小, 与基于 SW 势函数的计算结果接近. 从图 6 还可知, 基于 SW 势函数的计算结果中的退火因子与实验结果相比, 小于 1 s 时与实验结果较为接近, 而 1—10 s 范围内退火略快于实验结果, 但相差不大. 类似于基于 Tersoff 势函数的计算结果, 基于 SW 势函数的计算结果中两种退火因子也相差不大.

分析计算结果与实验结果出现偏差的原因如下.

1) 计算中假设耗尽区内电场分布是均匀的, 实验中器件的耗尽区内的电场分布是非均匀的, 在具有不同电场的耗尽区的缺陷对电流的贡献不同, 不同区域的缺陷的形态演化可能不同; 此外, 电场可能对部分缺陷的演化行为产生影响, 而本文的计算忽略了电场对缺陷演化的影响.

2) 公式推导过程中假设仅存在 I 和 V 两种缺陷, 而没有考虑更复杂的缺陷对 SPDD 电流的影响. 由于粒子碰撞具有随机性, 因此每次粒子入射产生的缺陷的形态和空间分布是不同的, 这些缺陷的形态和数目与时间相关: 一方面, 位移损伤的形成和初步演化发生在 ps 时间量级, 导致采用实验手段难以观测到缺陷的形成和初始演化行为; 另一方面, 缺陷与缺陷之间的距离较小时会发生相互作用, 且单粒子入射条件下缺陷数目不多, 这进一步增加了采用实验手段获取单粒子位移损伤缺陷形态演化信息的难度. 因此, 本文计算 SPDD 电流时未考虑复杂缺陷的影响, 这可能造成模拟结果与实验结果出现偏差.

3) SPDD 电流长时间演化的计算结果直接受到 KMC 计算结果的影响, KMC 参数的选取不当可能引起模拟结果与实验结果的偏差. KMC 计算的参数主要来源于实验和第一原理计算结果, 而某一参数在不同文献中报道的值也不相同. 例如, 硅间隙原子的形成能的值介于 2.5—5.6 eV^[28] 之间, 空位的形成能的值介于 2—4 eV^[28] 之间, 选取不同值所计算的结果也会不同, 因此 KMC 计算参数的选择也是一个重要方面.

5 结 论

本文基于 MD 和 KMC 方法建立了单粒子位移损伤缺陷产生和演化多尺度模拟方法, 推导了单粒子位移损伤泄漏电流计算公式, 并基于 MD 和 KMC 多尺度模拟结果计算了 keV 量级 PKA 在耗尽区中产生的位移损伤缺陷引起的单粒子位移损伤泄漏电流. 研究表明, 考虑两种及两种以上缺陷类型对 SPDD 电流的影响时, SPDD 电流退火因子和缺陷退火因子在数值上接近, 但有一定区别. 缺陷退火因子能够在一定程度上反映 SPDD 电流的退火行为. 采用本文计算的 SPDD 电流退火因子与实验值一致, 基于 SW 势函数计算的结果比基于 Tersoff 势函数计算的结果更接近实验值.

感谢西班牙 IMDEA 材料研究所 I. Martin-Bragado 研究员在 KMC 模拟方面提供的指导和帮助, 感谢西班牙 Alicante 大学 M. J. Caturla 教授及美国 Los Alamos 国家实验室陈迪博士在 MD 模拟方面的有益讨论.

参考文献

- [1] Zhang Z G, Liu J, Hou M D, Sun Y M, Zhao F Z, Liu G, Han Z S, Geng C, Liu J D, Xi K, Duan J L, Yao H J, Mo D, Luo J, Gu S, Liu T Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 096103
- [2] Yu J T, Chen S M, Chen J J, Huang P C 2015 *Chin. Phys. B* **24** 119401
- [3] Bogaerts J, Dierickx B, Mertens R 2002 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **49** 1513
- [4] Goiffon V, Magnan P, Saint-Pé O, Bernard F, Rolland G 2009 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **610** 225
- [5] Battaglia M, Bisello D, Contarato D, Denes P, Doering D, Giubilato P, Kim T S, Mattiazoc S, Radmilovic V, Zaluskya S 2010 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **624** 425
- [6] Virmontois C, Goiffon V, Magnan P, Girard S, Inguimbert C, Petit S, Rolland G, Saint-Pé O 2010 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **57** 3101
- [7] Doering D, Deveaux M, Domachowska M, Dritsaa C, Froehlich I, Koziela M, Muentza C, Ottersbach S, Wagner F M, Strotha J 2011 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **658** 133
- [8] Wang Z J, Tang B Q, Xiao Z G, Liu M B, Huang S Y, Zhang Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4136 (in Chinese) [王祖军, 唐本奇, 肖志刚, 刘敏波, 黄绍艳, 张勇 2010 物理学报 **59** 4136]

- [9] Zeng J Z, Li Y D, Wen L, He C F, Guo Q, Wang B, Ma L Y, Wei Y, Wang H J, Wu D Y, Wang F, Zhou H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 194208 (in Chinese) [曾骏哲, 李豫东, 文林, 何承发, 郭旗, 汪波, 玛丽娅, 魏莹, 王海娇, 武大猷, 王帆, 周航 2015 物理学报 **64** 194208]
- [10] Auden E C, Weller R A, Mendenhall M H, Reed R A, Schrimpf R D, Hooten N C, King M P 2012 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **59** 3054
- [11] Auden E C, Weller R A, Schrimpf R D, Mendenhall M H, Reed R A, Hooten N C, Bennett W G, King M P 2013 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **60** 4094
- [12] Raine M, Goiffon V, Paillet P, Duhamel O, Girard S, Gaillardin M, Virmontois C, Belloir J, Richard N, Magnan P 2014 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **61** 2826
- [13] Otto G, Gerhard H, Gärtner K 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **202** 114
- [14] Borodin V A 2012 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **282** 33
- [15] Nordlund K, Averback M G S, Tarus J 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7556
- [16] Delarubia T D, Gilmer G H 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2507
- [17] Jaraiz M, Rubio E, Castrillo P, Pelaz L, Bailon L, Barbolla J, Gilmer G H, Rafferty C S 2000 *Mat. Sci. Semicon. Proc.* **3** 59
- [18] Martin-Bragado I, Riverab A, Vallesb G, Gomez-Sellesa J L, Caturla M J 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2703
- [19] Nordlund K, Djurabekova F 2014 *J. Comput. Electron* **13** 122
- [20] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [21] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [22] Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U 1985 *The Stopping and Range of Ions in Matter* (Vol.1)(New York: Pergamon Press) p25ff
- [23] Farrell D E, Bernstein N, Liu W K 2009 *J. Nucl. Mater.* **385** 572
- [24] MMonCa Software Directory, Martin-Bragado I [http://www.materials.imdea.org//MMonCa/\[2015-7-7\]](http://www.materials.imdea.org//MMonCa/[2015-7-7])
- [25] Srour J R, Hartmann R A 1989 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **36** 1825
- [26] Lazanu I, Lazanu S 2006 *Phys. Scripta* **74** 201
- [27] Tang D, Martin-Bragado I, He C H 2015 *International Conference on Radiation Effects of Electronic Devices Proceedings* Harbin, China, October 19–21, 2015 p6
- [28] Aboy M, Santos I, Pelaz L 2015 *J. Comput. Electron* **13** 40

Multi-scale simulations of single particle displacement damage in silicon*

Tang Du He Chao-Hui[†] Zang Hang Li Yong-Hong Xiong Cen
Zhang Jin-Xin Zhang Peng Tan Peng-Kang

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

(Received 1 September 2015; revised manuscript received 27 December 2015)

Abstract

Silicon devices are extensively used in space and other radiation-rich environments. They must withstand radiation damage processes that occur over wide range of time and length. Ion implantation technique, one of the most important process in the fabrication of integrated circuits, can also create the displacement damage in silicon lattice. Exposure of silicon wafer or silicon device to radiation causes the creations of variety of defects and has adverse effects on the electrical properties of devices. Although phenomenological studies on the radiation effects in silicon have been carried out in the past decades, the features of multi-scale of displacement damage make it difficult to characterize the defect production and evolution experimentally or theoretically. Recently, the silicon device with ultra-low leakage current was shown to be very sensitive to the permanent displacement damage induced by single particles, called single particle displacement damage (SPDD) event. To the best of our knowledge, the investigation of single particle displacement damage (SPDD) event in silicon device by the coupling molecular dynamics (MD) and kinetic Monte Carlo (KMC) techniques has not yet been reported so far. In this paper, MD simulations are combined with KMC simulations to investigate the formation and evolution of SPDD event in silicon. In MD simulations, Tersoff potential is used to describe the Si-Si atomic interactions. The potential smoothly joins to Ziegler-Biersack-Littmark potential that describes the energetic short range interactions well. All atoms in the MD cell are allowed to evolve 0.205 ns to track the damage production and short-term evolution. A multi-phase simulations are performed to improve the simulation efficiency. Then the nearest neighbor criterion is employed to identify the configurations and spatial distributions of interstitials and vacancies, which are used as input in KMC simulations to study the thermal diffusion and interactions of those defects in the time interval from 0.205 ns to 1000 s. The results show that no defects are missing when transferring from MD to KMC simulation and the whole damage obtained in MD simulations is reproduced in KMC simulations. Since the production and evolution of defects are simulated, the SPDD current could be calculated based on Shockley-Read-Hall theory. We derive the formula to calculate the SPDD current and its annealing factor related to interstitials and vacancies in the depletion region. The calculated annealing factors of defects are compared with the annealing factors of SPDD currents and also with the experimental results. The results show that an annealing factor of defects has the same value as the annealing factor of an SPDD current when only one type of defect is considered in the calculations, while there are some differences between these two annealing factors when two and more types of defects are considered. The annealing factors of defects can be used to represent the annealing behaviors of SPDD currents since the divergences between these two annealing factors are not significant. Finally, SPDD current annealing factor based MD simulation results obtained with Tersoff potential are compared with the results in our previous study in which the Stillinger-Weber potential is used, and also compared with experimental results. The comparisons show that the simulation results with considering both Stillinger-Weber potential and Tersoff potential are in good agreement with experimental results. Compared with the calculated results with considering the Tersoff potential, the results with considering the Stillinger-Weber potential are closer to experimental results.

Keywords: displacement damage, defects, annealing factors, leakage current

PACS: 42.88.+h, 61.72.Cc, 61.80.-x, 85.30.-z

DOI: 10.7498/aps.65.084209

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11175138), the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11235008), the State Key Laboratory Program, China (Grant No. 20140134), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education, China (Grant No. 20130201120090).

[†] Corresponding author. E-mail: hechaohui@mail.xjtu.edu.cn