

氮化镓在不同中子辐照环境下的位移损伤模拟研究

谢飞 臧航 刘方 何欢 廖文龙 黄煜

Simulated research on displacement damage of gallium nitride radiated by different neutron sources

Xie Fei Zang Hang Liu Fang He Huan Liao Wen-Long Huang Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 192401 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200064

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200064>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于变温霍尔效应方法的一类n-GaN位错密度的测量

Determination of dislocation density of a class of n-GaN based on the variable temperature Hall-effect method

物理学报. 2017, 66(6): 067201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.067201>

质子在碳化硅中不同深度的非电离能量损失

Non-ionization energy loss of proton in different regions in SiC

物理学报. 2018, 67(18): 182401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181095>

ST401塑料闪烁体的脉冲中子相对光产额评估方法

A method of evaluating the relative light yield of ST401 irradiated by pulsed neutron

物理学报. 2017, 66(6): 062401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.062401>

基于三轴X射线衍射方法的n-GaN位错密度的测试条件分析

Analyses of determination conditions of n-GaN dislocation density by triple-axis X-ray diffraction

物理学报. 2017, 66(21): 216102 <https://doi.org/10.7498/aps.66.216102>

基于前冲康普顿电子高能伽马能谱测量系统设计

Optimization design of a Gamma-to-electron spectrometer for high energy gammas induced by fusion

物理学报. 2017, 66(1): 010703 <https://doi.org/10.7498/aps.66.010703>

GaN/In_xGa_{1-x}N型最后一个量子势垒对发光二极管内量子效率的影响

Identifying the influence of GaN/In_xGa_{1-x}N type last quantum barrier on internal quantum efficiency for III-nitride based light-emitting diode

物理学报. 2017, 66(15): 158501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.158501>

氮化镓在不同中子辐照环境下的 位移损伤模拟研究*

谢飞 臧航[†] 刘方 何欢 廖文龙 黄煜

(西安交通大学核科学与技术学院, 西安 710049)

(2020年1月10日收到; 2020年6月19日收到修改稿)

电子器件中的半导体材料经过中子辐照后产生大量位移损伤, 进而影响器件性能, 氮化镓 (GaN) 材料是第三代宽禁带半导体, GaN 基电子器件在国防、空间和航天等辐射服役环境中具有重要应用. 本文利用蒙特卡罗软件 Geant4 模拟了中子在 GaN 材料中的输运过程, 对在大气中子、压水堆、高温气冷堆和高通量同位素堆外围辐照区四种中子辐照环境下 GaN 中的初级反冲原子能谱及加权初级反冲原子能谱进行了分析. 研究发现: 在四种辐照环境下 GaN 中初级反冲原子能谱中, 均在 0.58 MeV 附近处出现不常见的“尖峰”, 经分析该峰为核反应产生的 H 原子峰, 由于低能中子 (n, p) 反应截面较大, 该峰的强弱和低能中子占总能谱的比例有关; 通过对比四种中子辐照环境下 GaN 中初级反冲原子能谱分布可知, 大气中子能谱辐照产生的初级反冲原子能量更低、分布范围更广, 裂变堆能谱下较高能量的初级反冲原子的比例较大, 大气中子和高通量同位素堆辐照环境下的初级反冲原子能谱与加权初级反冲原子谱形状更相似, 结合核反应产物对电学性能的影响, 高通量同位素堆外围辐照区更适合用于模拟 GaN 在大气中子环境下的辐照实验. 该结果对 GaN 基电子器件在辐射环境下长期服役评估研究和 GaN 材料的反应堆模拟中子辐照环境实验研究具有参考价值.

关键词: Geant4, 氮化镓, 初级反冲原子能谱, 中子辐照效应**PACS:** 24.10.Lx, 71.55.Eq, 61.80.Hg**DOI:** 10.7498/aps.69.20200064

1 引言

半导体材料在辐射服役环境下的损伤和老化问题是材料辐射效应最重要的基础科学问题之一. 第三代半导体材料氮化镓 (GaN) 拥有宽带隙、击穿电场高、饱和电子速率大、热导率高、化学性能稳定和抗辐射能力强等优点, 是目前高温、高频、大功率微波器件的首选材料之一^[1-6], 因此 GaN 基器件在国防、空间和航天等含辐射的服役环境具有重要的应用价值.

近年来中子在 GaN 中的辐照损伤引起了很多科研工作者的兴趣. Kazukauskas 等^[7]研究了

0.1 MeV 中子对 GaN 单晶材料的辐照损伤, 中子注量为 5.0×10^{14} — 1.0×10^{15} cm^{-2} , 发现随着中子注量的增加, 热电流减小了几个数量级. 张明兰等^[8]通过对中子辐照前后的 GaN 基器件持续光电导和低温光致发光的测量, 发现中子辐照会增强 GaN 的持续光电导率. 张得玺等^[9]计算了中子在栅注入晶体管中 p-AlGaIn 栅极、AlGaIn 沟道层和 GaN 外延层中的位移损伤情况, 结果显示随着中子注量的增加, 空位密度线性增大. 当中子注量为 10^{14} 量级时, GaN 沟道层空位密度为 10^{16} 量级, 中子注量增加到 10^{15} 量级时, 空位缺陷密度可达 10^{17} 量级. 吕玲等^[10]对 AlGaIn/GaN 异质结进行平均中子能量 1 MeV, 最高注量达 1.0×10^{15} cm^{-2}

* 科学挑战专题资助项目 (批准号: TZ2018004) 和国家自然科学基金 (批准号: 11975179) 资助的课题.

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

辐照后, 观察到面密度和迁移率降低, 电阻率明显增大的现象. Wang 等^[11-12]用中子辐照 GaN 外延层, 发现中子辐照导致载流子浓度减少, 并认为 GaN 外延层载流子浓度减少与中子辐照诱导结构缺陷产生载流子陷阱有关. 由国内外进展可知, 中子辐照下 GaN 材料中辐照诱生的结构缺陷会对 GaN 器件中载流子浓度、电导率以及电阻等参数造成一定的影响.

当宇宙射线进入大气层, 带有极高能量的粒子与大气中的原子核发生剧烈碰撞, 产生散裂反应, 由大气散裂反应产生的大气中子, 不带电且具有极强的穿透性, 广泛分布于地面和整个大气空间, 大气中子是导致 GaN 器件性能退化的主要粒子之一. 为了评价半导体器件在大气中子环境下长时间服役的可靠性, 可以借助反应堆的中子辐照环境进行辐照实验, 也可以通过计算模拟的方法模拟中子在材料中的辐照缺陷演化行为. 由于在不同的中子能谱辐照环境下, GaN 中产生的位移损伤存在一定的差异, 有必要研究氮化镓在不同中子辐照环境下的位移损伤. 本文对不同中子辐照环境下氮化镓产生的初级反冲原子能谱和以离位原子数为权重的加权初级反冲原子谱进行了分析, 该工作对 GaN 基器件在大气中子环境以及不同裂变堆辐照环境下的辐照效应研究具有重要意义.

2 程序设计

2.1 物理模型

Geant4 能模拟多种粒子在具有复杂结构探测器中的运输过程, 定义入射粒子类型和能量分布, 追踪粒子运输过程和感兴趣的物理量, 添加自定义函数来实现额外的功能 (如离位原子数的计算和不同中子能谱的读取), 已在核技术领域得到广泛应用^[13-17].

中子与物质相互作用主要包括弹性散射和一系列去弹过程 (非弹性散射, 俘获效应和裂变反应). 弹性散射中, 靶材料原子被撞出晶格位置, 产生初级反冲原子^[18]; 去弹过程会生成高能量反应产物, 这些高能产物会通过原子核的屏蔽库仑散射在材料中慢化, 屏蔽库仑散射会传递足够高的能量使晶格原子离位, 导致位移损伤. 本文中材料经过中子辐照产生的初级反冲原子包含中子碰撞材料原子产生的初级反冲原子和去弹过程中产生的

反应产物两个部分^[19]. 中子与物质的相互作用采用高精度中子弹性散射、非弹性散射、俘获和裂变物理模型来模拟. 利用 G4 hIonisation、G4 LElastic、G4 CascadeInterface 模型模拟 (n, p) 反应产生的质子电离、核弹性散射、核非弹性散射过程; 对于质子以外的初级反冲原子, 利用 G4 ionIonisation、G4 BinaryLightIonReaction 模型描述其电离过程和核相互作用过程; 采用屏蔽库仑散射物理过程考虑所有初级反冲原子与靶原子之间的库仑散射^[20].

2.2 入射中子能谱的选取

本文选取了四种典型的中子辐照环境 (详见图 1), 分别为大气中子谱^[21]、压水堆能谱^[22]、高温气冷堆^[22]、高通量同位素堆外围辐照区域的能谱 (简称同位素堆)^[23].

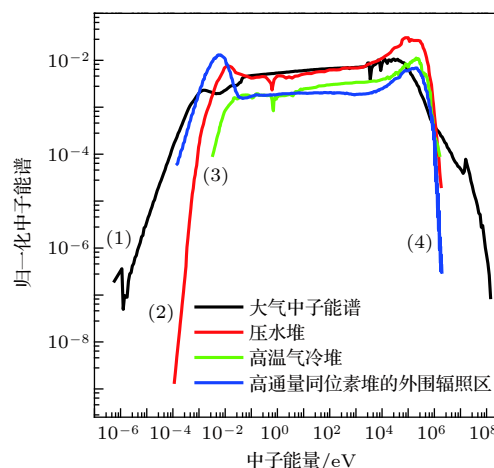


图 1 四种典型的归一化中子能谱

Fig. 1. Four typical normalized neutron spectrum.

2.3 几何结构

本文模拟的中子能谱范围主要在 10^{-3} — 10^7 eV 之间, 图 2 给出了不同能量的中子在氮化镓材料中的平均自由程, 为了确保统计的大多数中子与靶材料只发生一次相互作用, 靶材料厚度设为 0.5 cm, 本文中 Geant4 建模的几何结构如图 3 所示, 大小为 $1\text{ cm} \times 1\text{ cm} \times 0.5\text{ cm}$.

2.4 位移损伤计算

初级反冲原子产生的离位原子数 N_d 可通过 NRT 模型计算得出^[24]:

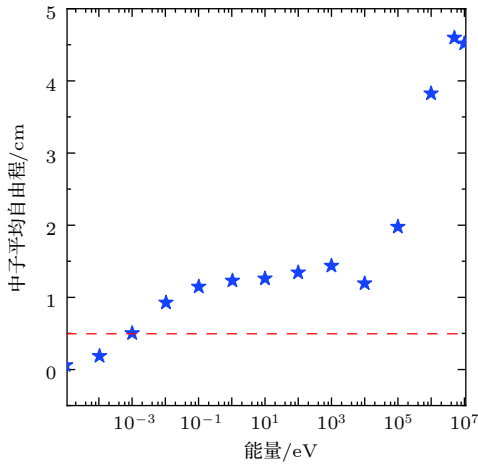


图 2 中子在 GaN 中的平均自由程
Fig. 2. The mean free path of neutrons in GaN.

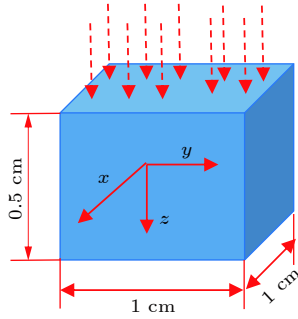


图 3 Geant4 中模拟的几何模型
Fig. 3. Simulated geometric model in Geant4.

$$N_d(E) = \begin{cases} 0, & E < E_d, \\ 1, & E_d \leq E < 2.5E_d, \\ 0.4E_D(E)/E_d, & E \geq 2.5E_d, \end{cases} \quad (1)$$

式中, E 为初级反冲原子能量; E_d 为离位阈值, 对氮化镓进行计算时, 以 26.5 eV 作为平均离位阈值^[18]; $E_D(E)$ 为初级反冲原子的损伤能, 利用 Robinson 修正的 Lindhard 分离函数^[20], 可近似表达为

$$E_D(E) = \frac{E}{1 + k_d g(\varepsilon_d)}, \quad (2)$$

$$\varepsilon_d = \frac{E}{30.724 Z_1 Z_2 \sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} \left(1 + \frac{A_1}{A_2}\right)}, \quad (3)$$

$$k_d = \frac{0.793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/4} A_1^{3/2} A_2^{1/2}}, \quad (4)$$

$$g(\varepsilon_d) = \varepsilon_d + 0.40244 \varepsilon_d^{3/4} + 3.4008 \varepsilon_d^{1/6}, \quad (5)$$

式中, Z_1 、 Z_2 及 A_1 、 A_2 分别为初级反冲原子与靶原子的原子序数及质量数.

依据 Akkerman^[25] 等研究, 当初级反冲原子能量低于 200 keV 时, (5) 式修正为^[12]

$$g(\varepsilon_d) = 0.742 \varepsilon_d + 1.6812 \varepsilon_d^{3/4} + 0.90565 \varepsilon_d^{1/6}, \quad (6)$$

(2) 式—(6) 式为计算初级反冲原子在单质中的损伤能, 对氮化镓这样的化合物, 文献^[26] 指出将化合物各元素的质量数 $A_{2,i}$ 、电荷数 $Z_{2,i}$ 进行原子密度加权平均得到平均质量数 $A_{2,average}$ 、平均电荷数 $Z_{2,average}$, 有:

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

$$Z_{2,average} = \frac{\sum_i n_i Z_{2,i}}{\sum_i n_i} \quad (8)$$

式中, n_i 为元素 i 在化合物中的原子密度, 将 $A_{2,average}$ 、 $Z_{2,average}$ 代入 (3) 式和 (4) 式可得初级反冲原子在化合物中的损伤能. 并通过 (1) 式计算离位原子数.

3 结果与分析

3.1 不同中子能谱辐照下产生的初级反冲原子份额

模拟的四种中子辐照环境下产生的初级反冲原子份额见表 1. 从表 1 可知初级反冲原子中 Ga、N 占据主导, 但是伴随着核反应的发生, 也产生了 C、B、H、He 等元素, 其它元素包括 Cu、Zn、Li 等, 由于其份额过少, 这里没有一一列出. 通过表 1 可知, 不同中子能谱下, 核反应产生的元素存在微小的差别, 其中压水堆和高温气冷堆环境下, 核反应

表 1 不同能谱下初级反冲原子占比
Table 1. Primary recoils proportion of different spectrum.

能谱	初级反冲原子比例/%						
	Ga	N	C	B	H	He	other
大气中子	52.34	45.08	1.25	0.032	1.26	0.034	0.004
压水堆	54.26	43.39	0.92	0.25	0.92	0.25	0.01
高温气冷堆	54.87	43.62	0.52	0.23	0.52	0.23	0.01
同位素堆	48.27	44.94	3.28	0.11	3.28	0.11	0.01

产物所占比例较为接近. 大气中子能谱环境下 GaN 中产生的 C 和 H 元素高于在压水堆和高温气冷堆环境下, 低于在同位素堆辐照环境下; 大气中子能谱环境下 GaN 中产生的 B 元素均低于其他三种中子辐照环境. 经估算, 当中子注量为 10^{15} 量级时, 大气中子能谱下, GaN 中由于核反应产生的 C、B 和 H 的浓度分别为 6.33×10^{-13} 、 1.62×10^{-14} 和 6.38×10^{-13} , 新生成的核反应产物有可能导致 GaN 基电子器件中半导体的能带结构发生改变, 进而影响其电学性能.

3.2 不同中子能谱辐照下的初级反冲原子能谱

从图 4 中可看出, 四种辐照环境下的初级反冲原子能谱总体上呈现一致的趋势, 且基本上随着反冲原子能量逐渐升高, 反冲原子所占比例越少, 即低能反冲原子占据优势. 大气中子辐照环境下初级反冲原子能量分布更广, 其他三种裂变堆能谱初级反冲原子能量范围基本一致, 由图 1 可知, 大气中子能谱能量分布范围比其他三种裂变堆能谱宽, 因此产生的初级反冲原子能谱更宽. 由图 1 中数据计算可知, 大气中子和同位素堆的平均中子能量分别

为 0.38 MeV 和 0.42 MeV, 压水堆和高温气冷堆的平均中子能量 0.74 MeV 和 0.76 MeV. 图 4 中大气中子和同位素堆下 GaN 的初级反冲原子能谱更为接近, 压水堆和高温气冷堆下 GaN 的初级反冲原子能谱更为接近, 这一现象可能和平均中子能量有关. 四种中子能谱的辐照环境下 GaN 中初级反冲原子能谱中, 均在 0.58 MeV 附近出现反冲原子能谱中不常见的固定位置的“尖峰”, 该尖峰强度排序为: 同位素堆 > 大气中子 > 高温气冷堆 > 压水堆.

图 5 给出了同位素堆辐照环境下初级反冲原子能谱的解谱分析, 发现 0.58 MeV 左右的尖峰主要由氢元素产生. 中子和 GaN 发生的产氢核反应主要是 (9) 式的反应过程, 图 6 给出了 (9) 式中核反应的 (n, p) 反应截面, 并且统计了 Geant4 模拟整个辐照过程中所有的该核反应发生的事件, 图 7 给出了产氢反应比例随中子能量变化的统计结果, 发现该反应主要发生在低能段. 通过能量守恒 (10) 式和反应能 (11) 式, 该反应能和入射中子能量无关, 计算得到该反应的反应能 $Q = 0.624$ MeV.

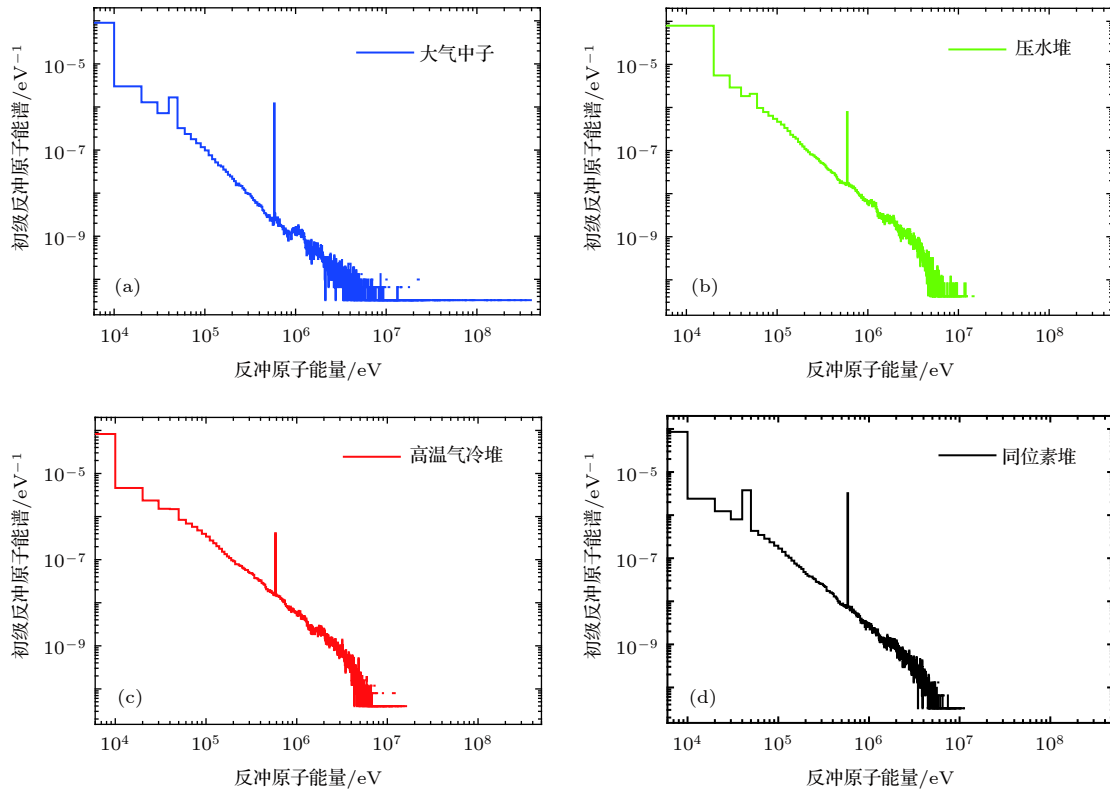
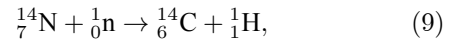


图 4 四种中子能谱在氮化镓中对应的初级反冲原子能谱
Fig. 4. Primary recoil spectrum of four neutron spectra in GaN.

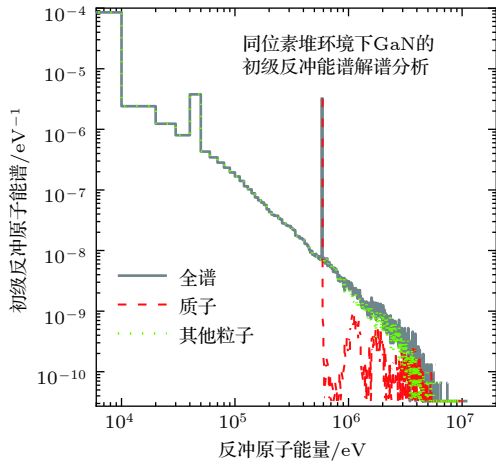


图 5 高通量同位素堆外围辐照区环境下的初级反冲原子能谱分析

Fig. 5. Analysis of primary recoil spectrum over peripheral irradiation area in high flux isotope reactor.

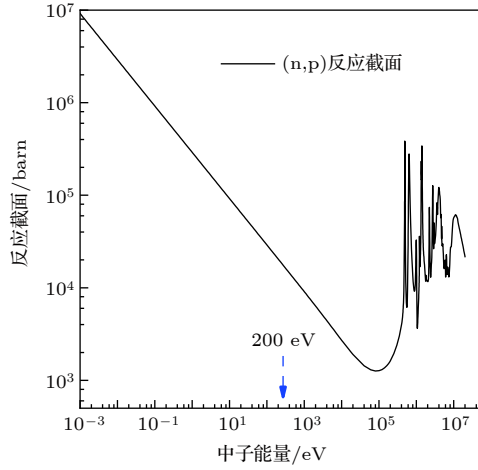


图 6 中子辐照氮化镓的 (n,p) 反应截面

Fig. 6. (n,p) reaction cross section for GaN.

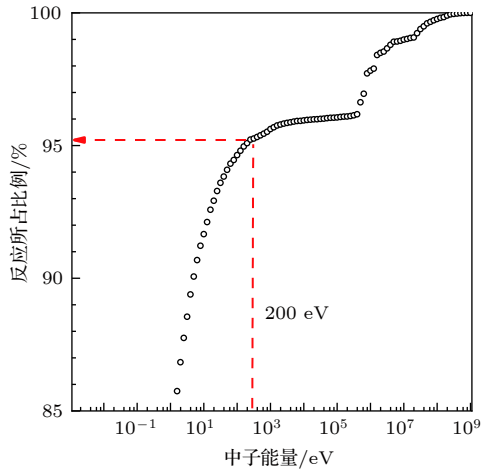


图 7 产氢反应比例随中子能量变化

Fig. 7. Proportion of hydrogen production reaction varies with neutron energy.

$$M_a c^2 + E_a + M_A c^2 + E_A = M_b c^2 + E_b + M_B c^2 + E_B, \quad (10)$$

$$Q = [M(^{14}\text{N}) + M_n - M(^{14}\text{C}) - M(^1\text{H})] c^2, \quad (11)$$

式中, M_a 、 M_A 、 M_b 、 M_B 、 E_a 、 E_A 、 E_b 、 E_B 分别为入射粒子中子, 靶核 N 原子, 出射粒子 H 原子和剩余核 C 原子的静止质量和动能. 通过 Q 方程的变形^[27], 可知出射粒子 H 原子的能量 E_b 可由 (12) 式计算得到, ω 和 u 是过程参数, 见 (13) 式和 (14) 式, $\cos \theta_L$ 表示反冲原子出射夹角余弦值.

$$E_b(\theta_L) = 2u^2 + \omega \pm 2u\sqrt{u^2 + \omega}, \quad (12)$$

$$\omega = \frac{(M_B - M_b) E_a + M_B Q}{M_B + M_b}, \quad (13)$$

$$u = \frac{\sqrt{M_a M_b E_a}}{M_B + M_b} \cos \theta_L. \quad (14)$$

由图 6 可知, 当中子能量低于 1 MeV, 反应截面随着中子能量的增大而降低, 由图 7 可知, 95% 的核反应是由低于 200 eV 的中子造成的. 对于小于 200 eV 的低能中子来说, 入射粒子中子的能量远小于反应能 Q , 可以对 (12) 式—(14) 式进行近似简化, 出射粒子 H 原子的能量 $E_b \approx \omega \approx \frac{14Q}{15} = 0.5824 \text{ MeV}$. 因此所有的低能中子产生出射粒子 H 的能量非常接近, 在低能核反应占主导的情况下, GaN 在四种中子能谱辐照下在 0.58 MeV 附近均形成由氢占据主导的“尖峰”. 图 8 给出了四种不同中子能谱的累积积分中子能谱, 由图 8 可知, 同位素堆和大气中子的低能中子比例远高于压水堆和高温气冷堆, 低能中子反应占

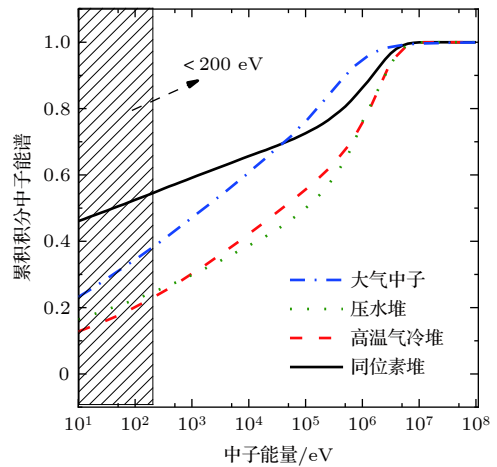


图 8 四种中子能谱的累积积分中子能谱

Fig. 8. Cumulative integral neutron spectra of four neutron spectra.

据了总产氢反应的绝大部分, 因此同位素堆和大气中子的 H 原子峰的强度高于压水堆和高温气冷堆, 吻合图 4 中计算结果.

图 9 给出了不同中子能谱在 GaN 中选取 Ga、N、B、C 四种初级反冲原子分别做初级反冲原子能谱. 由图 9 可知, 不同的初级反冲原子的初级反冲

原子能谱也显示出大气中子能谱范围较宽; 几种主要的初级反冲原子能谱存在一定的差异, 其中压水堆能谱和高温气冷堆能谱下, GaN 中的初级反冲能谱比较接近: 图 9(d) 中显示, 核反应产物 C 元素的初级反冲能谱中, 大气中子能谱和同位素堆能谱下比较接近.

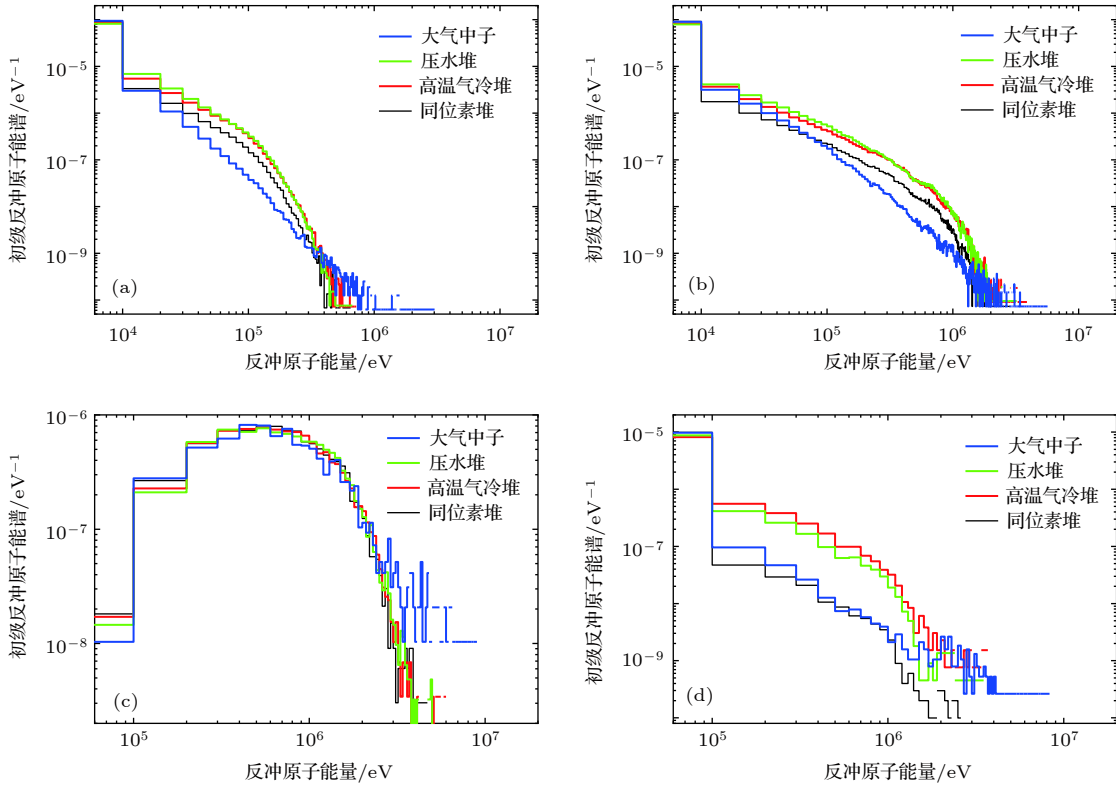


图 9 不同中子能谱在氮化镓中对应的初级反冲原子的能谱分布 (a)Ga 初级反冲原子能谱; (b)N 初级反冲原子的能谱; (c)B 初级反冲原子的能谱; (d) C 初级反冲原子的能谱

Fig. 9. Primary recoils spectrum distribution for different neutron spectra for the primary recoil particle type of (a) Ga, (b) N, (c) B, (d) C.

3.3 加权初级反冲原子谱 ($W_p(T)$)

进一步将初级反冲原子能谱以反冲原子产生的离位原子数目作为权重, 进行累积积分, 得到加权初级反冲原子谱^[28], 或损伤产生函数^[29], 这里统一称为加权初级反冲原子谱 ($W_p(T)$), 定义如下:

$$\begin{aligned}
 W_p(T) &= \frac{\sum_k \int_{E_d}^T N_{k,d}(T') \frac{d\sigma_k(T')}{dT'} dT'}{\sum_k \int_{E_d}^{T_{\max,k}} N_{k,d}(T') \frac{d\sigma_k(T')}{dT'} dT'} \\
 &= \frac{D(T)}{D} = \frac{\sum_{T' < T} N_d(T')}{\sum_{T' < T_{\max}} N_d(T')}, \quad (15)
 \end{aligned}$$

式中, $\frac{d\sigma_k(T')}{dT'}$ 为初级反冲原子 k (对于氮化镓, k 可能为 Ga、N、B、C 等) 的微分能谱, eV^{-1} ; E_d 为离位阈值, 对于氮化镓取平均值 $26.5 eV$ ^[19]; $T_{\max,k}$ 为初级反冲原子 k 的最大能量; $N_{k,d}(T')$ 为能量为 T' 的初级反冲原子 k 所产生的离位原子数. 由定义可得, 加权初级反冲原子谱 $W_p(T)$ 表征能量低于 T 的初级反冲原子产生的离位原子数占总损伤的份额. 由此得到四种中子能谱辐照下的加权初级反冲原子谱 $W_p(T)$, 见图 10.

由图 10 中可知, 大气中子能谱环境下比其余三种裂变堆能谱环境下, GaN 中产生的初级反冲原子的能量分布整体处于较低的能量, 表明三种裂变谱下产生的反冲原子中较高能量初级反冲原子

的份额高于大气中子能谱. 高温气冷堆和压水堆的加权初级反冲原子谱近似, 高通量同位素堆外围辐照区环境下, 高能初级反冲原子的份额比高温气冷堆和压水堆的低一些.

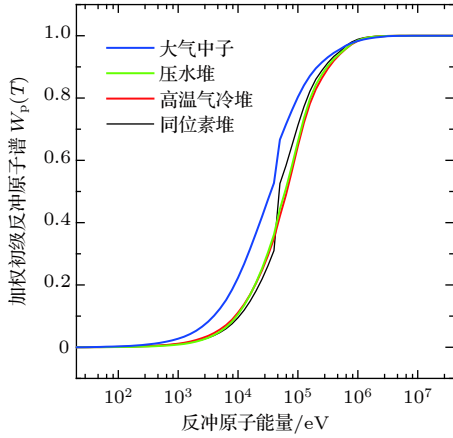


图 10 四种中子能谱在氮化镓中对应的加权初级反冲原子谱 $W_p(T)$
Fig. 10. Weighted primary recoil spectra of four neutron spectra in GaN.

为了进一步对不同中子能谱产生的初态缺陷的形态分布进行分析, 分别考虑了中子在氮化镓中

产生的不同类型的初级反冲原子 (Ga、N、B、C). 它们对应的加权初级反冲原子谱如图 11 所示.

从图 11 整体来看, 对于 Ga、N 和 B 三种反冲原子, 三种裂变堆环境下的加权初级反冲原子谱基本一致. 图 11(a) 显示, 和其他三种压水堆能谱相比, 大气中子能谱下 GaN 中高能 Ga 初级反冲原子和低能的 Ga 初级反冲原子所占份额都较大, 这是由于大气中子能谱较宽, 既产生更多的能量高的初级反冲原子, 也产生更多的能量低的初级反冲原子, 由于反冲原子的能量越大, 其产生离位级联损伤区越大, 因此大气中子辐照下, 有较大尺寸的离位损伤区产生. 图 11(b) 显示, 大气中子能谱下 N 初级反冲原子在低能区域占据更多份额, 图 11(c) 显示, 大气中子能谱下 B 初级反冲原子在低能区域占据更多份额. 图 11(c) 显示, 大气中子能谱和同位素堆能谱下 C 初级反冲原子的能量分布较为接近, 压水堆和高温气冷堆辐照下, C 初级反冲原子在低能区域占据更多份额, 此外, 根据 (9) 式的产氢反应, 同时产生了大量相近能量的 C 初级反冲原子, 因此加权初级反冲原子谱图 11(d) 中观察到谱线急剧上升的现象.

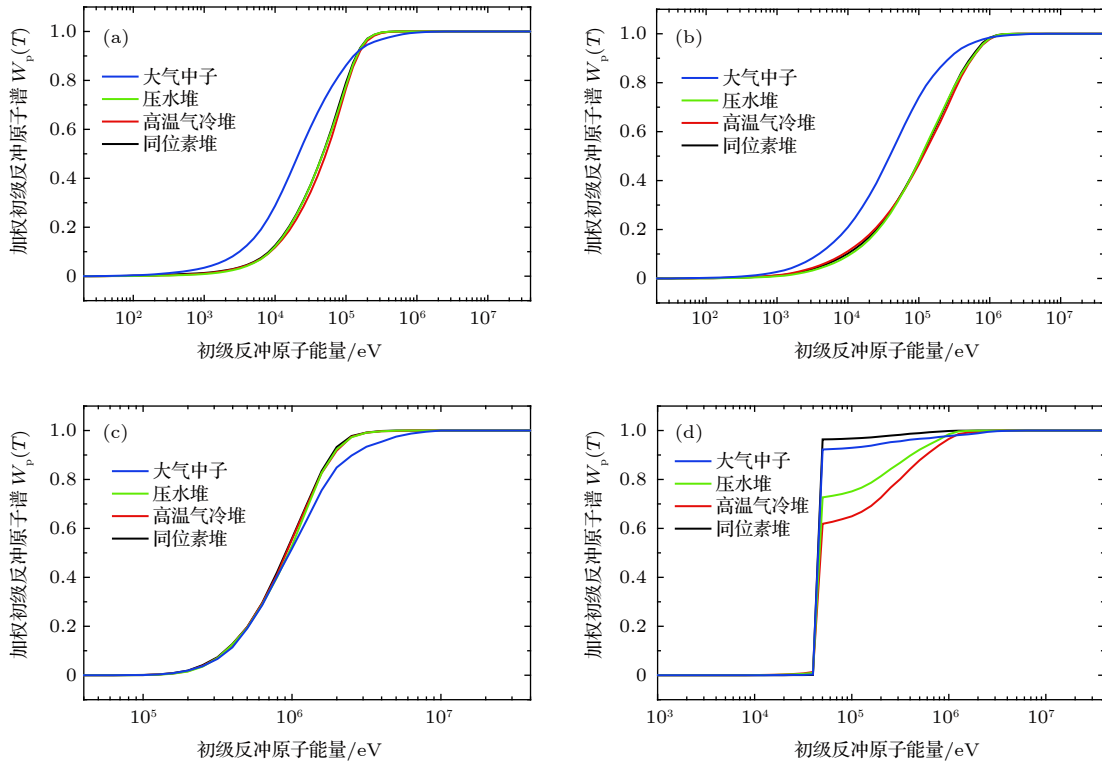


图 11 所研究中子能谱在氮化镓中对应的加权初级反冲原子谱 $W_p(T)$ (a) Ga 加权初级反冲原子谱; (b) N 加权初级反冲原子谱; (c) B 加权初级反冲原子谱; (d) C 加权初级反冲原子谱

Fig. 11. Weighted primary recoil spectra of studied neutron spectra in GaN: (a) Ga; (b) N; (c) B; (d) C.

GaN 基器件经过中子辐照后, GaN 材料中会生成许多具有一定能量的 Ga、N、B 和 C 等初级反冲原子, 这些带有一定能量的初级反冲原子会继续在 GaN 中通过离位级联进一步损失能量, 最后形成缺陷. 由于初级反冲原子的能量大小会影响到其在材料中的射程和形成缺陷的种类, 通过初级反冲原子能谱以及加权初级反冲原子的分析能够评价不同中子辐照环境下缺陷的形成变化. 由图 4、图 9—图 11 中四种中子能谱下 GaN 中的初级反冲能谱分布和加权初级反冲原子能谱分布可知, 大气中子能谱下 GaN 中初级反冲原子的能量分布较广, 大气中子和同位素堆下 GaN 的初级反冲原子能谱及加权初级反冲能谱更为接近. 对于 GaN 基器件的性能来说, 除了辐照缺陷能够影响材料的电学性能之外, 随着中子注量的增大, 核反应生成的 B 和 C 元素也越来越多, 有可能对半导体器件的能带结构造成一定影响, 结合表 1 中四种能谱下核反应产物的比例, 可知同位素堆更适于用于模拟大气中子能谱辐照实验.

4 结 论

利用 Geant4 模拟了四种典型中子辐照环境下中子在氮化镓中输运及位移损伤产生过程, 统计了不同能谱下初级反冲原子占比和一定注量下核反应产物的浓度大小, 得到了在四种能谱辐照下的初级反冲原子能谱及以离位原子数为权重的加权初级反冲原子谱. 得到如下结论: (1) 和三种裂变反应堆能谱相比, 大气中子谱辐照下 GaN 中初级反冲原子的能量分布在高能和低能区都宽, 产生的高能量反冲原子会产生更大的级联损伤区; (2) 不同中子能谱下 GaN 的初级反冲原子能谱中均形成了明显的氢峰, 与此相对应在 C 加权初级反冲原子谱中观察到谱线骤升的现象, 氢峰的强度与不同能谱的低能中子占总中子数的份额相对应; (3) 高温气冷堆、压水堆能谱在辐照氮化镓过程中的初级反冲原子能谱与加权初级反冲原子谱非常相似, 大气中子和同位素堆下 GaN 的初级反冲原子能谱及加权初级反冲能谱更为接近, 结合核反应产物的生成比例, 同位素堆更适于用于模拟大气中子能谱辐照实验.

参考文献

[1] Jia W L, Zhou M, Wang X M, Ji W L 2018 *Acta Phys. Sin.* **10** 107102 (in Chinese) [贾婉丽, 周森, 王馨梅, 纪卫莉 2018 物

理学报 **10** 107102]

- [2] Zhao D G, Zuo S H, Zhou M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5513 (in Chinese) [赵德刚, 周梅, 左淑华 2007 物理学报 **56** 5513]
- [3] Zhang L, Lin Z Y, Luo J, Wang S L, Zhang J C, Hao Y, Dai Y, Chen D Z, Guo L X 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 247302 (in Chinese) [张力, 林志宇, 罗俊, 王树龙, 张进成, 郝跃, 戴扬, 陈大正, 郭立新 2017 物理学报 **66** 247302]
- [4] Sun D Z 2000 *Physics* **30** 413 (in Chinese) [孙殿照 2000 物理 **30** 413]
- [5] Hadis Morkoç 2008 *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices* (Weinheim: Wiley-VCH) pp1–129
- [6] Lorenz K, Marques J G, Franco N, Alves E, Peres M, Correia M R, Monteiro T 2008 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **266** 2780
- [7] Kazukauskas V, Kalendra V, Vaitkus V 2006 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **568** 421
- [8] Zhang M L, Wang X L, Xiao H L, Yang C B, Wang R 2010 *10th IEEE International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology* Shanghai, November 1–4, 2010 p1533
- [9] Zhang D X 2015 *M. S. Thesis* (Xi'an: Xidian University) (in Chinese) [张得玺 2015 硕士学位论文 (西安: 西安电子科技大学)]
- [10] Lv L 2014 *Ph.D. Thesis* (Xi'an Xidian University) (in Chinese) [吕玲 2014 博士学位论文 (西安: 西安电子科技大学)]
- [11] Wang R X, Xu S J, Li S, Fung S, Beling C D, Wang K, Wei Z F, Zhou T J, Zhang J D, Gong M, Pang G K H 2004 *Conference on Optoelectronic and Microelectronic Materials and Devices* Brisbane December 8–10 2004 p141
- [12] Wang R X, Xu S J, Fung S, Beling C D, Wang K, Li S, Wei Z F, Zhou T J, Zhang J D, Huang Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 031906
- [13] Wang Y M, Cheng W, Guo H X, He B P, Luo Y H, Yao Z B, Zhang F Q, Zhang K Y, Zhao W 2010 *Atom Energ. Sci. Technol.* **44** 1505 (in Chinese) [王园明, 陈伟, 郭红霞, 何宝平, 罗尹虹, 姚志斌, 张凤祁, 张科营, 赵雯 2010 原子能科学技术 **44** 1505]
- [14] Zeng Z, Li J L, Cheng J P, Qiu R 2005 *J. Isotop.* **18** 55 (in Chinese) [曾志, 李君利, 程建平, 邱睿 2005 同位素 **18** 55]
- [15] Lu W, Wang T Q, Wang X G, Liu X L 2011 *Nucl. Technol.* **34** 529 (in Chinese) [路伟, 王同权, 王兴功, 刘雪林 2011 核技术 **34** 529]
- [16] Agostinelli S, Allison J, Amako K 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **506** 250
- [17] Shen S S, He C H, Li Y H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 182401 (in Chinese) [申帅帅, 贺朝会, 李永宏 2018 物理学报 **67** 182401]
- [18] Apostolakis J, Asai M, Bogdanoy A G 2009 *Radiat. Phys. Chem.* **78** 859
- [19] He B W, He C H, Shen S S, Chen Y M L 2017 *Atom Energ. Sci. Technol.* **51** 543 (in Chinese) [何博文, 贺朝会, 申帅帅, 陈袁妙梁 2017 原子能科学技术 **51** 543]
- [20] Guo D X, He C H, Zang H, Xi J Q, Ma L, Yang T, Zhang P 2013 *Atom Energy Sci Technol* **47** 1222 (in Chinese) [郭达禧, 贺朝会, 臧航, 席建奇, 马梨, 杨涛, 张鹏 2013 原子能科学技术 **47** 1222]
- [21] Hu Z L, Yang W T, Li Y H, Li Y, He C H, Wang S L, Zhou B, Yu Q Z, He H, Xie F, Bai Y R, Liang T J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 238502 (in Chinese) [胡志良, 杨卫涛, 李永宏, 李洋, 贺朝会, 王松林, 周斌, 于全芝, 何欢, 谢飞, 白雨蓉, 梁天骄 2019 物理学报 **68** 238502]
- [22] Was GS. 2007 *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (Berlin: Springer) pp545–577
- [23] Hu J W, Hayes A C, Wilson W B, Rizwan U 2010 *Nucl. Eng*

- Des* **240** 3751
- [24] Robinson M T, Torrens I M 1974 *Phys. Rev. B* **9** 5008
- [25] Akkerman A, Barak J 2006 *Proc. IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 3667
- [26] Detlef F, Frank G 2009 *Handbook of Spallation Research: Theory, Experiments and Applications* (Berlin, Wiley-VCG) pp220-224
- [27] Yang F J, Wang Y S, Lu F Q 2002 *Nuclear Physics* (Vol.2) (Shanghai: Fudan University Press) p153 (in Chinese) [杨福家, 王炎森, 陆福全 2002 原子核物理 (第2版) (上海: 复旦大学出版社) 第153页]
- [28] Wiedersich H 1990 *Radiat. Eff. and Defects. Solids* **113** 97
- [29] Mota F, Vila R, Ortiz C, Garcia A, Casal N, Ibarra A, Rapisarda D, Queral V 2011 *Fusion Eng. Des.* **86** 2425

Simulated research on displacement damage of gallium nitride radiated by different neutron sources*

Xie Fei Zang Hang[†] Liu Fang He Huan Liao Wen-Long Huang Yu

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

(Received 10 January 2020; revised manuscript received 19 June 2020)

Abstract

Gallium nitride (GaN), one of the third-generation wide-bandgap semiconductors, offers significant application for advanced electronic devices utilized in neutron irradiation environments, like the defense, space, and aerospace, etc. In these applications, neutron irradiation-induced defects affect the properties of GaN and eventually degrade the performance of devices. In this work, neutron transport process in GaN is simulated by using the Monte Carlo-based code, Geant4 toolkit under four different irradiation conditions, e.g. high flux isotope reactor, high temperature gas-cooled reactor, pressurized water reactor, and atmospheric neutron irradiation. The energy spectra of primary knock-on atoms (PKA) in GaN and the corresponding weighted spectra under those irradiation conditions are analyzed. It is found that there is one unusual "peak" at around 0.58 MeV in the Primary recoil spectrum, regardless of the irradiation conditions. This peak is attributed to the neutron reaction of hydrogen nucleus, i.e., (n, p). Because of the remarkable (n,p) reaction cross-section of low-energy neutron, the intensity of this peak is related to the ratio of low-energy neutron to the total neutron spectrum. By comparing these PKA energy spectra in GaN, we can see that the PKA energy spectrum created under atmospheric neutron irradiation is similar to that in the high flux isotopic reactor. Specifically, the energy distribution of PKA is wide, and the magnitude of energy is lower than those under fission neutron irradiation conditions. In combination with the effects of nuclear reaction products on electrical properties, the high flux isotopic reactor is more suitable for simulating the irradiation of GaN in an atmospheric neutron energy spectrum environment. These above results can provide not only some insights into the evaluation of the degradation of GaN-based electronic devices under neutron irradiation, but also dataset for the study of radiation damage effect of GaN in simulated neutron environment.

Keywords: geant4, gallium nitride, primary recoils spectrum, neutron irradiation effect

PACS: 24.10.Lx, 71.55.Eq, 61.80.Hg

DOI: 10.7498/aps.69.20200064

* Project supported by the Science Challenge Project (Grant No. TZ2018004) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11975179).

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