



空间重离子入射磷化铟的位移损伤模拟

白雨蓉 李永宏 刘方 廖文龙 何欢 杨卫涛 贺朝会

Simulation of displacement damage in indium phosphide induced by space heavy ions

Bai Yu-Rong Li Yong-Hong Liu Fang Liao Wen-Long He Huan Yang Wei-Tao He Chao-Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 172401 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210303

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210303>

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

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>

AlGaIn/GaN高电子迁移率晶体管器件中子位移损伤效应及机理

Neutron-induced displacement damage effect and mechanism of AlGaIn/GaN high electron mobility transistor

物理学报. 2020, 69(20): 207301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200714>

氮化镓在不同中子辐照环境下的位移损伤模拟研究

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

物理学报. 2020, 69(19): 192401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200064>

Si₃N₄钝化层对横向PNP双极晶体管电离辐射损伤的影响机理

Impact of nitride passivation layer on ionizing irradiation damage on LPNP bipolar transistors

物理学报. 2018, 67(16): 168501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172215>

三重简并拓扑半金属磷化钼的时间分辨超快动力学

Time-resolved ultrafast dynamics in triple degenerate topological semimetal molybdenum phosphide

物理学报. 2020, 69(7): 077801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191816>

V-4Cr-4Ti/Ti复合材料界面的辐照损伤特性研究

Characterization of interface irradiation damage in Ti-clad V-4Cr-4Ti composite material

物理学报. 2019, 68(21): 216101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191204>

空间重离子入射磷化铟的位移损伤模拟*

白雨蓉 李永宏 刘方 廖文龙 何欢 杨卫涛 贺朝会†

(西安交通大学核科学与技术学院, 西安 710049)

(2021年2月9日收到; 2021年4月22日收到修改稿)

磷化铟 (InP) 具备电子迁移率高、禁带宽度大、耐高温、耐辐射等特性, 是制备空间辐射环境下电子器件的重要材料. 随着电子器件小型化, 单个重离子在器件灵敏体积内产生的位移损伤效应可能会导致其永久失效. 因此, 本文使用蒙特卡罗软件 Geant4 模拟空间重离子 (碳、氮、氧、铁) 在 InP 材料中的输运过程, 计算重离子的非电离能量损失 (non-ionizing energy loss, NIEL), 得到重离子入射 InP 材料的位移损伤规律, 主要结论有: 1) NIEL 值与原子序数的平方成正比, 重离子原子序数越大, 在 InP 材料中产生位移损伤的能力越强; 2) 重离子 NIEL 比次级粒子 NIEL 大 3—4 个量级, 而 NIEL 与核弹性碰撞产生的反冲原子的非电离损伤能成正比, 说明重离子在材料中撞出的初级反冲原子是导致 InP 材料中产生位移损伤的主要原因; 3) 空间辐射环境中重离子数目占比少, 一年中重离子在 0.0125 mm^3 InP 中产生的总非电离损伤能占比为 2.52%, 但重离子 NIEL 值是质子和 α 粒子的 2—30 倍, 仍需考虑单个空间重离子入射 InP 电子器件产生的位移损伤效应. 4) 低能重离子在较厚材料中完全沉积导致平均非电离损伤能分布不均匀 (前高后低), 使 NIEL 值随材料厚度的增大而略微减小, 重离子位移损伤严重区域分布在材料前端. 研究结果为 InP 材料在空间辐射环境中的应用打下基础.

关键词: 磷化铟, 位移损伤, Geant4, 非电离损伤能

PACS: 24.10.Lx, 61.80.-x

DOI: 10.7498/aps.70.20210303

1 引言

InP 作为重要的第二代半导体材料, 禁带宽度大、电子迁移率高、耐高温、抗辐射性能优于硅和砷化镓, 是航天器电子器件的首选材料之一^[1]. 航天器远地飞行状态下, 主要受到来自银河宇宙射线的背景辐射 (85% 为质子, 15% 为 α 粒子, 1% 为重离子) 以及太阳耀斑爆发产生的大量重离子、 α 粒子、高能质子和电子辐射, 统称为宇宙射线 (cosmic ray, CR)^[2]. 研究表明, 空间辐射环境中电子器件的位移损伤效应是导致其电学性能永久失效的主要因素之一^[3], 且 InP 材料多被用于光电器件, 光电器件对于位移损伤效应的敏感性强于其他

器件. 空间重离子占比小但能量大, 可以穿过外层材料进入航天器内部, 且随着电子器件小型化, 单个高能重离子在电子器件灵敏体积处产生的位移损伤, 即可造成电子器件灵敏体积处的永久损伤^[4]. 因此, 研究空间重离子入射 InP 材料产生的位移损伤规律, 可以为 InP 材料在航天器中的应用打下基础.

目前, 国内外关于空间重离子入射 InP 材料产生的位移损伤规律未见文献报道, 研究主要集中于低能质子、电子^[5-12]、离子注入^[13-16]在 InP 材料或电子器件中产生的辐照效应. 实验方面, Yamaguchi 等^[5]采用地面实验装置探究 InP 单晶材料和太阳能电池经低能质子 (1—10 MeV) 和电子 (1 MeV) 辐照后的电学性能变化. Kamarou 等^[15]使用快重离子氩 (375 MeV)、金 (593 MeV)

* 基础加强计划 (批准号: 2019-JCJQ-ZD-267) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hechaohui@xjtu.edu.cn

注入 InP 单晶材料, 得到离子注入后的缺陷退火机制. 模拟方面, Summers 等^[17] 使用 SRIM 软件得到不同能量的质子和电子入射 Si, InP, GaAs 产生的 NIEL 值, 发现实验得到的电学损伤因子与 NIEL 相关, 可以衡量电子器件经辐照后的电学性能退化程度, 将不同种类和能量的粒子对电子器件的电学性能影响转化为 NIEL 进行比较是一种可靠的处理手段.

本文使用 Geant4 软件^[18] 模拟空间重离子在 InP 材料中的输运过程, 比较重离子及其次级粒子在 InP 材料中的 NIEL 值, 得到重离子在 InP 材料中产生的平均非电离损伤能随深度分布规律, 同时将空间主要辐射粒子 (氢、氦、碳、氮、氧、铁) 分别以实际年注入量的入射数目入射 InP 材料, 计算空间主要辐射粒子的总非电离能量沉积, 得到重离子在空间主要辐射粒子中的总非电离能量沉积占比. 该工作对 InP 基电子器件在航天领域的应用有重要意义.

2 模型构建

2.1 几何结构

根据文献^[5] 得到 InP 材料作为基底厚度是 500 μm , 同时为了探究厚度对重离子在 InP 中产生的 NIEL 值的影响, 将 InP 材料厚度分别设置为 500 μm , 1000 μm , 5000 μm , 横截面为 500 μm \times 500 μm .

2.2 物理过程

Geant4 软件在核技术领域应用较广^[19–22], 可以模拟多种能量、多种粒子在具有复杂几何结构、材料构成的器件中的输运过程. 本文利用 Geant4 软件和程序库, 使用 QGSP_BIC 物理模型模拟空间重离子在 InP 中的输运过程. QGSP_BIC 物理模型包含了电磁相互作用 (多次散射、电离、光电效应、韧致辐射) 和强子相互作用 (弹性散射、非弹性散射和原子核嬗变), 使用的数据库文件是基于 Livermore 实验室的 ENSDF, EEDL, EPDL97, EADL 库, 最高可模拟 10 TeV 的入射粒子在材料中的输运过程. 同时在电磁相互作用中增加了 G4-ScreenedNuclearRecoil 类, 模拟反冲原子的核阻止本领, 该类由 Weller 等^[23] 开发, 用于计算库仑散射对 NIEL 的贡献, Weller 等^[24] 也验证了该类

在计算质子入射 GaAs, Si 等材料的 NIEL 值时的准确性和可靠性. Raine 等^[4] 也使用 G4ScreenedNuclearRecoil 类计算质子和中子入射 Si 产生的 NIEL. 说明 G4ScreenedNuclearRecoil 类适用于计算带电粒子在材料中产生的 NIEL.

重离子与物质相互作用过程主要有核弹性碰撞和核外电子非弹性碰撞. 核弹性碰撞为带电粒子与靶原子核的库仑场作用发生弹性散射, 使原子核反冲带走带电粒子的一部分能量, 将这种能量损失称为非电离能量损失. 核外电子非弹性碰撞为带电粒子与靶原子核外电子发生库仑作用, 使电子获得能量被击出, 靶原子失去电子变为离子, 同时带电粒子的能量减小, 运动速度降低, 将这种能量损失称为电离能量损失.

位移损伤是指核弹性碰撞产生的初级反冲原子 (primary knock-on atom, PKA) 离开晶格位置, 继续发生弹性碰撞过程, 产生次级反冲原子 (secondary knock-on atom, SKA), 若次级反冲原子获得的能量足够大, 也会继续发生弹性碰撞, 进而形成级联碰撞, 产生点缺陷、团簇、位错环等晶格缺陷. 而这些缺陷多处于电子器件的深能级处, 可以俘获少数载流子, 影响少数载流子数目和寿命, 进而使得电学器件开路电压、短路电流、最大电功率、暗电流等电学特性发生变化, 改变器件的电学性能.

由于重离子与核外电子发生非弹性碰撞的产物在材料中形成位移损伤的方式与 PKA 相同, 因此将非弹性碰撞产物与初级反冲原子统称为 PKA, 用于探究重离子及其 PKA 在 InP 材料中产生的位移损伤大小.

2.3 粒子源设置

宇宙射线主要由质子 (H)、 α 粒子 (He)、空间重离子组成, 其中空间重离子主要种类有碳 (C)、氮 (N)、氧 (O)、铁 (Fe), 因此选取这 4 种粒子作为入射粒子. 粒子源以面源入射, 大小与材料横截面 (500 μm \times 500 μm) 相同. 粒子源能量选取考虑到航天器外层镀有薄铝合金, 航天器内部电子系统的辐射环境应为经过铝层屏蔽后的宇宙射线, 因此选取经过 100 mil (2.54 mm, 国际默认值) 厚的铝层屏蔽后的宇宙射线能谱图作为此次模拟能谱. 如图 1(a) 所示, 是 CREME96^[25] 数据库中得到的宇宙射线能谱图, 图 1(b) 为经过 100 mil 厚的铝层屏

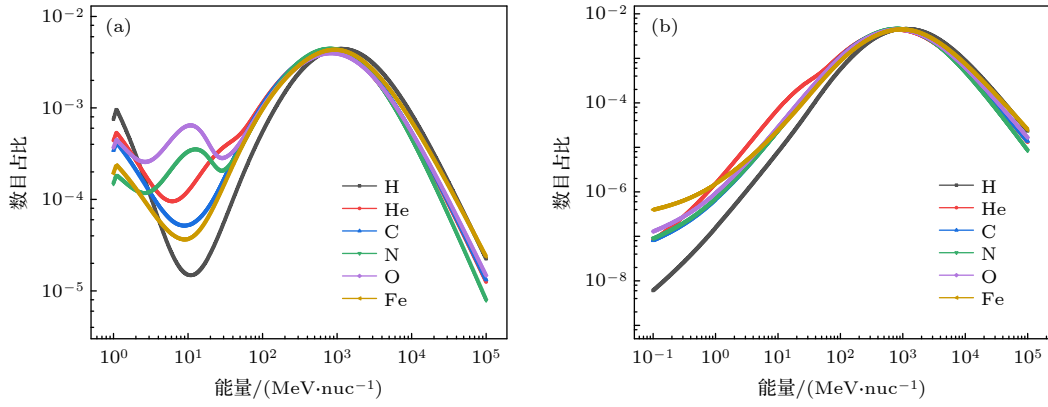


图 1 能谱图 (a) 宇宙射线能谱图; (b) 100 mil Al 屏蔽后的宇宙射线能谱图

Fig. 1. Energy spectrum: (a) Cosmic ray energy spectrum; (b) 100 mil Al shielded cosmic ray energy spectrum.

蔽后的宇宙射线能谱图. 可以观察到, 经过铝层屏蔽后的宇宙射线能谱在低能部分占比增多, 且能量从 1 MeV/nuc 降至 0.1 MeV/nuc (其中 nuc 表示核子数, 而质量数越大的粒子核子数越多, 如 C 的核子数为 12, 所以 1 MeV/nuc 对于 C 而言, 实际动能有 12 MeV.), 高能部分占比减少, 能谱峰值向左移动. 说明经过外层镀铝合金屏蔽后的宇宙射线能谱存在更多的低能重离子, 对于航天器内部电子元器件造成位移损伤的概率更大. 从图 1 能谱可知, 质量数越大的粒子能谱范围越广.

2.4 位移损伤计算

NIEL 是指单个粒子在单位质量厚度上非电离能量损失 [26], 单位为 MeV·cm²/g. NIEL 值越大, 表明粒子在材料中的非电离能量沉积越多, 产生位移损伤的能力越强. NIEL 计算方式如下:

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

式中, N_A 为阿伏伽德罗常数, A 为靶原子质量数, E 为反冲原子动能, $\sigma_i(E)$ 为第 i 个反冲原子的离位反应截面. $E_{\text{dam}}(E)$ 为能量为 E 的反冲原子在材料中的非电离损伤能.

Jun 等 [27] 在计算 NIEL 时, 将反应截面与非电离损伤能的乘积求和简化为

$$\sum_i \sigma_i(E) E_{\text{dam}}(E) = \frac{T_{\text{dam}}}{N_v h}, \quad (2)$$

式中, T_{dam} 是平均非电离损伤 (位移损失) 能, 将反冲原子 $E_{\text{dam}}(E)$ 加和除以入射粒子数即可得到, N_v 是原子密度, h 为靶材料厚度.

进一步推导得:

$$\text{NIEL} = T_{\text{dam}}/(\rho h), \quad (3)$$

式中, ρ 为靶材料密度, InP 材料密度取 4.56 g/cm³.

$E_{\text{dam}}(E)$ 用 Robinson 等 [28] 和 Akkerman 等 [29,30]

修正的 Lindhard 分离函数得到:

$$E_{\text{dam}}(E) = \frac{E}{1 + k_d g(\epsilon_d)}, \quad (4)$$

$$k_d = \frac{0.0793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} A_1^{3/2} A_2^{1/2}}, \quad (5)$$

$$\epsilon_d = \frac{E}{30.724 Z_1 Z_2 \sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} (1 + A_1/A_2)}, \quad (6)$$

$$g(\epsilon_d) = \begin{cases} \epsilon_d + 0.40244 \epsilon_d^{3/4} + 3.4008 \epsilon_d^{1/6}, & (E > 200 \text{ keV}), \\ 0.742 \epsilon_d + 1.6812 \epsilon_d^{3/4} + 0.90565 \epsilon_d^{1/6}, & (E < 200 \text{ keV}), \end{cases} \quad (7)$$

式中, Z_1, Z_2 是晶格原子和反冲原子的原子序数, A_1, A_2 是晶格原子和反冲原子的质量数. 对于化合物而言, 原子序数和质量数取化合物组成元素的加权平均数, 即:

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

$$A_{2,\text{average}} = \frac{\sum_i n_i A_i}{\sum_i n_i}, \quad (9)$$

式中, n_i 为元素 i 在化合物中的原子密度. 对于 InP 材料, 取 $Z_{2,\text{average}} = 32$, $A_{2,\text{average}} = 72.3$.

Akkerman-Robinson-Lindhard 修正函数被广泛应用于 NIEL 值的计算 [31,32], 由于 Geant4 程序中自带的 G4LindhardPartition 函数并没有包含 Akkerman 等 [29,30] 的修正部分, 重新编译 G4Lind-

hardPartition函数,使其包含 Akkerman 等 [29,30] 的修正计算.之后利用自行编译的 G4LindhardPartition 函数得到 InP 材料中入射粒子及 PKA 的非电离损伤能 $E_{\text{dam}}(E)$,代入 (2) 式即算出 NIEL 值.

2.5 物理过程可靠性验证

国内外对带电粒子入射硅 (Si) 的非电离能量损失规律及 NIEL 值计算资料丰富 [4,17,19,27,33],因此为验证程序可靠性,使用薄靶近似法 [19] 计算 1—300 MeV 单能质子入射 Si 和 InP 产生的 NIEL 值,即取材料厚度为入射粒子在材料中射程的 1/10,材料长宽为厚度的 10 倍.该方法的优点在于减少入射粒子在材料中慢化导致的 NIEL 值误差,同时保证材料中产生足够多的 PKA 数目,避免统计性误差.Geant4 模拟参数设置及计算结果如表 1 所示, Si 和 InP 射程由 SRIM [34] 软件计算得到.

如图 2 所示,将本文 Si 和 InP 的 NIEL 计算值与 Jun 等 [27] 和 Dale 等 [33] 计算结果做对比,发

现 NIEL 值变化趋势相同,即 NIEL 值随质子能量的增大而减小,说明低能质子在材料中产生的位移损伤大于高能质子.原因在于高能质子与原子核发生弹性碰撞的反应截面小,因此产生的 NIEL 值小.数值方面,本文计算值与文献值相近,数据符合一致性较好,说明本程序适用于计算带电粒子在 InP 中产生的 NIEL.

2.6 设计方案

关于 InP 辐照效应的研究多为 H, He, 因此本文在部分模拟中加入了 H, He 粒子的计算,将 C, N, O, Fe 的计算结果与 H, He 做对比,研究 H, He, 空间重离子位移损伤机制的异同.采用三种方法探究重离子入射 InP 材料产生的位移损伤: 1) 将 H, He, C, N, O, Fe 分别以 10^6 个粒子数目打入 InP 材料,取 InP 材料厚度为 500 μm ,比较质子、 α 粒子和重离子入射同一厚度的 InP 材料产生的 NIEL; 2) 从 CREME96 [25] 数据库中得到 H, He, C, N, O, Fe 的年注入量,以空间环境中粒子

表 1 Geant4 模拟相关参数和 NIEL 计算值
Table 1. Geant4 Simulated parameters and NIEL.

质子能量/MeV	Si射程/mm	Si厚度/mm	NIEL/(MeV·cm ² ·g ⁻¹)	InP射程/mm	InP厚度/mm	NIEL/(MeV·cm ² ·g ⁻¹)
1	0.016	0.0018	0.07004	0.013	0.0015	0.0558
2	0.048	0.0050	0.03763	0.038	0.0040	0.0302
5	0.216	0.0220	0.01519	0.164	0.0180	0.0135
10	0.709	0.0750	0.00968	0.518	0.0550	0.0079
20	2.390	0.2400	0.00759	1.680	0.2000	0.0051
50	12.180	1.2200	0.00483	8.320	1.0000	0.0037
100	41.620	4.1800	0.00265	27.530	3.0000	0.0034
200	138.630	14.0000	0.00148	90.270	9.5000	0.0032
300	273.570	28.0000	0.00138	176.860	18.0000	0.0033

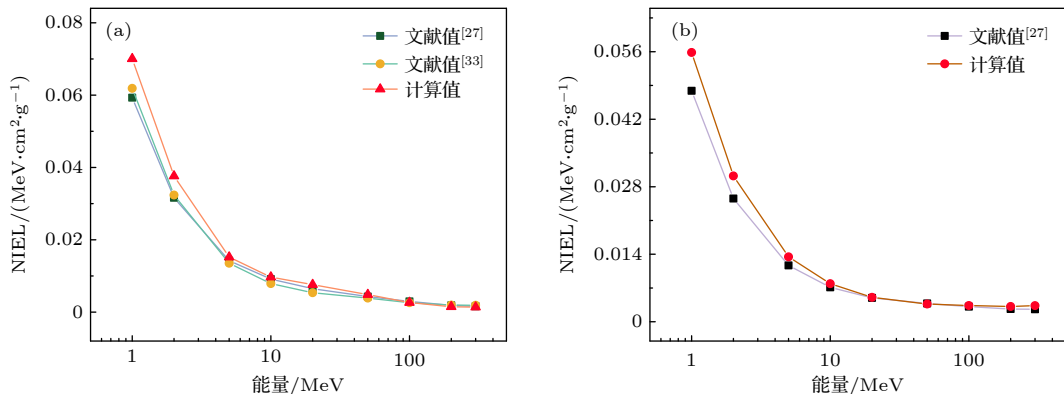


图 2 1—300 MeV 质子入射 (a) Si 和 (b) InP 的 NIEL 计算值

Fig. 2. 1—300 MeV proton NIEL for (a) Si and (b) InP.

年注量的数目打入 InP 材料, 取 InP 材料厚度为 500 μm , 统计一年中不同粒子在 InP 材料中的非电离能量沉积; 3) 将 C, N, O, Fe 分别以 10^6 个粒子数目打入 InP 材料, 取 InP 材料厚度为 500, 1000, 5000 μm , 比较相同粒子数下不同重离子入射不同厚度的 InP 材料产生的 NIEL, 具体设计方案如表 2.

表 2 重离子入射 InP 材料的设计方案
Table 2. Design scheme of heavy ion incident on InP.

	粒子种类	粒子数目	InP材料厚度/ μm
方法一	H	10^6	500
	He	10^6	500
	C	10^6	500
	N	10^6	500
	O	10^6	500
	Fe	10^6	500
	方法二	H	12728631
He		1187039	500
C		30945	500
N		8389	500
O		29305	500
Fe		3200	500
方法三		C	10^6
	N	10^6	500, 1000, 5000
	O	10^6	500, 1000, 5000
	Fe	10^6	500, 1000, 5000

3 结果与分析

3.1 相同粒子数下不同宇宙粒子入射 InP 产生的 NIEL

由于在 Geant4 程序中对于粒子能量的设置是采用能谱概率取值的方法, 为了保证能谱取值的遍历性和数据的可靠性, 数据都是经过 10 次计算后取平均值得到.

由 (1) 式可知, NIEL 值与粒子在材料中撞出的反冲原子的非电离损伤能 $E_{\text{dam}}(E)$ 有关, 因此入射粒子的 NIEL 值通过计算其产生的 PKA 非电离损伤能得到, 而 PKA 的 NIEL 值通过计算 PKA 撞出的 SKA 的非电离损伤能得到. 如表 3 所示, 列出 H, He, C, N, O, Fe 入射 500 μm 厚的 InP 材料的相关信息: 入射粒子及其 PKA 的 NIEL 值、NIEL 占比及变异系数. 其中, NIEL 占比等于各自 NIEL 值除以入射粒子及 PKA 的 NIEL 之和,

变异系数等于标准差除以平均值. 变异系数约在 10^{-2} 量级, 说明 10 次计算数据离散程度较小, 平均值具有代表性.

表 3 宇宙射线粒子及其 PKA 在 500 μm 厚的 InP 中产生的 NIEL 统计表

Table 3. NIEL of cosmic ray particles and their PKA produced in 500 μm InP.

粒子种类	统计种类	NIEL/ ($\text{MeV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$)	NIEL 占比/%	变异 系数
H	H	0.004316	98.365	0.03953
	PKA	7.1739×10^{-5}	1.635	0.08716
He	He	0.00861	96.443	0.02208
	PKA	3.17556×10^{-4}	3.557	0.04532
C	C	0.0165	99.906	0.01073
	PKA	1.54785×10^{-5}	0.094	0.20895
N	N	0.01798	99.928	0.01309
	PKA	1.2888×10^{-5}	0.072	0.30657
O	O	0.02132	99.936	0.01548
	PKA	1.3566×10^{-5}	0.064	0.20082
Fe	Fe	0.11922	99.976	0.00507
	PKA	2.9332×10^{-5}	0.024	0.15543

分析表 3 数据可知, 相较于 H, He, 重离子的 NIEL 值占比更大, 达 99% 以上, 而重离子 PKA 产生的 NIEL 值占比仅为 0.024%—0.094%. 原因在于重离子 PKA 在材料中产生的 SKA 数目少且其非电离沉积能量小, 可以忽略重离子的 SKA 在材料中产生的位移损伤, 研究重离子的 PKA 在 InP 材料中产生的位移损伤.

比较 6 种入射粒子的 NIEL 值, 发现 NIEL 值与原子序数的平方成正比, 这一趋势与文献 [35] 结论相符. 原因在于弹性散射截面与入射粒子原子序数的平方成正比. 入射粒子原子序数越大, 弹性散射截面越大, 在 InP 材料中产生位移损伤的能力越强, 即 NIEL 值越大. 对于同一厚度的 InP 材料, C, N, O, Fe 的 NIEL 值比 H, He 高 1—2 个量级, 说明空间重离子在 InP 材料中产生非电离能量沉积并造成位移损伤的概率远大于 H, He, 需要关注空间辐射环境下单个重离子入射 InP 电子器件导致的位移损伤效应.

3.2 年注量入射数目下的不同宇宙粒子入射 InP 产生的非电离能量沉积

根据 CREME96 数据库提供的能谱数据可知, H, He, C, N, O, Fe 粒子数目在宇宙射线中的占比

为 99.7%, 可以认为宇宙射线在电子器件中非电离能量沉积近似等于这 6 种粒子非电离能量沉积之和. 本节内容选取 H, He, C, N, O, Fe 作为代表粒子探究一年中宇宙射线在 InP 材料中产生的总非电离能量沉积. 6 种粒子在 $500\ \mu\text{m} \times 500\ \mu\text{m}$ 平面上一年内注入的总数目为 13987508 个, 在表 4 中列出了各粒子的入射数目、非电离损伤能、非电离损伤能占比 (各粒子非电离损伤能与 6 种粒子非电离损伤能之和的比值) 以及变异系数. 变异系数在 10^{-2} 量级, 说明 10 次计算的非电离损伤能平均值具有代表性.

表 4 不同粒子在 $0.125\ \text{mm}^3$ InP 产生的非电离损伤能统计表

Table 4. Total non-ionization damage energy produced by cosmic particles in $0.125\ \text{mm}^3$ InP.

粒子种类	入射数目	非电离损伤能/MeV	非电离损伤能占比/%	变异系数
H	12728631	12380.55	82.14	0.01366
He	1187039	2312.76	15.34	0.02426
C	30945	116.995	0.78	0.07564
N	8389	33.99	0.23	0.01548
O	29304	142.74	0.95	0.05274
Fe	3200	86.27	0.56	0.01301

由表 4 可知, 在 $0.125\ \text{mm}^3$ InP 材料中沉积的非电离损伤能最多的是 H, 占比为 82.14%, 与大多数理论和实验结果相符, He 的非电离损伤能占比达到了 15.34%, C, N, O, Fe 重离子的非电离损伤能总占比为 2.56%. 即使重离子的 NIEL 值高于 H, He, 但是重离子在空间辐射环境中的数目少, 因此在 InP 中产生的总非电离损伤能占比较低.

C 和 O 的数目以及 NIEL 值接近, 因此非电离损伤能占比接近, 分别为 0.78% 和 0.95%, 而 N 的 NIEL 值居中且数目较少, 其非电离损伤能占比最低为 0.23%. Fe 的数目最少但 NIEL 值比 C, N, O 大 1 个量级, 因此 3200 个 Fe 离子入射 $0.125\ \text{mm}^3$ InP 产生的非电离损伤能在空间重离子中不可忽视, 占比达到 0.56%. 以上统计有效对比了空间辐射环境中不同粒子产生的非电离损伤能, 为 InP 材料在空间中的应用提供参考数据.

3.3 不同重离子入射不同厚度的 InP 材料产生的 NIEL 及其深度分布

如表 5 所示, 统计了 C, N, O, Fe 在不同厚度

(500, 1000, 5000 μm) 的 InP 材料中产生的 NIEL 平均值及变异系数, 变异系数在 10^{-2} 量级, 说明数据离散程度较小, NIEL 平均值具有代表性.

表 5 重离子在 500, 1000, 5000 μm InP 产生的 NIEL 统计表

Table 5. NIEL of heavy ion produced in 500, 1000, 5000 μm InP.

重离子种类	材料厚度/ μm	NIEL 均值	变异系数
C	500	0.0165	0.01073
	1000	0.01639	0.00631
	5000	0.01539	0.00664
N	500	0.01798	0.01309
	1000	0.01755	0.01031
	5000	0.01628	0.00723
O	500	0.02132	0.01548
	1000	0.02087	0.00724
	5000	0.01878	0.00349
Fe	500	0.11922	0.00507
	1000	0.11591	0.00382
	5000	0.09486	0.00303

由表 5 可知, 随着材料厚度的增加, NIEL 值出现变小的趋势, 但是数值变化不大. 重离子在 500 μm 和 1000 μm 的 InP 中的 NIEL 值相差不多, 下降比例从 500 μm 到 1000 μm 约为 0.6%—2.7%; 重离子在 1000 μm 和 5000 μm InP 中的 NIEL 值相差略多, NIEL 值从 1000 μm 到 5000 μm 下降比例约为 6%—18%. 猜测原因在于当材料厚度增加后, 能谱中的中高能粒子的射程远大于 5000 μm , 在 InP 材料中产生均匀损伤, 而低能粒子会在材料前端发生完全沉积, 导致材料后端非电离损伤能相对降低, 使得 NIEL 值减小. 但是空间能谱中低能粒子数目占比小, 所以随着材料厚度的增大, 低能粒子在材料中的非均匀位移损伤对 NIEL 值的影响不显著, 即 NIEL 值减小幅度低.

由 (3) 式可知, 在材料种类确定的情况下, NIEL 的计算与平均非电离损伤能 T_{dam} 和材料厚度有关, 为了验证上述猜想, 需进一步研究空间重离子在 InP 材料中产生的 T_{dam} 随深度分布情况. 由于重离子在 500 μm 和 1000 μm InP 中的 T_{dam} 随深度分布与 5000 μm InP 前端分布相同, 因此只给出重离子在 5000 μm InP 材料中 T_{dam} 随深度的分布.

如图 3 所示, 实心球为 10 次计算得到的 T_{dam} 平均值, 阴影部分为 10 次计算结果的标准差. 由于

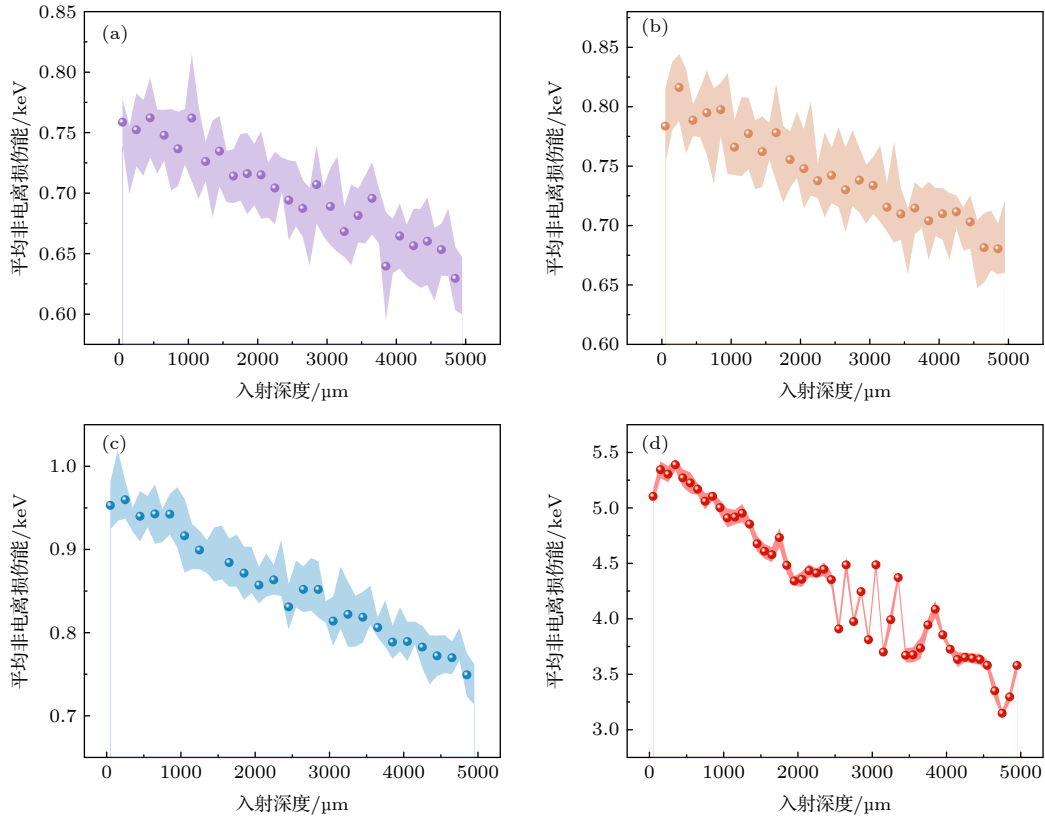


图 3 不同种类重离子 (a) C, (b) N, (c) O, (d) Fe 入射 5000 μm InP 产生的平均非电离损伤能随深度分布图

Fig. 3. Distribution average non-ionization damage energy of different heavy ions (a) C, (b) N, (c) O, (d) Fe with depth in 5000 μm InP.

粒子与物质相互作用发生概率为泊松分布, 同一能量粒子两次打入材料, 发生非电离反应的位置可能不同, 且本文使用从能谱中按概率取值的方式设置入射粒子动能, 增加了数据选取的随机性, 导致 T_{dam} 随深度的分布会出现数据涨落, 波动较大, 但依然可以得到重离子入射 InP 产生的 T_{dam} 随深度的分布趋势, 即 T_{dam} 随入射深度的增大而减小, 详细分析见下文. 图中标准差量级均为 10^{-2} , 但是由于 Fe 的 T_{dam} 波动较大, 在 2.5 keV 范围内波动, 而其他离子 T_{dam} 仅在 0.2 keV 范围内波动, 因此 Fe 的阴影区域相较于其他离子的阴影区域要小, 但从计算精度而言, C, N, O, Fe 的标准差均在同一量级. 同时, 因为 Fe 的质量数为 56, 将图 1(b) 横坐标乘以 56, 得到其能量范围为 5.6—5600000 MeV, 相较于 C, N, O 的能量范围, Fe 的能量取值范围更广, 所以 Fe 的 T_{dam} 波动更大.

由图 3 可知, C, N, O, Fe 入射 InP 材料产生的 T_{dam} 随深度增加而减少, 入射深度小于 1000 μm 时, T_{dam} 的下降趋势尚不明显, 则表 5 中 NIEL 值下降比例小. 当入射深度大于 1000 μm 后, T_{dam} 近似成线性下降, 材料后端的非电离能量沉积相较于于

前端减少很多, 则表 5 中 NIEL 值下降比例增大. 综上所述, 随着材料厚度的增大, 低能重离子在较厚材料前端发生完全沉积, 导致材料整体的位移损伤分布不均匀, 即 T_{dam} 在材料中出现下降情况, 进而使 NIEL 值减小.

分析图 3 纵坐标可知, 随着原子序数的增大, C, N, O, Fe 入射 InP 材料产生的 T_{dam} 的分布区间从 0.63—0.77 keV 逐渐上升为 3.5—5 keV, 说明随着原子序数的增大, T_{dam} 也逐渐增大, 则总非电离损伤能增大. 与表 3 中 NIEL 值随原子序数的增大而增大的趋势相同. 说明质量数大的重离子在 InP 材料中非电离能量沉积多, 产生位移损伤的能力强. 因此, 空间辐射环境中需要关注低能重离子入射 InP 电子器件产生的位移损伤.

4 结 论

本文使用 Geant4 模拟空间重离子 (C, N, O, Fe) 入射 InP 产生的位移损伤, 主要结论有: 1) 在 500 μm InP 中, 比较 H, He, C, N, O, Fe 的 NIEL 值, 发现 NIEL 值与原子序数的平方成正比,

Fe NIEL 值最大. 同时比较了 6 种粒子及其 PKA 的 NIEL 值, H, He NIEL 值比 PKA 的大 1—2 个量级, 而重离子 NIEL 值比 PKA 大 3—4 个量级, 说明空间重离子在 InP 材料中产生的位移损伤主要与重离子产生的 PKA 有关, 重离子产生的 SKA 在 InP 材料中的位移损伤可忽略; 2) 在实际应用中, 由于空间重离子数目占比小, 一年中 H, He 在 0.125 mm^3 InP 中产生的非电离损伤能在空间辐射环境中占比达 97.44%, 重离子占比仅为 2.56%, 但重离子 NIEL 值约是 H, He 的 2—30 倍, 单个空间重离子在 InP 电子器件中的位移损伤效应不可忽略; 3) 统计了 C, N, O, Fe 在 500, 1000, 5000 μm InP 中的 NIEL 值及 T_{dam} 随深度分布, 发现 NIEL 值随厚度增大而减小, 但减小幅度不大, 原因在于当低能离子射程小于 InP 材料厚度时, 在材料前端发生完全沉积, 导致后端非电离能量沉积相对变小, 进而使 NIEL 值随深度增大而减小. 进一步分析 T_{dam} 随深度分布可知, T_{dam} 随粒子入射深度的增加而减小, 验证了上述说法的正确性, 同时说明空间重离子在 InP 材料中产生的位移损伤严重区域主要分布在材料前端.

综上所述, 空间辐射环境中需要考虑低能高原子序数离子在 InP 电子器件中产生的位移损伤效应. 本文的工作对于 InP 电子器件在空间环境中的应用有重要意义, 为 InP 电子器件在轨性能预测和屏蔽防护设计提供参考数据.

参考文献

- [1] Yamaguchi M, Araki K, Kojima N, Ohshita Y 2020 *47th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)* Calgary, OR, Canada, June 15–August 21, 2020 pp149–151
- [2] O'Neill P M 2010 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **57** 3148
- [3] Srour J R, Palko J W 2013 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **60** 1740
- [4] Raine M, Jay A, Richard N, Goiffon V, Girard S, Gaillardin M, Paillet P 2017 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **64** 133
- [5] Yamaguchi M, Uemura C, Yamamoto A 1984 *J. Appl. Phys.* **55** 1429
- [6] Yamaguchi M, Ando K 1988 *J. Appl. Phys.* **63** 5555
- [7] Walters R J, Messenger S R, Summers G P, Burke E A, Keavney C J 1991 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **38** 1153
- [8] Keavney C J, Walters R J, Drevinsky P J 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 60
- [9] Walters R J 1995 *Microelectronics J.* **26** 697
- [10] Messenger S R, County B, Road I H 1996 *Solid. State. Electron.* **39** 797
- [11] Yamaguchi M, Takamoto T, Ohmori M 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 1116
- [12] Walters R J, Messenger S R, Summers G P, Romero M J, Al-Jassim M M, Araújo D, Garcia R 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 3558
- [13] Herre O, Wesch W, Wendler E, Gaiduk P, Komarov F 1998 *Phys. Rev. B-Condens. Matter Mater. Phys.* **58** 4832
- [14] Gasparotto A, Carnera A, Frigeri C, Priolo F, Fraboni B, Camporese A, Rossetto G 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 753
- [15] Kamarou A, Wesch W, Wendler E, Undisz A, Rettenmayr M 2008 *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **78** 054111
- [16] Schnohr C S, Kluth P, Giulian R, Llewellyn D J, Byrne A P, Cookson D J, Ridgway M C 2010 *Phys. Rev. B-Condens. Matter Mater. Phys.* **81** 1
- [17] Summers G P, Burke E A, Shapiro P, Messenger S R, Walters R J 1993 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **40** 1372
- [18] Allison J, Amako K, Apostolakis J, et al. 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 270
- [19] 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]
- [20] Xie F, Zang H, Liu F, He H, Liao W L, Huang Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 192401 (in Chinese) [谢飞, 臧航, 刘方, 何欢, 廖文龙, 黄煜 2020 物理学报 **69** 192401]
- [21] Garcia A R, Mendoza E, Cano-Ott D, Nolte R, Martinez T, Algorta A, Tain J L, Banerjee K, Bhattacharya C 2017 *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A: Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.* **868** 73
- [22] Li X J, Liu M C, Sun Z L, Lan M J, Xiao L Y, He S Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 058502 (in Chinese) [李兴冀, 刘超铭, 孙中亮, 兰慕杰, 肖立伊, 何世禹 2013 物理学报 **62** 058502]
- [23] Mendenhall M H, Weller R A 2005 *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B.* **227** 420
- [24] Weller R A, Mendenhall M H, Fleetwod D M 2004 *Trans. Nucl. Sci.* **51** 3669
- [25] Boberg P R, Brownstein B, Dietrich W F, Flueckiger E O, Petersen E L, Shea M A, Smart D F, Smith E C 1997 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **44** 2150
- [26] Summers G P, Burke E A, Xapsos M A 1995 *Radiat. Meas.* **24** 1
- [27] Jun I, Xapsos M A, Messenger S R, Burke E A, Walters R J, Summers G P, Jordan T 2003 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50** 1924
- [28] Robinson M T, Torrens L M 1974 *Phys. Rev. B* **8** 15
- [29] Akkerman A, Barak J 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 3667
- [30] Akkerman A, Barak J 2007 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms* **260** 529
- [31] Jun I, Kim W, Evans R 2009 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **56** 3229
- [32] Lu W, Wang T Q, Wang X G, Liu X L 2011 *Nucl. Tech.* **34** 529 (in Chinese) [路伟, 王同权, 王兴功, 刘雪林 2011 核技术 **34** 529]
- [33] Dale C G, Chen L, McNulty P J, Marshall P W, Burke E A 1994 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **41** 197
- [34] Ziegler J F, Ziegler M D, Biersack J P 2010 *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B* **268** 1818
- [35] Xapsos M A, Burke E A, Badavi F F, Townsend L W, Wilson J W, Jun I 2004 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **51** 3250

Simulation of displacement damage in indium phosphide induced by space heavy ions*

Bai Yu-Rong Li Yong-Hong Liu Fang Liao Wen-Long He Huan
 Yang Wei-Tao He Chao-Hui[†]

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

(Received 9 February 2021; revised manuscript received 22 April 2021)

Abstract

Indium phosphide (InP) has the characteristics of high electron mobility, large band gap, high temperature resistance, and radiation resistance. It is an important material of electronic devices in the space radiation environment. With the miniaturization of electronic devices, the displacement damage (DD) effect caused by a single heavy ion in the device may give rise to permanent failure. Therefore, this paper uses Monte Carlo software Geant4 to simulate the transportation process of space heavy ions(C, N, O, Fe) in InP. The non-ionizing energy loss (NIEL) of heavy ions is calculated for getting the information about displacement damage. Some conclusions are drawn as follows. 1) NIEL is proportional to the square of the atomic number, which means that single Fe can make severe displacement damage in InP. 2) The heavy ions NIEL is 3 to 4 orders of magnitude larger than PKA NIEL. The NIEL is proportional to the non-ionizing damage energy of recoil atoms produced by nuclear elastic collision, which indicates that the primary recoil atoms produced by heavy ions are the main cause of InP DD. 3) The number of heavy ions in space is small, so the proportion of total non-ionizing damage energy produced by heavy ions in 0.0125 mm³ InP is only 2.56% in one year. But the NIEL of heavy ions NIEL is 2–30 times that of protons and α particles, so the DD effect caused by single heavy ion incident on InP electronic device still needs to be considered. 4) NIEL decreases slightly with the increase of material thickness. The reason is that low-energy heavy ions are completely deposited in the front of InP, resulting in a non-uniform distribution of non-ionizing energy deposited in the material. Analyzing the dependence of mean DD energy with depth, we find that mean DD energy decreases with incident depth increasing, which means that the most severe DD region of heavy ions in InP is in the front of material.

Keywords: indium phosphide, displacement damage, Geant4, non-ionizing energy loss

PACS: 24.10.Lx, 61.80.-x

DOI: 10.7498/aps.70.20210303

* Project supported by the Basic Strength Program of China (Grant No. 2019-JCJQ-ZD-267).

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