

## InP中子位移损伤效应的Geant4模拟

李薇 白雨蓉 郭昊轩 贺朝会 李永宏

### Geant4 simulation of neutron displacement damage effect in InP

Li Wei Bai Yu-Rong Guo Hao-Xuan He Chao-Hui Li Yong-Hong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 082401 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211722

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211722>

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

#### 空间重离子入射磷化铟的位移损伤模拟

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

物理学报. 2021, 70(17): 172401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210303>

#### 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>

#### 14 nm FinFET和65 nm平面工艺静态随机存取存储器中子单粒子翻转对比

Comparison of neutron induced single event upsets in 14 nm FinFET and 65 nm planar static random access memory devices

物理学报. 2020, 69(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191209>

#### 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>

#### 基于蒙特卡罗模拟研究锆钛酸铅镧材料的中子辐照损伤

Simulation of neutron irradiation damage in lead lanthanum zirconate titanate by Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 076101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212041>

InP 中子位移损伤效应的 Geant4 模拟<sup>\*</sup>李薇 白雨蓉 郭昊轩 贺朝会<sup>†</sup> 李永宏

(西安交通大学核科学与技术系, 西安 710049)

(2021 年 9 月 16 日收到; 2021 年 12 月 7 日收到修改稿)

磷化铟 (InP) 作为第二代化合物半导体材料, 抗辐照能力强, 光电转换效率高, 在光子领域和射频领域具有优势. 大气空间中, InP 半导体器件受大气中子辐照影响, 器件性能发生退化. 本文采用蒙特卡罗模拟软件 Geant4 对 InP 中子辐照效应进行模拟, 得到 InP 中不同能量中子产生的位移损伤初态分布. 结果表明: 在微米量级内, 非电离能量损失 (NIEL) 随深度均匀分布, 在厘米及更高量级上, NIEL 随着入射深度的增大而降低, 当靶材料足够厚时可以降低至零; 分析 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的 NIEL 及其随深度分布, 发现 NIEL 随入射中子能量的增加呈现出先升后降的趋势, 该趋势主要由非弹性散射反应产生的初级反冲原子 (PKA) 造成; 分析 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的 PKA 种类、能量, 发现 In/P 的 PKA 占比较大, 是产生位移损伤的主要因素, 中子能量越高, PKA 的种类越丰富, PKA 最大动能越大, 但 PKA 主要分布在低能部分. 研究结果对 InP 基 5G 器件在大气中子辐射环境中的长期应用具有理论和指导价值.

**关键词:** 中子, InP, 位移损伤, 非电离能量损失**PACS:** 24.10.Lx, 61.80.-x, 25.40.Dn, 25.40.Fq**DOI:** 10.7498/aps.71.20211722

## 1 引言

InP 作为重要的第二代化合物半导体材料, 禁带宽度大, 工作温度高 (400—450  $^{\circ}\text{C}$ ), 具有高的光电转换效率、高的电子迁移率以及比 Si, GaAs 更强的抗辐射能力等优良特性, 在光子领域和射频领域具有优势, 在固态发光、光纤通信、微波通信、卫星、5G 技术等民用和军事领域前景广阔.

在大气空间中, 高能宇宙射线<sup>[1]</sup>进入地球大气层并与其中的氮 (N)、氧 (O) 等元素发生相互作用, 产生次级宇宙射线. 由于带电粒子的穿透性较弱, 因此大气中存在的粒子主要是中子, 称为大气中子<sup>[2]</sup>. InP 材料可能因中子辐射产生晶格缺陷, 形成永久性位移损伤<sup>[3]</sup>; 也会导致 InP 半导体器件发生单粒子效应 (SEE), 引起单粒子翻转 (SEU)、单粒子锁定 (SEL)、单粒子瞬态 (SET)、单粒子功

能中止 (SEFI) 等多种失效类型<sup>[4]</sup>. 通过研究 InP 材料的中子辐照效应, 可以评估其抗辐照性能水平, 为器件的选型提供有利依据.

研究材料的辐照损伤效应一般有两种方法. 一是实验手段, 如电子/质子/离子/中子辐照实验研究; 二是计算机模拟. 两种方法互为补充. 在国外, Inguibert 和 Gigante<sup>[5]</sup>开发出软件 NEMO, 通过计算获得电子、质子、中子和重离子等辐照粒子的非电离能量损失 (NIEL)<sup>[6]</sup>, 尚在不断完善中. Autran 等<sup>[7]</sup>对 InP 等 8 种 III-V 二元化合物半导体的高能大气中子辐射辐照敏感性进行探索. Ruzin 等<sup>[8]</sup>比较了 Si 材料的质子和中子辐照相关性. Messenger 等<sup>[9]</sup>通过对 GaAs/Ge 太阳能电池进行辐照实验, 使用 NIEL 对中子和质子的辐照相关性进行描述. 此外, Tonigan 等<sup>[10]</sup>也对中子和质子辐照相关性进行研究. 在国内, 蒋维等<sup>[11]</sup>采用 Geant4<sup>[12]</sup>和 FLUKA 模拟软件进行辐照研究, 并比较了两种模拟软

<sup>\*</sup> 基础加强计划 (批准号: 2019-JCJQ-ZD-267) 资助的课题.<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: hechaohui@mail.xjtu.edu.cn

件在暗物质粒子探测器 BGO 量热计中的质子簇射特性. 白雨蓉等<sup>[13]</sup>使用蒙特卡罗方法模拟研究了空间重离子对 InP 的位移损伤效应, 郭达禧等<sup>[14]</sup>使用 Geant4 模拟软件模拟了中子在 SiC 中的输运过程, 谢飞等<sup>[15]</sup>对 GaN 材料在不同中子辐照环境下的位移损伤进行了模拟研究. 此外, 还有有关质子在 Si 中<sup>[16]</sup>、低能质子在 Si 和 GaAs 中的非电离能损的计算研究<sup>[17]</sup>, 以及空间 GaAs/Ge 太阳能电池辐照损伤过程的研究<sup>[18]</sup>. 但是, 中子在 InP 中的 NIEL 分布情况未见相关报道. 本文基于大气中子能谱, 使用 Geant4 分别模拟不同能量中子辐照 InP 后产生的位移损伤效应, 包括 NIEL 随深度的分布情况, NIEL 与入射中子能量的关系, 以及初级反冲原子 (PKA) 的信息和能谱.

## 2 计算方法与仿真模型

### 2.1 大气中子能谱

根据中国散裂中子源 (China Spallation Neutron Source, CSNS) 提供的第 2 靶站微分中子能谱和标准大气中子谱<sup>[19]</sup>, 发现大气中子能谱范围非常宽, 其中, 20 MeV 以下低能中子占绝大多数. 又由于辐照损伤中起主要作用的是 1 MeV 以上的快中子, 所以将入射单能中子能量设置在 1—20 MeV 范围内, 分别为 1, 2.54, 5, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 19.9 MeV. 其中, 2.54 MeV 是考虑氘氘 (D-D) 聚变产生的中子, 14 MeV 是考虑氘氘 (D-T) 聚变产生的中子.

### 2.2 非电离能量损失

NIEL 是辐照粒子在材料中以位移过程和晶格振动过程沉积的能量, 会引起位移损伤, 是位移损伤效应的衡量标准. 本文通过 Lindhard 分离函数计算得到 NIEL.

修正 Lindhard 分离函数<sup>[20,21]</sup>如下:

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

其中

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

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

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

其中,  $E_{\text{dam}}$  是损伤能,  $T$  是初级反冲原子能量,  $Z_1$ ,  $Z_2$  和  $A_1$ ,  $A_2$  分别为初级反冲原子与靶原子的原子序数和质量数. 对于化合物, 原子序数  $Z_2$  和质量数  $A_2$  需要加权平均, 即

$$Z_{2,\text{average}} = \frac{\sum_i n_i Z_i}{\sum_i n_i}, \quad (5)$$

$$A_{2,\text{average}} = \frac{\sum_i n_i A_i}{\sum_i n_i}. \quad (6)$$

计算得 InP 的  $Z_{2,\text{average}} = 32$ ,  $A_{2,\text{average}} = 72.90$ . 将其代入修正 Lindhard 函数中, 即可计算得到损伤能  $E_{\text{dam}}$ . NIEL 与损伤能  $E_{\text{dam}}$  之间存在线性关系:

$$\text{NIEL} = \frac{E_{\text{dam}}(T)}{\rho h n}, \quad (7)$$

其中,  $\rho$  是靶材料的密度,  $h$  是靶材料的厚度,  $n$  是入射粒子数目. 通过 (7) 式可计算得出 NIEL 数值.

### 2.3 可靠性验证

#### 2.3.1 物理过程可靠性验证

中子与 InP 晶格原子相互作用, 发生弹性散射 (n, n)、非弹性散射 (n, n')、俘获反应 (n,  $\gamma$ ) 以及发射带电粒子反应 (n,  $\alpha$ )(n, p) 等, 将一部分动能传递给晶体原子, 使得晶体原子离开晶格位置成为初级撞出原子, 又称初级反冲原子 (PKA). 高能 PKA 继续运动撞击晶体中其他原子, 使其离位, 产生次级反冲原子, 次级反冲原子继续运动撞击其余靶原子, 造成一系列级联碰撞, 形成原子离位峰. 产生空位、间隙原子以及团簇等缺陷. 本文采用 Geant4 标准物理模型库, 包含高精度 (n, n), (n, n'), (n,  $\gamma$ ), (n,  $\alpha$ ), (n, p) 等基本物理过程. 其中, 如果 PKA 是质子, G4hIonisation, G4Lelastic 和 G4CascadeInterface 分别用于模拟电离过程、(n, n) 和 (n, n'). 如果 PKA 不是质子, G4ionIonisation 和 G4BinaryLightIonReaction 分别用于模拟电离过程和核相互作用过程.

ENDF 是由美国国家核数据中心发布的、包含反应堆物理和屏蔽设计所需的核数据库. 根据

ENDF 提供的 In, P 单质的反应截面, 采用布拉格相加法则混合得到 InP 化合物的反应截面. 这种混合方式忽略了化合物中化学键的作用, 原因在于化学键的能量远小于粒子能量, 不会对结果产生明显的影响. 通过比对 Geant4 计算得到的弹性散射截面数据与中子评价数据库 ENDF 获取的 InP 中子截面验证程序的可靠性, 截面计算公式为

$$\sigma = \frac{\Delta n}{NhIS}, \quad (8)$$

其中,  $\Delta n$  为单位事件发生弹性碰撞的次数,  $N$  为入射粒子数目,  $h$  为 3  $\mu\text{m}$  薄靶厚度,  $I$  为入射粒子束强度,  $S$  为靶横截面积.

图 1 为 Geant4 模拟结果与 ENDF 数据库比对图, 两者符合良好, 说明本文物理过程模拟结果可靠. 此外, 这套标准物理模型也经过了其他学者<sup>[13,14]</sup>验证, 结果可靠.

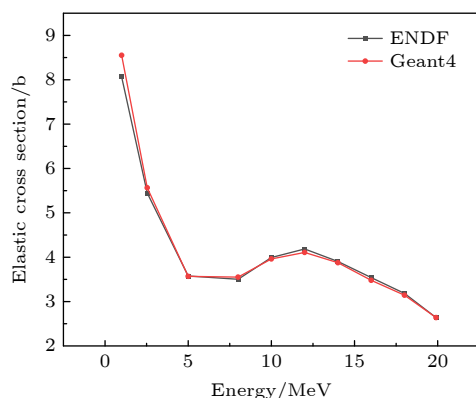


图 1 InP 的中子弹性散射截面

Fig. 1. Neutron elastic scattering cross section of InP.

### 2.3.2 模拟结果可靠性验证

目前有关中子辐照 InP 产生的位移损伤的实验研究还未见详细报道. 已有研究<sup>[22]</sup>给出通过位移比释动能计算得出的 1 MeV 中子在 InP 中的 NIEL 具体数值为 0.00064  $\text{MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$ , 该数值与本文用 Lindhard 函数计算得出的 NIEL 数值 0.000526  $\text{MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$  进行对比, 相对误差为 -0.178, 在允许范围内, 证明本文 NIEL 结果具有可信度.

## 2.4 仿真模型

大气环境中 InP 可用作太阳能电池的结构材料, 而作为基极的 InP 厚度一般为微米量级. 因此, 参考 Walters 等<sup>[23]</sup>研究中 n+p 型 InP/Si 太阳能

电池中 InP 基极的厚度, 本文采用 3  $\mu\text{m}$  厚度薄靶作为 InP 靶材料. 同时, 由于中子能量为 1—20 MeV, 根据平均自由程与宏观截面之间的倒数关系, 计算得到中子平均自由程在厘米量级, 因此采用 3 cm 厚靶作为对照, 以探究中子对 InP 的位移损伤效应. 中子沿厚度方向从表面垂直入射到 InP 中. 结构如图 2 所示, 外层立方体为 world, 内层立方体为 InP 晶体.

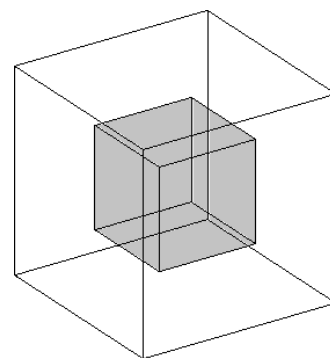


图 2 Geant4 模拟的 InP 结构图

Fig. 2. Structure of InP simulated by Geant4.

## 3 模拟结果分析

### 3.1 位移缺陷分布

对于 3  $\mu\text{m}$  薄靶, 中子从 InP 表面垂直入射, 入射中子数目均为  $10^9$ ; 对于 3 cm 厚靶, 中子同样从表面垂直入射, 数目均为  $10^7$ . 通过统计 PKA 的种类、数目、位置、能量以及 NIEL 等信息, 探究中子入射 InP 产生的位移损伤机制. 图 3 和图 4 为 1—20 MeV 中子在 3  $\mu\text{m}$ /3 cm InP 中产生的 NIEL 随深度分布图.

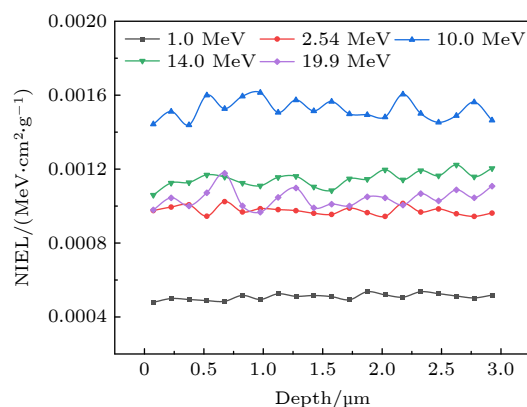


图 3 各能量中子在 3  $\mu\text{m}$  薄靶内的 NIEL 深度分布

Fig. 3. NIEL depth distribution of neutrons at different energies in the 3  $\mu\text{m}$  thin target.

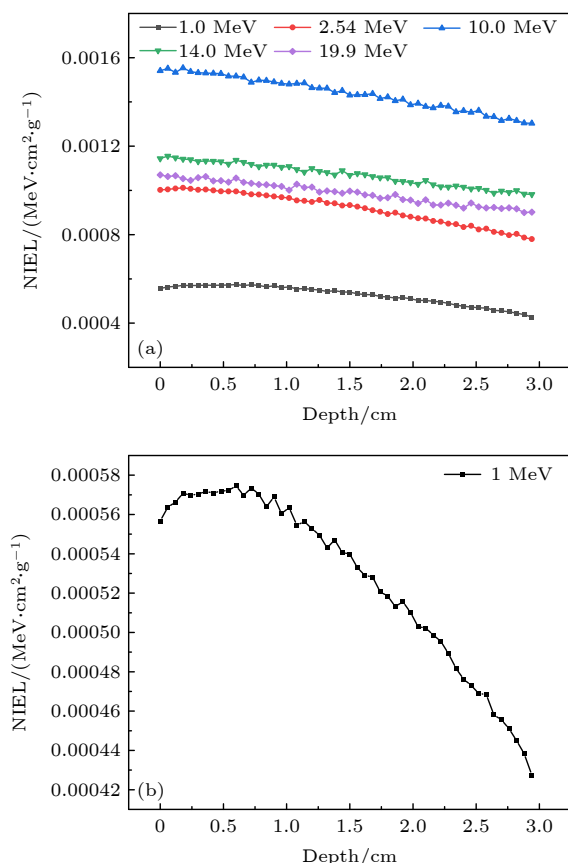


图4 (a) 各能量中子在 3 cm 厚靶内的 NIEL 深度分布;  
(b) 1 MeV 中子在 3 cm 厚靶内的 NIEL 深度分布  
Fig. 4. (a) NIEL depth distribution of neutrons at different energies in the 3 cm thick target; (b) NIEL depth distribution of 1 MeV neutrons in the 3 cm thick target.

从图3可知, 由于 3  $\mu\text{m}$  较薄, 中子在 3  $\mu\text{m}$  内碰撞次数少, 沉积能量分布均匀. 则 3  $\mu\text{m}$  范围内入射深度所导致的 NIEL 的差异不太明显, 即中子在微米量级 InP 中产生的 NIEL 与深度无关.

分析图4可知, 当 InP 材料厚度增至 3 cm 时, NIEL 随深度的增大呈现出缓慢下降的趋势, 这表明随着深度的加大, NIEL 逐渐减小. 原因在于中子动能因碰撞而不断减小, 沉积的非电离能量损失也随之减小.

由于在 cm 量级可以观察到 NIEL 缓慢减小的规律, 因此可以合理外推, 当靶厚度继续增加时, NIEL 会继续减小. 且由于中子不带电, 因此不会出现带电粒子特有的 Bragg 峰<sup>[24]</sup>, 因此当靶材料足够厚时, 中子的 NIEL 应当随着深度的增加而单调下降, 直至减小为零. 为证明这一结论, 模拟 1 MeV 中子从 100 cm InP 厚靶表面垂直入射, 得到 NIEL 随深度变化如图5所示, NIEL 在 80 cm 处趋向于 0, 则结论成立.

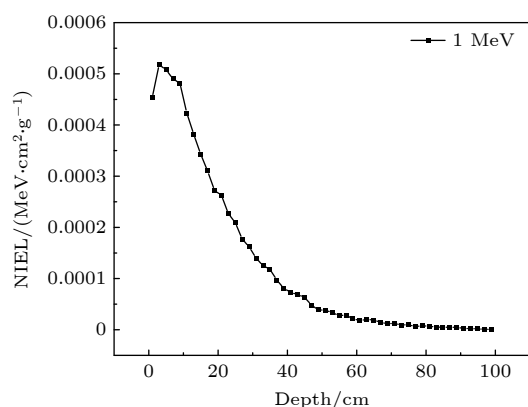


图5 1 MeV 中子在 100 cm 厚靶内的 NIEL 深度分布  
Fig. 5. NIEL depth distribution of 1 MeV neutrons in the 100 cm thick target.

### 3.2 位移损伤与入射中子能量的关系

分析 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$ /3 cm InP 产生的总 NIEL、非弹性 NIEL(非弹性散射产生)、弹性 NIEL(弹性散射产生)、俘获 NIEL(俘获反应产生), 比较中子不同反应产生的 NIEL, 进一步了解中子入射 InP 的位移损伤机制. 根据 Lindhard 分离函数, 模拟得到 NIEL 与中子能量关系如图6所示.

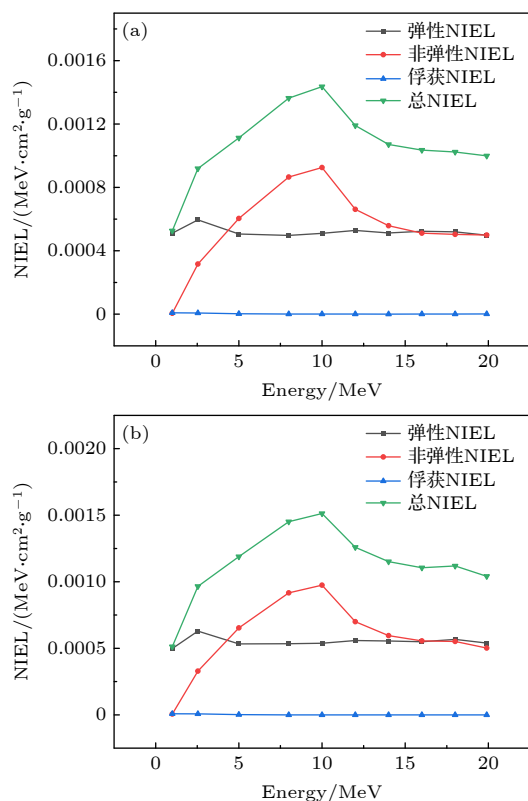


图6 NIEL 与中子能量的关系 (a) 3 cm 厚靶; (b) 3  $\mu\text{m}$  薄靶  
Fig. 6. The relationship between NIEL and neutron energy: (a) 3 cm thick target; (b) 3  $\mu\text{m}$  thin target.



分析图 6 可知, 在 1—10 MeV 的入射中子能量范围内, 总 NIEL 随中子能量的增大呈现上升趋势; 10—20 MeV 范围内, 总 NIEL 呈现下降趋势. 原因在于 1—20 MeV 范围内, 弹性散射 NIEL 数值在  $0.0005 \text{ MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$  附近波动, 入射中子能量造成的 NIEL 变化不明显, 同时, 俘获反应贡献的 NIEL 很低, 相比之下, 非弹性散射造成的 NIEL 数值大且变化明显. 因此, NIEL 的变化趋势主要由非弹性散射产生的 PKA 贡献得到. 非弹性散射反应在中子入射 InP 的运输过程中占主要作用.

### 3.3 PKA 的种类、数目及动能信息

1—20 MeV 中子入射  $3 \mu\text{m}$  的 InP 薄靶, 得到 PKA 的种类、数目、动能等信息见表 1, PKA 数目和入射中子能量的关系如图 7 所示, PKA 能谱如图 8 所示.

分析表 1 可知, 1—20 MeV 中子入射 InP 产生的 PKA 中, In/P PKA 占绝大多数, 其中, In 元素占比高于 P 元素, 原因在于 In 的中子反应截面大于 P, 则 In PKA 数量多. 随着中子能量的增加, PKA 种类越来越丰富, 且每种元素对应的同位素种类也越来越丰富, In/P PKA 总占比逐渐下降,

表 1 1—20 MeV 中子入射  $3 \mu\text{m}$  的 InP 薄靶所得 PKA 的种类、数目与动能信息

Table 1. The type, number, and energy information of PKA obtained from  $3 \mu\text{m}$  InP thin target irradiated by 1—20 MeV neutrons.

入射中子能量/MeV	反冲核(PKA)种类	最小动能/eV	最大动能/keV	元素占比/%
1.00	$^{113-116}\text{In}$	1.11	35.01	70.51
	$^{31-32}\text{P}$	2.48	122.37	29.49
2.54	$^{113-116}\text{In}$	1.41	89.03	62.08
	$^{31-32}\text{P}$	14.74	310.69	36.57
	$^1\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$	1.57	263.36	1.36
5.00	$^{113, 115, 116}\text{In}$	2.33	173.05	59.21
	$^{31-32}\text{P}$	6.10	612.41	37.57
	$^1\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ ,	2.21	4283.90	3.22
8.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.57	281.82	64.42
	$^{31}\text{P}$	17.12	980.54	28.80
	$^1\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{113, 115}\text{Cd}$	1.00	7282.10	6.78
10.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.29	350.53	66.42
	$^{31}\text{P}$	1.00	1225.70	25.58
	$^1\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{115}\text{Cd}$ , $^{112}\text{Ag}$	1.00	9287.10	8.00
12.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.11	417.21	63.21
	$^{31}\text{P}$	1.00	1473.49	27.51
	$^1\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{113, 115}\text{Cd}$ , $^{112}\text{Ag}$	1.00	14315.00	9.29
14.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.04	492.34	60.26
	$^{31}\text{P}$	1.00	1705.77	29.71
	$^{1-2}\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{112-115}\text{Cd}$ , $^{110, 112}\text{Ag}$	1.00	16463.00	10.03
16.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.12	556.47	57.82
	$^{31}\text{P}$	1.00	1967.15	31.98
	$^{1-2}\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{113-115}\text{Cd}$ , $^{110, 112}\text{Ag}$	1.00	17593.00	10.20
18.00	$^{113, 115}\text{In}$	1.45	631.07	54.70
	$^{31}\text{P}$	1.00	2215.82	34.42
	$^{1-3}\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{111-115}\text{Cd}$ , $^{110, 112}\text{Ag}$	1.00	21054.00	10.88
19.90	$^{113, 115}\text{In}$	2.04	703.43	50.34
	$^{31}\text{P}$	1.00	2453.43	37.58
	$^{1-3}\text{H}$ , $^{31}\text{Si}$ , $^4\text{He}$ , $^{28}\text{Al}$ , $^{111-115}\text{Cd}$ , $^{110, 112}\text{Ag}$	1.00	22391.00	12.08

其他 PKA 占比增加. 原因在于中子能量越高, 核反应种类越多, 则反应产物增加, 主要包括  $^{113-116}\text{In}(n, p)^{113-116}\text{Cd}$ ,  $^{113, 115}\text{In}(n, \alpha)^{110, 112}\text{Ag}$ ,  $^{30, 31}\text{P}(n, p)^{30, 31}\text{Si}$ ,  $^{30, 31}\text{P}(n, \alpha)^{27, 28}\text{Al}$  等反应产生的 Cd 等新核以及反冲出的 H, He 等 PKA. 比较 PKA 最小和最大动能可知, 随着入射中子能量的增加, PKA 的能量范围也逐渐扩大.

图 7 为 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的不同种类 PKA 占比图, 主要统计了总 PKA, In PKA, P PKA, 其他元素 PKA(H, Si, He, Al, Cd 等). 分析图 7 可知, In PKA 占比大, 与总 PKA 变化趋势相同, 是产生位移损伤的主要因素.

图 8 为 1—20 MeV 中子入射 InP 产的 PKA 能谱图, 分析可知, PKA 动能主要分布在低能部分, 原因在于中子质量远小于靶核质量, 传递给反冲核的能量很低. 高能 PKA 主要是质子和  $\alpha$ .

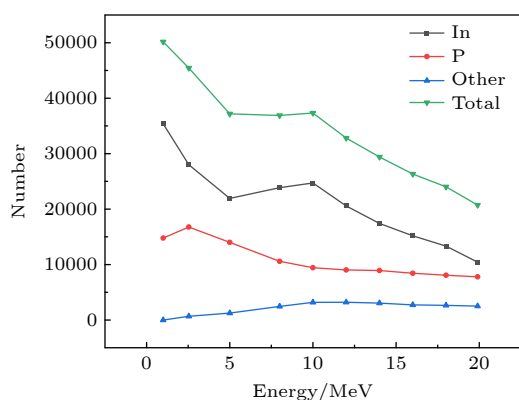


图 7 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的不同种类 PKA 数目

Fig. 7. The number of different PKA produced by 1–20 MeV neutrons incident on 3  $\mu\text{m}$  InP.

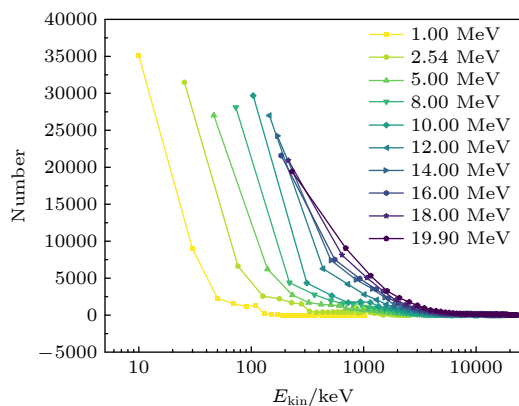


图 8 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 的 PKA 能谱

Fig. 8. The energy spectrum of PKA produced by 1–20 MeV neutrons incident on 3  $\mu\text{m}$  InP.

综上所述, 1—20 MeV 中子入射 InP, 主要产生 In/P PKA, 其中 In PKA 占比大, 是导致位移损伤的主要因素. 同时, 当中子能量逐渐增大时, PKA 的种类越来越丰富, 最大动能也随之增大, 但 PKA 能量仍主要分布在低能部分.

## 4 结 论

通过 Geant4 模拟了 1—20 MeV 范围内不同能量的中子入射 InP 半导体材料的位移损伤效应, 得出结论如下.

1) 在微米量级内, NIEL 随深度均匀分布; 在厘米及更高量级上, NIEL 随着入射深度的增加而降低, 当靶材料足够厚时可以降低至零.

2) 分析 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的 NIEL 及其随深度分布, 发现 NIEL 随入射中子能量的增加呈现出先升后降的趋势. 该趋势主要由非弹性散射反应产生的 PKA 造成.

3) 分析 1—20 MeV 中子入射 3  $\mu\text{m}$  InP 产生的 PKA 种类和能量, 发现 In/P 的 PKA 占比较大, 是产生位移损伤的主要因素; 中子能量越高, PKA 的种类越丰富, PKA 最大动能越大, 但 PKA 主要分布在低能部分.

## 参考文献

- [1] O'Neill P M 2010 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **57** 3148
- [2] Chen Q M, Guo G, Qi L, Zhang F Q 2018 *Sci. Technol. Innov. Her.* **15** 127 (in Chinese) [陈启明, 郭刚, 祁琳, 张付强 2018 科技创新导报 **15** 127]
- [3] Jay A, Raine M, Richard N, Mousseau N, Goiffon V, Hémeryck A, Magnan P 2017 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **64** 141
- [4] Atmospheric Radiation Effects Whitepaper, Vranish K [http://www.kva-engineering.com/pdf/SEU\\_whitepaper\\_FAA\\_Con.pdf](http://www.kva-engineering.com/pdf/SEU_whitepaper_FAA_Con.pdf) [2021-9-8]
- [5] Inguibert C, Gigante R 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 1967
- [6] Messenger S R 1999 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **46** 1595
- [7] Autran J, Munteanu D 2020 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **67** 1428
- [8] Ruzin A, Casse G, Glaser M, Zanet A, Lemeilleur F, Watts S 1999 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **46** 1310
- [9] Messenger S R, Burke E A, Lorentzen J, Walters R J, Warner J H, Summers G P, Murray S L, Murray C S, Crowley C J, Elkouh N A 2005 *Conference Record of the Thirty-first IEEE Photovoltaic Specialists Conference* FL, USA, Jan 3–7, 2005 p559
- [10] Tonigan A M, Arutt C N, Parma E J, Griffin P J, Fleetwood D M, Schrimpf R D 2018 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **65** 495
- [11] Jiang W, Yue C, Cui M Y, et al. 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 119601
- [12] Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Zschiesche

- D 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **506** 250
- [13] Bai Y R, Li Y H, Liu F, Liao W L, He H, Yang W T, He C H 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 172401 (in Chinese) [白雨蓉, 李永宏, 刘方, 廖文龙, 何欢, 杨卫涛, 贺朝会 2021 *物理学报* **70** 172401]
- [14] Guo D X, He C H, Zang H, Xi J Q, Ma L, Yang T, Zhang P 2013 *Atom. Energ. Sci. Technol.* **47** 1222 (in Chinese) [郭达禧, 贺朝会, 臧航, 席建琦, 马梨, 杨涛, 张鹏 2013 *原子能科学技术* **47** 1222]
- [15] Xie F, Zang H, Liu F, He H, Liao W L, Huang Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 126 (in Chinese) [谢飞, 臧航, 刘方, 何欢, 廖文龙, 黄煜 2020 *物理学报* **69** 126]
- [16] Zhu J H, Wei Y, Xie H G, Niu S L, Huang L X 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 066102 (in Chinese) [朱金辉, 韦源, 谢红刚, 牛胜利, 黄流兴 2014 *物理学报* **63** 066102]
- [17] 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]
- [18] Wu Y Y, Yue L, Hu J M, Lan M J, Xiao J D, Yang D Z, He S Y, Zhang Z W, Wang X C, Qian Y, Chen M B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 098110 (in Chinese) [吴宜勇, 岳龙, 胡建民, 蓝慕杰, 肖景东, 杨德庄, 何世禹, 张忠卫, 王训春, 钱勇, 陈鸣波 2011 *物理学报* **60** 098110]
- [19] Zhang L Y, Ni W J, Jing H T, Wang X Q 2018 *Mod. Appl. Phys.* **9** 10 (in Chinese) [张利英, 倪伟俊, 敬罕涛, 王相綦 2018 *现代应用物理* **9** 10]
- [20] Robinson M T, Torrens I M 1974 *Phys. Rev. B* **9** 5008
- [21] Akkerman A, Barak J 2007 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **260** 529
- [22] Shatalov A, Subramanian S, Klein A 2001 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **48** 2262
- [23] Walters R J, Messenger S R, Cotal H L, Xapsos M A, Summers G P 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 2164
- [24] Yang F J, Wang Y S, Lu F Q 1993 Nuclear Physics (Shanghai: Fudan University Press) p195 (in Chinese) [杨福家, 王炎森, 陆福全 1993 *原子核物理* (上海: 复旦大学出版社) 第195页]



# Geant4 simulation of neutron displacement damage effect in InP\*

Li Wei   Bai Yu-Rong   Guo Hao-Xuan   He Chao-Hui<sup>†</sup>   Li Yong-Hong

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

( Received 16 September 2021; revised manuscript received 7 December 2021 )

## Abstract

As the second-generation compound semiconductor material, indium phosphide (InP) has strong irradiation resistance and high photoelectric conversion efficiency. It has advantages in the field of photonics and radio frequency. In atmospheric space, high-energy cosmic rays enter into the earth's atmosphere and interact with nitrogen (N), oxygen (O) and other elements to produce secondary cosmic rays. The irradiation particles in the atmosphere are mainly neutrons because the penetration of charged particles is weak. The InP semiconductor devices are affected by atmospheric neutron irradiation of various energy from all directions, which results in the internal defects in InP crystals, the degradation of device performance and the reduction of device lifetime. In this paper, Monte Carlo simulation software Geant4 is used to simulate the neutron irradiation effect, and the initial state distribution of displacement damage caused by neutrons with different energy is obtained, including the distribution of non-ionized energy loss (NIEL) with depth, the relationship between NIEL and the energy of incident neutrons, and the type, number and energy of primary knock-on atoms (PKA). The results show that 1) the NIEL is uniformly distributed when material thickness is on the order of  $\mu\text{m}$  and for the material thickness on the order of  $\text{cm}$  and more, the NIEL decreases as the depth increases and can be reduced to zero when the target material is thick enough; 2) by analyzing the NIEL produced by 1–20 MeV neutrons incident on 3- $\mu\text{m}$  InP and their distribution with depth, it is found that the NIEL first increases and then decreases with incident neutron energy increasing. This trend is caused mainly by PKA produced through the inelastic scattering reaction; 3) by analyzing the type and the energy of PKA produced by 1–20 MeV neutrons incident on 3  $\mu\text{m}$  InP, it is found that the PKA of In/P accounts for a large proportion, which causes displacement damage mainly, and the higher the neutron energy, the richer the variety of PKA is and the greater the maximum kinetic energy of PKA, but the PKAs mainly distribute in the low energy part. The present research has theoretical and guiding value for the long-term application of InP-based 5G devices in atmospheric neutron irradiation environment.

**Keywords:** neutron, InP, displacement damage, non-ionized energy loss

**PACS:** 24.10.Lx, 61.80.-x, 25.40.Dn, 25.40.Fq

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211722

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

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [hechaohui@mail.xjtu.edu.cn](mailto:hechaohui@mail.xjtu.edu.cn)