

质子入射  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的位移损伤模拟\*何欢<sup>1)</sup> 白雨蓉<sup>1)</sup> 田赏<sup>2)</sup> 刘方<sup>1)</sup> 臧航<sup>1)</sup>柳文波<sup>1)†</sup> 李培<sup>1)‡</sup> 贺朝会<sup>1)††</sup>

1) (西安交通大学核科学与技术学院, 西安 710049)

2) (北京大学物理学院, 北京 100084)

(2023 年 10 月 19 日收到; 2023 年 11 月 16 日收到修改稿)

氮化镓材料由于优良的电学特性以及耐辐照性能, 其与不同含量  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料组成的电子器件, 有望应用于未来空间电子系统中. 然而目前关于氮化镓位移损伤机理研究多关注于氮化镓材料, 对于  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料位移损伤研究较少. 本文通过两体碰撞近似理论模拟了 10 keV—300 MeV 质子在不同 Al 元素含量的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中的位移损伤机理. 结果表明质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中产生的非电离能损随质子能量增大而下降, 当质子能量低于 40 MeV 时, 非电离能损随着 Al 含量的增大而变大, 当质子能量升高时该趋势相反; 分析由质子导致的初级撞出原子以及非电离能量沉积, 发现不同  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料初级撞出原子能谱虽然相似, 然而 Al 元素含量越高, 由弹性碰撞产生的自身初级撞出原子比例越高; 对于质子在深度造成的非电离能量沉积, 弹性碰撞导致的能量沉积在径迹末端最大, 而非弹性碰撞导致的能量沉积在径迹前端均匀分布, 径迹末端减小, 并且低能质子主要是通过弹性碰撞造成非电离能量沉积, 而高能质子恰好相反. 本研究揭示了不同 Al 元素含量的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料质子位移损伤机理, 为 GaN 器件在空间辐射环境下的应用提供参考依据.

**关键词:**  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , 质子, 位移损伤, 两体碰撞近似**PACS:** 24.10.Lx, 71.55.Eq, 61.80.Jh**DOI:** 10.7498/aps.73.20231671

## 1 引言

半导体技术在移动通信、轨道交通、雷达探测等领域迅速发展, 目前已经成为国民经济的重要组成部分之一. 第三代宽禁带半导体材料氮化镓 (gallium nitride, GaN) 由于具有宽禁带、高击穿场强以及电子迁移率、高巴利加优值<sup>[1-3]</sup>等优点, 近些年来在发光、电源供电、高频通信、电动汽车等领域中都有大规模应用. 此外, 由于其具有较强的高辐射耐受性, 在未来的太空应用中也显示出巨

大的潜力, 欧洲航天局也于近些年在多个空间通信系统和卫星中搭载了 GaN 器件<sup>[4,5]</sup>. 然而, 对工作于空间环境中的航天器而言, 其在空间辐射环境中面临的辐射环境主要有以下三种来源: 银河宇宙射线、太阳宇宙射线以及范艾伦辐射带, 其包含的质子、电子以及重离子等, 都会在半导体器件和材料内部造成能量沉积, 产生电子-空穴对或造成晶格原子移位, 从而造成电离损伤或位移损伤<sup>[6]</sup>, 导致器件的性能衰退、寿命缩短甚至发生故障, 影响航天任务的完成. 相比于硅基器件, GaN 高电子迁移率晶体管 (high electron mobility transistors,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11975179) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuwenbo@xjtu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: lipei0916@xjtu.edu.cn

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

HEMT) 具有较强的抗电离辐射能力, 位移损伤效应是其内部主要的辐射损伤效应[7].

目前已有大量实验和理论研究[8–18]报道了辐射粒子在 GaN 器件或者材料产生的位移损伤影响, 且对位移损伤相关的研究目前多关注辐照后的材料缺陷识别, 然而由于实际工艺上的掺杂浓度以及器件结构的差异, 对缺陷的确定尚未达成统一的认识, 因此需要从辐射粒子入射材料角度对 GaN 器件及材料的位移损伤效应机理开展研究, 提高其在辐射环境下的可靠性与稳定性.

非电离能损 (non-ionizing energy loss, NIEL) 是衡量、预测以及揭示辐射粒子造成位移损伤背后机理的关键参数与性质[19,20], 通过 NIEL 的表征, 可以很好地表征材料的抗位移损伤能力[7,21,22]. 同时, 研究由辐射粒子造成的初级撞出原子 (primary knock-on atom, PKA) 种类和能谱, 也可以较好地描述位移损伤效应机理, 该性质也可以为位移损伤效应的多尺度模拟提供关键的能谱信息[23,24]. 然而, 由于这两种性质均发生在极小的时间和空间尺度, 目前对其实验测量还很困难, 这也使得计算模拟成为研究其行为的必要工具, 其中应用最多的是两体碰撞近似. 已有相关研究针对 GaN 材料中不同辐射粒子所造成的 PKA 能谱[25] 和 NIEL 大小[7,21,26,27] 进行计算. 然而随着半导体工艺的发展, GaN 材料通常会与不同占比的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料形成异质结从而制成不同的器件. 对于不同占比  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料, 已有相关实验[28] 表明其位移损伤有较大的差异, 但是其背后机理尚不清晰. 因此, 为了探究空间辐射环境对  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的影响, 本文以空间辐射环境中含量最多粒子质子为辐射粒子, 基于两体碰撞方法进行了一系列位移损伤模拟计算, 主要探究了 Al 元素含量对质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中的位移损伤造成的 NIEL 影响, 并通过分析 PKA 能谱分布以及损伤能随深度分布探究其背后的机理.

## 2 模拟方法

### 2.1 NIEL 计算方法

对于半导体材料中位移损伤效应的评估与衡量, 目前常用 NIEL 来比较不同粒子与不同材料之间产生位移损伤的大小, 其计算公式如下[29,30]:

$$\text{NIEL} = \eta \int_{T_d}^{Q_{\max}} \frac{d\sigma}{dQ}(E) \cdot G(Q) \cdot Q \cdot dQ, \quad (1)$$

式中,  $\eta$  为靶材料密度;  $T_d$  为离位阈能值;  $Q$  为反冲原子能量;  $Q_{\max}$  为转移到材料的最大能量;  $d\sigma/dQ(E)$  为反应截面,  $G(Q)$  为能量为  $Q$  的反冲原子对应能量分离函数. 对于  $G(Q)$  分离函数, 多用 Lindhard 能量分离函数[31] 以及基于该函数改进的 Robinson[32] 和 Akkerman[33] 函数. (1) 式经过积分求和后可简化为[34]

$$\text{NIEL} = \frac{T_{\text{dam}}}{\rho h}, \quad (2)$$

式中,  $T_{\text{dam}}$  为平均非电离损伤能,  $\rho$  则为材料密度,  $h$  为靶材料厚度.

### 2.2 模拟设置

本文采用位移损伤模拟中应用较为广泛的 Geometry and Tracking (Geant4)10.5 软件[34,35], 该软件由欧洲核子研究中心 (CERN) 主导开发, 是一个以蒙特卡罗方法为基础, 可以模拟多种能量以及多种粒子与不同材料的相互作用, 广泛应用于辐射物理计算领域.

为了准确模拟质子与  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的相互作用, 采用 QGSP-BIC 标准物理列表, 该列表能很好地描述 TeV 以下质子与材料的相互作用, 但对于低能弹性碰撞的描述较差. 因此在模拟计算中还添加了库仑屏蔽模型[36,37]. 在模拟质子入射材料时, 选取单能粒子点源作为粒子源, 其在平行于  $Z$  轴方向上向材料内部发射. 为了确保准确性和统计性, 主要模拟了 10 keV—300 MeV 能量范围内的质子入射材料过程, 该能量范围主要涵盖了空间环境中的质子能谱以及目前大多数 GaN 器件与  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的质子辐照实验. 同时对 1 MeV 以上能量的质子, 入射数目选择为  $2 \times 10^6$  个, 而对 1 keV—1 MeV 能量范围内的质子, 入射数目选择  $2 \times 10^7$  个. 为了探究 Al 元素含量对  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料质子位移损伤的影响,  $x$  分别选取为 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0, 材料密度分别对应为 6.10, 5.49, 4.75, 4.02, 3.26 g/cm<sup>3</sup>.

本文整个模拟中主要采用两种体积模型, 薄靶近似模型以及无限厚靶模型, 如图 1 所示. 其中在计算单能质子产生 NIEL 大小时采用薄靶近似模型, 其厚度通常定义为该能量下质子 10% 的射程大小, 这主要是在计算单能质子 NIEL 总体大小

时, 过厚材料会导致质子能量歧离, 高估 NIEL 的大小, 无法与实验值进行比对. 而在探究其背后的损伤机理时, 采用的是无限厚靶模型, 以充分探究不同能量质子在入射  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中的位移损伤效应规律. 无限厚靶模型将模拟体系定义为一个无限厚度的材料, 可以记录质子在全射程内的运动过程.

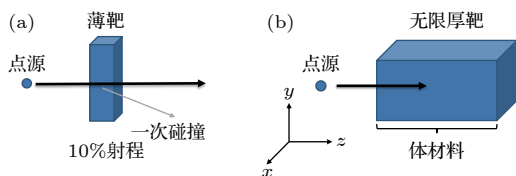


图 1 位移损伤模型 (a) 薄靶近似模型; (b) 无限厚靶模型

Fig. 1. Displacement damage models: (a) Thin target approximation model; (b) infinite thick target model.

## 2.3 准确性验证

NIEL 是比较不同辐射粒子在不同材料中造成损伤的重要参数, 本节利用薄靶近似模型, 统计 10 keV—300 MeV 质子入射 GaN 材料产生的 NIEL 大小, 并与文献 [21] 中的 GaN NIEL 计算值进行比对以验证本研究模型的准确性. 在本模型中采用了第一性原理中关于离位阈能的计算结果, 其中由第一性原理得到 Ga 和 N 原子的离位阈值 ( $T_d$ ) 分别为 73.2 eV 和 32.4 eV<sup>[38]</sup>, 图 2 为本文薄靶近似模型与文献值的对比结果.

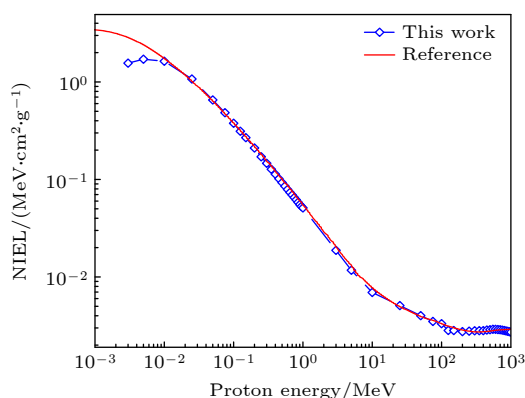


图 2 不同能量质子在 GaN 材料中产生的 NIEL 大小, 与文献 [21] 值比较

Fig. 2. The values of NIEL in GaN material induced by protons with different energies, compared with values from Ref. [21].

由图 2 中数据可知, 本文所采用模型与之前的计算和实验结果 [21,27] 一致, 表明了本文计算模型的合理性和准确性, 即低能质子产生的 NIEL 大,

是导致位移损伤的主要因素. 然而在低能量下 ( $< 5$  keV), 本文两种结果均低于文献 [21] 中的报道, 这主要是由于 Khanna 等 [18,23,38] 在计算 NIEL 时, 选取的 Ga 和 N 原子  $T_d$  为 10 eV 和 14 eV, 该值与后来理论计算文献报道相比较低, 因此在低能处高估了 NIEL. 除此之外, 在高能量下 ( $> 5$  keV) 的结果一致性也表示当质子能量较高时, 离位阈能的选择对 NIEL 计算大小无显著影响.

## 3 结果与分析

### 3.1 质子入射 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的非电离能损计算

基于以上位移损伤模型的介绍与验证, 本文首先对于不同能量单能质子在 5 种  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料造成的 NIEL 大小进行计算, 其中 Al 原子的离位阈能为 94 eV<sup>[39]</sup>, 结果如图 3 所示. 在不同质子能量下, 5 种  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的 NIEL 的变化趋势相似, 即都随着质子能量增大而逐渐减小. 然而, NIEL 大小与 Al 元素的含量并不是呈现单调相关性. 随着 Al 元素含量的变化, NIEL 的变化可分为两个不同区间. 当质子能量低于约 40 MeV 时, Al 元素含量较高的材料具有较高的 NIEL. 例如, 当质子能量在 10 keV 左右时, AlN 的 NIEL ( $3.04 \text{ MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$ ) 能达到 GaN ( $1.63 \text{ MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$ ) 的 2 倍. 然而在更高的质子能量下 (大于 40 MeV), 这种变化趋势是相反的, 即 Al 含量高的材料实际上具有更低的 NIEL. 当质子能量为 100 MeV, GaN 的 NIEL 是  $3.33 \times 10^{-3} \text{ MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$ , 而 AlN 的 NIEL 值仅为  $1.97 \times 10^{-3} \text{ MeV}\cdot\text{cm}^2/\text{g}$ .

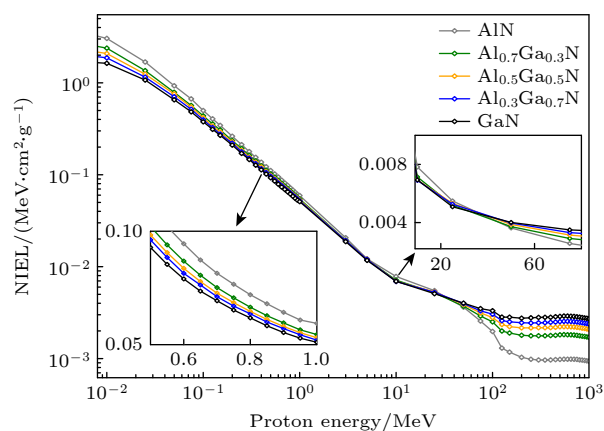


图 3 不同能量质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中产生的 NIEL 大小

Fig. 3. The values of NIEL in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials induced by protons with different energies.

该计算结果与 Hayers 等<sup>[28]</sup> 进行的 GaN 以及 AlGa<sub>x</sub>N 低能质子实验现象对应, 在应用 2 MeV 质子辐照两种材料后, GaN 的载流子去除率为 257 cm<sup>-1</sup>, 而 AlGa<sub>x</sub>N 的载流子去除率可以达到 510 cm<sup>-1</sup>, 是其 2 倍之多, 这表明在遭受低能质子辐照后, Al 元素含量更多的材料位移损伤更严重.

### 3.2 质子入射 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 材料产生的 PKA 种类和能谱分析

由于 PKA 的产生是造成 NIEL 的最主要原因, 为了进一步探究 Al 元素含量对 NIEL 大小影响机理, 对质子在 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 材料中产生的 PKA 能谱进行分析, 以下研究均采用了无限厚靶模型以更全面地研究质子在材料中的位移损伤效应规律.

首先对不同质子在 GaN 体材料中造成位移损伤的 PKA 总能谱进行研究, 结果如图 4(a) 所示, 其中该能谱已进行归一化, 归一化系数为能量和 PKA 总数目乘积, 能量区间为 1 eV. 由图 4 可以看出, 尽管 PKA 最大能量随着质子能量的增大而

明显增大, 但 PKA 能量的主要分布范围却没有受到明显的影响, 而且随着 PKA 能量的增大, 其数量也明显减少. 对于不同质子能量, 其产生的大部分 PKA 能量主要分布在 1 keV 到几十 keV 之间.

同时, 统计不同类型 PKA 占比, 发现不同能量质子产生的 PKA 类型不同, 根据 PKA 的原子类型将其主要分为 5 类. 1) 材料本身元素对应的 PKA(自 PKA): Ga PKA 和 N PKA; 2) 中子; 3) 质子; 4) 轻 PKA ( $2 \leq Z < 13$ , N 除外); 5) 重 PKA ( $13 \leq Z < 34$ , Ga 除外), 图 4(b) 所示为不同类型 PKA 占比随质子能量的变化. 当质子能量低于 0.1 MeV 时, 由于此时质子只与材料发生弹性碰撞, 且由于 N 元素质量较小, 质子与其反应截面较大, 导致只有 N PKA 撞出. 当质子能量逐渐增大到 10 MeV 时, 这一阶段质子与 Ga 元素的反应截面变大, 所以导致 Ga PKA 的占比越来越大, N PKA 的占比逐渐减小. 当质子能量大于 10 MeV 时, 此时质子与材料开始发生非弹性碰撞, 中子、质子以及其他粒子开始产生, 并随着质子能量的增加逐渐成为主要成分, 这些 PKA 占比顺序为: 中子 > 质子 > 轻 PKA > 重 PKA. 此外, Ga PKA 和 N PKA 的能量集中在 50 keV 以下, 而其他粒子能量其他类型 PKA 的能量主要分布 100 keV—1 MeV 之间, 这表明低能质子辐照 GaN 材料产生的自 PKA 能量在 10—50 keV. 该结果可以直接应用于实验或多尺度模拟中, 在硅的多尺度模拟<sup>[40,41]</sup>以及金属的多尺度模拟中<sup>[42-44]</sup>, PKA 能量是一个极重要参数, 其大小直接决定了下一阶段分子动力学模拟的输入.

对于其他 4 种 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 材料, 采用同样的方法分析其 PKA 能谱, 并与以上 GaN 材料的质子入射的能谱结果进行对比, PKA 总能谱结果显示 4 种 PKA 能谱形状与 GaN 形状类似, 这表明 Al 元素的加入对 PKA 能谱的分布没有显著影响. 然而由于 Al 元素的引入, Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 材料中弹性碰撞比例有所不同, 因此, 图 5 主要展示了不同能量的质子在 5 种 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 材料中产生弹性碰撞事件占总碰撞事件比例. 结果显示, Al 元素含量越高, 质子与其发生弹性碰撞比例越高, 并且该比例与 Al 元素含量呈线性相关. 当质子能量低于 10 MeV 时, 99% 的质子与材料发生的是弹性碰撞, 而当质子能量上升后, 该比例下降速度增大. 这主要是由于 Al 元素较轻的原子质量以及较低的密度共同导致的.

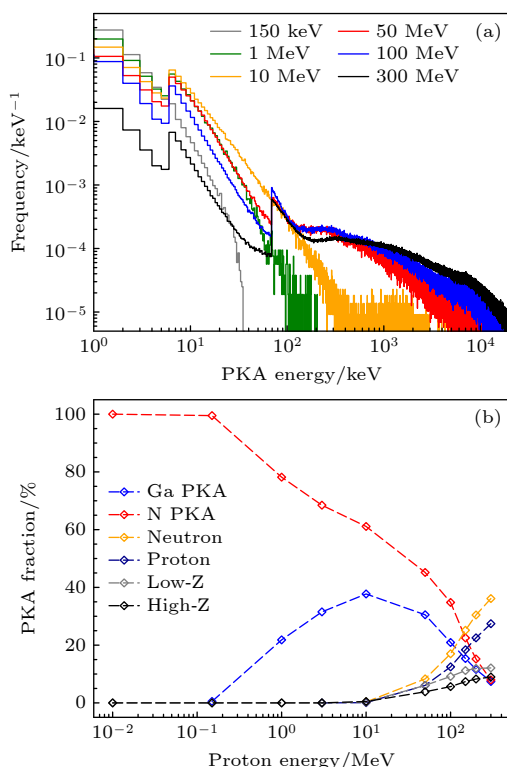


图 4 不同能量质子在 GaN 材料中产生的 PKA 信息 (a) PKA 总能谱; (b) 不同类型 PKA 占比

Fig. 4. PKA information induced by protons with different energies in GaN material: (a) Overall PKA energy spectra; (b) fraction of different types of PKA.

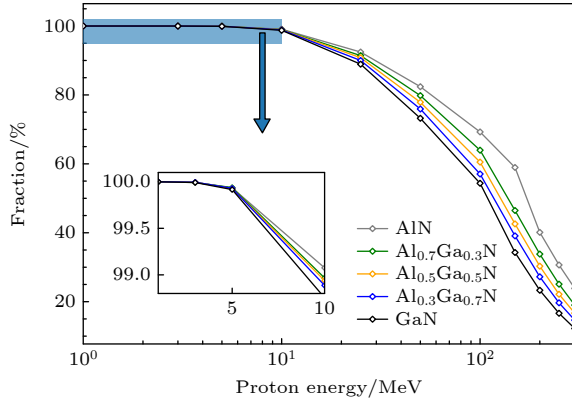


图 5 不同能量质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中产生弹性碰撞事件的占比

Fig. 5. The fraction of elastic collision events in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials induced by protons with different energies.

### 3.3 质子入射 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的损伤能随深度分布

基于以上对质子入射  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  体材料的 PKA 信息, 进一步对这些 PKA 在材料内部造成的损伤能 ( $T_{\text{dam}}$ ) 进行分析, 将其按质子射程划分为 100 个等长的区间, 图 6 描述了不同能量质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  体材料中产生  $T_{\text{dam}}$  随深度分布的变化趋势。

对于  $T_{\text{dam}}$  在深度方向的分布, 质子的能量对于其分布形状没有较大影响, 即在质子射程末端, 都有一个较明显的布拉格峰。该布拉格峰位置与质子的射程具有极强的相关性, 大约位于质子射程的 80%—100%, 且随着质子能量的增大, 该比例越来越大。此外, 由图 6 曲线可知, 该峰位置将整个  $T_{\text{dam}}$  随深度的分布划分为两部分区域, 即布拉格峰前半部分的平滑区, 以及后半部分的下降区域。

然而由于 Al 元素含量的不同, 不同  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  体材料中这两部分区域的分布有所差异。对于低能质子, 图 6(a), (b) 结果显示含 Al 元素多的材料峰值位置更深, 其数值也更大。因此, AlN 的  $T_{\text{dam}}$  峰值出现在更深的区域, 其峰值也更大。然而随着质子能量增大,  $T_{\text{dam}}$  在深度方向的分布并不是如图 5 中弹性碰撞比例随着 Al 元素含量增大呈现单调关系, 虽然含 Al 元素多的材料峰值位置依然更深, 但结果显示其峰值越来越小于含 Ga 元素多的材料。如图 6(c), (d) 所示, 50 MeV 的质子在不同  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  体材料中产生的峰值近似相等, 而当质子能量在 200 MeV 时, GaN 中布拉格峰峰值更高。除此之外, 当质子能量较高时, 如 200 MeV, 含 Al 元素的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料并没有出现像纯 GaN

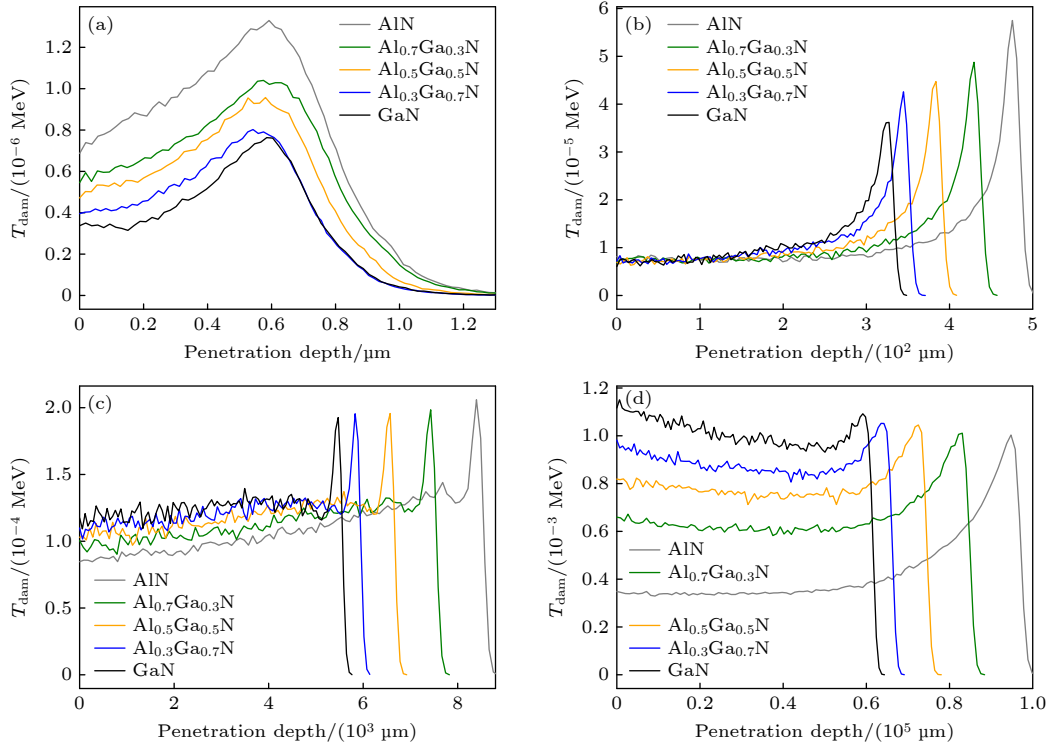


图 6 不同能量质子在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中沉积的  $T_{\text{dam}}$  随深度分布 (a) 150 keV; (b) 10 MeV; (c) 50 MeV; (d) 200 MeV

Fig. 6. Distribution of deposited  $T_{\text{dam}}$  with depth in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials irradiated by protons with different energies: (a) 150 keV; (b) 10 MeV; (c) 50 MeV; (d) 200 MeV.

那样平滑区要高于峰值的现象, 这种与 GaN 材料不一致的情况表明, Al 原子的加入会显著影响损伤区域的分布, 且与 Al 元素含量呈非单调线性关系.

为了进一步分析不同含量 Al 元素造成的损伤分布差异, 将  $T_{\text{dam}}$  按照弹性碰撞与非弹性碰撞事件的贡献分开, 并与 PKA 数目随深度的分布进行对比. 图 7 以 GaN 材料为例, 展示了 4 种不同能量质子在材料内部沉积的  $T_{\text{dam}}$  随深度分布, 结果发现弹性碰撞与非弹性碰撞事件产生的  $T_{\text{dam}}$  与 PKA 数量呈现高度一致性, 同时可以看出, 弹性与非弹性碰撞事件产生的  $T_{\text{dam}}$  在材料内部有着完全不同的机理, 对于 10 MeV 以下质子, 以图 7(a), (b) 为例, 由于此时质子主要与材料发生弹性碰撞, 非弹性碰撞事件产生的 PKA 数目几乎为 0, 因此,  $T_{\text{dam}}$  在质子射程的末端达到最大值. 随着能量的增大, 如图 7(c) 所示, 非弹性相互作用导致该部分 PKA 的数量增加, 从而增大了其对应的  $T_{\text{dam}}$  值, 尽管弹性碰撞产生的 PKA 数目在所有深度范围上都远多于非弹性碰撞产生的 PKA 数目, 但非弹性碰撞导致  $T_{\text{dam}}$  在射程前端的值要远大于后端,

这也表明非弹性碰撞产生 PKA 导致的  $T_{\text{dam}}$  更大. 在更高的能量下, 例如 200 MeV, 如图 7(d) 所示, 这种区别就更加明显. 在质子射程的前端, 大多数 PKA 是由非弹性碰撞产生的,  $T_{\text{dam}}$  也是由非弹性碰撞贡献的. 而在射程的末端, 弹性碰撞产生的 PKA 变得比非弹性碰撞产生的更多, 该距离内  $T_{\text{dam}}$  主要由弹性碰撞提供.

基于以上分析, 可以得知弹性与非弹性碰撞产生的  $T_{\text{dam}}$  在材料内部具有完全不同的机理, 对于弹性碰撞, 其产生的  $T_{\text{dam}}$  随着深度的增大而增大, 在质子范围的末端表现出明显的布拉格峰, 而对于非弹性碰撞, 其产生的  $T_{\text{dam}}$  主要在径迹前端处. 正是这种不同的作用机制导致了图 3 中 NIEL 在不同质子能量处随 Al 元素含量变化的不同趋势. 在质子能量较低时, 弹性碰撞主导了整个位移损伤过程, 由于 Al 原子的原子质量数低于 Ga 原子, 因此其有更高的概率与质子发生弹性作用, 导致 Al 含量较高的材料中 NIEL 更高. 然而对于高能质子, NIEL 是由非弹性碰撞作用导致. 因此, 材料中较高的 Al 含量导致经历非弹性碰撞相互作用的质子比例较低, 从而产生较低的 NIEL 值.

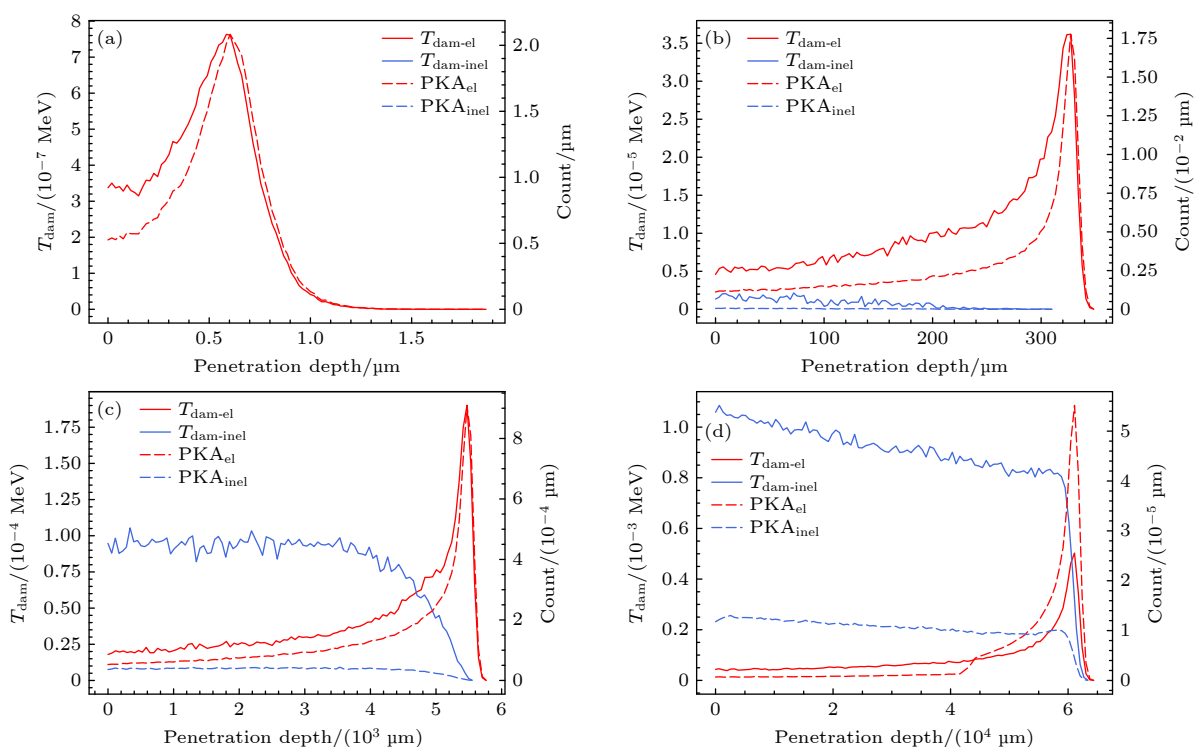


图 7 (a) 150 keV, (b) 10 MeV, (c) 50 MeV, (d) 200 MeV 质子在 GaN 材料中沉积的  $T_{\text{dam}}$  (红色) 以及产生的 PKA 数目 (蓝色) 随深度分布, 其中实线为弹性碰撞事件, 虚线为非弹性碰撞事件

Fig. 7. Distribution of deposited  $T_{\text{dam}}$  (Red) and produced PKAs (Blue) with depth in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials irradiated by protons of (a) 150 keV, (b) 10 MeV, (c) 50 MeV, (d) 200 MeV. The solid lines and the dashed lines correspond to elastic and inelastic collision events.

## 4 结 论

本文通过两体碰撞近似方法,研究了 10 keV—300 MeV 的质子在不同 Al 元素含量的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中产生的位移损伤效应,主要针对导致位移损伤效应的 NIEL 大小开展了模拟研究,并通过分析 PKA 能谱以及  $T_{\text{dam}}$  随深度的分布揭示 Al 元素含量对 NIEL 的影响机理. 研究结果表明,当质子能量低于 40 MeV 时, NIEL 随着 Al 含量增大而增大,而质子能量高于 40 MeV 时,呈现相反的变化趋势, NIEL 随着 Al 含量增大而减小. 分析导致 NIEL 变化的 PKA,虽然不同  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料的 PKA 能谱相似,即当质子能量低于 10 MeV 时,质子主要与材料发生弹性碰撞,当质子能量升高时,非弹性碰撞逐渐成为主要碰撞机制,然而由于 Al 元素质量数小,导致 AlN 材料中弹性碰撞比例远高于 GaN 材料. 同时,研究  $T_{\text{dam}}$  随深度的分布,发现其与 PKA 数量的分布显示出高度的相似性,并且由弹性碰撞相互作用引起的  $T_{\text{dam}}$  随着深度的增大而增大,在射程的末端形成最大值,而由非弹性碰撞相互作用产生的  $T_{\text{dam}}$  在射程前端呈现均匀分布,在射程的末端逐渐减少. 因此对于低能质子,由于 NIEL 主要是由弹性碰撞导致, Al 占比越大则 NIEL 越大,而对于高能质子,其产生的 NIEL 主要是由非弹性碰撞导致, Al 占比越大则 NIEL 越小. 本研究揭示了  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料中质子位移损伤效应的机理,并且为该器件及材料的位移损伤效应实验研究和多尺度模拟提供重要依据.

## 参考文献

- [1] Hao Y, Zhang J F, Zhang J C, Ma X H, Zheng X F 2015 *Chin. Sci. Bull.* **10** 874 (in Chinese) [郝跃, 张金凤, 张进成, 马晓华, 郑雪峰 2015 科学通报 **10** 874]
- [2] Zhang Y, Dadgar A, Palacios T 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 273001
- [3] Pearton S, Ren F, Patrick E, Law M, Polyakov A Y 2015 *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **5** Q35
- [4] Richard Y, Guzmán D, Smith D 2014 *The 4S Symposium* Majorca, Spain, May 26–30, 2014 p20141
- [5] Valenta V, Loughnane G, Espana C, Latti J, Barnes A, Roux J P, del Rio O, Rubio-Cidre G, Ramirez-Torres M, Serru V, Caille L 2022 *17th European Microwave Integrated Circuits Conference (EuMIC)* Milan, Italy, September 26–27, 2022 p41
- [6] Chen W, Yang H L, Guo X Q, Yao Z B, Ding L L, Wang Z J, Wang C H, Wang Z M, Cong P T 2017 *Chin. Sci. Bull.* **10** 978 (in Chinese) [陈伟, 杨海亮, 郭晓强, 姚志斌, 丁李利, 王祖军, 王晨辉, 王忠明, 丛培天 2017 科学通报 **10** 978]
- [7] Hu X, Choi B K, Barnaby H J, Fleetwood D M, Schrimpf R D, Lee S, Shojah-Ardalan S, Wilkins R, Mishra U K, Dettmer R W 2004 *IEEE T. Nucl. Sci.* **51** 293
- [8] Zhu T, Zheng X F, Wang J, Wang M S, Chen K, Wang X H, Du M, Ma P J, Zhang H, Lv L, Cao Y R, Ma X H, Hao Y, 2021 *IEEE T. Nucl. Sci.* **68** 2616
- [9] Chen J, Puzyrev Y S, Jiang R, Zhang E X, McCurdy M W, Fleetwood D M, Schrimpf R D, Pantelides S T, Arehart A R, Ringel S A, Saunier P, Lee C 2015 *IEEE T. Nucl. Sci.* **62** 2423
- [10] He H, Liao W L, Wang Y Z, Liu W B, Zang H, He C H 2021 *Comput. Mater. Sci.* **196** 110554
- [11] Lo C, Chang C, Chu B, Kim H Y, Kim J, Cullen D A, Zhou L, Smith D, Pearton S, Dabiran A, Ren F 2010 *J. Vac. Sci. Technol. B* **28** L47
- [12] Lü L, Ma J G, Cao Y R, Zhang J C, Zhang W, Li L, Xu S R, Ma X H, Ren X T, Hao Y 2011 *Microelectron. Reliab.* **51** 2168
- [13] Lyons J L, Wickramaratne D, Van de Walle C G 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 111101
- [14] Wan P F, Li W Q, Xu X D, Wei Y D, Jiang H, Yang J Q, Shao G J, Lin G, Peng C, Zhang Z G, Li X J 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 092102
- [15] Wang Y Z, Zheng X F, Zhu T, Yue S Z, Pan A L, Xu S R, Li P X, Ma X H, Zhang J C, Guo L X, Hao Y 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 143501
- [16] Weaver B, Martin P, Boos J, Cress C 2012 *IEEE T. Nucl. Sci.* **59** 3077
- [17] Zhang Z, Arehart A R, Cinkilic E, Chen J, Zhang E X, Fleetwood D M, Schrimpf R D, McSkimming B, Speck J S, Ringel S A 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 042102
- [18] He H, He C H, Zhang J H, Liao W L, Zang H, Li Y H, Liu W B 2020 *Nucl. Eng. Technol.* **52** 1537
- [19] Akkerman A, Barak J, Chadwick M, Levinson J, Murat M, Lifshitz Y 2001 *Radiat. Phys. Chem.* **62** 301
- [20] Akkerman A, Barak J, Murat M 2020 *IEEE T. Nucl. Sci.* **67** 1813
- [21] Khanna S M, Estan D, Erhardt L S, Houdayer A, Carlone C, Ionascu-Nedelcescu A, Messenger S R, Walters R J, Summers G P, Warner J H, Jun I 2004 *IEEE T. Nucl. Sci.* **51** 2729
- [22] Liu L, Mei B, Zheng Z S, Wang L, Bai Y R, Yu Q K, Li P, Zhao H D, Sun Y C, Li B 2023 *T. Trans. Nucl. Sci.* **70** 1885
- [23] Nord J, Nordlund K, Keinonen J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 184104
- [24] Tang D, He C H, Zang H, Li Y H, Xiong C, Zhang J X, Zhang P, Tan P K 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 024212 (in Chinese) [唐杜, 贺朝会, 臧航, 李永宏, 熊涔, 张晋新, 张鹏, 谭鹏康 2016 物理学报 **65** 024212]
- [25] 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]
- [26] Chen N J, Rasch E, Huang D H, Heller E R, Gao F 2018 *IEEE T. Nucl. Sci.* **65** 1108
- [27] Keum D, Kim H 2018 *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **7** Q159
- [28] Hayes M, Auret F, Wu L, Meyer W, Nel J, Legodi M 2003 *Physica B* **340** 421
- [29] Jun I, Xapsos M A, Burke E A 2004 *IEEE T. Nucl. Sci.* **51** 3207
- [30] Jun I, Xapsos M A, Messenger S R, Burke E A, Walters R J, Summers G P, Jordan T 2003 *IEEE T. Nucl. Sci.* **50** 1924
- [31] Lindhard J, Nielsen V, Scharff M, Thomsen P 1963 *Kgl. Danske Videnskab., Selskab. Mat. Fys. Medd.* **33** 1
- [32] Robinson M T 1994 *J. Nucl. Mater.* **216** 1
- [33] Akkerman A, Barak J 2006 *IEEE T. Nucl. Sci.* **53** 3667
- [34] Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Dubois P A,

- Asai M, Barrand G, Capra R, Chauvie S, Chytracek R 2006 *IEEE T. Nucl. Sci.* **53** 270
- [35] Agostinelli S, Allison J, Amako K a, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, Asai M, Axen D, Banerjee S, Barrand G 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **506** 250
- [36] Weller R A, Mendenhall M H, Fleetwood D M 2004 *IEEE T. Nucl. Sci.* **51** 3669
- [37] Mendenhall M H, Weller R A 2005 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **227** 420
- [38] Xiao H, Gao F, Zu X T, Weber W J 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 123527
- [39] Xi J, Liu B, Zhang Y, Weber W J 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 045904
- [40] Raine M, Jay A, Richard N, Goiffon V, Girard S, Gaillardin M, Paillet P 2016 *IEEE T. Nucl. Sci.* **64** 133
- [41] Jay A, Raine M, Richard N, Mousseau N, Goiffon V, Hémaryck A, Magnan P 2016 *IEEE T. Nucl. Sci.* **64** 141
- [42] Stoller R E 2000 *J. Nucl. Mater.* **276** 22
- [43] Rayaprolu R, Möller S, Linsmeier C, Spellerberg S 2016 *Nucl. Mater. Energy* **9** 29
- [44] Wirth B D, Odette G R, Marian J, Ventelon L, Young-Vandersall J A, Zepeda-Ruiz L A 2004 *J. Nucl. Mater.* **329** 103

## Simulation of displacement damage induced by protons incident on $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ materials\*

He Huan<sup>1)</sup> Bai Yu-Rong<sup>1)</sup> Tian Shang<sup>2)</sup> Liu Fang<sup>1)</sup> Zang Hang<sup>1)</sup>

Liu Wen-Bo<sup>1)†</sup> Li Pei<sup>1)‡</sup> He Chao-Hui<sup>1)††</sup>

<sup>1)</sup> (School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

<sup>2)</sup> (School of Physics, Peking University, Beijing 100084, China)

( Received 19 October 2023; revised manuscript received 16 November 2023 )

### Abstract

Gallium nitride materials, due to their excellent electrical properties and irradiation resistance, are expected to be used in future space electronics systems where electronic devices are composed of different amounts of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials. However, most of their displacement damage studies currently focus on GaN materials, and less on  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials themselves. The mechanism of displacement damage induced by 10-keV to 300-MeV protons incident on  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials with different Al content is investigated by binary collision approximation method. The results show that the non-ionization energy loss of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  material decreases with proton energy increasing. When the proton energy is lower than 40 MeV, the non-ionization energy loss becomes larger with the increase of Al content, while the trend is reversed when the proton energy increases. Analyzing the primary knock-on atoms and non-ionizing energy deposition caused by protons, it is found that the primary knock-on atoms' spectra of different  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  materials are similar, but the higher the content of Al, the higher the proportion of the self primary knock-on atoms generated by elastic collisions is. For the non-ionizing energy deposition produced by protons at different depths, the energy deposition due to elastic collisions is largest at the end of the trajectory, while the energy deposition due to inelastic collisions is uniformly distributed in the front of the trajectory but decreases at the end of the trajectory. This study provides a good insight into the applications of GaN materials and devices in space radiation environment.

**Keywords:**  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , proton, displacement damage, binary collision approximation

**PACS:** 24.10.Lx, 71.55.Eq, 61.80.Jh

**DOI:** 10.7498/aps.73.20231671

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

† Corresponding author. E-mail: [liuwenbo@xjtu.edu.cn](mailto:liuwenbo@xjtu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [lipei0916@xjtu.edu.cn](mailto:lipei0916@xjtu.edu.cn)

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



## 质子入射 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的位移损伤模拟

何欢 白雨蓉 田赏 刘方 臧航 柳文波 李培 贺朝会

### Simulation of displacement damage induced by protons incident on $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ materials

He Huan Bai Yu-Rong Tian Shang Liu Fang Zang Hang Liu Wen-Bo Li Pei He Chao-Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 052402 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231671

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231671>

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>

#### InP中子位移损伤效应的Geant4模拟

Geant4 simulation of neutron displacement damage effect in InP

物理学报. 2022, 71(8): 082401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211722>

#### 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>

#### 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>

#### 100 keV质子与低高能质子在绝缘微孔中输运特性的对比分析

Simulation analyses of 100-keV as well as low and high energy protons through insulating nanocapillary

物理学报. 2018, 67(1): 013401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171701>

#### $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 插入层对双沟道 $n\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT器件性能的影响

Effect of inserted  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layer on characteristic of double-channel  $n\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  HEMT

物理学报. 2022, 71(16): 167301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220403>