

# 质子和 1MeV 中子在硅中能量沉积的 模拟计算\*

陈世彬<sup>1,2</sup> 张义门<sup>1</sup> 陈雨生<sup>2</sup> 黄流兴<sup>2</sup> 张玉明<sup>1</sup>

1(西安电子科技大学微电子所 西安 710071)

2(西北核技术研究所 西安 710024)

**摘要** 在现有中子截面数据和粒子与物质相互作用的理论基础上,编写了计算中子非电离能量损失(NIEL)和电离能量损失(IEL)程序,利用该程序和引进的TRIM95程序计算了1MeV中子和质子在硅中IEL和NIEL的大小和分布等,并对计算结果进行了分析和比较.

**关键词** 中子损伤 计算机模拟 蒙特卡罗 能量沉积

## 1 引言

各种人为环境和空间辐射环境中充斥着中子、质子、高能电子和 $\gamma$ 光子以及其他高能离子的辐射,这些辐射的累积剂量效应是导致核辐射环境中工作的电子系统失效的主要原因之一.入射粒子的累积能量损失包括两类,即电离能量损失(IEL)和非电离能量损失(NIEL).不同器件辐射损伤机理不同,对IEL和NIEL的敏感程度不同,因此研究半导体器件的辐射损伤需要区分NIEL和IEL.非电离能量沉积在材料中产生晶格缺陷,常起到复合中心的作用,使少数载流子寿命减小,因此可以造成双极型器件增益下降;电离能量沉积激发电子空穴对,在双极型器件中造成瞬时光电流;在MOS型器件中产生氧化物正电荷和引起界面态,造成阈值电压漂移.因此,IEL和NIEL的研究对于卫星的辐射效应研究具有重要的现实意义.研究表明<sup>[1]</sup>大多数情况下器件的非电离辐射损伤与器件中非电离能量沉积之间存在着较好的线性关系,而不同能谱、不同种类粒子在器件中能量沉积规律有相当大的差别.在半导体器件的辐射效应研究中,若能找出中子与质子的损伤关系,就可以利用中子源来进行质子非电离损伤研究,这正是国内外半导体器件抗辐射加固研究亟待解决的问题之一.国内外对于不同中子能谱的损伤等效常以1MeV中子损伤作为比较的基准,20MeV质子也常作为质子损伤的标准.本文进行中子和质子在硅中造成的NIEL计算研究,旨在为今后研究器件在空间复杂的辐射环境中的综合效应以及建

2000-03-16 收稿

\* 国防科技预研基金资助

立地面模拟源辐射效应与空间辐射效应之间的等效关系奠定基础。

半导体器件的辐射损伤计算常采用 Monte-Carlo 模拟方法。目前关于非电离能量损失和电离能量损失的计算,对于中子、高能电子和  $\gamma$  光子,尚没有公开的软件可以直接进行计算。商业化的中子和光子耦合输运软件 MCNP 等记录的能量沉积并不区分电离能量沉积和非电离能量沉积,所以不宜直接进行损伤计算。本文提出了计算中子 NIEL 和 IEL 的 Monte-Carlo 方法,利用该方法编写了计算中子 NIEL 和 IEL 的计算程序。利用上述自编的程序和引进的 TRIM95 程序分别计算了中子和质子的 NIEL 和 IEL。上述计算结果与文献资料进行了比较。

## 2 计算模型及抽样方法

### 2.1 中子 NIEL 计算模型及抽样方法

中子射入半导体材料中时,通常会发生多种不同的反应,不同反应道的反应截面随入

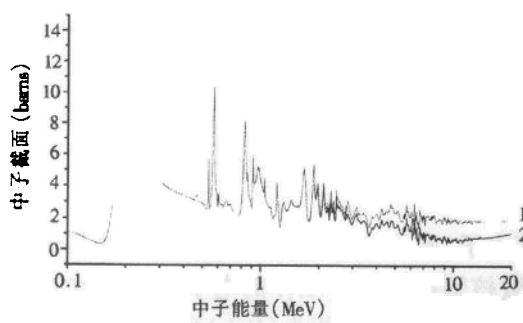


图 1 硅的总截面和弹性散射截面与中子能量关系  
1:总截面,2:弹性散射截面。

射粒子的能量而改变,即不同反应类型发生的几率不同。图 1 为根据美国辐射安全信息计算中心 (RSICC) 中子反应截面数据库<sup>[2]</sup> 本文作者绘出的图。从图 1 可见,1MeV 中子与硅主要发生弹性散射。物理量的记录方法如下:中子产生初始反冲原子 (PKA), PKA 与靶材的碰撞过程中,电离能量损失 IEL 等于电离阻止截面乘以轨迹长度。PKA 与核的碰撞产生次级反冲原子 (SKA), 次级反冲原子将产生空位、声子和电离,其具体各

部分能量分配由改进的 Kinchin-Pease 模型<sup>[3]</sup> 进行计算。然后继续跟踪 PKA, 直至其逃逸系统或能量低于截断能。

由于半导体材料厚度远远小于中子的平均自由程,所以为减小计算误差必须促使中子在材料中进行强迫碰撞。PKA 在材料内行进中由于其部分电子被剥离,实际为带电子,其所带有效电荷与其有效速度有关,有效速度(相对于靶核的热振动速度)越大,核外电子剥离越多,有效电荷量越大。带电粒子与原子核的散射在低能时主要为弹性散射,即库伦散射。在二体弹性散射近似中,带电粒子在其行进过程中要与其最近的每个原子进行散射,为节省计算时间,在屏蔽问题的计算中常采用多次散射近似(又称压缩历史方法),然而在 NIEL 的计算中,需要进行单次散射计算。模拟中我们认为 PKA 与靶材的电子碰撞的能量损失在行进过程中是连续的,即 IEL 等于电离阻止截面( $dE/dX$ )乘以轨迹长度;而与核碰撞的能量损失是分立的,即 PKA 与核散射时将能量传递给靶核。模拟过程主要涉及原子间真实库伦势的计算、瞄准距和最大瞄准距的抽样、与核的碰撞距离的抽样、散射角的计算和电子阻止截面的计算等<sup>[3]</sup>。

程序中一些主要计算公式和抽样方法如下。

在二体弹性散射中,知道了散射角就可以求出中子和散射靶核能量及方向。设入射中子能量为  $E_{in}$ , 散射靶核能量为  $E_{out}$ , 中子和靶核质量分别为  $M_1$  和  $M_2$ , 质心系下散射角为  $\mu$ , 则有

$$E_{out} = \frac{4M_1M_2E_{in}}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \sin^2 \frac{\mu}{2}.$$

质心系下中子散射角  $\mu$  的确定,根据文献<sup>[3]</sup>中给出的对应于不同入射中子能量的散射角分布表中抽样得到。得到了质心系下中子散射角,则容易得到初始反冲原子实验室系下的散射角,进而得到 PKA 出射方向。

反冲原子的碰撞距离由下式求得

$$L_{PKA} = \frac{1}{\pi P_{MAX}^2 \rho}, \quad (2)$$

其中  $P_{MAX}$  为最大瞄准距,  $\rho$  为原子数密度。最大瞄准距与最小传递能(或最小散射角)相对应,最小传递能(即截断能)通常取 1—5eV。公式(2)的物理意义不难看出,反冲原子与其经过的每个原子进行碰撞。瞄准距的抽样在以靶核为中心,以最大瞄准距为半径的圆内均匀抽样,即

$$P = P_{MAX} \cdot \sqrt{\xi}. \quad (3)$$

其中  $\xi$  为(0,1]之间均匀分布的随机数。程序中对 SKA 行为利用近似计算中 Lindhard 理论,即 SKA 动能中产生非电离能量沉积的能量为

$$E_v = \frac{E_{out}}{1 + K_{gr} \cdot g(t \arg et, E_{out})}, \quad (4)$$

其中  $K_{gr}$  与靶核有关,  $g(t \arg et, E_{out})$  与靶核和反冲原子动能有关,随  $E_{out}$  增加而增加。SKA 产生的空位数可根据熟知的 modified Kinchin-Pease model 进行估计,即产生空位数

$$\begin{aligned} \nu &= 1 & E_d < E_v < 2.5E_d, \\ \nu &= 0.4E_v/E_d & E_v > 2.5E_d, \end{aligned} \quad (5)$$

$E_d$  为产生一个硅原子空位所需要的能量(计算中取为 25eV)。电离阻止截面和散射角的计算可参见文献<sup>[3]</sup>。

在整个程序的 Monte Carlo 模拟中,一个粒子游动历史的终极根据粒子能量、权重和是否逃逸系统进行确定。

## 2.2 质子 NIEL 计算模型及抽样方法

质子 NIEL 的结果是根据我们引进的 1995 年版 TRIM(TRANSPORT OF IONS IN MATTER)程序,即 TRIM95 程序计算得到。TRIM95 程序是专为计算带电离子在材料中的电离和非电离能量沉积而编制的 Monte-Carlo 输运程序。其适用的能量范围为 0.1KeV—几十 MeV,能量下限是由于程序只考虑离子与一个原子的二体散射;能量上限是由于程序中不考虑相对论效应。TRIM95 程序可以给出任意材料产生缺陷、声子和电离的能量沉积分布。TRIM95 程序中计算 NIEL 的原理和抽样方法与 2.1 节中模拟初始反冲原子的

NIEL 一致.

### 3 计算结果及分析

中子与核发生碰撞,造成晶格原子位移,该晶格原子称为初始反冲原子 PKA,PKA 若具有较高的能量就要继续与其他次级反冲原子 SKA 发生碰撞,造成更多的原子位移.计算这种位移“级联过程”,就是模拟大量 PKA 的统计行为.可见,PKA 能谱在判断位移损伤大小时具有很重要的作用.不同类型和不同能量的粒子产生的 PKA 谱是不同的,图 2 是计算的 1MeV 中子在硅中产生的初始反冲原子能谱(已归一化,即图中面积为 1).从该图中可以看出,低能初始反冲原子所占比重较大,其平均值为 43.16keV.由(1)式可知,中子倾向于向前散射.由于靶材相对于入射粒子的平均自由程而言很薄,所以图 3 中电离能量沉积和非电离能量沉积与硅靶材厚度近似成线性关系.图 3 中直线与横轴的截距并不等于零,其值在纳米材料的长度范围.这并非完全是计算误差,这说明纳米材料几乎不会造成非电离辐射损伤,即辐射基本上未遇到核的散射而直接穿过材料,事实上纳米材料正具备这一特性.图 3 还给出 NIEL 中分别产生空位和声子的能量沉积.从图 3 可见,1MeV 中子产生的 NIEL 中大部分能量损耗于产生晶格振动.根据图 3 中电离和非电离能量沉积直线斜率计算的阻止截面及与文献比较列于表 1 中.1MeV 中子产生空位能量沉积除以硅原子晶格位移能  $E_d$ ,可得 1MeV 中子在硅中空位产生率为  $7.51 \times 10^{-3}/(\mu\text{m} \cdot \text{n})$ .

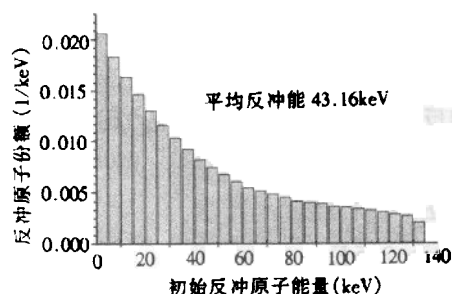


图 2 1MeV 中子在硅中产生初始反冲原子能谱(归一化)

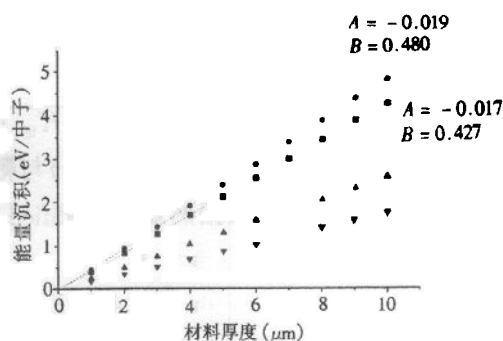


图 3 1MeV 中子在硅造成的 NIEL、IEL、空位和声子能量沉积与厚度关系  
NIEL = 空位 + 声子. ■NIEL, ●IEL,  
▼空位, ▲声子, 一线性拟合  $Y = A + B \cdot X$ .

表 1 1MeV 中子在硅中电离和非电离阻止截面与文献的比较(单位:  $10^{-3} \text{MeV} \cdot \text{cm}^2/\text{g}$ )

	NIEL	IEL
本文计算值	1.84	2.07
文献[4]	2.00	1.67
文献[5]	1.30	

图 4—6 为质子在硅中辐照的 TRIM95 程序计算结果.从图 4 可见,在几个微米的硅材料中,IEL 基本均匀地沉积在其中.图 4,5 中还给出了入射质子以及由质子产生的反

冲原子的非电离能量沉积. 从图 4,5 可见, 随着材料的深度增加, 能量沉积逐渐增大, 但前几个微米基本上也是均匀的. 产生声子和位移能量沉积的图形相似, 但声子能量沉积要大于产生空位的能量沉积, 两者皆小于 IEL. 从图 6 可见, 在本图给出的能量范围, 电离和非电离阻止本领随质子能量的增加而减小, 这与我们熟知的中子的情况相反. 比较表 1 和图 6 可见, 1MeV 质子比 1MeV 中子电离和非电离阻止本领都大得多, 表明 1MeV 质子比 1MeV 中子对硅损伤更大. 在本文对中子产生的 PKA 的模拟和 TRIM95 对质子的模拟计算中, 采用了一种适用于各种材料和各种入射离子的通用势函数, 理论和实验检验其误差在 5% 以内<sup>[3]</sup>. 另外, Monte-Carlo 方法本身还会带来计算误差, 其误差与模拟的粒子数目和使用的减小方差的模拟技巧有关, 当然计算的准确性也与所使用的中子截面数据库有关, 所以理论上很难估计结果的误差. 然而我们认为粒子运输的模拟通常之所以使用 Monte-Carlo 方法, 除了该方法直观和便捷外, 其误差一般不比数值方法大(如果数值方法可以计算的话), 因为 Monte-Carlo 方法不需要对系统几何条件进行简化. 根据表 1 中对 1MeV 中子的计算结果与文献资料的比较, 我们认为本文的结果是合理的. 由于能量沉积是一个微量, 它的检验需要通过辐照使半导体器件宏观电参数的退化来进行, 这首先需要器件辐照损伤效应的定量关系, 这正是国内外半导体器件辐射损伤效应正在进行的工作, 所以目前对于能量沉积尚没有实验结果.

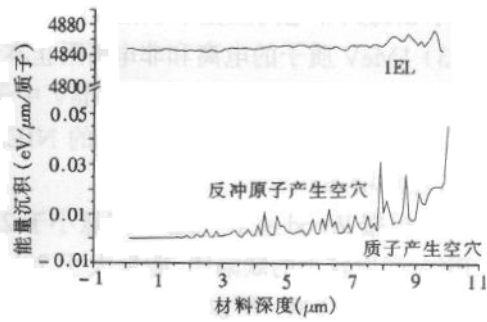


图 4 20MeV 质子在硅中产生电离和空位能量沉积分布

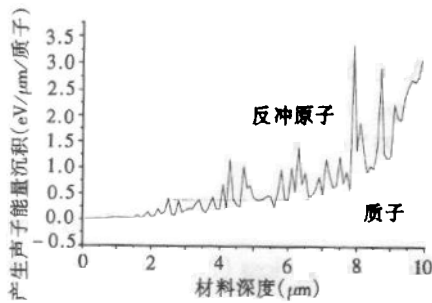


图 5 20MeV 质子在硅中产生声子能量沉积分布

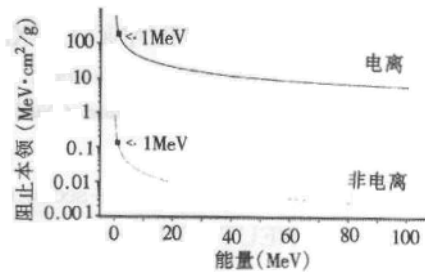


图 6 TRIM95 程序计算的质子在硅中的阻止本领

## 4 结论

通过以上 IEL 和 NIEL 的计算和给出的图中可以得出以下一些结论:

- 1) 对于硅材料, 无论电离或非电离能量损失, 1MeV 质子比 1MeV 中子要大得多;
- 2) 1MeV 质子的电离阻止本领比其非电离阻止本领大 3 个量级. 1MeV 中子的电离

阻止本领比其非电离阻止本领稍大;

3) 1MeV 质子的电离和非电离阻止本领比 20MeV 质子电离和非电离阻止本领大;

4) 在几个微米的硅材料中,1MeV 中子产生的 IEL 和 NIEL 均匀分布,20MeV 质子的 IEL 均匀分布,而 20MeV 质子的 NIEL 分布不均匀,随着材料深度的增加,质子的 NIEL 逐渐增加;

5) 根据 Wood et al<sup>[6]</sup> 观点,能量小于 2keV 的 PKA 主要产生点缺陷,能量小于 12keV 的 PKA 产生较小的缺陷团,能量大于 20keV 的 PKA 将产生树状结构缺陷,即反冲原子不断发生级联碰撞. 所以,1MeV 中子在硅中将产生树状结构缺陷.

### 参考文献(References)

- 1 Summers G P et al. Damage Correlations in Semiconductors Exposed to Gamma, Electron and Proton Radiations IEEE Trans. on Nucl. Sci. 1993, 40(6):1372—1379
- 2 MCNP-A General Monte Carlo Particle Transport Code, version 4b the Radiation Safety Information Computational Center (RSICC). 1997
- 3 Ziegler J F et al. The Stopping and Range of Ions in Solids, Volume 1. New York: Pergamon Press, 1985
- 4 Srour J R et al. Damage Mechanisms in Radiation-Tolerant Amorphous Silicon Solar Cells. IEEE Trans. on Nucl. Sci., 1998, 45(6):2624—2631
- 5 Summers G P et al. Correlation of Particle-Induced Displacement Damage in Silicon. IEEE Trans. on Nucl. Sci., 1987, 34(6):1134—1139
- 6 Wood S et al. Simulation of Radiation Damage in Solids. IEEE Trans. on Nucl. Sci., 1981, 28(6):4107—4112

## Simulation of Energy Deposition of Protons and 1MeV Neutrons in Silicon\*

CHEN Shi-Bin<sup>1,2</sup> ZHANG Yi-Men<sup>1</sup> CHEN Yu-Sheng<sup>2</sup>  
HUANG Liu-Xing<sup>2</sup> ZHANG Yu-Ming<sup>1</sup>

1(Microelectronics Institute, Xidian University, Xi'an 710071, China)

2(Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China)

**Abstract** Based on existing cross-section data and general theories, a Monte-Carlo computer program named NEUTRON for calculating non-ionizing energy loss (NIEL) and ionizing energy loss (IEL) of neutrons in materials was written. The amount of IEL & NIEL and their distributions irradiation-induced by 1MeV neutrons and protons in common semiconductor material Si were calculated with NEUTRON and introduced TRIM95, respectively. These results were analyzed and compared with literatures.

**Key words** neutron damage, computer simulation, Monte-Carlo, energy deposition

Received 16 March 2000

\* Supported by Preresearch Fund of Science and Technology for National Defence