

МОНТЕ–КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ ПОЛУПРОВОДНИКА InAs НА САПФИРОВОЙ ПОДЛОЖКЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НЕЙТРОННОГО ПОТОКА

© 2026 г. В. Р. Ямурзин^a, *, М. В. Булавин^a

^aОбъединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., 141980 Россия

*E-mail: yamurzin.v@nf.jinr.ru

Поступила в редакцию 12.07.2024 г.

После доработки 31.07.2025 г.

Принята к публикации 22.09.2025 г.

Статья посвящена Монте–Карло моделированию влиянию нейтронного потока на кристаллическую структуру полупроводника InAs на сапфировой подложке в программной среде Geant4 и SRIM. Рассмотрен список генерируемых вторичных частиц, их длины пробега и количество образовавшихся вакансий на ион. На основе численного моделирования сделаны выводы о расположении полупроводниковой пленки в процессе облучения и влияние на ее механические и электрофизические свойства.

Ключевые слова: Geant4, SRIM, гетероструктура, дефектообразование, сенсоры магнитного поля, Монте–Карло моделирование

DOI: 10.56304/S2079562926020041

ВВЕДЕНИЕ

В современной науке и технологии полупроводниковые материалы играют ключевую роль в разработке и производстве различных электронных устройств, от микросхем до сенсоров [1]. Однако, эксплуатация этих устройств в условиях высоких энергий и радиационных нагрузок, таких как космическое пространство, ядерные реакторы или токамаки, требует глубокого понимания их поведения под воздействием радиации [2]. Особенно актуальной является проблема воздействия нейтронного потока, который может значительно изменять физические свойства материалов и ухудшать работоспособность полупроводниковых устройств [3].

В контексте воздействия нейтронного потока особый интерес представляют быстрые нейтроны с энергией около 14 МэВ, которые образуются в результате реакции дейтерий–третия [4]. Эти нейтроны обладают высокой проникающей способностью и могут вызывать значительные изменения в структуре полупроводниковых материалов [5]. Взаимодействие быстрых нейтронов с атомами материала приводит к образованию первичных отклонений от стехиометрии и радиационных дефектов, таких как вакансии и междоузлия, которые могут существенно влиять на электронные свойства полупроводника [6]. Однако, важно от-

метить, что помимо одиночных дефектов образуются также кластерные дефекты. Эти дефекты представляют собой группы атомов, которые были выбиты из своих положений в кристаллической решетке и образовали устойчивые конфигурации. Кластерные дефекты могут оказывать значительное влияние на электронные свойства полупроводниковых материалов, поскольку они могут создавать глубокие ловушки для носителей заряда и изменять проводимость материала.



В рамках нашего исследования для анализа воздействия нейтронного потока на полупроводниковые материалы мы использовали программные пакеты для моделирования Geant4 [7] и SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) [8]. Использование этих программных пакетов позволило нам с высокой точностью моделировать и анализировать процессы, происходящие в полупроводниковых материалах под воздействием нейтронного потока.

Это исследование помогает понять, какие механизмы повреждения доминируют в InAs/Al₂O₃ при облучении нейтронами и какие стратегии могут быть использованы для минимизации этих эффектов.

Таблица 1. Таблица изотопов и изобилия элементов в материале мишени

Элемент	A	Массовая доля, %	Изобилие, %	Элементная доля, %
In	113	60	5	49.46
	115		95	
As	75	40	100	50.54

1. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В данной главе описывается численное моделирование взаимодействия нейтронов с полупроводниковым материалом InAs, выполненное с использованием программного обеспечения Geant4 версии 11.1.1. Элементный состав кристалла InAs представлен в табл. 1.

Каждая мишень виртуально облучалась нейтронами, прилетевшими перпендикулярно к поверхности, с энергией равной 0.0253 эВ, 14 МэВ и максвелловским спектром нейтронов экспериментального энергетического спектра нейтронов реактора ИБР-2 канала № 3 на расстоянии 30 мм от водяного замедлителя (рис. 1) [9].

В моделировании учитывался изотопный состав каждого элемента, содержащегося в материале. Для описания физических процессов применялся стандартный набор физических моделей QGSP_BIC_HP [10], который включает кварк-глюонные струнные, предкомпаундные и бинарные каскадные процессы высокой точности. Этот набор моделей подходит для анализа взаимодействий, включающих нейтроны, и обеспечивает детальное описание следующих процессов:

- Упругое рассеяние
- Неупругое рассеяние
- Захват
- Каскады вторичных частиц

В исследовании анализировались вторичные частицы, генерированные в результате взаимодействия атомов кристаллической решетки полупроводникового материала с нейтронами высокой энергии. Изучалась средняя энергия, выделяемая в ходе реакций, а также кинетическая энергия вторичных заряженных частиц, что позволило провести детальный анализ образования дефектов в структуре материала. Для каждой из реакций использовались сечения, взятые из открытой библиотеки данных JENDL-4.0 [11].

В процессе обработки выходных данных производилась фильтрация событий, при которых энергия не превышала 1 кэВ. Из анализа были исключены все сгенерированные фотоны, пионы и другие элементарные частицы, кроме электронов, так как они не влияют на электрофизические характеристики исследуемого материала. Для детального анализа вторичных частиц использовалось программное обеспечение SRIM, что позво-

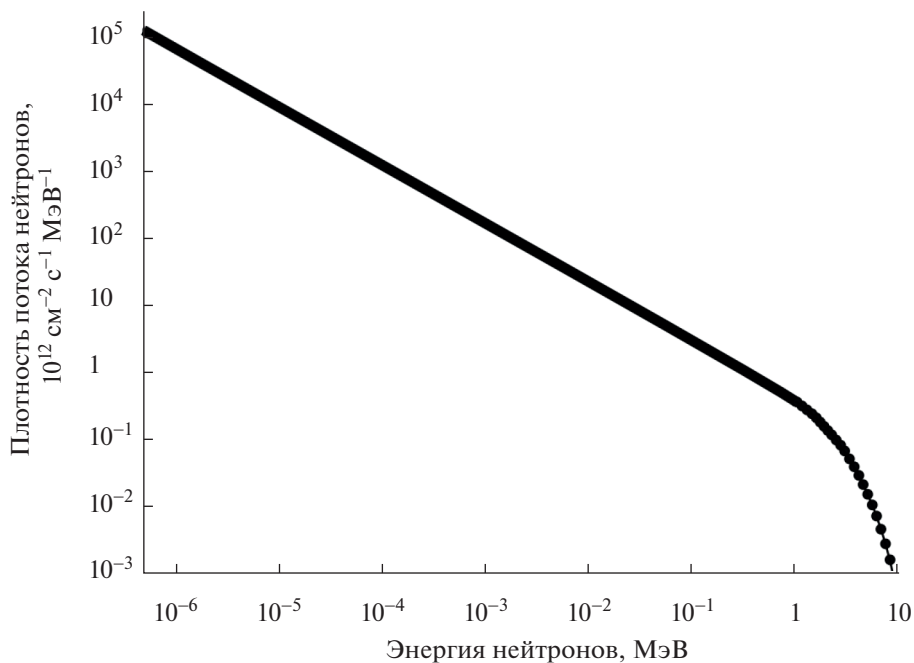


Рис. 1. Дифференциальная энергетическая плотность потока нейтронов в канале № 3 реактора ИБР-2 на расстоянии 0.3 м от водяного замедлителя.

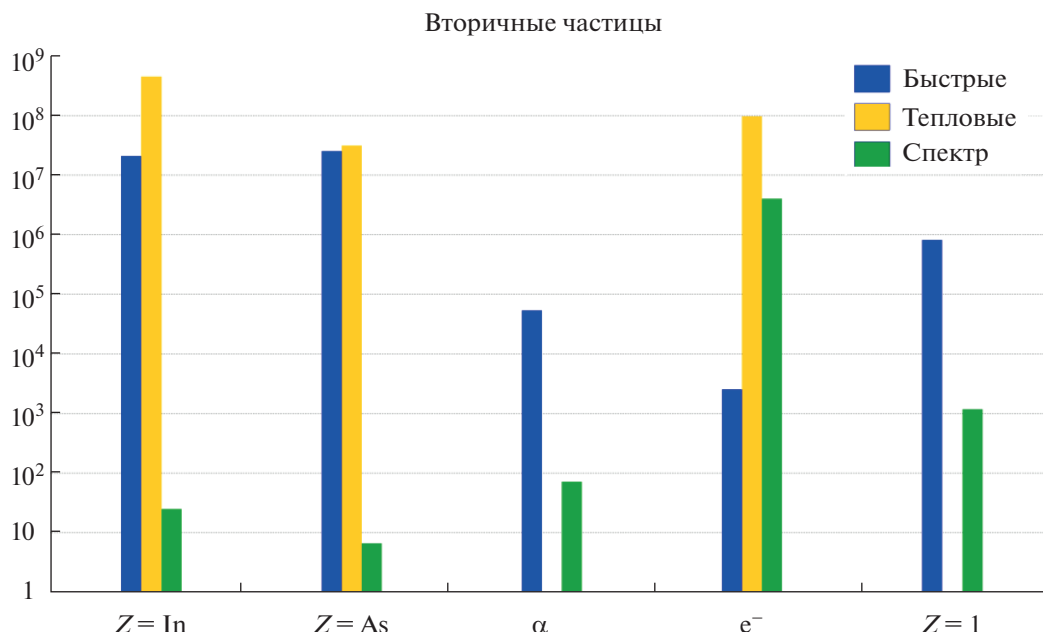


Рис. 2. Рассчитанное количество образовавшихся вторичных частиц после взаимодействия нейтронов различных энергий с ядрами кристаллической решетки материала.

лило оценить образование вакансий и пробег каждого вторичного продукта.

В программе SRIM моделируются взаимодействия ионов с твердыми материалами, при котором энергия от иона передается атомам материала в результате столкновений. Это позволяет прогнозировать поведение ионов в материалах и их влияние на структуру и свойства материала.

Использование полупроводникового материала InAs (арсенид индия) на сапфировой подложке Al_2O_3 (оксид алюминия) в вашем исследовании представляет собой интересный выбор для анализа воздействия нейтронного потока [12]. InAs известен своей высокой электронной подвижностью и широко используется в высокочастотных и оптоэлектронных приложениях [13]. Сапфировая подложка обеспечивает хорошую термическую стабильность и механическую прочность, что делает эту комбинацию подходящей для условий, где материалы подвергаются радиационному воздействию.

Мы рассматривали мишень из объемного чистого материала с геометрией параллелепипеда (толщиной 100 нм³) и со следующими параметрами: плотность – 5.670 г/см³, радиационная длина – 1.741 см, ядерная длина взаимодействия – 28.273 см, I_{mean} (средняя энергия ионизации) – 424.674 эВ.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В рамках численного моделирования методом Монте-Карло в среде Geant4 было определено количество произошедших реакций и образовав-

шихся вторичных частиц в полупроводнике из арсенида индия (InAs) при воздействии нейтронного излучения с энергиями, проставленными в предыдущей главе.

Из анализа результатов становится ясно, что количество реакций каждого типа сильно зависит от энергии налетающего нейтрона. Эта зависимость объясняется значениями сечений реакций для элементов кристаллической решетки материала InAs, представленными выше. Для различных энергий налетающего нейтрона существует соответствующее сечение для каждого типа реакции. При энергиях тепловых нейтронов определенные реакции захвата (Capture) оказываются более вероятными, в отличие от упругих (см. рис. 3). Большинство реакций захвата происходят именно на атомах индия (In), что подтверждается количеством образовавшихся ядер, равным зарядовому числу In (см. рис. 2). При более высоких энергиях реакции упругих соударений становятся доминирующими. Кроме того, быстрые нейтроны в основном вызывают радиационные дефекты, выбивая атомы из узлов кристаллической решетки.

В последующем исследовании фокус был смещен на изучение воздействия быстрых нейтронов на полупроводниковые материалы. Данный энергетический диапазон представляет повышенный интерес, поскольку быстрые нейтроны индуцируют значительные повреждения кристаллической решетки за счет образования первичных точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) и их кластеров, что критически влияет на электрофизические характеристики материалов [14]. Ос-

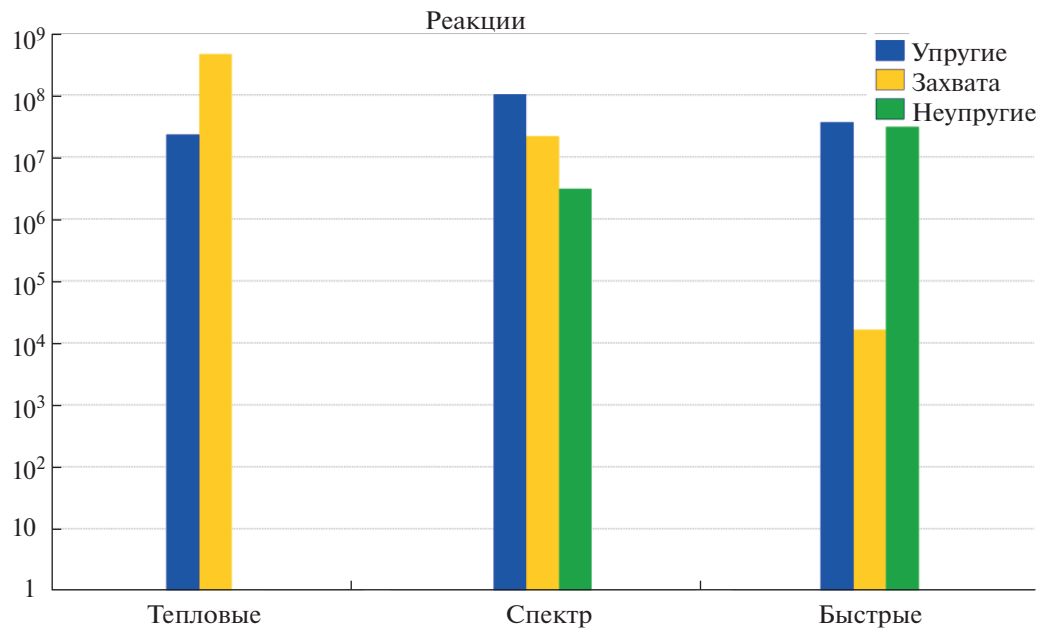


Рис. 3. Рассчитанная доля упругих, неупругих событий и реакций захвата для различных энергий нейтронного излучения.

новным фокусом анализа стали вторичные заряженные частицы, генерируемые в результате этих взаимодействий. Ключевыми параметрами для изучения являлись кинетическая энергия этих частиц после столкновения с нейтронами внутри полупроводникового материала, а также изменения этих параметров при переходе через сапфировую подложку. Результаты моделирования были систематизированы и представлены в виде табл. 2, что позволяет наглядно оценить распределение кинетической энергии.

Для количественного анализа длин пробега заряженных частиц использовалась программная среда SRIM, специализированная на моделировании процессов ионного взаимодействия с ве-

ществом. Толщина полупроводникового материала InAs была установлена на уровне 500 Å, что позволило симулировать условия, при которых реакции происходят в глубине полупроводника. Исходные данные о кинетической энергии и изотопном составе заряженных частиц были взяты из предварительно составленной табл. 2, что обеспечило точность исходных параметров для моделирования. Результаты моделирования, отражающие распределение длин пробега и образовавшихся вакансий на ион в зависимости типа частиц, были систематизированы и представлены в табл. 3.

В рамках нашего исследования, помимо основных параметров, таких как длины пробега, мы

Таблица 2. Список сгенерированных частиц для быстрых нейтронов

Элемент	Средняя энергия E_{mean} , кэВ (после подложки)	Средняя энергия E_{mean} , кэВ (без подложки)
⁷⁵ As	2.7732	79.24
⁷⁶ As	251.49 эВ	—
⁷⁶ Se	55.577 эВ	—
¹¹³ In	7.2847	31.475
¹¹⁵ In	13.468 эВ	61.376
¹¹⁶ In	120.05 эВ	—
¹¹⁶ Sn	31.924 эВ	—
²⁷ Al	17.657	—
¹⁶ O	20.321	—

Таблица 3. Длины пробега и образовавшиеся вакансии заряженных частиц

Элемент	Всего образовавшихся вакансий на ион		Средний пробег частиц l_{mean} , Å	
	(после подложки)	(без подложки)	(после подложки)	(без подложки)
^{75}As	35.6	907	45	441
^{76}As	3.1	—	13	—
^{76}Se	0.5	—	7	—
^{113}In	93.3	385.8	65	159
^{115}In	—	734.1	6	255
^{116}In	1.4	—	11	—
^{116}Sn	0.1	—	7	—
^{27}Al	155.4	—	423	—
^{16}O	188	—	265	—

также уделяем значительное внимание анализу траекторий заряженных частиц. Эти траектории зачастую оказываются нелинейными из-за сложных взаимодействий частиц с атомами материала. В процессе проникновения и движения внутри полупроводникового материала, такого как InAs, заряженные частицы могут испытывать ряд событий, включая рассеяние, поглощение или даже вторичное излучение, что приводит к изменению их первоначальных траекторий.

В ходе моделирования прохождения 10000 заряженных частиц через полупроводниковый материал InAs без подложки были получены следующие результаты: изотоп ^{115}In демонстрирует 58 случаев выхода за пределы материала, для ^{75}As зафиксировано 195 таких событий, а для ^{113}In — 60 событий. На рис. 4–6 показано количественное распределение дефектов внутри материала полупроводника после взаимодействия атомов с нейтронами высоких энергий, прилетающих со стороны полупроводника. Вероятности выхода частиц за пределы материала составляют 0.58% для ^{115}In , 1.95% для ^{75}As и 0.60% для ^{113}In .

Однако для полноты исследования необходимо анализировать аналогичные процессы, происходящие в полупроводнике после воздействия нейтронного излучения, прошедшего через подложку.

Особое внимание следует уделить заряженным частицам, которые образуются в сапфировой подложке и затем попадают в полупроводник. Например, кислород, проникающий в полупроводник, проходит значительное расстояние, и из 10000 таких частиц 1145 возвращаются обратно в подложку. Что касается алюминия, из 10000 частиц 1451 возвращается в подложку, а 143 частицы выходят за пределы полупроводника. Вероятности возвращения алюминиевых частиц в подложку и выхода за пределы полупроводника составляют 14.51 и 1.43% соответственно.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Исходя из анализа взаимодействия атомов подложки и полупроводника, можно сделать вывод о том, что размещение полупроводникового материала перед подложкой в структуре устройства является более предпочтительным (рис. 7). Это обусловлено несколькими ключевыми аспектами:

Взаимодействие атомов подложки с полупроводником представляет собой значительный риск для кристаллической структуры полупроводника. Атомы, такие как кислород и алюминий, могут мигрировать из подложки в полупроводник, вызывая дефекты и ухудшая его электрофизические свойства. Это влияет на функциональность и эффективность полупроводниковых устройств.

Кроме того, важным аспектом является возможность выхода частиц из материала на поверхность или их переход в подложку. Эти процессы могут существенно повлиять на электрофизические свойства полупроводника и его долговечность. Смещение атомов полупроводника из верхних слоев подложки обратно в полупроводник может способствовать восстановлению его разрушенной кристаллической структуры под действием ионизирующего излучения и эффектом “самоотжига” [15, 16]. Это явление помогает поддерживать структурную целостность полупроводника, что критически важно для поддержания его долговечности и радиационной стойкости.

Деградация верхнего слоя полупроводника под воздействием нейтронного излучения может происходить медленнее, если излучение направлено со стороны полупроводника. Выход частиц на поверхность может привести к формированию дефектов, которые, в свою очередь, влияют на механические свойства материала. Это замедление процесса деградации способствует сохранению качества и функциональности полупроводнико-

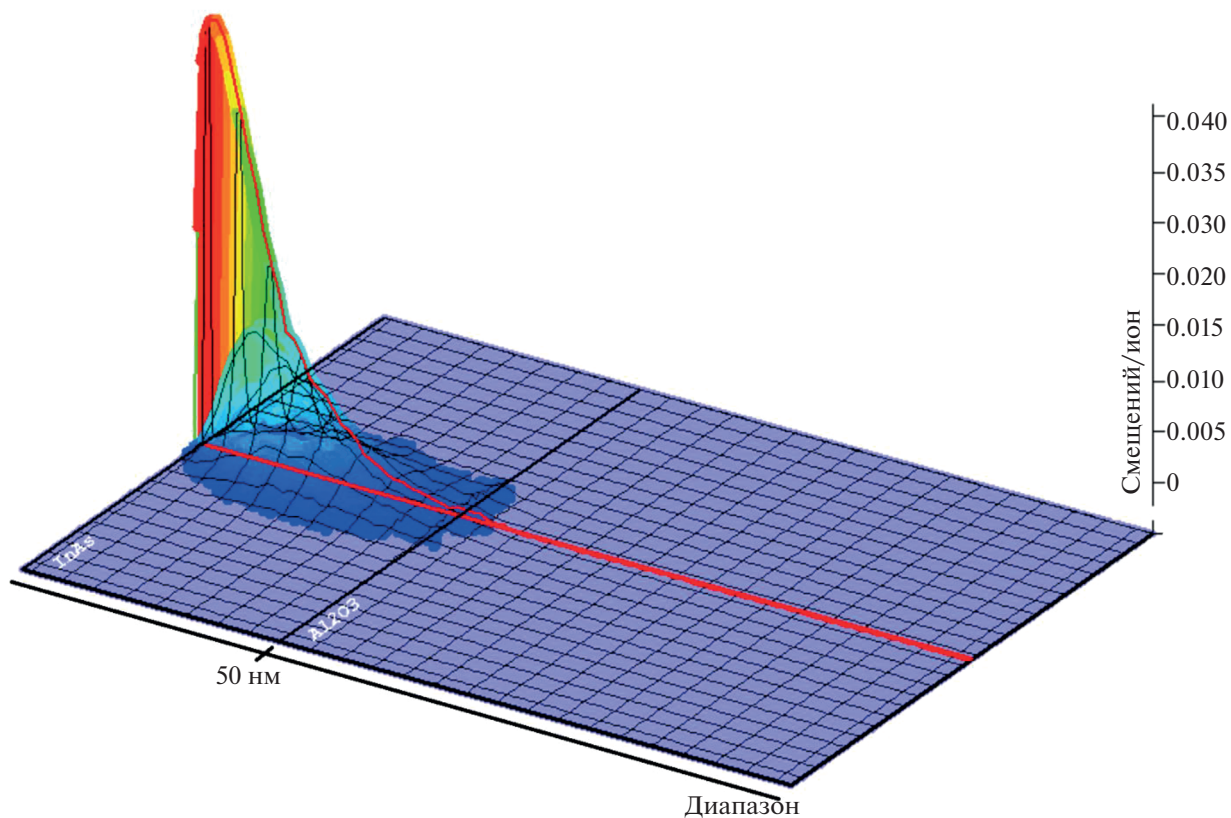


Рис. 4. Распределение дефектов внутри полупроводника после взаимодействия с заряженной частицей ^{113}In . Нейтронный поток направлен со стороны InAs.

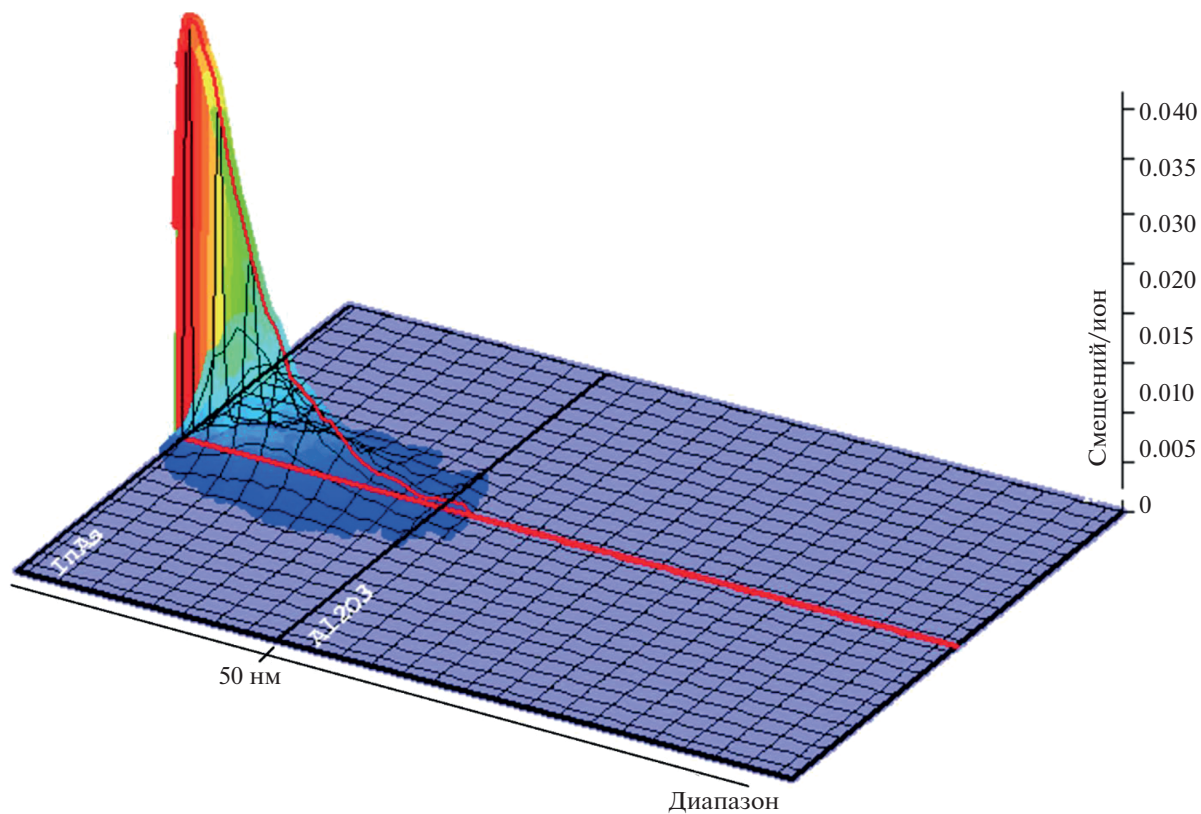


Рис. 5. Распределение дефектов внутри полупроводника после взаимодействия с заряженной частицей ^{113}In . Нейтронный поток направлен со стороны InAs.

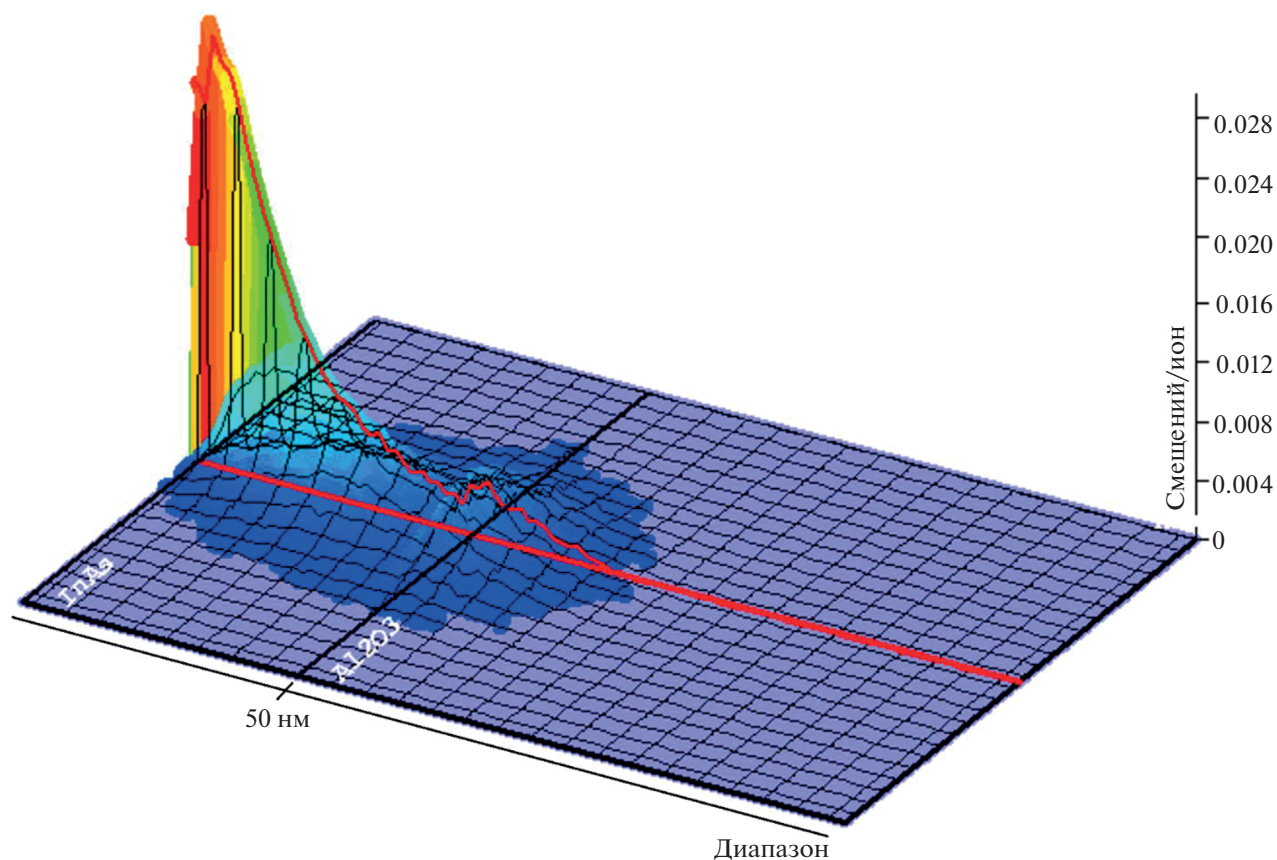


Рис. 6. Распределение дефектов внутри полупроводника после взаимодействия с заряженной частицей ^{75}As . Нейтронный поток направлен со стороны InAs.

вого слоя, увеличивая тем самым общую долговечность и радиационную стойкость устройства.

ВЫВОД

В ходе нашего исследования мы провели анализ взаимодействия заряженных частиц с полупроводниковым материалом InAs и сапфировой подложкой. Результаты моделирования показали, что изотопы ^{115}In , ^{75}As и ^{113}In демонстрируют различные вероятности выхода частиц за пределы

материала после взаимодействия с нейтронами до и после подложки.

Особое внимание в нашем исследовании было уделено вторичным заряженным частицам, образующимся в сапфировой подложке, поскольку они оказывают более сильное влияние на электрофизические характеристики полупроводников. Например, 14.51% частиц алюминия и 11.45% частиц кислорода, образующихся в подложке, возвраща-

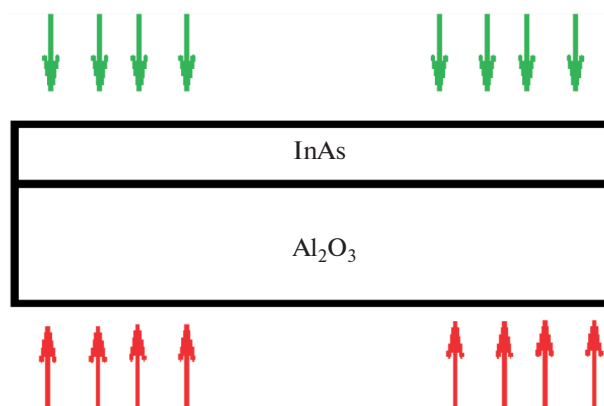


Рис. 7. Схематическое представление направлений нейтронного потока относительно гетероструктуры InAs/ Al_2O_3 .

ются обратно, что свидетельствует о высоком уровне их взаимодействия с полупроводником.

Полученные результаты позволяют заключить, что размещение полупроводникового материала перед подложкой в структуре устройства является предпочтительным с точки зрения минимизации негативного воздействия на его кристаллическую структуру и электро-физические характеристики. Такой подход может способствовать увеличению долговечности и радиационной стойкости полупроводникового устройства, что подтверждается наблюдаемыми вероятностями и эффектами, выявленными в ходе моделирования.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа проводится в рамках гранта № 075-15-2021-1352 Министерства науки и высшего образования РФ от 12 октября 2021 г. “Методы синхротронной и нейтронной диагностики материалов ядерной, термоядерной энергетики и сверхпроводящих материалов”.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Выражается благодарность научным сотрудникам национального исследовательского ядерных университета “МИФИ” Клочкову Алексею Николаевичу и Васильевскому Ивану Сергеевичу за ценные советы при планировании исследования и рекомендации по оформлению статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Лебедев А.А., Челноков В.Е. Широкозонные полупроводники для силовой электроники // Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33 (9). С. 1096–1099.
2. Bolshakova I. et al. Magnetic measuring instrumentation with radiation-resistant hall sensors for fusion reactors: experience of testing at JET // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2012. V. 59 (4). P. 1224–1231.
3. Fauzi D.A. et al. Effects of high neutron fluence on the electrical characteristics of InAs quantum dot structures // IEEE 4th Int. Conf. Photonics (ICP). Melaka, Malaysia. 2013. 227–229. <https://doi.org/10.1109/ICP.2013.6687122>
4. Morse E. Nuclear Fusion. 2018. Cham: Springer.
5. Васильев А.В. и др. Влияние нейтронных потоков высокой интенсивности на чувствительность металллических сенсоров Холла. Тр. 12-ой Междунар. конф. “Взаимодействие излучений с твердым телом” (ВИТТ-2017). 19–22 сентября 2017. Минск. 2017. С. 44–45.
6. Shatalov A. et al. Neutron irradiation induced degradation of the collector–emitter offset voltage in InP/InGaAs single heterojunction bipolar transistors // J. Appl. Phys. 2000. V. 88 (6). P. 3765–3767.
7. Geant4 . <https://www.geant4.org>.
8. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter. <http://www.srim.org>.
9. Petrova M.O., Bulavin M.V., Rogov A.D., Yskakov A., Galushko A.V. Current Characteristics of Ionizing Radiation Fields of the IBR-2 Reactor’s Irradiation Facility for Researching Materials’ Radiation Resistance // Instrum. Exp. Tech. 2022. V. 65. P. 371–375. <https://doi.org/10.1134/S0020441222030046>
10. Geant4. Physics Reference Manual. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/html/index.html>.
11. Nuclear Data Center JENDL-4.0. <https://www.nndc.jaea.go.jp/jendl/j40/j40.html>.
12. Klochkov A.N. et al. Growth by molecular beam epitaxy and characterization of n-InAs films on sapphire substrates // Appl. Surf. Sci. 2023. V. 619. P. 156722.
13. Landry G. et al. Characterization of single magnetic particles with InAs quantum-well Hall devices // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 85 (20). P. 4693–4695.
14. Was G.S. Fundamentals of Radiation Materials Science. 2007. Berlin, Heidelberg: Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-49472-0>
15. Чернов И.П., Мамонтов А.П. Упорядочение структуры кристаллов ионизирующим излучением (эффект малых доз ионизирующего излучения) // Изв. Томского политехн. ун-ва. 2000. Т. 303 (1). С. 74–80. <https://earchive.tpu.ru/handle/11683/2671>.
16. Дворников О.В. и др. Влияние гамма-излучения на элементы аналоговых интегральных схем // Докл. Белорусс. гос. ун-ва. информ. радиоэлектр. 2012. № 3 (65). С. 56–62. <https://doklady.bsuir.by/jour/article/download/28/28>.

Monte Carlo Simulation of Defect Formation in the Crystalline Structure of InAs Semiconductor on a Sapphire Substrate Under Neutron Flux

V. R. Yamurzin¹, * and M. V. Bulavin¹

¹Joint Institute for Nuclear Research, Moscow oblast, Dubna, 141980 Russia

*e-mail: yamurzin.v@nf.jinr.ru

Received July 12, 2024; revised July 31, 2025; accepted September 22, 2025

Abstract—The article is devoted to Monte Carlo simulation of the effect of neutron flux on the crystalline structure of an InAs semiconductor on a sapphire substrate using the Geant4 and SRIM software environments. The list of generated secondary particles, their ranges, and the number of vacancies per ion are examined. Based on numerical modeling, conclusions are drawn regarding the positioning of the semiconductor film during irradiation and its impact on the mechanical, optical, and electrophysical properties.

Keywords: Geant4, SRIM, heterostructure, defect formation, magnetic field sensors, Monte Carlo simulation