

Научная статья

УДК 621.315.5 https://doi.org/10.32603/2071-8985-2023-16-9-5-17

# Исследование относительной восприимчивости изотопов кремния к потоку тепловых нейтронов

М. В. Ремизов<sup>1,2</sup>, Ю. Ю. Бунькова<sup>1,3</sup>, О. В. Вольпяс<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ РФ ЦНИИ РТК, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> ФГБУ «ПИЯФ им. Б. П. Константинова» НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

<sup>™</sup>o.volpyas@rtc.ru

**Аннотация.** Для решения задач, связанных с изучением возможности изменения свойств перспективных полупроводниковых материалов, исследованы механизмы взаимодействия нейтронного излучения с изотопами кремния. Изучение данного полупроводникового материала особенно актуально из-за его широкого использования в современных полупроводниковых технологиях построения интегральных микросхем.

Исследованы типы взаимодействий нейтронного излучения с веществом, основные механизмы образования дефектов кристаллической решетки под воздействием тепловых нейтронов. Проведено моделирование случайных процессов взаимодействия потока тепловых нейтронов с тремя изотопами кремния  $^{28}$ Si,  $^{29}$ Si и  $^{30}$ Si. Определен наиболее восприимчивый к упругим взаимодействиям изотоп –  $^{29}$ Si. В случае реакций (*n*,  $\gamma$ ) наиболее чувствительным оказался изотоп  $^{28}$ Si.

**Ключевые слова:** кремний, нейтронное излучение, деформация кристаллической решетки, полупроводник, изотопы кремния, тепловые нейтроны

**Для цитирования:** Ремизов М. В., Бунькова Ю. Ю., Вольпяс О. В. Исследование относительной восприимчивости изотопов кремния к потоку тепловых нейтронов // Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2023. Т. 16, № 9. С. 5–17. doi: 10.32603/2071-8985-2023-16-9-5-17.

Финансирование: Результаты получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России FNRG-2023-0001 1022113000016-5-2.5.1 № 075-03-2023-193/2 «Исследование влияния нейтронного излучения на свойства полупроводниковых материалов».

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Original article

# Investigation of the Relative Reseptivity of Silicon Isotopes to a Thermal Neutron Flux

## M. V. Remizov<sup>1,2</sup>, Yu. Yu. Bunkova<sup>1,3</sup>, O. V. Volpyas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Russian State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics, Saint Petersburg, Russia

<sup>2</sup> Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov

of NRC «Kurchatov Institute», Saint Petersburg, Russia

<sup>3</sup> Saint Petersburg Electrotechnical University, Saint Petersburg, Russia

<sup>⊠</sup>o.volpyas@rtc.ru

**Abstract.** To solve problems related to the study of the possibility of changing the properties of promising semiconductor materials, the mechanisms of interaction of neutron radiation with silicon isotopes are investigated. The study of this semiconductor material is especially relevant because of its widespread use in modern semiconductor technologies for the construction integrated circuits.

The types of interactions of neutron radiation with matter, the main mechanisms of formation of crystal lattice defects under the influence of thermal neutrons are investigated. Random processes of interaction of thermal neutron flux with three isotopes of silicon <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si and <sup>30</sup>Si are simulated. The isotope <sup>29</sup>Si, which is most susceptible to elastic interactions, has been determined. In the case of reactions (*n*, γ), the isotope <sup>28</sup>Si was the most sensitive.

Keywords: silicon, neutron radiation, lattice strain, semiconductor, silicon isotopes, thermal neutrons

**For citation** Remizov M. V., Bunkova Yu. Yu., Volpyas O. V. Investigation of the Relative Reseptivity of Silicon Isotopes to a Thermal Neutron Flux // LETI Transactions on Electrical Engineering & Computer Science. 2023. Vol. 16, no. 9. P. 5–17. doi: 10.32603/2071-8985-2023-16-9-5-17.

**Funding**: The results were obtained within the framework of the state assignment of the Ministry of Education and Science of Russia FNRG-2023-0001 1022113000016-5-2.5.1 № 075-03-2023-193/2 «Investigation of neutron radiation induced effect on the properties of semiconductor materials».

Conflict of interest. The authors declare no conflicts of interest.

Введение. На сегодняшний день кремний – один из наиболее востребованных полупроводниковых материалов на рынке. Данный полупроводник лежит в основе КМОП- (комплементарная структура «металл–оксид–полупроводник») технологии, по которой производится подавляющее большинство современных интегральных микросхем.

Изотопный состав кремния влияет на свойства полупроводника: подвижность носителей заряда, электропроводность, теплопроводность и др. Для производства устройств микроэлектроники с наиболее эффективными характеристиками необходимо изучение и использование свойств каждого из изотопов. На данный момент существуют работы, описывающие получение и очистку изотопов кремния, позволяющих получить материалы со степенью очистки более 99.9 % [1]–[3].

Более того, приборы, изготовленные на основе кремния, работают в самых различных условиях: от стандартных до экстремальных. Следовательно, стоит актуальная задача обеспечения стойкости таких устройств к разного рода воздействиям окружающей среды.

В последние годы моделирование дефектообразования в полупроводниках под воздействием нейтронов привлекло внимание исследователей. Такие исследования имеют важное практическое значение для различных областей, включая ядерную энергетику, электронику и полупроводниковую промышленность.

Одним из важных аспектов исследований является рассмотрение влияния изотопного состава на процессы взаимодействия нейтронов с веществом. Некоторые исследования фокусируются на влиянии конкретных изотопов кремния – <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si и <sup>30</sup>Si. Например, недавняя публикация [4] посвяшена изучению взаимодействия нейтронов. образующихся в реакциях ядерного синтеза, с кремнием. В ней проводится прямой расчет количества взаимодействий с использованием базы ядерных сечений, а также было проведено численное моделирование с использованием программного обеспечения Geant4 и МСNP6. Был получен подробный анализ взаимодействий в зависимости от реагирующего изотопа кремния и классификация частиц, образующихся в результате взаимодействия нейтронов с веществом, в зависимости от их типа, энергии, пробега и др.

Исследования ведутся и в области усовершенствования уже существующих детекторов на основе полупроводников. Так, в [5], [6] рассматривается новый тип детекторов потока нейтронов в ядерном реакторе на основе монокристаллического кремния. Такие приборы должны быть долговечными и иметь возможность относительно безопасной и быстрой утилизации по истечении срока эксплуатации. Обеспечить данные аспекты работы приборов помогает изучение дефектов, возникающих под воздействием нейтронного излучения, а также модификация материалов для увеличения их радиационной стойкости, в частности изменение изотопного состава материала детектора. В данных публикациях исследуется влияние нейтронного излучения на кремний. Особое внимание уделено изучению воздействия тепловых нейтронов, которые активно используются для легирования монокристаллов полупроводников методом нейтронно-трансмутационного легирования. Более того, такой тип нейтронов применяется при определении элементного состава твердых тел методом нейтронно-активационного анализа, а также при лечении онкологии методом нейтронно-захватной терапии.

О влиянии нейтронного излучения на полупроводниковые материалы. Энергия нейтронов определяет вероятность возникновения различных типов взаимодействий с веществом, а следовательно, и возникновение разного рода дефектов, которые в дальнейшем влияют на свойства. Классификация нейтронов по энергии, скорости, средней длине волны и средней температуры представлена в табл. 1.

Существует четыре основных типа взаимодействия нейронов с ядрами вещества:

1) упругое рассеяние (*n*, *n*);

- 2) неупругое рассеяние (*n*, *n*');
- 3) ядерные реакции (*n*, *x*);
- 4) деление ядер (*n*, *f*).

Кратко рассмотрим каждый из них.

Упругие взаимодействия подчиняются законам сохранения энергии и импульса и обеспечивают перераспределение энергии между налетающей частицей и частицей, на которой происходит рассеяние. При таком взаимодействии не происходит возбуждения ядра, образования заряженных частиц или изменения элементного и изотопного состава исходного вещества. Упругие взаимодействия не имеют пороговой энергии и могут происходить при любых энергиях нейтронного потока.

На рис. 1 представлено схематическое изображение процесса упругого взаимодействия нейтрона с ядром.

Под неупругими взаимодействиями понимают такой процесс, при котором налетающая частица поглощается ядром, переводя его в возбужденное состояние. В результате образуется новое составное ядро. По своим свойствам оно ничем не отличается от обычного, однако имеет на один нейтрон больше, чем первичное ядро. При поглощении нейтрона ядро возбуждается и по прошествии небольшого отрезка времени испускает нейтрон с меньшей энергией, при этом оставаясь в возбужденном состоянии. Впоследствии для снятия возбуждения ядро испускает заряженную частицу.



Для прохождения такого типа реакции налетающий нейтрон должен обладать энергией выше пороговой. Пороговая энергия определяется энергией, необходимой для образования составного ядра. Точную граничную энергию для образования таких ядер определить невозможно, обычно она составляет около сотни килоэлектрон-Вольт и определяется свойствами ядра.

Процесс неупругого рассеяния можно описать следующей схемой:

$${}^{A}_{Z}X + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{A}_{Z}X^{*} + {}^{1}_{0}n' + \gamma,$$

где A – массовое число ядра; Z – зарядовое число ядра;  $X, X^*$  – обозначения химического элемента до рассеяния и после него; n – нейтрон до рассеяния; n' – нейтрон после рассеяния;  $\gamma$  – гаммачастица.

При тепловых энергиях ядерные реакции протекают в две стадии. Первая стадия, как и для неупругих взаимодействий, заключается в поглощении ядром нейтрона, в результате чего образу-

<i>1ab. 1.</i> Neutron Classification					
Нейтроны	Энергия, эВ	Скорость, м/с	Средняя длина волны, м	Средняя температура, К	
Быстрые	> 10 <sup>5</sup>	$> 4.4 \cdot 10^{6}$	<10 <sup>-14</sup>	10 <sup>10</sup>	
Промежуточные	0.510 <sup>5</sup>	$10^44.4 \cdot 10^6$	$1.65 \cdot 10^{-12}$	$5 \cdot 10^{-7}$	
Тепловые	$5 \cdot 10^{-3} \dots 0.5$	$10^310^4$	$2 \cdot 10^{-10}$	300	
Холодные	$10^{-7} \dots 5 \cdot 10^{-3}$	4.410 <sup>3</sup>	$9 \cdot 10^{-10}$	10	
Ультрахолодные	< 10 <sup>-7</sup>	< 4.4	9 · 10 <sup>-8</sup>	10-3	

*Табл. 1.* Классификация нейтронов *Tab 1* Neutron Classification

ется составное ядро. После поглощения частицы ядро переходит в возбужденное состояние. Возбужденное состояние неустойчиво и в результате распада ядра образуются как заряженные частицы – протон (n, p), альфа-частица  $(n, \alpha)$ , так и незаряженные – гамма-квант  $(n, \gamma)$ , нейтрон (n, 2n), (n, 3n). Подобные реакции также имеют порог, связанный с наличием разрешенных энергий у составного ядра.

Реакцию типа  $(n, \gamma)$  также называют радиационным захватом. В ходе данного процесса нейтрон поглощается ядром. В результате реакции массовое число ядра увеличивается на единицу, а само ядро переходит в неустойчивое возбужденное состояние. При переходе ядра из возбужденного состояния в стационарное происходит испускание гамма-частицы. Чаще всего получившееся ядро становится радиоактивным и претерпевает  $\beta$ -распад.

Данный тип реакций имеет особенное значение для процессов взаимодействия потока тепловых нейтронов с веществом, так как относится к наиболее вероятным в тепловом диапазоне энергий. Сечение взаимодействия радиационного захвата лежит в диапазоне от  $3 \cdot 10^{-28}$  до  $3 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup> для большинства химических элементов.

Пример реакции радиационного захвата для изотопа кремния <sup>30</sup>Si:

$$^{30}_{14}$$
Si +  $^{30}_{14}n \rightarrow ^{31}_{14}$ Si +  $\gamma$ ; (1)

$$^{31}_{14}\text{Si} \rightarrow ^{31}_{15}\text{P} + ^{0}_{-1}e,$$
 (2)

где Si – кремний; Р – фосфор; е – электрон.

Реакции (1) и (2) с образованием фосфора используют при нейтронно-трансмутационном легировании для производства кристаллов с однородным распределением примеси [7], [8].

Реакции с образованием заряженных частиц также имеют пороговые значения энергий нейтрона, которые лежат в диапазоне 0.5...10 МэВ. Реакции с образованием двух и больше нейтронов происходят только при энергиях больше 10 МэВ. В результате подобных реакций образуются нестабильные ядра, по распаду которых (чаще всего β-распад) можно определить поток нейтронов и их энергию.

Схемы реакций (*n*, α), (*n*, *p*) и (*n*, 2*n*):

$$(A, Z) + n \rightarrow (A, Z - 1) + p,$$
  

$$(A, Z) + n \rightarrow (A - 3, Z - 2) + \frac{4}{2} \text{He},$$
  

$$(A, Z) + n \rightarrow (A - 1, Z) + 2n,$$

где *p* – протон; Не – гелий.

Реакция деления чаще всего происходит на тяжелых ядрах: уран (U), торий (Th), калифорний (Cf) и другие. При поглощении нейтронов такие ядра делятся на два ядра с меньшими массовыми числами, называемые осколками деления. Образовавшиеся осколки обладают электрическим зарядом и большой кинетической энергией [9]. Средняя длина пробега для таких ядер в воздухе может достигать 2.7 см. Значительную роль в процессе торможения осколков занимают упругие взаимодействия и ионизация атомов. За счет высокой энергии осколки деления достаточно легко зарегистрировать.

О дефектообразовании в кристаллах под воздействием тепловых нейтронов. Взаимодействие нейтрона с веществом приводит к возникновению разного рода дефектов. Роль дефектов особенна важна в случае монокристаллов полупроводников, так как они изменяют свойства материала и имеют значительное влияние на электрофизические параметры устройств на основе полупроводниковых материалов, в частности кремния. К основным параметрам, на которые влияет нейтронное излучение, можно отнести: удельное сопротивление полупроводника, концентрация носителей заряда, их время жизни и подвижность носителей заряда, а также скорость рекомбинации. Далее рассмотрены основные типы дефектов, вызываемые тепловыми нейтронами в полупроводниках. Так как в кремнии в тепловой области происходят только радиационный захват и упругие взаимодействия, то можно ограничиться лишь влиянием данных типов реакций на полупроводник.

Дефекты, вызванные упругими соударениями. Упругие соударения нейтронов с кремнием вызывают движение атомов в кристаллической решетке, что приводит к смещению атома из его исходного места в ней. Один из наиболее распространенных типов дефектов, образующихся в результате таких соударений, – вакансии – отсутствие атома в кристаллической решетке. Такой тип дефектов возникает, когда атомы в решетке смещаются под действием упругих соударений тепловых нейтронов и не возвращаются обратно в исходное положение.

Образование вакансий связано с возникновением внедренных атомов, которые находятся в междоузлии, так как при смещении атома в междоузлие его место в кристаллической решетке часто остает-

ся свободным. Такие парные дефекты называют дефектом по Френкелю или парой Френкеля.

Атом смещается при получении энергии большей, чем пороговая энергия смещения. Пороговая энергия варьируется в зависимости от атомной массы, типа кристаллической решетки, а также от условий, в которых происходило облучение (температура и другие факторы). Экспериментально значения пороговой энергии можно определить по минимальной энергии частиц, при облучении которыми изменяется какая-либо характеристика образца [10].

Вакансии и междоузельные атомы подвижны и перемещаются в объеме кристалла при температурах, отличных от абсолютного нуля, что вызывает трудности с их изучением. В большинстве случаев требуется заморозка полупроводника до сверхнизких температур для ограничения их движения [11].

При достаточно большой энергии падающей частицы, упругое соударение может повлечь за собой смещение рядом стоящих атомов, что вызывает совокупность точечных дефектов в малой области, вместе образующих единый протяженный дефект – разупорядоченную область (PO). В случае кремния значения порога образования PO варьируются от 5 до 40 кэВ в зависимости от источника [11].

Влияние подобных дефектов заключается в изменении электрофизических (проводимость, концентрация носителей, их подвижность и время жизни) и механических (прочность, упругость) свойств полупроводника.

Значение пороговой энергии образования смещений для кремния разнится в зависимости от источника. Так, встречаются значения 12.9, 20, 25 эВ. Данные энергии превышают верхнюю границу тепловых нейтронов, так что в данном случае влияние упругих соударений на возникновение дефектов в кремнии несущественно. В результате упругих соударений с тепловыми нейтронами атомы могут лишь немного колебаться в узлах кристаллической решетки [12], [13]. Дефекты, вызванные радиационным захватом. Как уже было упомянуто, в результате радиационного захвата изменяется природа ядра, из которого следует образование ядра с другим массовым числом. В случае наиболее распространенных изотопов кремния ( $^{28}$ Si,  $^{29}$ Si,  $^{30}$ Si) появляются изотопы кремния с большими массовыми числами. Изотопы  $^{29}$ Si и  $^{30}$ Si стабильны, а  $^{31}$ Si – нестабилен, и распадается с образованием стабильного изотопа фосфора. В результате процесса распада в кристаллической решетке появляется донорная примесь фосфора. Ее концентрацию можно рассчитать по следующей формуле [11]:

$$N_{31\mathbf{p}} = Nk\sigma_{\gamma}\Phi t, \qquad (3)$$

где  $N = 4.977 \cdot 10^{22}$  – концентрация атомов Si в 1 см<sup>3</sup>; k – содержание изотопа <sup>30</sup>Si, %;  $\sigma_{\gamma}$  – эффективное сечение реакции радиационного захвата для <sup>30</sup>Si, см<sup>2</sup>;  $\Phi$  – плотность потока тепловых нейтронов, см<sup>-2</sup> · c<sup>-1</sup>; t – время облучения, с.

В [11] представлена таблица сечений реакции радиационного захвата для изотопов кремния (табл. 2).

Подставив выделенные жирным значения k и  $\sigma$  из таблицы и известное значение N в (3), получим следующее выражение, которое зависит только от времени облучения и плотности потока нейтронов:

$$N_{31_P} = 4.977 \cdot 10^{22} \cdot 0.0305 \cdot 0.11 \cdot 10^{-24} \cdot \Phi t =$$
$$= 2 \cdot 10^{-4} \cdot \Phi t.$$

В случае использования данной реакции для легирования кремния и получения *n*-типа проводимости необходимо учитывать и однородность распределения примеси, определяемую следующими факторами [14]:

1) распределение нейтронного потока;

2) влияние рассеяния и поглощения нейтронов;

3) загрязнение кристалла другими примесями.

Кроме того, при реакции радиационного захвата образуется гамма-частица, которая также влияет на дефектообразование. Переданную ядру

Табл. 2. Сечения реакции радиационного захвата для изотопов кремния [11]
Tab. 2. Cross-Sections of the Radiation Capture Reaction for Silicon Isotopes [11]

Изотоп кремния	Содержание изотопа в естественном материале, %	Эффективное сечение 10 <sup>-24</sup> см <sup>2</sup>	Продукт реакции
<sup>28</sup> Si	92.27	$0.08 \pm 0.03$	<sup>29</sup> Si, стабилен
<sup>29</sup> Si	4.68	0.27±0.09	<sup>30</sup> Si, стабилен
<sup>30</sup> Si	3.05	0.11±0.01	<sup>31</sup> Si, нестабилен, распадается посредством β-распада с образованием <sup>31</sup> P

энергию при испускании гамма-частицы можно определить по следующей формуле [14]:

$$E = 537 \frac{(h\upsilon)^2}{A},$$

где  $h_{0}$  – энергия гамма-частицы. Среднее значение таких энергий составляет 780 эВ, а максимальное достигает 2.01 кэВ [14].

После облучения кремния нейтронами могут также образоваться дополнительные радиоактивные изотопы. По этой причине необходимо отслеживать примесный состав легируемого образца. Для снижения активности <sup>31</sup>Si практически до нуля требуется около трех дней. Из примесных атомов (бор, фосфор) только фосфор может образовывать изотоп <sup>32</sup>P с относительно долгим временем активности (период полураспада около двух недель), однако его выход в результате радиационного захвата незначителен [11].

Для получения образца кремния с хорошими электрофизическими свойствами после нейтроннотрансмутационного легирования также необходим отжиг. В результате отжига происходит перераспределение имеющихся в кристалле примесей, удаление структурных радиационных дефектов.

Согласно [15], [16], при температуре отжига в пределах 500...600 °С резко уменьшается удельное сопротивление образца, а при температуре больше 800 °C происходит отжиг большинства структурных радиационных дефектов и их влияние на электрофизические характеристики становится незначительным. Более того, в случае очистки кремния методом зонной плавки наблюдается совпадение экспериментальной зависимости концентрации донорной примеси от плотности потока нейтронного излучения с теоретической. Несмотря на это, при выращивании кристалла методом Чохральского концентрация донорной примеси оказывается выше рассчитанной и увеличивается при большей концентрации кислорода в полупроводнике. Авторы [16] объясняют такую разницу наличием стабильных дефектов, которые образуются с участием атомов кислорода. При использовании метода Чохральского концентрация кислорода в кремнии составляет в среднем 10<sup>18</sup> см<sup>-3</sup>, что делает формирование таких комплексов достаточно вероятным [10]. В случае зонной плавки сам кристалл более чист и содержит меньше примесей, включая кислород, поэтому наличие подобных дефектов проявляется не так явно.

Действительно, примеси могут формировать устойчивые дефектные комплексы. При переме-

щении вакансии по объему полупроводника может произойти объединение двух дефектов. В таком случае атом примеси занимает свободное место в узле кристаллической решетки.

Рассмотрим формирование таких комплексов, как А-центр и Е-центр.

А-центр образуется при соединении вакансии с атомом кислорода, его модель представлена на рис. 2, *а.* В результате формирования такого комплекса остается один неспаренный электрон, с которым связан энергетический уровень А-центра, находящийся на 0.18 эВ от дна зоны проводимости. Атом кислорода восстанавливает две разорванные связи вблизи вакансии, перераспределяя две оставшиеся связи между двумя ближайшими атомами кремния. В ходе этого процесса комплексом захватывается один электрон.

При соединении вакансии с атомом фосфора образуется Е-центр, который создает дополнительный донорный уровень с энергией ниже 0.44 эВ от зоны проводимости, а фосфор, входящий в состав такого центра, – не образует. При значении уровня Ферми выше уровня захвата, равного 0.4 эВ, такой центр образуется с захватом двух электронов из зоны проводимости, вследствие чего комплекс приобретает отрицательный заряд. В обратном случае дефект захватывает только один электрон, в результате чего образуется нейтральный центр [10]. Модель Е-центра представлена на рис. 2, *б*.



О моделировании взаимодействия тепловых нейтронов с чистыми изотопами кремния. Для моделирования воздействия нейтронного излучения на различные материалы в данных исследованиях было использовано ПО Neutron Calculations, которое разработано выпускником кафедры ЭЯФ СПбГПУ К. А. Багаевым под руководством канд. физ.-мат. наук. С. С. Козловского. Программа позволяет моделировать воздействие нейтронного излучения на различные материалы. Расчет осуществляется при помощи методов Монте Карло для пластин различных материалов, которые облучаются потоком нейтронов из плоскопараллельного источника. Программа позволяет добавлять несколько слоев различных материалов, включая изотопы, а также изменять их геометрические размеры.

С помощью данного ПО можно менять энергию нейтронного потока в широком диапазоне. При моделировании источник нейтронов имел дискретные значения энергий, несмотря на то что реальные источники облают спектром энергий. Такое решение было принято исходя из удобства анализа. При использовании источника. испускающего нейтроны со спектром энергии, на выходе можно наблюдать лишь некоторую интегральную характеристику взаимодействий, которая не совсем удобна для анализа. В таком случае не представляется возможным определить, какие именно энергии нейтронов вызывают те или иные взаимодействия. При использовании источника с дискретным значением энергии неоднократными итерациями программы можно добиться зависимости количества реакций от энергии и сделать необходимые выводы.

Была исследована пластина природного кремния площадью  $10 \cdot 10 \text{ см}^2$  с толщиной 15 мм. Энергия нейтронов лежит в диапазоне от 5 мэВ до 0.5 эВ для рисунков, представленных в данном разделе. Для каждого значения энергии было проведено  $10^7$  итераций расчета, что означает активность источника, равную  $10^7$  нейтронов. Все результаты моделирования были нормированы по активности источника и представлены в процентах. Зависимости относительного количества взаимодействий от энергии, представленные на рис. 3–6.

Результаты моделирования представлены только для упругого рассеяния и реакции  $(n, \gamma)$ , так как энергии тепловых нейтронов недостаточно для прохождения реакций  $(n, \alpha)$ , (n, p) и возникновения неупругих взаимодействий нейтронов с ядром атома.

Зависимости, представленные на рис. 3, имеют максимум в начале тепловых энергий (при 5 мэВ), который составляет 18.5, 24 и 20 % для изотопов кремния  ${}^{28}$ Si,  ${}^{29}$ Si,  ${}^{30}$ Si соответственно. На остальном промежутке энергий кривые не об-

ладают четко выраженными максимумами, не считая некоторого колебания значений в области до 0.1 эВ. График для  $^{29}$ Si лежит выше всех, среднее значение относительного количества взаимодействия на заданном диапазоне энергий для данного изотопа составляет 22.8 %, что делает его наиболее восприимчивым к упругим взаимодействиям с тепловыми нейтронами. Средние значения для остальных изотопов составляют 17.5 и 19.1 % для  $^{28}$ Si и  $^{30}$ Si соответственно.



*Puc.* 3. Зависимость относительного количества упругих взаимодействий от энергии для трех изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si в области тепловых энергий в линейном масштабе *Fig.* 3. Energy dependence of the relative amount of elastic interactions for three silicon isotopes <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si in the thermal energy region on a linear scale 3 <sup>9</sup> <sup>9</sup> <sup>1</sup> <sup>2</sup> <sup>28</sup>Si <sup>28</sup>Si



*Рис. 4.* Зависимость относительного количества реакций  $(n, \gamma)$  от энергии для трех изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si в области тепловых энергий в линейном масштабе *Fig. 4.* Energy dependence of the relative amount

of reaction  $(n, \gamma)$  for three silicon isotopes <sup>28</sup> Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si in the thermal energy region on a linear scale

Зависимости, представленные на рис. 4, также возрастают с уменьшением энергии нейтронного потока. Максимальное значение относительного количества взаимодействий составляет 2.9, 1.6 и 1.6 % для  ${}^{28}$ Si,  ${}^{29}$ Si и  ${}^{30}$ Si соответственно. Зависимости резко снижаются в области до

.....

0.2 эВ, далее графики имеют более пологий характер. Вид кривых для изотопов <sup>29</sup>Si и <sup>30</sup>Si практически совпадает, кривая для изотопа <sup>28</sup>Si лежит выше остальных, что показывает его большую восприимчивость к реакциям (n,  $\gamma$ ). Средние значения относительного количества взаимодействия в области тепловых энергий составляют 1.3, 0.76 и 0.77 % для изотопов <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si и <sup>30</sup>Si соответственно.

Для более подробного рассмотрения вида зависимостей на промежутке энергий от 0.005 до 0.1 эВ, построим графики, представленные на рис. 3 и 4, в логарифмическом масштабе (рис. 5 и 6).



Puc. 5. Зависимость относительного количества упругих взаимодействий от энергии для трех изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si в области тепловых энергий в логарифмическом масштабе *Fig. 5.* Energy dependence of the relative amount of elastic interactions for three silicon isotopes <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si in the thermal energy region on a logarithmic scale



*Рис. 6.* Зависимость относительного количества реакций  $(n, \gamma)$  от энергии для трех изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si в области тепловых энергий в логарифмическом масштабе *Fig. 6.* Energy dependence of the relative amount of reaction  $(n, \gamma)$  for three silicon isotopes <sup>28</sup> Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si in the thermal energy region on a logarithmic scale

В логарифмическом масштабе более отчетливо видны некоторые максимумы и минимумы кривых, что свидетельствует о резонансном поведении зависимостей. Более всего максимумы выражены для изотопа <sup>29</sup>Si, наиболее восприимчивого к упругим реакциям, возникающим под воздействием тепловых нейтронов.

При изменении масштаба на логарифмический отчетливо видно практически полное отсутствие резонансного поведения для изотопов  $^{28}$ Si и  $^{30}$ Si, тогда как изотоп  $^{29}$ Si имеет небольшой пик при энергии 0.009 эВ.

Представленные графики иллюстрируют влияние изотопного состава на восприимчивость кремния к тепловым нейтронам. Их анализ показал, что больше всего нейтроны взаимодействуют с изотопом <sup>29</sup>Si при упругом рассеянии (относительное количество взаимодействий в среднем 22.8 %) и с изотопом <sup>28</sup>Si при реакциях типа (n,  $\gamma$ ) (относительное количество взаимодействий в среднем 1.3 %). Наименее восприимчивы к нейтронному излучению оказались изотопы <sup>28</sup>Si при упругом рассеянии (относительное количество взаимодействий в среднем 17.5 %) и <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si при реакциях типа (n,  $\gamma$ ) (относительное количество взаимодействий в среднем 0.76 и 0.77 % соответственно).

Несмотря на наличие упругого взаимодействия нейтронов с ядрами, энергии тепловых нейтронов недостаточно для дефектообразования. Дефекты, образующиеся под воздействием тепловых нейтронов, в большей степени вызваны реакциями типа  $(n, \gamma)$ , в результате которых образуются новые атомы примеси. Упругие взаимолействия также вносят вклад в дефектообразование. Под действием нейтронов образуются вакансии, междоузельные атомы. При соединении вакансии с атомом примеси возникают примесные центры (например, вакансия + атом кислорода или вакансия + атом фосфора), которые имеют донорный или акцепторный уровень и также влияют на электрофизические параметры полупроводника. Так, например, при высоком содержании кислорода или атомов примеси фосфора в кристалле возможно возникновение дефектов, связанных с объединением вакансии и примесного атома, -А- и Е-центры, которые образуют донорные уровни на расстоянии 0.44 и 0.18 эВ от дна зоны проводимости соответственно.

Влияние дефектов сводится к изменению электрофизических свойств полупроводника –

проводимости, подвижности и концентрации носителей заряда, теплопроводности, магнитных характеристик (например, проявление парамагнетизма отрицательных Е-центров), а также к появлению примесных атомов в кристаллической решетке.

О моделировании взаимодействия тепловых нейтронов с изотопами кремния в природном соотношении. На рис. 7–8 представлены графики процентного вклада каждого из трех изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si, <sup>30</sup>Si в области энергий тепловых нейтронов. Процентный вклад изотопа <sup>28</sup>Si показан диагональной штриховкой,

.....

наклоненной вправо, <sup>29</sup>Si – перекрестной штриховкой, <sup>30</sup>Si – диагональной штриховкой, наклоненной влево. Представленные результаты моделирования приведены для пластины кремния толщиной 15 мм. Все зависимости отображаются в линейном масштабе. Необходимость в дополнительных графиках, показывающих зависимости в логарифмическом масштабе, отсутствует, так как все зависимости постоянны на всем диапазоне тепловых энергий.

Значения процентного вклада каждого из изотопов постоянны на всем диапазоне исследован-





*Fig.* 7. Energy dependence of the percentage of the number of elastic interactions for the natural ratio of silicon isotopes at a thickness of 15 mm for thermal neutrons



Рис. 8. Процентное соотношение количества реакций (*n*, γ) от энергии для природного соотношения изотопов кремния при толщине 15 мм для тепловых нейтронов

*Fig. 8.* Energy dependence of the percentage of the number of reactions  $(n, \gamma)$  for the natural ratio of silicon isotopes at a thickness of 15 mm for thermal neutrons

ных энергий. Так, вклад изотопа <sup>28</sup>Si в общее количество упругих взаимодействий составляет 90 %, <sup>29</sup>Si – 6 %, <sup>30</sup>Si – 4 %. В случае реакций типа (n,  $\gamma$ ) процентный вклад каждого из изотопов распределился следующим образом; наиболее восприимчивым изотопом оказался <sup>28</sup>Si, среднее значение его вклада составляет 95 %; далее идут изотопы <sup>29</sup>Si и <sup>30</sup>Si, чей вклад в общее количество взаимодействий составил 3 и 2 % соответственно.

На рис. 9-11 представлены результаты моделирования взаимодействия тепловых нейтронов с изотопами кремния в природном соотношении. Моделирование проводилось для пластин кремния с толщинами 15 и 60 мм. На графиках сплошной линией обозначены результаты моделирования для пластины толщиной 15 мм, штриховой линией – для пластины толщиной 60 мм. График зависимости относительного количества упругих взаимодействий от энергии потока тепловых нейтронов представлен в линейном масштабе; графики для реакции типа (n, ү) – в линейном и логарифмическом масштабах. Зависимость упругих соударений от энергии имеет аналогичный вид в линейном и логарифмическом масштабах, поэтому нет необходимости представлять второй график.



Рис. 9. Зависимость относительного количества упругих взаимодействий от энергии для природного соотношения изотопов кремния для тепловых нейтронов в линейном масштабе
 Fig. 9. Energy dependence of the relative amount of elastic interactions for the natural ratio of silicon isotopes for thermal neutrons on a linear scale

Зависимость, представленная на рис. 9 практически постоянна. Относительное количество взаимодействий незначительно увеличивается в области низких энергий, достигая значений 18.7 и 68.8 % при энергии 5 мэВ для пластин толщиной 15 и 60 мм соответственно. Среднее значение относительного количества взаимодействий составляет 17.8 и 67.8 % соответственно.



Рис. 10. Зависимость относительного количества реакций  $(n, \gamma)$  от энергии для природного соотношения изотопов кремния для тепловых нейтронов в линейном масштабе *Fig. 10.* Energy dependence of the relative amount of reactions  $(n, \gamma)$  for the natural ratio of silicon isotopes for thermal neutrons on a linear scale





Зависимость количества реакций  $(n, \gamma)$  от энергии резко увеличивается с уменьшением энергии и плавно снижается с увеличением энергии для обеих пластин. Максимум относительного коли-

.....

## LETI Transactions on Electrical Engineering & Computer Science. 2023. Vol. 16, no. 9. P. 5–17

чества взаимодействий составляет 2.8 и 9.4 % для пластин толщиной 15 и 60 мм соответственно. Среднее количество взаимодействий составляет 1.2 и 4.4 % соответственно.

Для приведенных зависимостей характерно отсутствие какого-либо резонансного поведения.

Заключение. Были получены графики зависимостей относительного количества взаимодействий изотопов кремния  ${}^{28}$ Si,  ${}^{29}$ Si,  ${}^{30}$ Si и кремния с природным соотношением изотопов в зависимости от энергии тепловых нейтронов; графики процентного вклада изотопов кремния в общее количество взаимодействий с тепловыми нейтронами в зависимости от энергии излучения. Были проанализированы полученные данные и определены наиболее чувствительные к нейтронам изотопы –  ${}^{28}$ Si и  ${}^{29}$ Si. Наименее склонный к взаимодействиям с нейтронным излучением изотоп кремния –  ${}^{30}$ Si.

Применительно к увеличению стойкости материала к образованию дефектов логично уменьшить процентное содержание изотопов кремния <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si и увеличить долю <sup>30</sup>Si в смеси. Несмотря на это, увеличение содержания <sup>30</sup>Si не будет оптимальным вариантом для снижения количества дефектов, так как данный эффект будет скомпенсирован сложным процессом удаления таких структурных несовершенств кристаллической решетки. Так, <sup>30</sup>Si – единственный из стабильных изотопов кремния, который переходит в изотоп фосфора <sup>31</sup>P в результате радиационного захвата. Дефекты в виде примесных атомов фосфора, а также дефектных комплексов с участием кислорода или фосфора не подвергаются отжигу и избавиться от них можно лишь переплавкой кристалла.

Таким образом, варьируя долю данных изотопов в полупроводнике, можно управлять количеством взаимодействий, а следовательно, концентрацией дефектов и примесных атомов в кремнии как в сторону увеличения процентного содержания, так и в сторону его уменьшения в зависимости от желаемого результата.

Полученные результаты могут быть использованы при конструировании радиационно-стойких электронных приборов, детекторов нейтронного излучения, нейтронно-трансмутационном легировании кремния, нейтронно-активационном анализе и других отраслях.

Планируется проведение экспериментов по облучению кремния нейтронами, в частности тепловыми, для дальнейшего исследования процессов, происходящих в веществе под воздействием нейтронного излучения, а также для изучения изменения свойств материала.

#### Список литературы

1. Гусев А. В., Гавва В. А., Козырев Е. А. Выращивание монокристаллов стабильных изотопов кремния // Перспективные материалы. 2010. № 8. С. 366–369.

2. Моноизотопные разновидности кремния и германия с высокой химической и изотопной очисткой / М. Ф. Чурбанов, А. В. Гусев, А. Д. Буланов, А. М. Потапов // Изв. Академии наук. Сер. химическая. 2013. № 2. С. 275–280.

3. Получение высокочистого моноизотопного кремния-28 / Г. Г. Девятых, А. Д. Буланов, А. В. Гусев, П. Г. Сенников, А. М. Прохоров, Е. М. Дианов, Х.-Й. Поль // Докл. Академии наук. 2001. Т. 376, № 4. С. 492–493.

4. Autran J., Munteanu D. Electronics reliability assessment of future power fusion machines: neutron interaction analysis in bulk silicon // Microelectronics Reliability: электрон. журн. URL: https://www.sciencedi rect.com/science/article/abs/pii/S002627142100189X (дата обращения 10.05.2023).

5. Determining absolute value of thermal neutron flux density based on monocrystalline silicon in nuclear reactors / V. A. Varlachev, E. G. Emets, Y.-C. Mu, E. A. Bondarenko, V. A. Govorukhin // Nuclear Sci. and Techniques: электрон. журн. URL: https://link.springer. com/article/10.1007/s41365-022-01077-z (дата обращения 10.05.2023).

6. Controlling characteristics of reactor's neutron fields by single-crystal silicon / V. A. Varlachev, E. G. Emets, Y.-C. Mu, E. A. Bondarenko, V. A. Govorukhin // Instruments and Experimental Techniques. 2022. № 65. C. 887–890.

7. Нейтронно-трансмутационное легирование фосфором моноизотопа кремния <sup>30</sup>Si / А. Н. Ионов, П. Г. Баранов, Б. Я. Бер, А. Д. Буланов, О. Н. Годисов, А. В. Гусев, В. Ю. Давыдов, И. В. Ильин, А. К. Калитеевский, М. А. Калитеевский, А. Ю. Сафронов, И. М. Лазебник, Н.-J. Pohl, Н. Riemann, N. V. Abrosimov, П. С. Копьев // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, № 12. С. 87–94.

8. Абрамовский В. А., Абрамовская Н. В. Распределение примеси фосфора <sup>31</sup>Р в кристалле кремния <sup>30</sup>Si по толщине образца при нейтронно-трансмутационном легировании // Вестн. Новгородского гос. ун-та. 2014. № 81. С. 23–26.

9. Климов А. Н. Ядерная физика и ядерные реакторы. М.: Энергоатомиздат, 2002. 464 с. 3-е изд., перераб. и доп. 10. Вавилов В. С., Кекелидзе Н. П., Смирнов Л. С. Действие излучений на полупроводники. М.: Наука, 1988. 192 с.

11. Болотов В. В. Вопросы радиационной технологии полупроводников / под ред. Л. С. Смирновой // Институт физики полупроводников СО АН СССР. Новосибирск: Наука, 1980. 294 с.

12. Коршунов Ф. П., Богатырев Ю. В., Вавилов В. А. Воздействие радиации на интегральные микросхемы. Минск: Наука и техника, 1986. 254 с.

13. Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979. 336 с.

14. Haas W. E., Schnöller M. S. Silicon doping by nuclear transmutation // J. of Electronic Materials. 1976. T. 5, № 1. C. 57–68.

15. Исследование радиационно-легированного кремния / Л. Ф. Конорова, М. А. Литовский, Р. Ш. Малкович, И. П. Никитина, Э. П. Савин // Физика и техника полупроводников. 1977. Т. 11, № 10. С. 2036–2038.

16. Проводимость кремния, подвергнутого нейтронному облучению и отжигу / В. Н. Мордкович, С. П. Соловьев, Э. М. Темпер, В. А. Харченко // Физика и техника полупроводников. 1974. Т. 8, № 1. С. 210–213.

## Информация об авторах

Михаил Викторович Ремизов – аспирант ФГБУ «ПИЯФ НИЦ «Курчатовский институт», ГНЦ РФ ЦНИИ РТК, инженер второй категории, 194064, Санкт-Петербург, Тихорецкий проспект, д. 21. E-mail: m.remizov@rtc.ru

Юлия Юрьевна Бунькова – студентка гр. 9207 факультета электроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ», инженер ГНЦ РФ «ЦНИИ робототехники и технической кибернетики», 194064, Санкт-Петербург, Тихорецкий проспект, д. 21.

E-mail: yu.bunkova@rtc.ru

Ольга Валерьевна Вольпяс – студентка гр. 9371 факультета компьютерных технологий и информатики СПбГЭТУ «ЛЭТИ», программист ГНЦ РФ «ЦНИИ робототехники и технической кибернетики», 194064, Санкт-Петербург, Тихорецкий проспект, д. 21. E-mail: o.volpyas@rtc.ru

### References

1. Gusev A. V., Gavva V. A., Kozyrev E. A. Vyrashhivanie monokristallov stabil'nyh izotopov kremnija // Perspektivnye materialy. 2010. № 8. S. 366–369. (In Russ.).

2. Monoizotopnye raznovidnosti kremnija i germanija s vysokoj himicheskoj i izotopnoj ochistkoj / M. F. Churbanov, A. V. Gusev, A. D. Bulanov, A. M. Potapov // Izv. akademii nauk. Ser. himicheskaja. 2013. № 2. S. 275–280. (In Russ.).

3. Poluchenie vysokochistogo monoizotopnogo kremnija-28 / G. G. Devjatyh, A. D. Bulanov, A. V. Gusev, P. G. Sennikov, A. M. Prohorov, E. M. Dianov, H.-J. Pol' // Dokl. Akademii nauk. 2001. T. 376, № 4. S. 492–493. (In Russ.).

4. Autran J., Munteanu D. Electronics reliability assessment of future power fusion machines: neutron interaction analysis in bulk silicon // Microelectronics Reliability: jelektron. zurn. URL: https://www. sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S00262714210 0189X (data obraschenija 10.05.2023).

5. Determining absolute value of thermal neutron flux density based on monocrystalline silicon in nuclear reactors / V. A. Varlachev, E. G. Emets, Y.-C. Mu, E. A. Bondarenko, V. A. Govorukhin // Nuclear Sci. and Techniques: jelektron. zurn. URL: https://link.springer. com/article/10.1007/s41365-022-01077-z (data obraschenija 10.05.2023).

6. Controlling characteristics of reactor's neutron fields by single-crystal silicon / V. A. Varlachev, E. G. Emets, Y.-C. Mu, E. A. Bondarenko, V. A. Govorukhin // Instruments and Experimental Techniques. 2022. № 65. С. 887–890.

7. Nejtronno-transmutacionnoe legirovanie fosforom monoizotopa kremnija <sup>30</sup>Si / A. N. Ionov, P. G. Baranov, B. Ja. Ber, A. D. Bulanov, O. N. Godisov, A. V. Gusev, V. Ju. Davydov, I. V. II'in, A. K. Kaliteevskij, M. A. Kaliteevskij, A. Ju. Safronov, I. M. Lazebnik, N.-J. Pohl, H. Riemann, N. V. Abrosimov, P. S. Kop'ev // Pis'ma v ZhTF. 2006. T. 32, № 12. S. 87–94. (In Russ.).

8. Abramovskij V. A., Abramovskaja N. V. Raspredelenie primesi fosfora <sup>31</sup>P v kristalle kremnija <sup>30</sup>Si po tolshhine obrazca pri nejtronno-transmutacionnom legirovanii // Vestn. Novgorodskogo gos. un-ta. 2014. № 81. S. 23–26. (In Russ.).

9. Klimov A. N. Jadernaja fizika i jadernye reaktory. M.: Jenergoatomizdat, 2002. 464 c. 3-e izd., pererab. i dop. (In Russ.).

10. Vavilov V. S., Kekelidze N. P., Smirnov L. S. Dejstvie izluchenij na poluprovodniki. M.: Nauka, 1988. 192 s. (In Russ.).

11. Bolotov V. V. Voprosy radiacionnoj tehnologii poluprovodnikov / pod red. L. S. Smirnovoj // Institut fiziki poluprovodnikov SO AN SSSR. Novosibirsk: Nauka, 1980. 294 s. (In Russ.).

12. Korshunov F. P., Bogatyrev Ju. V., Vavilov V. A. Vozdejstvie radiacii na integral'nye mikroshemy. Minsk: Nauka i tehnika, 1986. 254 s. (In Russ.).

LETI Transactions on Electrical Engineering & Computer Science. 2023. Vol. 16, no. 9. P. 5–17

13. Vineckij V. L., Holodar' G. A. Radiacionnaja fizika poluprovodnikov. Kiev: Naukova dumka, 1979. 336 c. (In Russ.).

14. Haas W. E., Schnöller M. S. Silicon doping by nuclear transmutation // J. of Electronic Materials. 1976. T. 5, № 1. S. 57–68. (In Russ.).

15. Issledovanie radiacionno-legirovannogo kremnija / L. F. Konorova, M. A. Litovskij, R. Sh. Malkovich, I. P. Nikitina, Je. P. Savin // Fizika i tehnika poluprovodnikov. 1977. T. 11, № 10. S. 2036–2038. (In Russ.).

16. Provodimost' kremnija, podvergnutogo nejtronnomu oblucheniju i otzhigu / V. N. Mordkovich, S. P. Solov'ev, Je. M. Temper, V. A. Harchenko // Fizika i tehnika poluprovodnikov. 1974. T. 8, № 1. S. 210–213. (In Russ.).

## Information about the authors

**Mikhail V. Remizov** – postgraduate student of Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», Russian State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics, second category engineer. 21, Tikhoretsky prospect, Saint Petersburg, 194064, Russia. E-mail: m.remizov@rtc.ru

**Yuliya Yu. Bunkova** – student of Saint Petersburg Electrotechnical University «LETI», Russian State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics, engineer. 21, Tikhoretsky prospect, Saint Petersburg, 194064, Russia.

E-mail: yu.bunkova@rtc.ru

**Olga V. Volpyas** – student of Saint Petersburg Electrotechnical University «LETI», Russian State Scientific Center for Robotics and Technical Cybernetics, programmer. 21, Tikhoretsky prospect, Saint Petersburg, 194064, Russia.

E-mail: o.volpyas@rtc.ru

Статья поступила в редакцию 02.07.2023; принята к публикации после рецензирования 22.07.2023; опубликована онлайн 23.11.2023.

Submitted 02.07.2023; accepted 22.07.2023; published online 23.11.2023.