

· 光电器件与材料 ·

## 分子动力学模拟4H-SiC辐照下缺陷形成机理

何涛<sup>1</sup>, 何红宇<sup>1</sup>, 周媛<sup>1</sup>, 朱卫华<sup>1</sup>, 陈志勇<sup>1</sup>, 王新林<sup>1,2</sup>

(1. 南华大学 电气工程学院, 湖南 衡阳 421001; 2. 南华大学 机械工程学院, 湖南 衡阳 421001)

**摘要:** 运用分子动力学模拟的方法, 采用LAMMPS程序模拟了六方晶格结构的4H-SiC材料辐照下级联碰撞过程。先建立4H-SiC晶体结构模型, 再模拟了不同能量的初始碰撞原子(PKA)级联碰撞产生点缺陷的演化。模拟结果表明, 总的点缺陷包括空位缺陷、间隙原子和反位缺陷, 并以空位缺陷和间隙原子为主, 给出空位缺陷与间隙原子的空间分布图; 级联碰撞产生的空位缺陷数量与PKA能量成线性关系; 空位缺陷与间隙原子的空间分布, 特别是空位缺陷与间隙原子聚集区域, 与PKA能量有密切关系。上述结果为分析4H-SiC基材电子器件在辐照环境下电学性质变化提供理论基础。

**关键词:** 4H-SiC; 分子动力学; 级联碰撞; 缺陷

中图分类号: O474; O571.1

文献标识码: A

文章编号: 1673-1255(2017)-05-0045-07

## Molecular Dynamics Simulation of 4H-SiC under Irradiation Defects Formation Mechanism

HE Tao<sup>1</sup>, HE Hong-yu<sup>1</sup>, ZHOU Yuan<sup>1</sup>, ZHU Wei-hua<sup>1</sup>, CHEN Zhi-yong<sup>1</sup>, WANG Xin-lin<sup>1,2</sup>

(1. Department of Electrical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China;

2. Department of Mechanical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China)

**Abstract:** The molecular dynamics method is used to simulate the cascade collision of 4H-SiC material with hexagonal crystal structure by using LAMMPS code. 4H-SiC crystal structure model is established and the evolution of radiation-induced point defects by the collision cascade is simulated at different primary knock-on atom (PKA) energy and initial incident direction. The simulation results show that the total point defects include vacancy defects, interstitial atoms and antisite defects, giving priority to vacancy defects and interstitial. The space distribution of vacancy defects and interstitial atoms is given, in which the number of vacancy defects produced by cascade collision has linear relationship with PKA energy, the space distributions of vacancy defects and interstitial atoms, especially the gathered area of vacancy defects and interstitial atoms, has a close relationship with PKA energy. The above results provide a theoretical basis for the analysis of electrical properties change of electronic devices with 4H-SiC substrate under irradiation environment.

**Key words:** 4H-SiC; molecular dynamics; cascade collision; defect

SiC 由于具有宽禁带、高临界击穿电场、高热导率、高载流子饱和和漂移速度的特性, 是制作高温、高频、大功率和抗辐射器件极具潜力的半导体材料<sup>[1-2]</sup>, 现在许多国家投入了大量的资金对 SiC 进行广泛深入的研究, 并已在 SiC 晶体生长、关键器件工艺、光

器件开发、SiC 集成电路制造等方面取得突破<sup>[3-4]</sup>。SiC 材料具有同质多型特性, 3C-SiC、4H-SiC 和 6H-SiC 是这种材料中比较成熟的宽禁带半导体, 其中, 3C 为周期 3 层的 SiC 原子密排堆积的立方晶格结构, 4H 为周期 4 层的 SiC 原子密排堆积的六方晶格

收稿日期: 2017-10-12

作者简介: 何涛(1992-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为射线辐照半导体材料。

结构,4H-SiC的带隙比3C-SiC和6H-SiC更宽,被认为是大功率电子器件方面最有用途的SiC材料。针对辐射对4H-SiC材料的影响的研究已有一些报道,Wu<sup>[5]</sup>和Gao<sup>[6]</sup>等人研究了4H-SiC中的点缺陷以及它们复杂化合物的类型和演变过程。Konopka<sup>[7]</sup>等人基于第一性原理分析了4H-SiC中的C空位—Si空位的微观结构和形成模式。Kato<sup>[8]</sup>等的研究表明,在中子辐照的石墨(pyrocarbon)和SiC纤维的复合体中,二者的组分和电学性能的变化均可以影响到复合材料的电导率。值得一提的是,Kato<sup>[8]</sup>认为,导致中子辐照的SiC的半导体性能的变化主要受控于辐照剂量和缺陷。但是目前,射线辐照SiC材料大多数研究其缺陷类型及演化对SiC材料物理性质的影响,而对分析缺陷空间分布和浓度对SiC电学性能的影响,如载流子寿命的影响,仍然需要一些深入的研究。

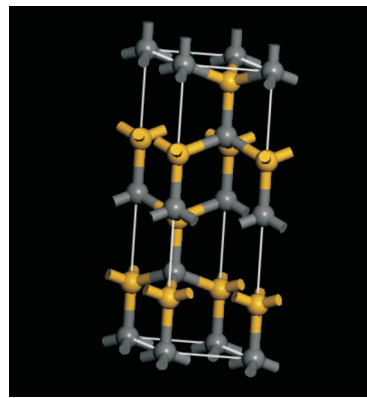
由于辐照诱发缺陷的形成与聚集发生在皮秒(ps)和纳米(nm)时空尺度,在这种尺度下发生的现象实验上很难观察,因此,计算机模拟成为研究辐照损伤的有效手段<sup>[9]</sup>,其中分子动力学模拟由于它的空间和时间尺度与辐照引发的位移级联的空间和时间尺度是一致的,能较好地模拟辐照损伤缺陷产生和演化过程,所以被普遍使用。中子或者其他射线辐照SiC,可能会出现核反应、电离效应和位移效应,考虑其中的位移损伤效应,通过粒子与SiC材料晶格原子发生碰撞产生初级碰撞原子(primary knock-on atom PKA<sup>[10-11]</sup>),PKA与其他原子产生级联碰撞,这种碰撞主要以弹性碰撞的方式把能量传递给其他原子,基本上可看做弹性钢球的碰撞过程,并且通过这种碰撞,高能粒子将部分能量传递给晶格原子,使其产生位移,在材料中形成空位、间隙原子还有反位缺陷,从而揭示辐照位移损伤机制和演化机制,而且缺陷的空间分布会影响4H-SiC材料的电学性能,为以4H-SiC为基材的电子器件在辐照环境下电学性质变化的揭示提供理论基础,进而可能为放射性环境下使用此类电子器件的选择乃至内部结构设计提供依据。

以4H-SiC材料为研究对象,先建立4H-SiC晶体模型,再采用分子动力学模拟方法,模拟不同能量的PKA引起的级联碰撞过程中空位缺陷与反位缺陷数量随时间的演化过程,空位、间隙原子的空间

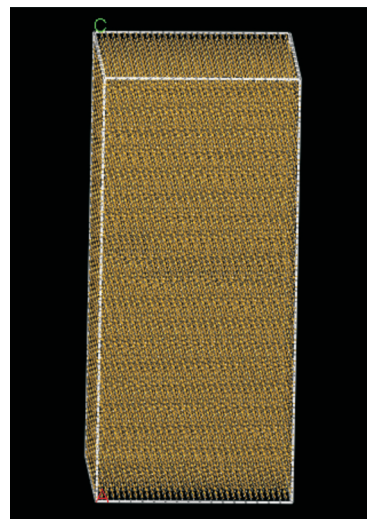
分布特征,着重分析PKA能量对空位缺陷与间隙原子空间分布的影响。

## 1 计算模型和模拟方法

文中采用美国Sandia国家实验室开发的分子动力学程序LAMMPS<sup>[12]</sup>对中子或者其他射线辐照损伤碰撞级联过程进行模拟,计算中,SiC原子之间相互作用采用Tersoff<sup>[13]</sup>势函数进行描述,PKA与SiC原子之间相互作用采用Ziegler-Biersack-Littmark<sup>[14]</sup>势函数进行描述。通过构建不同尺度的模型,保证在不同能量PKA入射产生的损伤区域在模拟体系内部。4H-SiC晶体结构的3D模型如图1所示。



(a)4H-SiC晶胞



(b)4 keV~10 keV PKA入射下模拟构型

图1 4H-SiC晶体结构的3D模型(黄色为Si原子,灰色为C原子)

4H-SiC晶胞如图1a所示。将4H-SiC的晶胞结

构通过MS软件处理使其变成长方体结构,然后建立超晶胞,能量为2 keV构型为 $30a_0 \times 18\sqrt{3}a_0 \times 15c_0$  ( $a_0=3.078 \text{ \AA}$ ,  $c_0=10.045 \text{ \AA}$ ,为4H-SiC晶格常数),包含129 600个原子;能量为4 keV,8 keV和10 keV PKA入射下模拟构型为 $30a_0 \times 18\sqrt{3}a_0 \times 20c_0$ ,包含172 800个原子。图1b为 $30a_0 \times 18\sqrt{3}a_0 \times 20c_0$ 的4H-SiC晶体构型。

辐照时,从模拟体系顶端随机选取一个Si原子,并且赋予其相应能量,作为初级碰撞原子,并且记录所有原子的位置和速度,进行缺陷的分析。缺陷分析利用的方法是Voronoi<sup>[15]</sup>方法。若泰森多面体内有0个原子,则定义该晶格位置为空位;当泰森多面体内有1个以上原子,则定义该晶格位置有间隙原子;当泰森多面体内仅有一个原子且与原来完美晶格原子类型不一致,则定义该晶格位置为反位缺陷。

在整个模拟过程中使用三维周期性边界条件,在进行级联碰撞模拟前,采用NVT系综对整个模拟体系进行20 ps的弛豫,采用Nose-Hoover<sup>[16]</sup>热浴法使模拟体系温度达到300 K,在级联碰撞模拟阶段采用NVE系综,并且采用分阶段变步长的方法:初始碰撞阶段,时长为0.2 ps,步长为0.01 fs;中间弛豫阶段,时长为1 ps,步长为0.1 fs;最终平衡阶段,时长为10 ps,步长为1 fs。因此从PKA入射到碰撞结束,共模拟了11.2 ps。

## 2 原子之间势函数

文中SiC原子之间采用Tersoff势函数描述,短程相互作用采用ZBL势函数进行描述,ZBL势函数用于表达两碰撞原子之间的相互作用。

Tersoff势函数形式为

$$E_{ij}^{\text{Tersoff}} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (1)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}) \quad (2)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}) \quad (3)$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(\pi \frac{r_{ij} - R_{ij}}{S_{ij} - R_{ij}}), & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad (4)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_{ij} \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (5)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \quad (6)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos\theta_{ijk})} \quad (7)$$

式中, $E_{ij}$ 为第*i*与第*j*个原子之间的相互作用能量; $r_{ij}$ 为原子*i*与原子*j*之间的距离; $b_{ij}$ 为吸引系数; $\theta_{ijk}$ 是键*ij*和键*ik*之间的键角; $f_R$ 为原子*i*与原子*j*之间的排斥势; $f_A$ 是两原子之间的吸引势; $f_c$ 为截断函数。表1<sup>[13]</sup>为Tersoff势函数参数表。

表1 Tersoff势函数参数表

参数	C	Si
A(eV)	$1.393 6 \times 10^3$	$1.830 8 \times 10^3$
B(eV)	$3.467 \times 10^2$	$4.711 8 \times 10^2$
$\lambda(\text{\AA}^{-1})$	3.465 3	2.479 9
$\mu(\text{\AA}^{-1})$	2.306 4	1.7322
$\beta$	$4.161 2 \times 10^{-6}$	$1.100 0 \times 10^{-6}$
<i>n</i>	0.990 54	0.787 34
<i>c</i>	$1.998 1 \times 10^4$	$1.003 9 \times 10^5$
<i>d</i>	7.034	16.217
<i>h</i>	-0.339 53	-0.598 25
<i>R</i> (\AA)	1.8	2.7
<i>D</i> (\AA)	2.1	3.0

ZBL势函数形式为

$$V_{ij}(r_{ij}) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) \quad (8)$$

$$a = \frac{0.885 4 a_0}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}} a_{\text{Bohr}} \quad (9)$$

$$\phi(x) = 0.181 8 e^{-3.2x} + 0.509 9 e^{-0.942 3x} + 0.280 2 e^{-0.402 9x} + 0.028 17 e^{-0.201 6x} \quad (10)$$

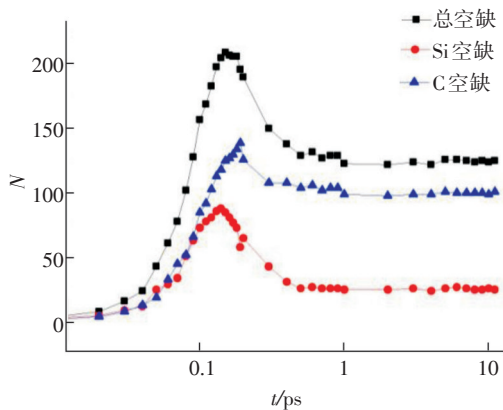
式中, $Z_i$ 与 $Z_j$ 分别为核*i*与核*j*的原子序数; $e$ 为电子所带电荷; $a$ 为屏蔽半径; $a_{\text{Bohr}}$ 为波尔半径。

## 3 结果与讨论

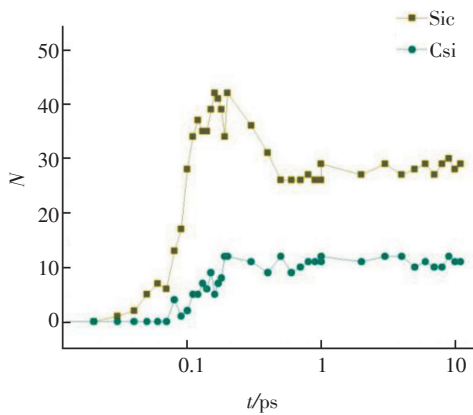
### 3.1 级联碰撞过程缺陷的形成过程与演化

模拟方法如下:选取*z*轴顶部中心区域Si原子作为的PKA,赋予其10 keV能量,入射角度与*z*轴夹角为 $10^\circ$ ,选取此方向主要是为了避免产生沟道效应<sup>[17]</sup>,辐照环境温度为300 K;选取*z*轴顶部中心区域不同Si原子作为PKA多次入射,进行统计平均,得到4H-SiC中空位缺陷数量和各类缺陷数量随

时间演化过程如图 2a~图 2b 所示。



(a) 空位数目



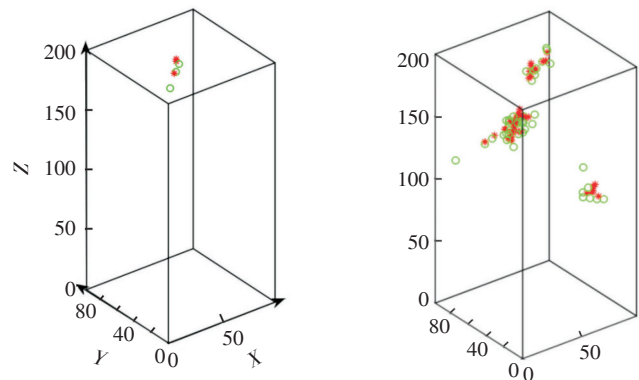
(b) 反位缺陷数目

图 2 10 keV PKA 能量时级联碰撞产生的各种缺陷随时间的演化

在图 2a 中总空位数量、Si 空位数量、C 空位数量随着时间的推移会迅速地增加,在大约 0.13 ps 左右会达到顶峰,随后由于空位与间隙原子发生复合,使 Si 空位数量与 C 空位数量减少,在 1 ps 左右会达到相对稳定值,产生这种规律的原因是 PKA 入射能量在高于 4H-SiC 中 Si 原子与 C 原子移位阈值下,PKA 会在材料内部引起级联碰撞,PKA 与周围原子发生二次碰撞形成二级离位原子,这些二级离位原子会碰撞其他原子形成三级离位原子,这样一代代碰撞下去直到能量低于 Si 原子或者 C 原子离位阈值才会停止,若这些原子恰好停在一个空位处或者相近空位处,就会发生复合,导致缺陷数量减少或者产生反位缺陷;最终产生的 C 空位缺陷数量多于 Si 缺陷空位数量,这是由于 C 的移位阈值小于 Si 的移位阈值<sup>[18]</sup>,使更多的 C 原子由于碰撞离开原来晶

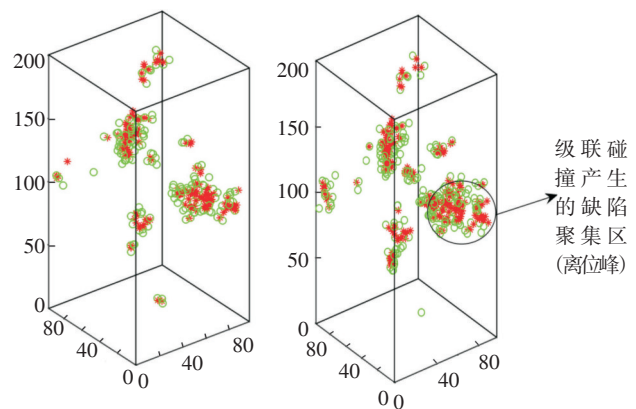
格位置产生空位形成间隙原子;在图 2b 中,级联碰撞产生的反位缺陷包括 SiC 反位与 CsC 反位, SiC 是 Si 原子取代 C 原子位置占据 C 原子晶格位置产生的, CsC 是 C 原子取代 Si 原子位置并占据 Si 原子晶格位置产生的,产生 SiC 反位缺陷数目多于 CsC 反位缺陷数量,这是由于 Si 间隙原子与 C 空位形成 SiC 反位缺陷的形成能较低,使得 Si 原子有更多可能在空位间隙复合过程中占据 C 原子位置产生 SiC 反位缺陷。这一模拟结果与 FGao<sup>[19]</sup>与马小强<sup>[20]</sup>等人所发表的关于论文中的 3C-SiC 缺陷数目随时间的变化规律是相似的,这说明了文中使用方法的合理性。

马小强等人在分析 3C-SiC 缺陷数目随时间的变化规律方面做出重要工作,但是在级联碰撞产生缺陷的空间分布方面需要进一步深入研究,所以为进一步观察 4H-SiC 缺陷的形成与演化,给出 10 keV 能量下空位与间隙原子的空间分布,如图 3a~图 3f 所示。



(a) 0.02 ps

(b) 0.06 ps



(c) 0.1 ps

(d) 0.13 ps



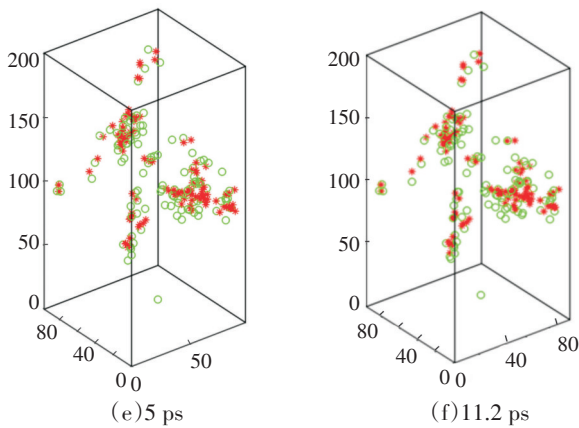


图3 10 keV PKA 能量时级联碰撞不同时刻点缺陷空间分布(红色为空位,绿色为间隙原子)

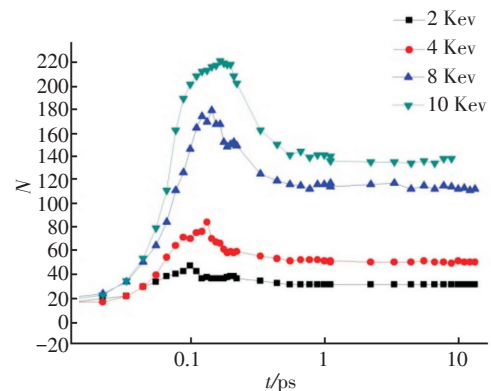
图3a为0.02 ps缺陷分布图。可以看到,级联碰撞刚刚形成。图3b为0.06 ps缺陷分布图。可以看到,子级联碰撞的产生,并且已经形成了空位与间隙原子能聚集区域(离位峰),在0.13 ps时,如图3d所示。处于空位峰值并且有三个明显的空位与间隙原子聚集区域,在这个中心区域有大量的空位型缺陷,图3e~图3f处于稳定的阶段。从缺陷分布可以看出,这种聚集区域仍然存在,主要空位与间隙原子缺陷位置没有发生大的改变。辐照中缺陷积累数量与空间分布是由PKA级联碰撞过程中产生的缺陷和在相应温度退火时缺陷发生复合这两者相互竞争的直接结果<sup>[21]</sup>。

### 3.2 PKA 能量对级联碰撞缺陷形成与演化的影响

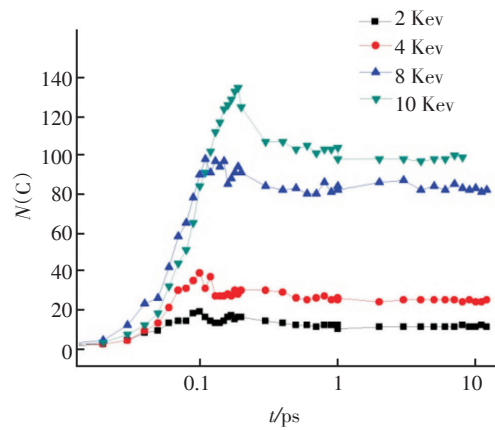
模拟条件:随机选取z轴顶部中心区域Si原子作为的PKA,赋予其2 keV~10 keV 能量,入射角度都与z轴夹角为10°,辐照环境温度为300 K;相同入射能量下,选择z轴顶部中心区域不同Si原子作为PKA多次入射,进行统计平均,得到4H-SiC中不同PKA能量下总空位缺陷数量和各类缺陷数量随时间演化过程如图4a~图4e所示。

图4a~图4c分别为不同能量下总空位缺陷数量、Si空位缺陷数量和C空位缺陷数量随时间演化过程。 $N$ 为各种缺陷数目,随着辐照能量的增加,空位总数及C空位和Si空位有大幅度的增加,但是Si空位数量要小于C空位数量,这可能是因为Si原子的离位阈值大于C原子的离位阈值的缘故,而且与图1相比,PKA能量变化并没有影响缺陷演化趋势,

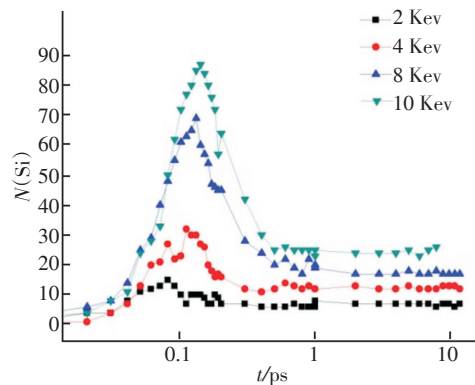
能量越高产生的峰值缺陷的数量和稳定时候缺陷数量也越多,而且达到峰值的时间会向后推移,也就是说,PKA能量越高,级联碰撞持续时间越长,辐照能量的升高也会使空位峰值与稳定值之间差距越大;从图4d与图4e看,分别为不同能量下Csi反位缺陷数量和Sic反位缺陷数量随时间变化过程。随着PKA入射能量升高,Csi与Sic反位原子缺陷数量是在增加的,而且PKA能量较低时,反位缺陷相对比较稳定,不会发生复合;这与韩苗苗<sup>[22]</sup>所发表论文中关于PKA入射能量对4H-SiC缺陷数目的影响规律是相似的。



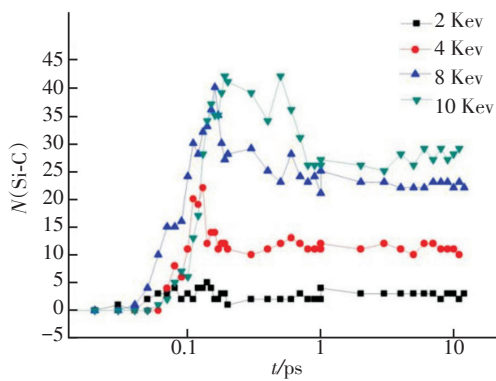
(a)总空位数目



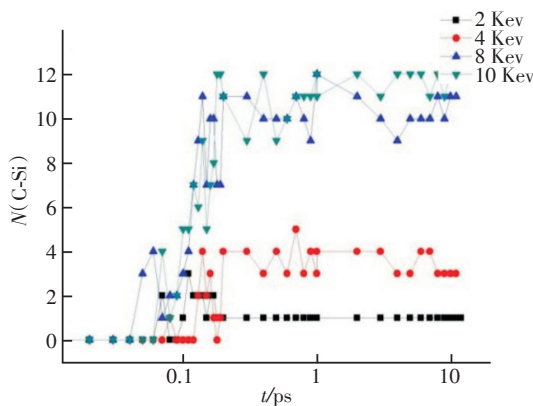
(b)C空位数目



(c)Si空位数目



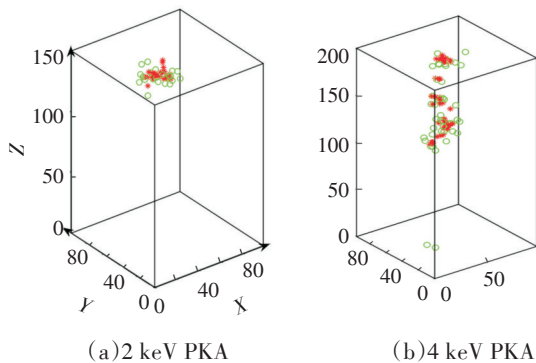
(d) SiC 反位缺陷数目



(e) Csi 反位缺陷

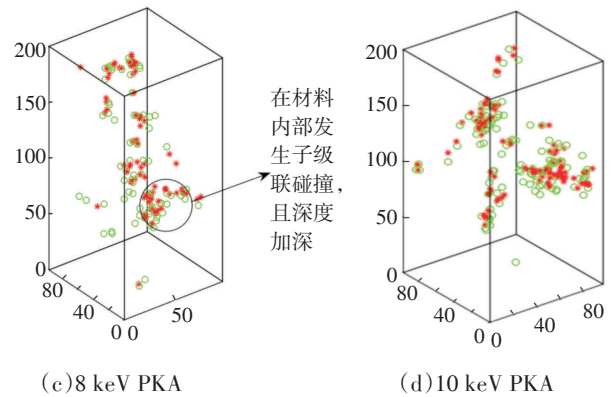
图4 不同PKA能量入射下4H-SiC空位与反位缺陷随时间的变化

韩苗苗等人在分析PKA入射能量对4H-SiC缺陷数目的影响方面做出重要工作,但在不同PKA能量下最终阶段缺陷的空间分布方面仍需要进一步深入研究,而且由于缺陷的空间分布会对电子器件的电学性质有较大影响。所以为了进一步分析PKA入射能量对级联碰撞缺陷的演化,给出最终稳定阶段不同PKA能量下空位缺陷与间隙原子的空间分布如图5a~图5d所示。



(a) 2 keV PKA

(b) 4 keV PKA



(c) 8 keV PKA

(d) 10 keV PKA

图5 不同PKA能量入射下最终空位缺陷与间隙原子的空间分布(红色为空位,绿色为间隙原子)

可以看到,产生的缺陷的结构有些是两个间隙原子与空位组成哑铃状的缺陷结构,这是缺陷结构最常见的形式<sup>[23]</sup>。从图5a来看,当能量较低时,不会产生子级联碰撞,而且缺陷产生的深度比较浅,当能量较高的时候,如图5c与图5d,会产生子级联碰撞,而且级联碰撞深度会加深,这是由于能量较高时,次级离位原子具有更大的动能,使得缺陷能扩散更远的距离,产生几个明显空位缺陷与间隙原子聚集区域,聚集区域空位密集程度也会增大,这可能是影响器件电学性质的重要因素之一。

## 4 结论

通过用分子动力学模拟方法模拟了4H-SiC在辐照环境下的级联碰撞情况,详细模拟了不同能量、不同入射方向的初级碰撞原子(PKA)级联碰撞产生点缺陷的演化。(1)模拟发现级联碰撞产生总的点缺陷包括空位缺陷、间隙原子和反位缺陷,并以空位缺陷和间隙原子为主,在碰撞最初极短的时间内空位缺陷数量和间隙原子数量就可达到最大值,随后空位缺陷与间隙原子发生复合并在1 ps内迅速减少,平衡后还会有空位与间隙原子存在;(2)级联碰撞产生的空位缺陷数量与PKA能量成线性关系,PKA能量的增加将会延迟空位缺陷数量峰值的出现时间,并使出现时的空位缺陷峰值数量增多。(3)给出空位缺陷与间隙原子的空间分布图,从空位缺陷与间隙原子的空间分布看,PKA入射能量的不同会影响级联碰撞的深度,而且当能量较大时,级联碰撞深度会加深,会产生几个明显的空位缺陷与间隙原子缺陷聚集区域。上述结论也为分

析以4H-SiC为基材的电子器件在辐照环境下电学性质变化提供理论基础,进而可能为放射性环境下使用此类电子器件的选择乃至内部结构设计提供依据。

### 参考文献

- [1] HAN Yi, LI Bing-sheng. H-ion irradiation-induced annealing in He-ion implanted 4H-SiC[J]. *Chin Phys Lett*, 2017, 1(34): 19-22.
- [2] Karlsson A L H, Hallén J Birch. Atomically resolved microscopy of ion implantation induced dislocation loops in 4H-SiC[J]. *Materials Letters*, 2016(181): 325-327.
- [3] 王莉,朱萍. 新型宽带SiC功率器件在电力电子中的应用[J]. *南京航空航天大学学报*, 2014, 46(4): 524-532.
- [4] Krishna C Mandal. Characterization of semi-insulating 4H Silicon Carbide for radiation detectors[J]. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2011, 58(4): 1992-1999P.
- [5] WU P, YOGANATHAN M, ZWIEBACK I. Defect evolution during growth of SiC crystals[J]. *Cryst Growth*, 2008 (310): 1804P.
- [6] GAO F, WEBER W J, XIAO H Y, et al. Formation and properties of defects and small vacancy clusters in SiC: ab initio calculations[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2009(267): 2995P.
- [7] KONOPAKA A, Greulich-Weber S, DIEROLF V, et al. Microscopic structure and energy transfer of vacancy-related defect pairs with Erbium in wide-gap semiconductors[J]. *Optical Material*, 2011(33): 1041P.
- [8] KATOH Y, KONDO S, SNEAD L L. DC electrical conductivity of silicon carbide ceramics and composites for flow channel insert applications [J]. *J Nucl Mater*, 2009, 386/388: 639-642.
- [9] 贺新福,杨文,樊胜. 论FeCr合金辐照损伤的多尺度模拟[J]. *物理学报*, 2009, 58(12): 8657-8669.
- [10] NORDLUND K, GHALY M, AVERBACK R S, et al. Defect production in collision cascades in elemental semiconductors and fcc metals[J]. *Physical Review B*, 1998, 7 (13): 7556.
- [11] DEVANATHAN R, WEBER W J, GAO F. Atomic scale simulation of defect production in irradiated 3C-SiC[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 90(5): 2303-2309.
- [12] PLIMPITON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117: 1-19.
- [13] TERSOFF J. Modeling solid chemistry: interatomic potentials for multi-component systems[J]. *Physical Review B*, 1989(39): 5666-5668P.
- [14] BIERSACK J P, ZIEGLER J F. Refined universal potentials in atomic collisions [J]. *Nuclear Instruments and Methods*, 1982(194): 93-100.
- [15] FARRELL D E, BERNSTEIN N, LIU W K. Thermal effects in 10 keV Si PKA cascades in 3C-SiC[J]. *Nuclear Materials*, 2009(385): 572-581P.
- [16] NOSE S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(1): 511-519P.
- [17] GAO F, WEBER W J. Atomic-scale simulation of 50 keV Si displacement cascades in  $\beta$ -SiC[J]. *Physical Review B*, 2000, 63(5): 054101.
- [18] DEVANATHAN R, WEBER W J. Displacement energy surface in 3C and 6H SiC[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, 278(2): 258-265.
- [19] GAO F, WEBER W J, JIANG W. Primary damage states produced by Si and Au recoils in SiC: A molecular dynamics and experimental investigation[J]. *Physical Review B*, 2001(63): 214106.
- [20] 马小强,袁大庆,夏海鸿. 3C-SiC辐照诱发缺陷演化及温度效应分子动力学模拟[J]. *原子能科学技术*, 2016, 50(2): 220-226.
- [21] ZHANG Y, WEBER W J, JIANG W, et al. Effects of implantation temperature and ion flux on damage accumulation in Al-implanted 4H-SiC[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003(93): 1954-1960.
- [22] 韩苗苗. 4H-SiC辐照损伤分子动力学模拟初步研究[D]. 哈尔滨:哈尔滨工程大学, 2013.
- [23] ZHANG Y, GAO F. Damage accumulation and defect relaxation in 4H-SiC[J]. *Physical Review B*, 2004 (70): 125203.