

6H-SiC 辐照点缺陷诱发化学无序的分子动力学分析

张修瑜¹, 陈晓菲², 王浩¹, 郭寻¹, 薛建明¹

(1. 北京大学核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871; 2. 中国核科技信息与经济研究院, 北京 100048)

摘要: 为配合 6H-SiC 中化学无序对其导电性能影响的研究, 本研究运用经典分子动力学方法, 采用 LAMMPS 软件对 6H-SiC 的线性级联碰撞过程进行了模拟, 给出了在不同能量、不同种类 PKA(Primary Knock-on Atom)的情况下, 6H-SiC 单次线性级联碰撞和多次线性级联碰撞过程中主要点缺陷的演化过程, 并统计了多次级联碰撞后化学无序的演化和六种点缺陷各自最终所占的比例。结果表明, 级联碰撞产生的 Si-Si 键比 C-C 键更易形成且更加稳定, Si-Si 键主要由 Si_C 反位缺陷形成, C-C 键主要由 C 间隙原子聚集形成, PKA 的种类及初始能量影响点缺陷的产额和化学无序的程度, 但不影响六种点缺陷各自的占比。

关键词: 点缺陷; 化学无序; 线性级联碰撞; 分子动力学; 辐照

中图分类号: O439 文献标识码: A

Molecular Dynamics Analysis of Chemical Disorders Induced by Irradiated Point Defects in 6H-SiC

ZHANG Xiuyu¹, CHEN Xiaofei², WANG Hao¹, GUO Xun¹, XUE Jianming¹

(1. State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China; 2. China Institute of Nuclear Information and Economics, Beijing 100048, China)

Abstract: To cooperate with studying the influence of chemical disorder on the conductivity of 6H-SiC, the linear collision cascade of 6H-SiC was simulated by the classical molecular dynamics with LAMMPS. Evolution process of main point defects in 6H-SiC during single linear cascade collision and multiple linear cascade collisions under different energy and different types of PKA (Primary Knock-on Atom) is given, while chemical disorder and the final proportion of each of the point defects are counted. The results show that the Si-Si bond generated by the linear cascade collision is easier to form and more stable than the C-C bond. The Si-Si bond is mainly formed by the antisite defect Si_C, the C-C bond is mainly formed by the C-interstitial cluster. Their chemical disorder and point defect yield are affected by the type and initial energy of PKA. However, the proportion of each point defect is almost unchanged.

Key words: point defects; chemical disorder; linear collision cascade; molecular dynamics; irradiation

随着人们对空间环境的不断探索以及核反应堆应用规模的不断扩大, 能够工作在上述极端辐射环境下的高可靠性抗辐照器件的需求也日益增多, 且面临更大的挑战^[1], 设计抗辐照器件需要合适的抗辐照材料。SiC 是典型的“第三代半导体材料”之

一, 化学结构十分稳定, 禁带宽度是 Si 的 2~3 倍, 具有优异的抗辐照电学特性^[2]。因此, SiC 衬底也成为替代传统 Si 基器件衬底的一个很好的选择^[3-4]。已有的 SiC 辐照效应中产生的点缺陷及其对宏观性质影响的研究更多集中在作为核反应堆结构材料的

收稿日期: 2019-09-10; 收到修改稿日期: 2019-09-25

基金项目: 科学挑战专题(TZ2018004) Science Challenge Project (TZ2018004)

作者简介: 张修瑜(1992-), 男, 博士研究生. E-mail: xiuyuzhang@pku.edu.cn

ZHANG Xiuyu (1992-), male, PhD candidate. E-mail: xiuyuzhang@pku.edu.cn

通讯作者: 薛建明, 教授. E-mail: jmxue@pku.edu.cn

XUE Jianming, professor. E-mail: jmxue@pku.edu.cn

力学性能^[5]和材料的热导率上^[6],对 SiC 电学性能影响的研究则相对较少。

辐照对 SiC 宏观性质的影响是由辐照产生的缺陷逐渐积累和演化所致,因此全面理解 SiC 中的缺陷过程,对研究 SiC 及 SiC 器件抗辐照电学性能的影响至关重要。辐照除了会使 SiC 中原有的 Si-C 键被破坏(长程无序^[7])以外,还会引入新的同质化学键,如 Si-Si 键和 C-C 键,形成化学无序(短程无序^[8])。对化学无序 χ 的传统定义是 C-C 键的数目和 C-Si 键的数目之比,即 $\chi=N_{C-C}/N_{C-Si}$,没有定义 Si-Si 键^[8]。而本研究所指的化学无序是同核键(Si-Si 键和 C-C 键)与异核键(C-Si 键)之比,包含了 Si-Si 键。这些晶体的短程序结构,会显著影响 SiC 的电子空间分布以及能带结构^[9],进而改变电阻率、载流子迁移率、载流子寿命等电学参数,影响 SiC 器件的电学性能。

目前关于不同粒子辐照在 SiC 中产生短程序结构的研究主要针对非晶化的过程。Sorieu 等^[5]利用 Raman 光谱证实 SiC 在 4 MeV Au 离子辐照导致非晶化后产生 C-C 键和 Si-Si 键。已有 MD 模拟研究了同核键的积累会导致非晶化^[8]。然而针对不同粒子产生的化学无序的差异,及其对电学性能的影响尚未建立完整的理论体系。因此,迫切需要研究不同能量不同粒子辐照后 SiC 短程序结构损伤类型、产生机制的差异,及其对电学性能的影响,这些又与材料中的点缺陷密切相关。针对 SiC 中辐照位移损伤产生点缺陷的分子动力学研究已有不少报道^[10-15],但多数集中在 3C-SiC 和 4H-SiC 两种同质多型体和单次级联碰撞过程^[10-14],6H-SiC 和多次级联碰撞过程^[15]相对较少,且多次级联碰撞更多关注 SiC 的非晶化过程^[15](长程无序)。对于化学无序的来源,已有报道仅说明了 SiC 中同核键的产生来自于反位缺陷和间隙原子团^[8],并没有更具体的缺陷类型信息。

为进一步补充对 SiC 不同多型体线性级联碰撞过程的分子动力学模拟结果,分析不同辐照条件下 SiC 中的化学无序及其产生机制,本研究采用经典分子动力学模拟 6H-SiC 中的线性级联碰撞过程,结合 Wigner-Seitz 原胞法统计产生的主要点缺陷数量及化学无序程度,分析不同点缺陷对 6H-SiC 中产生化学无序的贡献。

1 模型与方法

材料建模借助了 VESTA (Visualization for electronic and structural analysis)软件^[16],分子动

力学模拟采用 LAMMPS(Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator)软件^[17],可视化及数据分析采用 OVITO(The open visualization tool)软件^[18]。

1.1 材料建模及优化

6H-SiC 的晶胞信息取自 Material Project 网站材料库^[19]编号为 7631 的材料,为六角晶胞,但在分子动力学计算中,采用立方晶胞更为方便。因此我们对 6H-SiC 晶胞作如下处理:1)用文献中的晶胞信息构建 $2 \times 2 \times 1$ 的超胞;2)找到最小周期性立方晶胞,如图 1 中红框所示,最终立方晶胞内含 24 个原子;3)以该立方晶胞为单元周期性建模即可得到模拟用的初始结构。盒子大小与材料大小一致,本研究设置为 $40a \times 40b \times 20c$,共有 768000 个原子。 a, b, c 三个方向上均设置周期性边界条件,在 300 K 条件下进行自由弛豫,使其达到热平衡状态,完成对初始结构的优化,优化步长设置为 1 fs,共模拟 10000 步(10 ps),采用 NVT 系综。优化完毕的结构如图 1 所示,此时体系温度和能量变化趋于平稳,达到热平衡状态。

1.2 势函数

采用 Tersoff/ZBL 混合势模拟 6H-SiC 原子间的相互作用。Tersoff 势主要描述原子间的长程作用力^[20],ZBL 势主要描述原子间的短程作用力^[21],将两种势结合可以较为准确地描述辐照损伤下 6H-SiC 原子之间的相互作用力。LAMMPS 手册中给出的 Tersoff/ZBL 混合势函数形式为:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij} \quad (1)$$

$$V_{ij} = (1 - f_F(r_{ij}))V_{ij}^{\text{ZBL}} + f_F(r_{ij})V_{ij}^{\text{Tersoff}} \quad (2)$$

$$f_F(r_{ij}) = \frac{1}{1 + e^{-A_F(r_{ij} - r_c)}} \quad (3)$$

其中, E 为体系总能量, V_{ij} 为第 i 个原子和第 j 个原子之间的相互作用能, f_F 是平滑连接 ZBL 排斥势

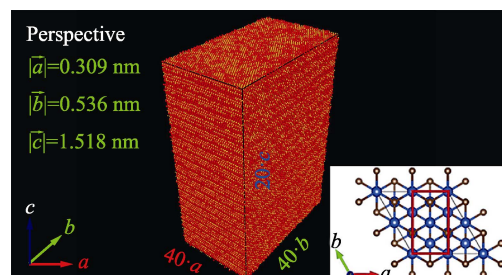


图 1 立方晶胞建模并弛豫后 6H-SiC 晶体结构示意图
Fig. 1 Cubic cell modeling and relaxation of 6H-SiC crystal structure

和 Tersoff 势的费米型函数, A_F 是控制过渡剧烈程度的参数, r_C 是 ZBL 势的截断半径, r_{ij} 为第 i 个原子和第 j 个原子之间的距离(键长), V_{ij}^{ZBL} 为 ZBL 势函数, $V_{ij}^{Tersoff}$ 为 Tersoff 势函数。两种势函数的具体形式见 LAMMPS 手册或势函数参考文献^[20-21]。

1.3 模拟细节介绍

PKA 在(-5~5 nm, -5~5 nm, 7~12.1 nm)坐标范围限定的一个体区域内随机产生。

模拟了 Si PKA 和 C PKA 各三种不同初始能量下(0.5、1、1.5 keV)的线性级联碰撞全过程, 共 120 次(PKA 数目为 120)。单次线性级联碰撞过程的时间步长设置为 0.01 fs, 共模拟 20000 步(0.2 ps), 为 NVE 系综。热弛豫恢复过程分两个阶段: 第一阶段时间步长为 0.1 fs, 共模拟 8000 步(0.8 ps); 第二阶段时间步长为 1 fs, 共模拟 10000 步(10 ps), 均为 NVT 系综。体系温度均设置为 300 K。为避免沟道效应, PKA 初始运动方向在与 z 坐标轴负方向始终呈 7° 夹角的限定下随机选择。

缺陷识别采用 Wigner-Seitz 原胞法, 即以材料的每个晶格格点为中心, 与近邻原子连线, 作该连线的垂直平分面, 所有的垂直平分面将格点围成一个 Wigner-Seitz 原胞, 判断该原胞内的原子数目。若为 0, 则该处格点视为空位; 若大于等于 2, 则该处格点视为含间隙原子; 若为 1, 则与理想晶格对比, 相同则没有缺陷, 不同则视为反位原子。依据该方法可以统计 6H-SiC 中的六种主要点缺陷, 包括 C 空位(V_C)、Si 空位(V_{Si})、C 间隙原子(I_C)、Si 间隙原子(I_{Si})、C 原子占据 Si 原子格点的反位缺陷(C_{Si})、Si 原子占据 C 原子格点的反位缺陷(Si_C)。

2 结果与讨论

2.1 单次线性级联碰撞

图 2 给出了不同初始能量(500、1000、1500 eV)的 Si PKA 和 C PKA 单次线性级联碰撞过程中 6H-SiC 弗伦克尔缺陷对(空位和间隙成对出现的缺陷)的演化。可以看到, 所有种类的弗伦克尔缺陷对随着级联碰撞过程的开始至结束, 产额均是先急剧增加后略有减少最终逐渐趋于稳定。即 6H-SiC 的损伤开始迅速增加, 在达到峰值后, 逐渐有所恢复, 最终趋于稳定, 但损伤仍然高于初始状态, 且随 PKA 初始能量的增加而近似线性增加。这样的趋势与 3C-SiC 和 4H-SiC 的分子动力学模拟结果十分相

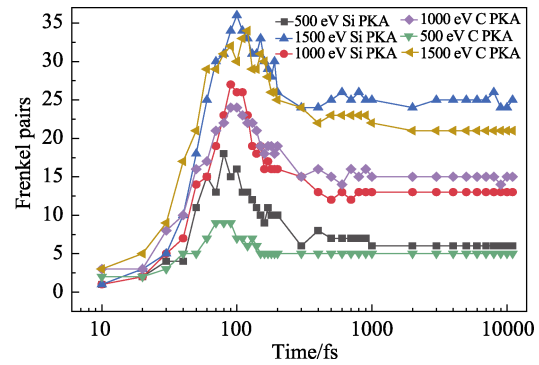


图 2 不同种类、不同能量 PKA 线性级联碰撞至弛豫恢复全程的弗伦克尔缺陷对演化情况

Fig. 2 Evolution of Frenkel pairs of PKA with different energies and different types during the process of linear cascade collision to relaxation recovery (a) 500 eV; (b) 1000 eV; (c) 1500 eV

似^[10-14], 且产生的缺陷量级也有类似的比例关系, 证明了模拟的正确性。如 2015 年 Samolyuk 等^[11], 2016 年马小强等^[12], 2018 年何涛等^[13]和 Sahoo 等^[14]统计的 10 keV Si PKA 产生的总空位数随时间演化的峰值约 190~230, 稳定后约 130, 本次模拟 1 keV 时 Si PKA 产生的总空位数随时间演化的峰值约 27, 稳定后约 13, 即 PKA 初始能量降低了 1/10 后缺陷量级也降低至约 1/10。相似的缺陷量级比例和演化趋势也说明了在不同的 SiC 多形体中的单次线性级联碰撞过程是类似的。用 K-P 模型^[22]和 NRT 公式^[23]同样可以估算单次级联最终产生的 Frenkel 缺陷对数目, 与 LAMMPS 模拟结果变化类似。

点缺陷数量的演化除了能够从微观角度反应单次线性级联碰撞过程之外, 还可以反应线性级联碰撞结束后材料的稳定损伤状况。对于不同种类不同能量的 PKA, 单次线性级联碰撞过程结束后点缺陷产额差异明显。为减小单次模拟过程中随机性的影响, 进一步确认不同点缺陷最终产额的差异和比例, 计算了多次线性级联碰撞的损伤累积。

2.2 多次线性级联碰撞

图 3 则统计了每次线性级联碰撞过程结束且损伤稳定后的六种点缺陷的产额, 共 120 次, 后一次级联碰撞均是基于前一次形成稳定损伤后的材料模型, PKA 的数目对应于辐照位移损伤的剂量。无论哪种 PKA, 各点缺陷的产额均随 PKA 数量的增加而呈近似线性的增长, 但增长速率不同, 最终各自占全部点缺陷的比例也不同。在多次线性级联碰撞的模拟结果中, 不同点缺陷的最终产额差异十分明显。通过增加 PKA 的初始能量可以更加清晰地看出不同种类点缺陷在线性级联碰撞过程中演化的差异, 最终产额大小排序: $I_C > V_C > Si_C > V_{Si} > C_{Si} > I_{Si}$,

与 2018 年 Sahoo 等^[14]给出的结果相同。

此外, 还可以看到不同模拟条件下 C 间隙原子的产额始终都是大于 Si 间隙原子, 且随 PKA 数目的增加其增长速率也大于 Si 间隙原子。这是因为 Si 间隙原子和 C 间隙原子在晶体内迁移时的跃迁几率(或扩散系数)不同, 如式(4)中的 Arrhenius 关系所示^[24], 影响因素主要是温度和迁移能。其中, 跃迁几率 p 与迁移能 E_m 成反比, 与温度 T 成正比, k_B 为玻尔兹曼常数, ν 为点缺陷振动频率。

$$p = \nu \cdot \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right) \quad (4)$$

本次模拟的设定均在室温 300 K 下, 因此主要影响因素为迁移能, C 间隙原子的迁移能为 0.74 eV, Si 间隙原子为 1.53 eV^[24], C 原子的跃迁几率更大, 最终的间隙原子产额也更多。此外, 离位阈能也可解释

这种现象。学界一般认为 SiC 中 Si 原子的离位阈能是 35 eV, C 原子的离位阈能是 21 eV^[25], 因而更容易级联碰撞出更多的 C 原子至晶格的间隙位置。还可以从不同点缺陷形成能不同的角度来解释, 或是比较 Si 和 C 间隙原子在单次级联过程中从峰值到最终平衡的过程, 这部分结果已有相关报道^[14], 通过分析恢复过程中的影响因素寻找二者最终产额差异的来源。

2.3 同核键及各类点缺陷最终产额统计

基于图 3 的多次线性级联碰撞结果以及键长的相关数据^[26-29], 分别近似设置了 C-Si 键的键长(0.19 nm), C-C 键的键长(0.15 nm)和 Si-Si 键的键长(0.24 nm), 采用 OVITO 统计了对于不同种类不同初始能量的 PKA, 在多次线性级联碰撞之后化学无序的变化, 如图 4 和图 5 所示。结果显示: Si-Si 键的数量远大于 C-C 键; 随着 PKA 数量增加, Si-Si 键数

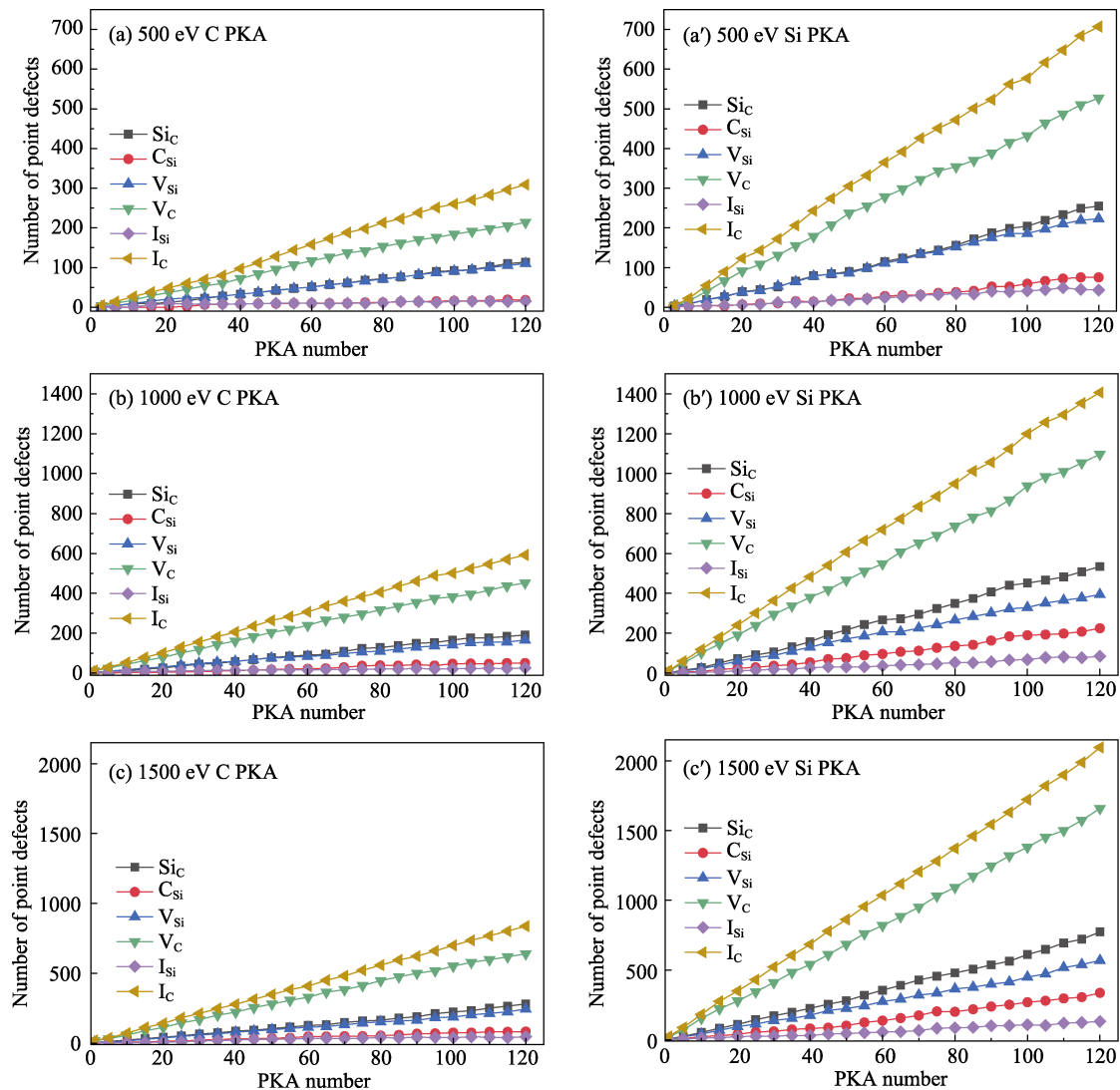


图 3 六种主要点缺陷随 PKA 数量的演化

Fig. 3 Evolution of six main point defects with the number of PKA
(a, a') 500 eV; (b, b') 1000 eV; (c, c') 1500 eV

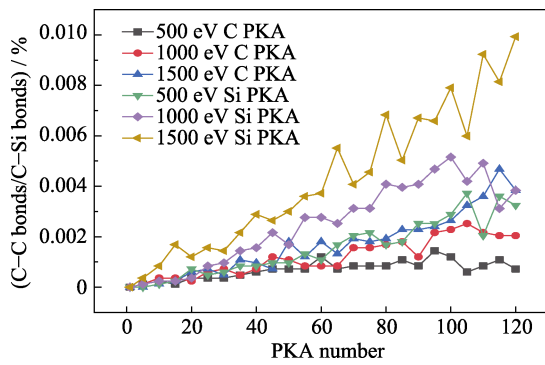


图 4 多次线性级联碰撞后 C-C 键数量统计

Fig. 4 Statistics on the number of C-C bonds after multi-sub-collision cascade

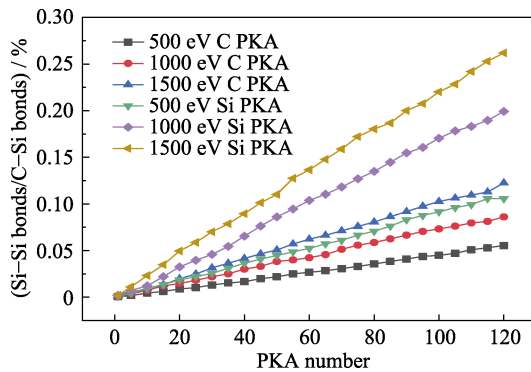


图 5 多次线性级联碰撞后 Si-Si 键数量统计

Fig. 5 Statistics on the number of Si-Si bonds after multi-sub-collision cascade

量稳定增长, 而 C-C 键总体增长, 却出现多次恢复的情况; Si PKA 的同核键产额较 C PKA 大很多, 500 eV Si PKA 与 1500 eV C PKA 的同核键产额几乎相当。以上结果说明 Si-Si 键比 C-C 键更易形成且更加稳定, 因为 Si-Si 键的键能(2.32 eV/bond)相较于 C-C 键(3.68 eV/bond)更低^[29]。对于 C-C 键数量多次出现的恢复情况, 可能是多次级联碰撞过程中缺陷相互作用与演化导致, 亦可能是其数量过少导致的统计性不足。

鉴于 Si_C 和 I_Si 均有可能形成 Si-Si 键, C_Si 和 I_C 均有可能形成 C-C 键(替位形成或形成小的缺陷团簇), 图 6 统计了对于不同种类不同初始能量的 PKA, 在 120 次线性级联碰撞过程结束后, 6H-SiC 中六种主要点缺陷的最终产额。可以看到, 尽管每种点缺陷的最终产额随着 PKA 种类和初始能量的不同而不同, 但对于相同种类和能量的 PKA, 六种点缺陷各自的比例并没有发生太大的变化。同时也可以看出, 同种类 PKA 同初始能量条件下, Si_C 的产额远远大于 I_Si , I_C 的产额远远大于 C_Si 。

由此可以推断, SiC 中的 C-C 键的来源主要是 I_C , Si-Si 键的来源主要是 Si_C , 且与 PKA 初始能量

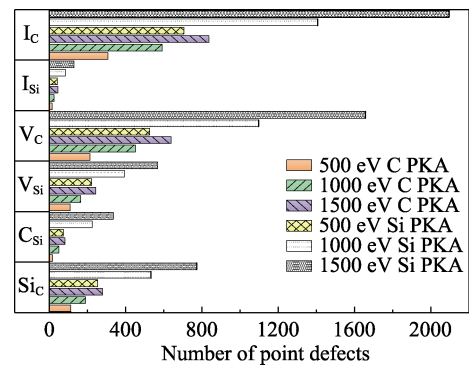


图 6 多次级联碰撞后六种主要点缺陷最终产额统计

Fig. 6 The statistical final yield of six main point defects after multi-sub-collision cascade

呈正相关, 部分结果与相关的第一性原理计算相互辅证^[8]。C-C 键与 I_C 、Si-Si 键与 Si_C 之间可以建立一定的对应关系, 通过定量控制辐照参数来定量控制 Si_C 和 I_C 的产额, 进而可以实现对 SiC 中同核键数量(或化学无序)的控制。最终, 通过建立同核键数量与 SiC 电阻率之间的关系, 实现辐照对 SiC 导电性能的定量调控。同时, 也为材料和器件的抗辐照预测和加固提供计算机模拟支持。

3 结论

通过对单次和多次线性级联碰撞过程中 6H-SiC 内六种主要点缺陷和两种同核键的产额进行统计, 得出以下结论:

- 1) SiC 中, Si-Si 键比 C-C 键更易形成且更加稳定。
- 2) C-C 键的主要来源是 I_C , Si-Si 键的主要来源是 Si_C , 且点缺陷数量与能量呈近似线性正相关, 同核键数量与关键点缺陷数量呈正相关;
- 3) 单次线性级联碰撞过程中, 点缺陷的演化规律与先前的其他报道大致相同; 多次线性级联碰撞过程中六种点缺陷产额的区别可以用 Si 原子和 C 原子的跃迁几率、离位阈能不同进行解释, 也可以尝试从缺陷的形成能和比较不同恢复过程进行分析。

本研究仅从分子动力学角度揭示了形成化学无序的主要点缺陷类型, 而化学无序对 SiC 导电性能的影响, 会在本实验室其他的工作中给出。在定性分析之后, 进一步更有工程价值的工作则是建立辐照参数-缺陷参数-SiC 电学性能之间的定量关系。

参考文献:

- [1] FLEETWOOD D M. Evolution of total ionizing dose effects in MOS devices with Moore's law scaling. *IEEE Transactions on*

- Nuclear Science*, 2018, **65(8)**: 1465–1481.
- [2] ALMAZ E, STONE S, BLUE T E, *et al.* The effects of neutron irradiation and low temperature annealing on the electrical properties of highly doped 4H silicon carbide. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2010, **622(1)**: 200–206.
- [3] AKTURK A, WILKINS R, MCGARRITY J, *et al.* Single event effects in Si and SiC power MOSFETs due to terrestrial neutrons. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2017, **64(1)**: 529–535.
- [4] LEBEDEV A A, DAVYDOVSKAYA K S, STRELCHUK A M, *et al.* Comparison of the Effects of Electron and Proton Irradiation on 4H-SiC and Si Device Structures. Materials Science Forum. Trans Tech Publications, 2018, **924**: 217–220.
- [5] SORIEUL S, COSTANTINI J M, GOSMAIN L, *et al.* Raman spectroscopy study of heavy-ion-irradiated α -SiC. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2006, **18(22)**: 5235–5251.
- [6] CROCOMBETTE J P, PROVILLE L. Thermal conductivity degradation induced by point defects in irradiated silicon carbide. *Applied Physics Letters*, 2011, **98(19)**: 191905.
- [7] WEBER W J, JIANG W, THEVUTHASAN S. Accumulation, dynamic annealing and thermal recovery of ion-beam-induced disorder in silicon carbide. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2001, **175**: 26–30.
- [8] YUAN X, HOBBS L W. Modeling chemical and topological disorder in irradiation-amorphized silicon carbide. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2002, **191(1–4)**: 74–82.
- [9] CUBIOTTI G, KUCHERENKO Y, YARESKO A, *et al.* The effect of the atomic relaxation around defects on the electronic structure and optical properties of β -SiC. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1999, **11(10)**: 2265.
- [10] 韩苗苗. 4H-SiC 辐照损伤分子动力学模拟初步研究. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学硕士学位论文, 2013.
- [11] SAMOLYUK G D, OSETSKY Y N, STOLLER R E. Molecular dynamics modeling of atomic displacement cascades in 3C-SiC: comparison of interatomic potentials. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, **465**: 83–88.
- [12] MA XIAO-QIANG, YUAN DA-QING, XIA HAI-HONG, *et al.* Molecular dynamics simulation of evolution of defect and temperature effect in irradiated 3C-SiC. *Atomic Energy Science and Technology*, 2016, **50(2)**: 219–226.
- [13] 何涛. 4H-SiC 材料辐照位移损伤的分子动力学模拟. 衡阳: 南华大学硕士学位论文, 2018.
- [14] SAHOO D R, SZLUFARSKA I, MORGAN D, *et al.* Role of pre-existing point defects on primary damage production and amorphization in silicon carbide (β -SiC). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2018, **414**: 45–60.
- [15] GAO F, WEBER W J, DEVANATHAN R. Defect production, multiple ion-solid interactions and amorphization in SiC. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2002, **191(1–4)**: 487–496.
- [16] MOMMA K, IZUMI F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *Journal of Applied Crystallography*, 2011, **44(6)**: 1272–1276.
- [17] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, **117(1)**: 1–19.
- [18] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, **18(1)**: 015012.
- [19] JAIN A, ONG S P, HAUTIER G, *et al.* Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*, 2013, **1(1)**: 011002.
- [20] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems. *Physical Review B*, 1989, **39(8)**: 5566–5568.
- [21] BIRSACK J P, ZIEGLER J F. Refined universal potentials in atomic collisions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 1982, **194(1/2/3)**: 93–100.
- [22] KINCHIN G H, PEASE R S. The displacement of atoms in solids by radiation. *Reports on Progress in Physics*, 1955, **18(1)**: 1.
- [23] NORGETT M J, ROBINSON M T, TORRENS I M. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nuclear Engineering & Design*, 1975, **33(1)**: 50–54.
- [24] GAO F, WEBER W J, POSSELT M, *et al.* Atomistic study of intrinsic defect migration in 3C-SiC. *Physical Review B*, 2004, **69(24)**: 245205.
- [25] DEVANATHAN R, WEBER W J. Displacement energy surface in 3C and 6H SiC. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, **278(2/3)**: 258–265.
- [26] LIDE JR D R. A survey of carbon-carbon bond lengths. *Tetrahedron*, 1962, **17(3/4)**: 125–134.
- [27] RAGHAVACHARI K, LOGOVINSKY V. Structure and bonding in small silicon clusters. *Physical Review Letters*, 1985, **55(26)**: 2853.
- [28] BEAGLEY B, MONAGHAN J J, HEWITT T G. Electron-diffraction studies of tetramethylsilane and hexamethyldisilane, and discussion of the lengths of Si-C bonds. *Journal of Molecular Structure*, 1971, **8(4)**: 401–411.
- [29] ISHIMARU M, BAE I T, HIRATA A, *et al.* Volume swelling of amorphous SiC during ion-beam irradiation. *Physical Review B*, 2005, **72(2)**: 024116.