

电子能损效应对材料辐照缺陷影响的理论 模拟研究进展

徐姜炜¹ 张超¹ 毛飞² 张丰收³

1(安徽理工大学 材料科学与工程学院 淮南 232001)

2(南华大学 核科学技术学院 衡阳 421001)

3(北京师范大学 核科学与技术学院 北京 100875)

摘要 高能粒子与靶材料相互作用主要通过核能损和电子能损两种方式损失能量。电子阻止效应和电子-声子耦合效应是体现电子能损的两种不同机制。准确模拟高能粒子的辐照损伤过程,亟须解决电子能损效应对粒子辐照损伤的影响这一关键科学问题。本文综述了几种关键结构材料在考虑电子能损效应下辐照损伤行为的最新研究进展,阐述了电子阻止效应、电子-声子耦合效应和电子热导率等对辐照缺陷的影响规律,总结了目前电子能损效应对靶材料辐照损伤的影响规律,归纳了高能粒子辐照靶材料研究中存在的问题,并对后续的研究方向进行了展望。

关键词 电子能损效应, 辐照缺陷, 双温度模型, 电子-声子耦合, 级联碰撞

中图分类号 TL329

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.120504

Progress on theoretical simulation study of the influence of electronic energy loss on the irradiation defects of materials

XU Jiangwei¹ ZHANG Chao¹ MAO Fei² ZHANG Fengshou³

1(School of Materials Science and Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

2(School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang 421001, China)

3(College of Nuclear Science and Technology, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract Energy loss during interactions between high-energy particles and target materials mainly consists of nuclear and electronic energy losses. Electronic stopping and electron-phonon coupling effects are two different mechanisms that reflect electronic energy loss effects. To accurately simulate the irradiation damage process of high-energy particles, it is necessary to solve the key scientific problem of the influence of electronic energy loss on irradiation damage. This paper reviews the most recent progress on the irradiation damage behavior study of several key structural materials under the influence of electronic energy loss effects, elaborates the effects of electronic stopping, electron-phonon coupling, and electronic thermal conductivity on irradiation defects. The influence laws of electronic energy loss effects on the irradiation damage of target materials are summarized and the existing problems

国家自然科学基金(No.11505003)、安徽省自然科学基金(No.2108085MA25)

第一作者: 徐姜炜, 女, 1998年出生, 2023年于安徽理工大学获硕士学位, 研究领域为反应堆理论计算

通信作者: 张超, E-mail: chaozhang@mail.bnu.edu.cn; 张丰收, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn

收稿日期: 2023-05-15, 修回日期: 2023-10-19

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 11505003) and the Provincial Natural Science Foundation of Anhui (No. 2108085MA25)

First author: XU Jiangwei, female, born in 1998, graduated from Anhui University of Science and Technology with a master's degree in 2023, focusing on reactor theoretical calculation

Corresponding author: ZHANG Chao, E-mail: chaozhang@mail.bnu.edu.cn; ZHANG Fengshou, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn

Received date: 2023-05-15, revised date: 2023-10-19

in the research of high-energy particle irradiation of target materials are highlighted. Finally, the prospectives are outlined for future research directions.

Key words Electronic energy loss effect, Irradiation defect, Two-temperature model, Electron-phonon coupling, Collision cascades

高能离子通常又称为快速重离子(Swift Heavy Ions, SHI),当它被发射到固体中时,会与固体中晶格原子发生一系列碰撞,从而引发辐照效应。在该过程中,入射离子与固体的相互作用会使入射离子将一部分能量传递给固体中原子核和电子,从而造成入射离子的能量损失。这两种能量损失机制可被量化为单位离子路径长度的平均能量损失,即阻止本领。其中,核阻止本领是指运动的离子与固体中的原子核发生弹性碰撞而引起的能量损失;电子阻止本领是指运动的离子与固体中的电子发生非弹性散射而引起的能量损失。在以往的研究中发现,电子和原子核的能量转移以及材料的响应可大致分为三种能量区间:1)当离子能量 $E < 0.5$ MeV时,能量向原子核的转移占主导地位,电子能量损失可以被视为微不足道;2)对于 $E > 50$ MeV的高能离子,电子能量损失占主导地位,强烈的电离会导致损伤产生^[1]、径迹形成^[2]或损伤恢复^[3];3)在中等离子能量下(0.5 MeV $< E < 50$ MeV),核能量损失和电子能量损失具有相似的量级,会对损伤产生^[4-6]或恢复过程^[7]产生附加效应,从而影响辐照过程中的损伤累积。

虽然高能电子和离子与固体相互作用会使固体中电子子系统和原子子系统之间发生能量转移,但是一直以来,材料的辐照效应研究主要侧重于原子子系统内部的能量转移,而对电子子系统及其与原子子系统之间的能量交换过程研究甚少^[8-9],导致理解和模拟各种材料,如陶瓷^[10-12]、金属和化合物半导体^[13-14]等所产生的电子效应时存在很多困难。近年来,越来越多的研究者认识到在陶瓷和合金中,电子能量耗散及其对损伤演化的影响十分重要。

在过去的几十年中,经典分子动力学(Molecular Dynamics, MD)是模拟辐照事件后早期

辐照效应的有效方法,它可以模拟适当空间(nm)和时间(ns)的体系,这种方法使辐照损伤方面的研究取得了许多显著进展。然而,经典MD方法存在一定的局限性,其中最主要的是它无法纳入电子能损效应的影响,这导致该方法只能用于研究与材料中的原子核相互作用的辐照类别,例如低能离子。对于高能离子入射,能量损失主要是电子阻止作用^[15],如图1(a,b)所示,核碰撞的横截面非常小,在这种情况下,经典MD方法不适用于模拟快速重离子的辐照损伤过程。为了解决这一局限性,Duffy和Rutherford^[16-17]将经典MD和电子能量传输与扩散模型耦合,开发了双温度分子动力学(Two-Temperature Molecular Dynamics, 2T-MD)方法。该工作最初是为了模拟金属薄膜的激光辐照^[18-20]和金属表面的电子喷射^[21-23],后来发展了级联碰撞过程的模型,使电子阻止效应和电子-声子(electron-phonon, e-ph)耦合的影响能够包含在中高能离子辐照模拟中。

本文结合本课题组前期的研究工作,综述了近年来采用2T-MD模型研究电子能损效应分别对碳化硅、碳化硅复合材料以及Ni、Ni-Fe、Ni-Pd等Ni基合金辐照损伤过程影响的最新研究进展,总结了电子能损效应对几种关键材料辐照损伤的影响机制,归纳了目前存在的问题以及未来的研究方向。本文首先详细描述2T-MD模型;其次,概述碳化硅和碳化硅复合材料在高速粒子辐照下的电子能损效应。最后,梳理和比较经典MD、电子阻止效应和2T-MD三种模型下几种Ni基多主元固溶体合金的辐照损伤行为,并进一步对这些材料研究中的关键科学问题进行总结和展望。

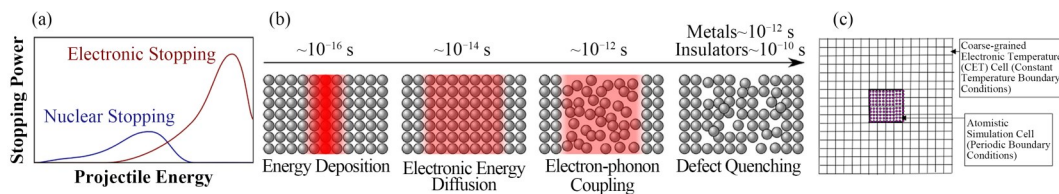


图1 (a) 原子核(蓝色)和电子(红色)的阻止能力与入射能量的关系示意,(b) SHI辐照事件的能量沉积和耗散示意图^[15], (c) 2T-MD模拟单元格示意图^[17](彩图见网络版)

Fig.1 (a) Schematic representation of the nuclear (blue) and electronic (red) stopping powers as a function of the ion projectile energy, (b) schematic representation of the energy deposition and dissipation for a SHI irradiation event^[15], (c) schematic representation of the simulation cell^[17] (color online)

1 双温度分子动力学模型

2T-MD 模型描述了原子子系统和电子子系统之间的能量交换,它可以捕获原子核和电子能量耗散的协同效应,同时考虑电子阻止和 e-ph 相互作用。在 Caro 和 Victoria^[24] 模型基础上,引入非均匀的 Langevin 恒温器来实现原子子系统和电子子系统之间的能量交换,能量交换的量取决于两个子系统之间的局部温差。如图 1(c) 所示,将 MD 模拟和粗粒度网格结合起来,即在原子 MD 模拟单元格上叠加一个代表电子温度的立方网格。这些单元格被称为粗粒度电子温度 (Coarse-grained Electronic Temperature, CET) 单元格,每个单元格包含几百个原子。电子温度网格远超出原子模拟单元格,超出部分边界处的温度恒定,代表了“系统的其余部分”。

与经典 MD 模拟中离子运动方程(式(1))相比,修正的 Langevin 方程(式(2))包含了一个摩擦力项:

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = F_i(t) \quad (1)$$

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = F_i(t) - \gamma_i v_i + \tilde{F}(t) \quad (2)$$

式中: m_i 和 v_i 分别表示原子的质量和速度; $F_i(t)$ 表示在 t 时刻由于与周围原子相互作用而作用在原子 i 上的力。摩擦力项 γ_i 包括一个电子阻止摩擦力项 γ_e 和一个 e-ph 耦合摩擦力项 γ_p 。电子-声子相互作用在模拟时间为 t_{cph} 时被激活。当 $v_i > v_c$ 时,摩擦力项 $\gamma_i = \gamma_e + \gamma_p$; 当 $v_i \leq v_c$ 时, $\gamma_i = \gamma_p$ 。 v_c 为截止速度,其值相当于系统内聚能的两倍^[25]。随机力项 $\tilde{F}(t)$ 包括与电子相互作用而获得的能量,由局域电子温度决定。

在 2T-MD 中,对描述电子子系统的扩散方程与 MD 方程同时进行数值积分,在每个 MD 时间步长内,两个子系统之间进行能量交换。采用有限差分方法对电子热扩散方程进行数值求解。注意,有限差分的时间步长通常比 MD 时间步长小几个数量级。由于电子能量在空间上扩散的快速性,电子子系统需要很小的积分时间步长。

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla \cdot (k_e \nabla T_e) - g_p (T_e - T_a) + g_s T_a' \quad (3)$$

式中: T_e 和 T_a 分别表示电子温度和原子温度; C_e 和 k_e 分别是电子比热和电子热导率; g_s 和 g_p 分别表示电子阻止常数和 e-ph 耦合常数。等式右侧第二项表示由于 T_a 和 T_e 之间的温差而进行的能量交换,第三项表示电子阻止引起的能量交换,其中参数 T_a' 具有温度单位,它的大小由受到电子阻止的原子的平均动能计算得出。

式(2)中的摩擦力项 γ_i 与电子阻止常数 g_e 和 e-ph 耦合常数 g_p 有关, g_p 和 g_e 分别被表示为:

$$g_p = \frac{3Nk_B\gamma_p}{\Delta V m_i} \quad (4)$$

$$g_e = \frac{3N'k_B\gamma_s}{\Delta V m_i} \quad (5)$$

式中: N 是体积为 ΔV 的 CET 单元格中的总原子数; N' 是在该单元格中速度大于 v_c 的原子数; k_B 表示玻尔兹曼常数。

在低速区,电子阻止本领与离子速度成正比,比例常数 (λ) 由 Firsov 模型或 Lindhard 和 Scharff 模型^[16] 确定:

$$dE/dx = \lambda E^{1/2} \quad (6)$$

$$m dv/dt = \lambda (m/2)^{1/2} v \quad (7)$$

然后,由式(2)得:

$$\gamma_s = \lambda (m/2)^{1/2} \quad (8)$$

电子阻止相应的弛豫时间为:

$$\tau_s = m/\gamma_s = (2m)^{1/2}/\lambda \quad (9)$$

由 e-ph 相互作用引起的能量损失的时间尺度为:

$$\tau_p = m/\gamma_p \quad (10)$$

根据式(4)得:

$$\tau_p = 3nk_B/g_p \quad (11)$$

式中: n 是单位体积的原子数。

2 电子能损效应对立方碳化硅及其复合材料辐照损伤的影响

2.1 电子能损效应对立方碳化硅辐照损伤的影响

由于碳化硅 (Silicon Carbide, SiC) 材料具有极高的机械强度、优良的热导率、极佳的高温强度、抗蠕变、抗氧化以及耐酸碱腐蚀等优良性能,使其在强辐照等极端环境下的电子器件和结构材料等方面具有潜在的应用价值^[26-27], 成为裂变和聚变反应堆中非常理想的堆壁候选材料^[28]。Wu 等^[29] 采用 2T-MD 模型研究了立方 SiC 材料的快速离子诱导效应。他们首先研究了 Si 轰击 SiC 材料过程中核阻止和电子阻止的能量损失。结果发现,在 65 keV 入射能量下,核能损和电子能损具有几乎相同的能量损失,表明该入射能量下,损伤不仅归因于核能损为主的级联碰撞过程,还归因于通过电子-声子耦合效应将高能离子能量沉积给电子子系统,进而影响原子的运动,如图 2 所示。低于该入射能量时,主要是核能损为主,反之,主要是电子能损占据主导地位。其次,他们基于上述研究结果选择 20 keV、65 keV、300 keV 和 20 MeV,详细研究了不同辐照能量对碳

化硅材料辐照损伤的影响。结果发现,在以电离过程为主的阶段, SiC 晶体形成的损伤很小, 而 SiC 内部大量缺陷的形成主要是由于当能量耗散到以核能损为主的阶段时, 入射粒子与靶原子之间发生级联碰撞引起的, 如图 3(a、b)所示。同时, 为了评估 MD 计算结果的有效性, 基于 SRIM 模拟研究了不同辐照能量下电离效应和缺陷累积效应, 如图 4 所示。从图 4 可以发现, 一方面, 随着入射能量的增加, 损伤峰出现了明显的右移。另一方面, 缺陷累积效应是电子能损和核能损耦合作用的结果, 如 65 keV 时, 达到损伤峰值时对应的电子能损和核能损均很大。

通过研究初始能量为 20 MeV 的 Si 离子辐照 SiC 的整个过程发现, SHI 和靶的作用可以按时间顺

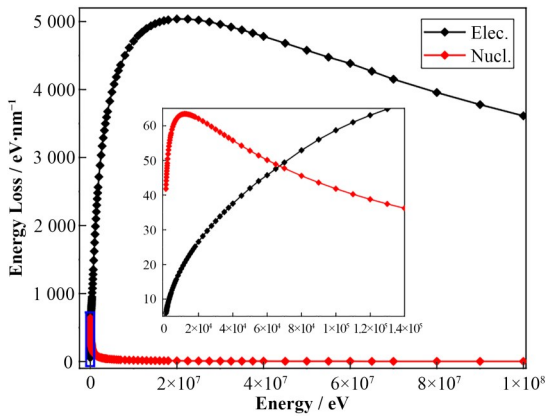


图 2 Si 轰击 SiC 材料的 SRIM 模拟中能量 0~100 MeV 的电子阻止(Electronic stopping, Elec.)和核阻止(Nuclear stopping, Nucl.)能量损失。插图显示了 0~140 keV 能量范围内的能损情况^[29](彩图见网络版)

Fig.2 Energy loss of electronic stopping (Electronic stopping, Elec.) and nuclear stopping (Nuclear stopping, Nucl.) for energies ranging from 0 eV to 100 MeV in the SRIM simulation of Si bombarding SiC. The inset shows the enlarged detail of the energy loss in the range of 0 eV to 140 keV^[29] (color online)

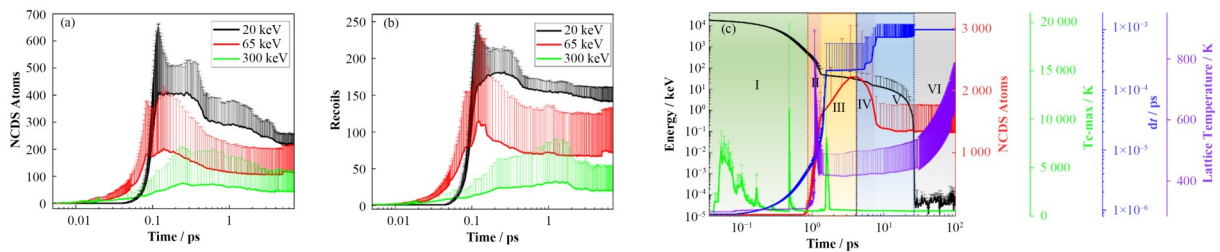


图 3 不同能量 Si 离子辐照下的损伤(Non-cubic Diamond Structure Atoms, NCDS)(a)和反冲原子的演化(b), (c) 初始能量为 20 MeV 的 Si 离子辐照期间, 辐照能量(左轴, 黑线)、辐照损伤(右轴, 红线)、最大电子温度(右轴, 绿线)、时间步长值(右轴, 蓝线)和 NVE 系综下的晶格温度(右轴, 紫线)的演化过程^[29](彩图见网络版)

Fig.3 Damage evolution (non-cubic diamond structure atoms, NCDS) (a) and variations of recoils (b) under different energies of Si ion radiation, (c) variations of radiation energy (left axis, black), number of NCDS atoms (right axis, red), maximum electron temperature (right axis, green), and timestep (right axis, blue) and lattice temperature under NVE ensemble (right axis, purple) during 20 MeV initial energy of single Si ion radiation^[29] (color online)

序分为 6 个阶段, 即电离(阶段 I)、快速损伤形成(阶段 II)、缓慢损伤形成(阶段 III)、快速自我修复(阶段 IV)、缓慢自我修复(阶段 V)和损伤稳定阶段(阶段 VI), 如图 3(c)所示。对于电离阶段, 碰撞能量从 20 MeV 下降至约 500 keV, 只形成了少量的缺陷, 这表明核能损对该阶段的影响很小。此外, 从图 3 中绿色曲线可以看出, 在阶段 I, 电子温度剧烈波动, 体现了电子子系统的活跃程度明显大于阶段 II 和阶段 III, 因此, 可以认为电离是阶段 I 能量下降的主要原因。在阶段 II, 碰撞能量加速下降, 在 0.44 ps 内, 从约 500 keV 下降至约 50 keV, 同时发生缺陷的悬崖状爬升。在阶段 III, 缺陷形成明显减慢, 但缺陷数量仍在增加, 表明系统中仍存在进一步的级联碰撞过程。虽然电子温度在阶段 III 出现了波动, 但更有可能是由于反冲原子产生。损伤形成后, 系统进入自修复阶段, 即阶段 IV 和阶段 V。由于局部应力的释放和晶格的热振动, 一些原子最终回到晶格位置。综合以上结果可以看出, 电离阶段主要是电子能损占主导作用, 产生少量缺陷, 而快速损伤形成阶段和缓慢损伤形成阶段形成了大量缺陷, 且这些缺陷主要是由入射粒子与靶原子之间发生的一系列级联碰撞所引起, 此时的能量耗散主要以核能损为主。该工作阐明了在高性能粒子辐射下靶材料中原子子系统和电子子系统耦合响应的基本机制, 为实验上观察极端能量沉积下缺陷的形成和演化机制提供指导。

本课题组通过研究 e-ph 耦合强度对方 SiC 材料辐照缺陷的影响^[30], 发现缺陷残余数与 γ_p 之间不是单调的线性关系(图 5(a))。碳空位缺陷数大于硅空位缺陷数, 且碳反基数多于硅反基缺陷数, 其原因是碳化硅晶体中碳原子的移位阈能小于硅原子的移位阈能。从图 5(b)中观察发现, 当 $\gamma_p = 1\ 200\ \text{g} \cdot (\text{mol} \cdot \text{ps})^{-1}$ 时, 对应的缺陷峰值(N_p)最大, 而强耦合情况下(如当 $\gamma_p = 2\ 400\ \text{g} \cdot (\text{mol} \cdot \text{ps})^{-1}$), N_p 却较小。残余缺陷数(N_r)的变化趋势类似于 N_p , 但复合

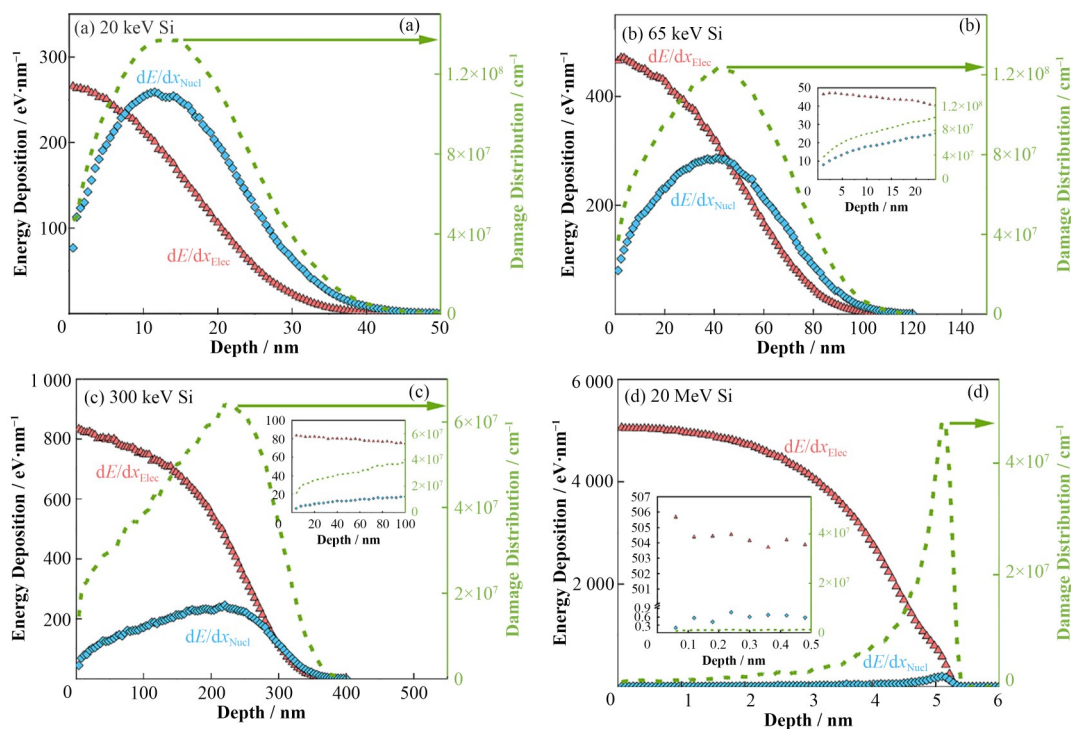


图4 在不同辐射能量的SRIM模拟中,能量沉积(左轴)和损伤分布(右轴)与穿透深度的关系^[29](彩图见网络版)
Fig.4 Energy deposition (left axis) and damage profile (right axis) as a function of penetration depth from SRIM simulations under different radiation energies^[29] (color online)

缺陷数(N_a)却随着 γ_p 增加而减少。通过分析体系的原子温度(T_a)和电子温度(T_e)阐释了缺陷的形成机制。在I阶段,总体上 T_a 的下降速率随着 γ_p 的增加而加快(图5(c)),表明级联碰撞过程中运动的原子迅速地被慢化。因此,在强耦合情况下,能量沉积较快,体系中没有足够的能量克服移位势垒,从而缺陷的峰值 N_p 相对较小(图5(b))。然而,电子温度 T_e 在I阶段内随着 γ_p 的增加而快速上升(图5(d))。这是由于随着 T_e 的升高,原子的移位势垒降低,所以,只要体系中的原子有足够的能量克服较低移位势垒,就可以使样品产生缺陷。在中等耦合强度时,体系中原子既有较低的移位势垒,也有足够的能量克服势垒,所以容易形成缺陷;而在强耦合情况下,虽然原子的移位势垒较低,但是体系原子已经慢化到没有足够的能量克服较低的势垒,从而较难形成缺陷;在弱耦合时, T_e 非常低,移位势垒相对较高,体系中的原子较难克服移位势垒。因此,中等耦合强度所对应的 N_p 要高于强耦合和弱耦合时的 N_p (图5(b))。

2.2 电子能损效应对碳化硅复合材料辐照损伤的影响

连续碳化硅(SiC)纤维增强SiC基体(SiC_f/SiC)复合材料由于低余热、较大的高温强度和优异的辐射稳定性而被开发应用于先进聚变能源系统和其他核系统^[31-32]。本课题组^[33]分别采用经典MD和2T-

MD模型研究了SiC/Gra/SiC复合材料中初级碰撞原子(Primary Knock-on Atom, PKA)的动能和位移的演化行为。结果发现,经典MD模型中PKA动能先缓慢下降,然后迅速下降,在2.0 ps附近PKA初始动能损失超过99.92%,如图6(a)所示。基于2T-MD模型,PKA动能在碰撞后迅速降低,且在0.1 ps附近PKA几乎失去了所有的初始动能。从图6中还可以发现,2T-MD模型的动能曲线比经典MD模型的动能曲线光滑很多。此外,从图6(b)可以观察到,经典MD模型中PKA的位移先是缓慢增加,然后迅速增加,在2.0 ps后PKA已基本停止运动,对应的位移约为120 nm,而2T-MD模型中PKA位移仅约为14.67 nm,相应模拟时间约为0.1 ps。这些结果表明,考虑了电子能损效应的2T-MD模型对初级碰撞原子的动能和位移演化行为具有重要影响,进而影响材料的损伤行为。

3 电子能损效应对Ni基合金辐照损伤的影响

Ni基多主元固溶体合金作为一种面心立方(Face-Centered Cubic, FCC)结构的单相合金,由于其化学复杂性,表现出优异的热学、电学和力学性能^[34-39],使得它们有望成为下一代聚变反应堆的良好候选材料。

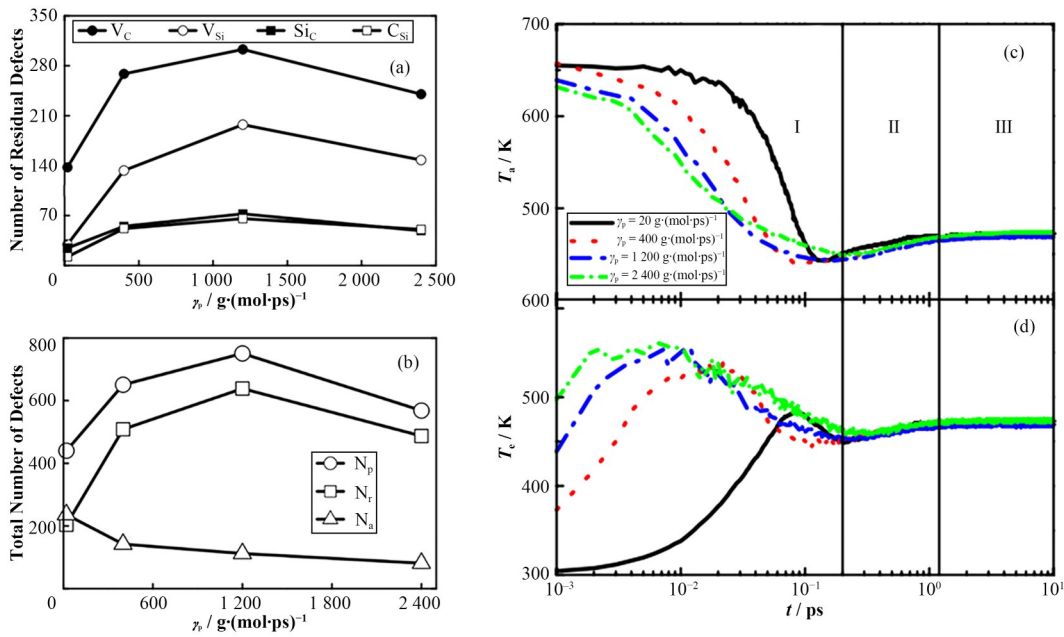


图5 在立方SiC样品的级联碰撞过程中,(a) 体系中最终残留的碳空位 V_C 、硅空位 V_{Si} 、碳反基 Si_C 和硅反基 C_{Si} 缺陷数随着电子-声子耦合系数 γ_p 的变化关系,(b) 缺陷数(包括空位和反基缺陷)的最大值(N_p)、最后稳定时缺陷(N_f)以及退火修复的缺陷(N_a)与 γ_p 的变化关系, γ_p 取20~2 400 $\text{g} \cdot (\text{mol} \cdot \text{ps})^{-1}$ 范围内时,体系的原子温度(c)和电子温度(d)随着时间的演化关系^[30](彩图见网络版)

Fig.5 During the cascade collision process of 3C-SiC sample: (a) with changes in the electron-ion coupling coefficient γ_p , the number of final residual carbon vacancies V_C , silicon vacancies V_{Si} , carbon anti-site defects Si_C , and silicon anti-site defects C_{Si} in the system varies, (b) with changes in γ_p , the maximum number of defects (including vacancies and anti-site defects) (N_p), the number of defects at final stability (N_f) and defects repaired by annealing (N_a) exhibit variations; when γ_p is in the range of 20~2 400 $\text{g} \cdot (\text{mol} \cdot \text{ps})^{-1}$, the evolution of atomic (c) and electronic (d) temperature with time is also depicted^[30] (color online)

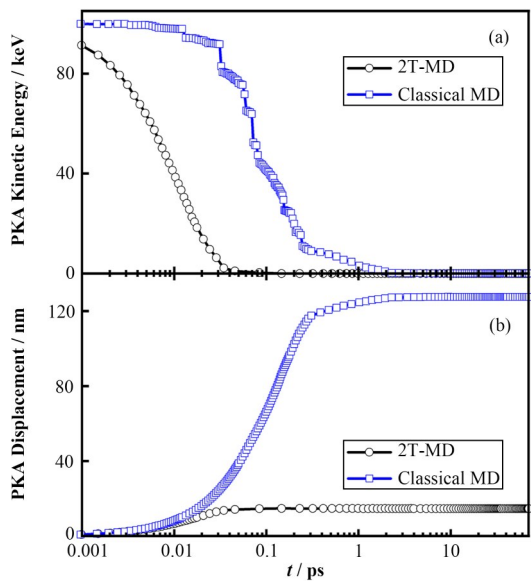


图6 2T-MD和经典MD模型下SiC/Gra/SiC复合材料中PKA动能(a)和位移(b)随着时间的演化行为^[33](彩图见网络版)

Fig.6 Evolutions of PKA kinetic energy (a) and displacement (b) over time in the SiC/Gra/SiC composite system with the 2T-MD and classical MD models, respectively^[33] (color online)

3.1 电子能损效应对金属Ni辐照损伤的影响

Weber等^[40-41]分别研究了100 keV和150 keV碰撞能量下电子能损效应对金属Ni辐照损伤的影响。结果发现,在100 keV Ni离子辐照情况下,采用电子阻止和双温度模型均会使每次级联碰撞事件后的残余损伤增加。然而,对于每个碰撞事件,采用双温度模型计算的缺陷数量相对较少(图7(a))。由于在级联碰撞区域温度较高,而远离级联时温度较低。因此,在这种高能碰撞事件中,局部电子和原子温度非常高(图7(b,c))。根据原子系统和电子系统之间的局部温差,能量可以双向流动。在模拟开始时,来自初级碰撞原子的能量耗散导致原子温度升高。随着级联碰撞的进行,电子阻止会减慢快速移动的原子,使原子系统的能量转移给电子子系统,从而提高了电子温度。除了电子阻止外,由于e-ph相互作用产生的摩擦力项还将原子系统的能量转移到电子系统中。能量在电子子系统中进一步耗散,而电子系统的能量能否返回到原子子系统取决于电子子系统局部温度是否高于原子子系统的温度。这种能量转移有助于当前碰撞事件和之前发生的级联碰撞所产生的离位原子的复合。因此,当模拟中包含e-ph耦合作用时,残余缺陷的数量较小。此外,发现e-ph耦合作用

导致产生更多的单空位缺陷,且随着级联碰撞次数的增加,这种影响更为显著(图8),但对间隙原子缺陷的影响较小(图8(a))。e-ph相互作用还导致了较多的小间隙团簇(图8(b))和空位团簇(图8(g))。对于中等大小的团簇,e-ph相互作用对间隙团簇的影响较小,而对空位团簇数量的影响较大(图8(h)),并且随着级联事件次数的增加,影响更为显著。对于大尺寸的团簇,也观察到e-ph耦合对空位团簇的影响更加明显(图8(i)和(j))。对于由51~100个间隙原子组成的团簇,e-ph相互作用的影响也较为明显(图8(d)),而对于尺寸大于101的间隙团簇,这种影响较小。总的来说,当能量由于电子的电离而被转移到原子子系统时,就会形成更多的小空位团簇。因此,可用于形成大团簇的空位较少,这意味着e-ph耦合极大地抑制了大空位团簇的形成。

在150 keV Ni离子辐照情况下,发现e-ph耦合作用越强,即e-ph耦合常数 g_p 越大,残余Frenkel缺陷的平均数量越少;而电子热导率 k_e 越高,残余缺陷的数量就越多,如图9(a)所示。正如式(3)中的 g_p

(T_c-T_a)项,两个子系统之间的能量交换取决于局部温差以及e-ph耦合常数。对于更大的 g_p ,允许从电子子系统传输的能量更多,因此,这种过剩能量可用于短时间内热刺激移位原子的复合,从而导致缺陷数量的减少。而对于较高的电子热导率 k_e ,由于电子子系统冷却得更快,导致可用于返回至原子子系统的能量变少,从而影响残余缺陷的数量。图9(b)、(c)展示了150 keV Ni离子自辐照产生的间隙团簇和空位团簇数。从图9(b)可以发现, g_p 值越大,间隙缺陷的数量越多,而间隙团簇的尺寸越小。对于2T-MD 2g的情况,不存在超过35个间隙缺陷组成的团簇,而对于2T-MD 5g的情况,不存在20个以上间隙缺陷组成的团簇。类似地,更强的e-ph耦合导致大尺寸的空位团簇较少。从图9(c)可以发现,2T-MD 2g模拟中发现的最大空位团簇尺寸为25,2T-MD 5g模拟发现,最大的空位团簇尺寸为8。由于缺陷复合发生在团簇形成阶段,所以影响了团簇的大小。当 g_p 较大时,大团簇的形成受到抑制,而 k_e 值较高时则相反。

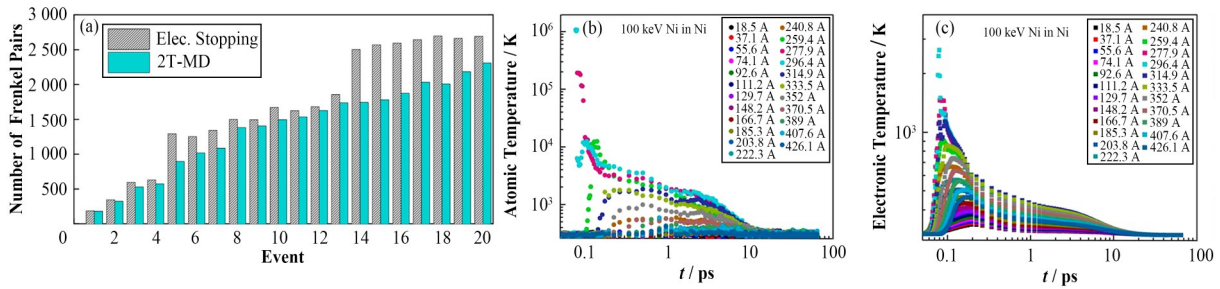


图7 100 keV Ni离子自辐照后,在电子阻止和2T-MD模型下的Frenkel缺陷对数目与级联碰撞事件的关系(a),2T-MD模型下原子温度(b)和电子温度(c)随模拟时间的演化行为^[40](彩图见网络版)

Fig.7 After 100 keV Ni ion self-irradiation: (a) relationship between the number of Frenkel pairs and the cascade collision events in the electronic stopping and 2T-MD models, temporal evolution of atomic (b) and electronic (c) temperature in the 2T-MD model^[40] (color online)

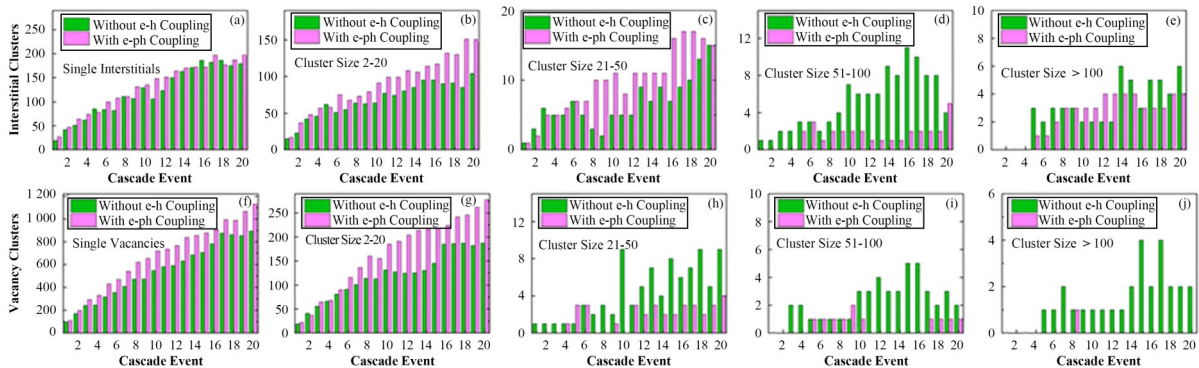


图8 根据缺陷尺寸显示的每个级联碰撞事件间隙团簇缺陷数(a~e)和(f~j)空位团簇缺陷数。绿色代表未考虑e-ph耦合作用,紫色代表考虑了e-ph耦合作用^[40](彩图见网络版)

Fig.8 (a~e) Interstitial cluster count found in each cascade event according to size, (f~j) vacancy clusters found in each cascade event according to size. The green bars represent simulations without e-ph coupling, whereas the purple bars represent the cascades with e-ph coupling taken into account^[40] (color online)

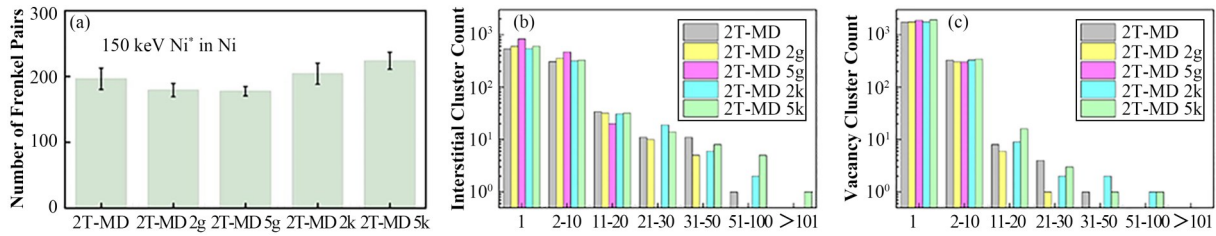


图9 150 keV Ni离子自辐照后,2T-MD模拟产生的平均残余Frenkel缺陷数(误差条表示每种情况下15个级联事件的标准误差)(a)、间隙团簇数(b)和空位团簇数(c)^[41](彩图见网络版)

Fig.9 For the 2T-MD model cases at the end of the simulation time for 150 keV Ni ion cascades in Ni: average surviving number of Frenkel pairs (the error bars represent the standard error over 15 cascade events for each case) (a), interstitial (b) and vacancy cluster count (c)^[41] (color online)

上述结果表明,e-ph耦合作用能够影响微观结构的演化,导致更多孤立点缺陷的形成和更多小尺寸团簇的生成,且e-ph耦合作用越强,残余的Frenkel缺陷的平均数量越少,而电子热导率 k_e 越高,残余缺陷的数量就越多。当能量由于电子的电离而被转移到原子子系统时,就会形成更多的小空位团簇。因此,可用于形成大团簇的空位较少,表明e-ph耦合能够极大地抑制大空位团簇的形成。

3.2 电子能损效应对NiFe合金辐照损伤的影响

通过分别采用经典MD模型、电子阻止模型和2T-MD模型研究了Ni和等原子比的NiFe合金在30 keV和50 keV情况下的级联碰撞过程发现,在30 keV的级联碰撞模拟中,与经典MD计算结果相比,电子阻止导致金属Ni的损伤减少,但e-ph耦合

作用的加入不会显著影响残余的Frenkel缺陷对(图10(a))^[42]。对于NiFe合金,三种模拟下的残余缺陷数量几乎相同。在50 keV的级联碰撞过程中,与经典MD模拟相比,电子阻止均会导致两种材料损伤降低。与仅考虑电子阻止损伤相比,2T-MD模拟产生的损伤更少(图10(b))。通过对比Ni和NiFe合金的损伤结果表明,NiFe合金中产生的损伤较少,这与Zhang等的实验结果一致^[43]。图10(c~f)显示了在50 keV级联碰撞能量下在相同的PKA速度方向上,分别采用经典MD和2T-MD模拟NiFe合金的辐照缺陷数。从图10中可以观察到,2T-MD级联碰撞过程中产生更多的孤立点缺陷和更小的缺陷团簇。一般来说,除了NiFe合金中的损伤比Ni中的少之外,在每个模拟条件下,NiFe合金还形成了更少的自间隙原子和空位团簇,以及更多的孤立缺陷。

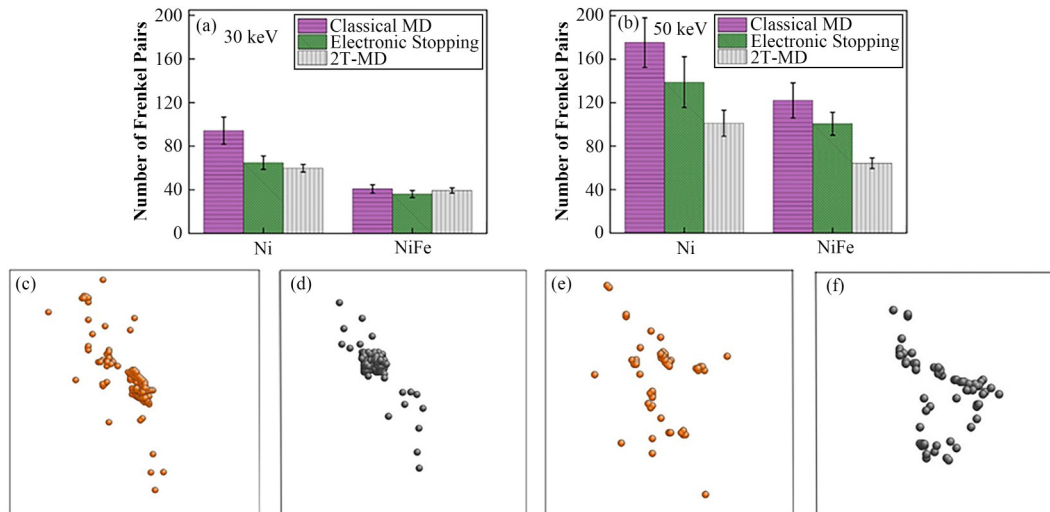


图10 Ni和NiFe合金分别在30 keV(a)和50 keV(b)Ni离子级联碰撞情况下产生的平均残余缺陷数。在相同的PKA速度方向上,NiFe合金在50 keV级联碰撞能量下,经典MD(c,d)和2T-MD(e,f)的辐照缺陷,(c)和(e)为残余的间隙原子缺陷,(d)和(f)为残余的空位缺陷^[42](彩图见网络版)

Fig.10 Average surviving defects for 30 keV (a) and 50 keV (b) Ni cascades in Ni and NiFe alloys. Final defects of classical MD (c, d) and 2T-MD (e, f) at 50 keV cascades collision energy in NiFe alloys with the same PKA velocity direction. (c) and (e) show the surviving interstitials, and (d) and (f) show the surviving vacancies^[42] (color online)

当e-ph耦合激活时间, t_{ep} 分别为0.2 ps和1 ps时,在Ni和NiFe合金中,Case I(电子阻止项全程开启)和Case II(e-ph被激活时,电子阻止项关闭)均会导致相同数量的残余损伤^[44],如图11(a,b)所示。由于在Ni和NiFe合金的级联碰撞事件中,速度等于或高于截止值的原子数量非常少(在4~162个原子之间变化),如图11(c)所示。因此,此时产生的残余缺陷数量的差异可以忽略不计,这可归因于辐照事件的统计差异。例如,当e-ph耦合激活时间为1 ps时,级联碰撞的高能量阶段已经结束,所有原子的速度均小于截止速度。因此,Case I和Case II在1 ps下e-ph耦合激活的结果差异是由于级联碰撞的统计差异造成的,如图11(a,b)所示。从图11(a)还可以看出,在Ni中,与0.2 ps的激活时间相比,1 ps的激活

时间会导致更多的损伤量。这是因为对于0.2 ps的激活时间,当级联碰撞被更快地淬灭时,能量也能比在1 ps激活的情况下更快地返回晶格原子。对于1 ps情况,电子子系统开始向原子子系统返回能量之前会有更多的时间耗散能量。因此,1 ps比0.2 ps激活时间会导致更多的损伤量。对于NiFe合金,这一差异小于金属Ni(图11(b)),这可能是因为Ni中发生的热传导更快。图12(a)和(b)显示了Ni和NiFe合金中最大电子温度,可以看出,Ni中的电子温度下降速度比NiFe合金快。图12(c)和(d)显示了相应的最高原子温度。通过比较e-ph耦合激活时间为1 ps的最大原子温度发现(图12(e)),对于较长的时间,NiFe合金的原子温度较高,这可能会增强缺陷复合。

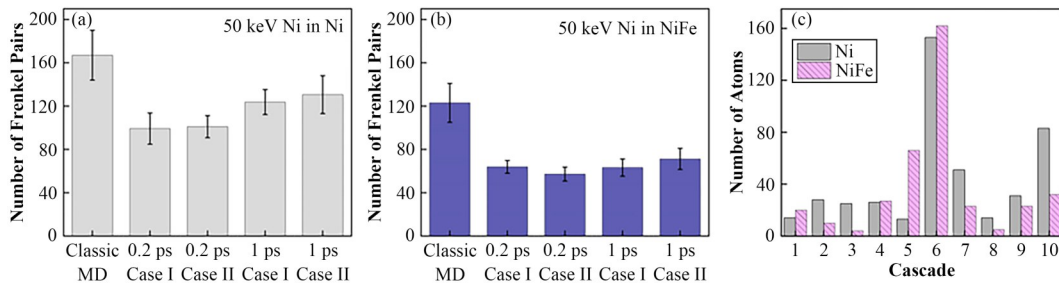


图11 在模拟时间结束时,Ni (a)和NiFe (b)合金中50 keV Ni级联碰撞的平均残余缺陷数,误差条表示10个级联事件的标准误差(经典MD模拟结果取自文献[42]),(c)当模拟时间为0.2 ps时,Ni和NiFe合金中速度高于截止速度的原子数^[44](彩图见网络版)

Fig.11 Average number of surviving defects (Frenkel pairs) at the end of the simulation time for 50 keV Ni cascades in Ni (a) and NiFe (b). The error bars represent the standard error for ten cascade events. The results of the classical MD simulations from Ref.[42] is provided for comparison, (c) the number of atoms with a velocity higher than the cut-off value at a 0.2 ps simulation time in Ni and NiFe^[44] (color online)

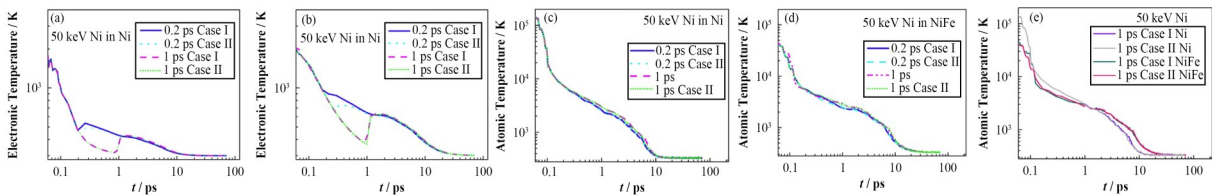


图12 在Ni离子级联碰撞过程中,Ni (a)和NiFe (b)合金的最高电子温度,在Ni (c)和NiFe (d)合金中与最高电子温度对应的最高原子温度,(e)显示当e-ph耦合激活时间为1 ps时,(c)和(d)中显示的最高原子温度的对比情况^[44](彩图见网络版)

Fig.12 Maximum electronic temperature for Ni ion cascades in Ni (a) and NiFe (b). Corresponding maximum atomic temperature in Ni (c) and NiFe (d). (e) Comparison between the maximum atomic temperature for a 1 ps e-ph coupling activation time shown in (c) and (d)^[44] (color online)

综合以上分析发现,电子能损效应在辐照能量较高的级联碰撞中影响更为显著,且采用2T-MD模型研究的级联碰撞过程中会产生更多的孤立点缺陷和更多的小尺寸团簇。电子阻止项的开关条件对产生的损伤的影响可以忽略不计,而电子-声子耦合激活时间的选择会影响残余缺陷的数量。

3.3 电子能损效应对NiPd合金辐照损伤的影响

Zarkadoula等^[45-46]研究了电子能损效应对NiPd

和NiFe合金辐照损伤的影响。结果发现,与电子阻止相比,2T-MD模型下产生的缺陷数更少(图13(a~c)),这与上述结论一致。通过比较几种合金辐照诱发孤立缺陷的百分比发现,除了NiFe合金间隙原子缺陷外,2T-MD模型通常会更多孤立的间隙原子和空位缺陷(图13(d~g))。与NiFe合金相比,辐照后NiPd合金会产生更多的Frenkel缺陷对。图14展示了2T-MD级联模拟NiPd和Ni₈₀Pd₂₀合金的原子温度和电子温度。从图14中可以发现,与电子

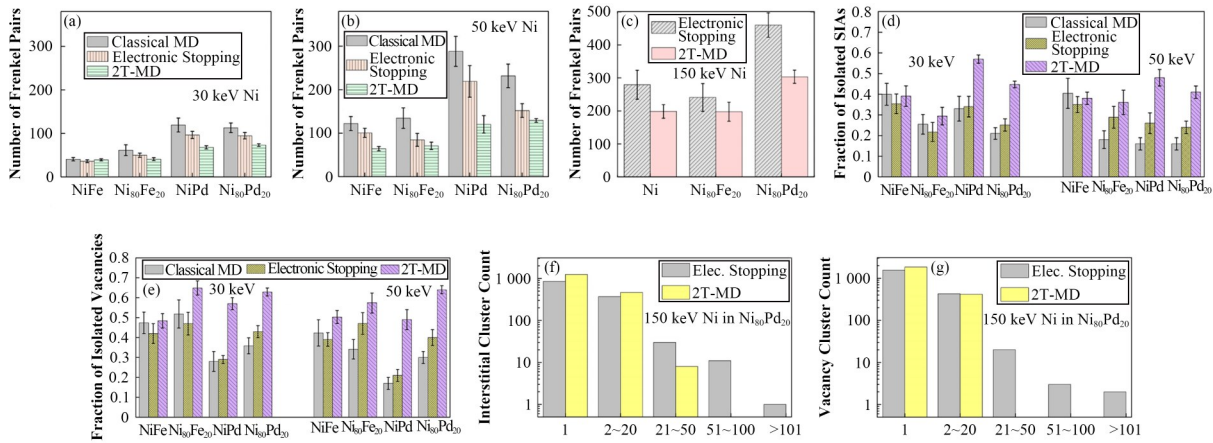


图 13 30 keV (a)、50 keV (b)和 150 keV (c) Ni 离子级联模拟产生的平均残余 Frenkel 对数^[45-46], 孤立的自间隙原子(d)和孤立的空位缺陷数(e)^[45], Ni₈₀Pd₂₀ 合金中间隙团簇数(f)和空位团簇数(g)^[46] (彩图见网络版)

Fig.13 Average number of surviving Frenkel pairs for 30 keV (a), 50 keV (b) and 150 keV (c) Ni ion cascades^[45-46], numbers of isolated self-interstitial atoms (d) and isolated vacancies (e)^[45], numbers of interstitial (f) and vacancy clusters (g) in Ni₈₀Pd₂₀^[46] (color online)

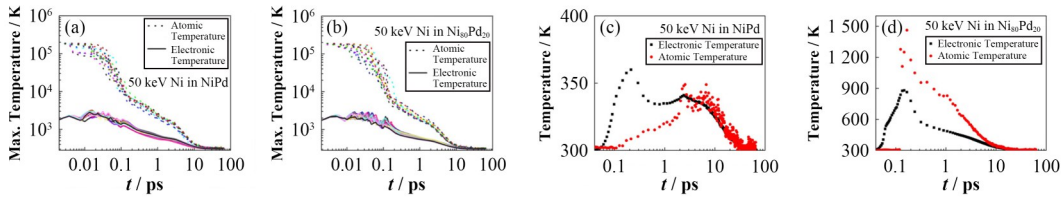


图 14 2T-MD 级联模拟 NiPd (a)和 Ni₈₀Pd₂₀ (b)网格中最大原子温度和电子温度, NiPd (c)和 Ni₈₀Pd₂₀ (d)模拟盒子中心格子的原子温度和电子温度^[45] (彩图见网络版)

Fig.14 Maximum atomic and electronic temperatures for 2T-MD cascade simulations of NiPd (a) and Ni₈₀Pd₂₀ (b), atomic and electronic temperatures of the center cell of the MD box in NiPd (c) and Ni₈₀Pd₂₀ (d)^[45] (color online)

温度相比,原子温度下降更快,直到 e-ph 耦合相互作用被激活时,原子温度下降才减慢,最终电子温度和原子温度达到平衡。即使图中观察到最高原子温度始终大于最高电子温度,但这种情况在模拟盒子的局部区域能够发生逆转,如图 14(b)所示。这是因为当 e-ph 相互作用被激活时,来自电子子系统的能量可以转移给原子子系统。这种能量转移可以增强缺陷复合,导致更少的残余缺陷(图 13(a,b)),同时也会影响团簇的形成,导致更多的孤立缺陷产生(图 13(d,e))。

4 总结与展望

本文综述了电子能损效应对碳化硅、碳化硅复合材料以及 Ni、NiFe、NiPd、Ni₈₀Fe₂₀ 和 Ni₈₀Pd₂₀ 等 Ni 基合金辐照缺陷影响的最新研究进展。研究发现, e-ph 耦合效应对辐照缺陷的形成和能量耗散速率等具有非常重要的影响。对 Ni 基合金而言,与经典 MD 相比,考虑电子阻止效应和 e-ph 耦合效应时的残余缺陷数较少,且同时考虑两种效应时的缺陷更少。电子能损效应还会影响缺陷团簇的形成,当考

虑 e-ph 耦合作用时,辐照体系会产生更多的孤立缺陷和小尺寸的缺陷团簇,尤其对于空位团簇的形成更为明显。同时,随着 e-ph 耦合强度的增加,体系产生的残余缺陷数减少,孤立缺陷和小团簇的数量增多。然而,这种辐照损伤行为与提高电子热导率时的结果相反。由于较高的电子热导率,电子子系统冷却更快,因此,可返回到原子子系统的能量减少,导致残余缺陷和大尺寸团簇数量增多。

尽管电子能损效应对靶材料辐照损伤的影响研究已取得了一定的进展,但是从辐照损伤机理和抗辐照材料的实际应用角度出发,高能粒子与靶材料相互作用过程中的电子能损效应的研究仍存在一些

1) 目前针对辐照能量、温度等条件对材料辐照损伤的影响已有大量的研究成果,而针对合金元素及种类变化对材料辐照损伤的影响还未有太多深入的研究。

2) 目前电子能损效应对 Ni 基多主元固溶体辐照损伤影响的研究重点在于二元或三元的单相合金,对于四元及以上的多主元高熵合金,电子能损效应对其辐照损伤影响的研究报道较少,而多主元高

合金被认为是未来核聚变反应堆和先进核裂变装置重要的候选结构材料,因此,研究电子能损效应对多主元高熵合金辐照损伤的影响具有重要理论意义和工程应用价值。

3)当前电子能损效应对多主元固溶体合金辐照损伤影响的研究重点在于过渡族FCC固溶体合金,但其高温性能并不突出。相比于过渡族FCC固溶体合金,难熔固溶体合金在高温环境下具有明显的性能优势。然而,当前电子能损效应对难熔固溶体合金辐照损伤影响的研究仍较少。

因此,针对以上存在的问题,提出以下三方面的研究,有待未来进一步开展。

一,需要从多方面继续开展研究材料辐照损伤的影响因素,尤其在合金元素及种类变化方面还需进行深入探讨其对材料辐照损伤的影响规律和机理。

二,开展电子能损效应对Ni基多主元固溶体合金辐照损伤的影响研究,分析辐照诱发损伤的程度,探索主元的种类和数量与电子能损效应之间的关系,揭示Ni基多主元固溶体合金辐照损伤的机理。

三,加强电子能损效应对低活化、难熔多主元固溶体合金辐照损伤影响的研究,探究电子阻止效应、e-ph耦合效应和电子热导率等因素分别对其辐照损伤的影响,阐明难溶固溶体合金辐照损伤的机理,为相关实验工作的开展提供重要的理论指导。

此外,针对分子模拟方法用于研究材料辐照损伤机理方面提出了以下展望:

MD模拟的精确性主要依赖于势函数的选择。选择合理的势函数不仅能够准确地计算体系的一系列物理性质,如晶格常数、弹性常数、内聚能等,还能够很好地预测辐照缺陷的一些关键性质,如缺陷的形成能和迁移能等。所以,为了更加准确地描述材料的辐照损伤行为和进一步提高计算的精确度,还需对已有的势函数进行更完善的修正,构建出更加理想的势函数。

其次,目前使用的双温度模型存在多个计算参数,如电子比热、电子热导率、电子-声子耦合系数等,而部分参数与温度有关,准确确定这些参数仍然存在一些困难,特别在辐照损伤过程中,无论是原子子系统还是电子子系统的温度均是变化的,因此,为了更加准确描述材料辐照损伤过程,还需要对双温度模型的计算参数进行修正,充分考虑温度、缺陷结构等的影响。由于机器学习是一种通过大量数据自动学习的技术,所以可以借助机器学习方法,统计足够多的模拟来克服级联碰撞的高度随机性,研究双温度模型的计算参数对级联碰撞的影响,将使材料

辐照损伤的理论模拟更加准确和真实。

作者贡献声明 徐姜炜负责收集文献及起草文章;张超负责策划、技术指导和审阅;毛飞负责技术指导,对文章的知识性内容作批评性审阅;张丰收负责整体策划、技术指导。

参考文献

- 1 Toulemonde M, Weber W J, Li G S, *et al.* Synergy of nuclear and electronic energy losses in ion-irradiation processes: the case of vitreous silicon dioxide[J]. *Physical Review B*, 2011, **83**(5): 054106. DOI: [10.1103/physrevb.83.054106](https://doi.org/10.1103/physrevb.83.054106).
- 2 Zhang J M, Lang M, Devanathan R, *et al.* Nanoscale phase transitions under extreme conditions within an ion track[J]. *Journal of Materials Research*, 2010, **25**(7): 1344 - 1351. DOI: [10.1557/JMR.2010.0180](https://doi.org/10.1557/JMR.2010.0180).
- 3 Debelle A, Backman M, Thomé L, *et al.* Combined experimental and computational study of the recrystallization process induced by electronic interactions of swift heavy ions with silicon carbide crystals[J]. *Physical Review B*, 2012, **86**(10): 100102. DOI: [10.1103/physrevb.86.100102](https://doi.org/10.1103/physrevb.86.100102).
- 4 李莹, 李健健, 付崇龙, 等. 选区激光熔化成形的304L不锈钢的Xe离子辐照损伤研究[J]. *核技术*, 2021, **44**(7): 070201. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.070201](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.070201).
LI Ying, LI Jianjian, FU Chonglong, *et al.* Damage characteristics of selective laser melted 304L stainless steel under Xe ion irradiation[J]. *Nuclear Techniques*, 2021, **44**(7): 070201. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.070201](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.070201).
- 5 许红霞, 林俊, 朱智勇, 等. 燃料元件基体石墨Xe离子辐照缺陷的慢正电子束研究[J]. *核技术*, 2022, **45**(10): 100204. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.100204](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.100204).
XU Hongxia, LIN Jun, ZHU Zhiyong, *et al.* Slow positron beam study on defects induced by Xe ions irradiation in matrix graphite of fuel elements[J]. *Nuclear Techniques*, 2022, **45**(10): 100204. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.100204](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.100204).
- 6 Zhang Y W, Aidhy D S, Varga T, *et al.* The effect of electronic energy loss on irradiation-induced grain growth in nanocrystalline oxides[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014, **16**(17): 8051 - 8059. DOI: [10.1039/C4CP00392F](https://doi.org/10.1039/C4CP00392F).
- 7 Zhang Y, Varga T, Ishimaru M, *et al.* Competing effects of electronic and nuclear energy loss on microstructural evolution in ionic-covalent materials[J]. *Nuclear*

- Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms, 2014, **327**: 33 - 43. DOI: [10.1016/j.nimb.2013.10.095](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2013.10.095).
- 8 Weber W J, Duffy D M, Thomé L, *et al.* The role of electronic energy loss in ion beam modification of materials[J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2015, **19**(1): 1 - 11. DOI: [10.1016/j.cossms.2014.09.003](https://doi.org/10.1016/j.cossms.2014.09.003).
- 9 Zhang Y W, Egami T, Weber W J. Dissipation of radiation energy in concentrated solid-solution alloys: unique defect properties and microstructural evolution[J]. *MRS Bulletin*, 2019, **44**(10): 798 - 811. DOI: [10.1557/mrs.2019.233](https://doi.org/10.1557/mrs.2019.233).
- 10 赵中华, 渠广昊, 姚佳池, 等. 热峰作用下单斜 ZrO₂ 相变过程的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2021, **70**(13): 355 - 362. DOI: [10.7498/aps.70.20201861](https://doi.org/10.7498/aps.70.20201861).
ZHAO Zhonghua, QU Guanghao, YAO Jiachi, *et al.* Molecular dynamics simulation of phase transition by thermal spikes in monoclinic ZrO₂[J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, **70**(13): 355 - 362. DOI: [10.7498/aps.70.20201861](https://doi.org/10.7498/aps.70.20201861).
- 11 Szenes G, Toth L. Basic restrictions for theories of ion-induced track formation: ignored relationships between experimental data[J]. *Physica Scripta*, 2019, **94**(11): 115810. DOI: [10.1088/1402-4896/ab300c](https://doi.org/10.1088/1402-4896/ab300c).
- 12 靳博, 魏龙, 牛犇, 等. 离子在近电子能损阈值能区诱发云母表面小丘形成[J]. *原子能科学技术*, 2019, **53**(5): 769 - 775. DOI: [10.7538/yzk.2018.youxian.0478](https://doi.org/10.7538/yzk.2018.youxian.0478).
JIN Bo, WEI Long, NIU Ben, *et al.* Formation of hillock on muscovite mica surface induced by energetic ion near electronic energy loss threshold[J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 2019, **53**(5): 769 - 775. DOI: [10.7538/yzk.2018.youxian.0478](https://doi.org/10.7538/yzk.2018.youxian.0478).
- 13 Sellami N, Debelle A, Ullah M W, *et al.* Effect of electronic energy dissipation on strain relaxation in irradiated concentrated solid solution alloys[J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2019, **23**(2): 107 - 115. DOI: [10.1016/j.cossms.2019.02.002](https://doi.org/10.1016/j.cossms.2019.02.002).
- 14 曾利霞, 周贤明, 梅策香, 等. 质子轰击钨靶表面时的电子发射产额与靶温度的相关性研究[J]. *原子核物理评论*, 2022, **39**(2): 232 - 237. DOI: [10.11804/NuclPhysRev.39.2022004](https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.39.2022004).
ZENG Lixia, ZHOU Xianming, MEI Cexiang, *et al.* Study on the correlation between electron emission yield and temperature of tungsten target bombarded by H⁺ ion [J]. *Nuclear Physics Review*, 2022, **39**(2): 232 - 237. DOI: [10.11804/NuclPhysRev.39.2022004](https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.39.2022004).
- 15 Darkins R, Duffy D M. Modelling radiation effects in solids with two-temperature molecular dynamics[J]. *Computational Materials Science*, 2018, **147**: 145 - 153. DOI: [10.1016/j.commatsci.2018.02.006](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.006).
- 16 Rutherford A M, Duffy D M. The effect of electron-ion interactions on radiation damage simulations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, **19**(49): 496201. DOI: [10.1088/0953-8984/19/49/496201](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/49/496201).
- 17 Duffy D M, Rutherford A M. Including the effects of electronic stopping and electron-ion interactions in radiation damage simulations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, **19**(1): 016207. DOI: [10.1088/0953-8984/19/1/016207](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/1/016207).
- 18 Ivanov D S, Zhigilei L V. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films[J]. *Physical Review B*, 2003, **68**(6): 064114. DOI: [10.1103/physrevb.68.064114](https://doi.org/10.1103/physrevb.68.064114).
- 19 Schafer W A, Bowman D A, Carroll J M. Map-based navigation in a graphical MOO[J]. *XRDS: Crossroads, the ACM Magazine for Students*, 2002, **9**(1): 8 - 15. DOI: [10.1145/571758.571764](https://doi.org/10.1145/571758.571764).
- 20 Lin Z H, Guan C J, Feng X L, *et al.* Synthesis of macroreticular p- (ω -sulfonic-perfluoroalkylated) polystyrene ion-exchange resin and its application as solid acid catalyst[J]. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, 2006, **247**(1 - 2): 19 - 26. DOI: [10.1016/j.molcata.2005.11.008](https://doi.org/10.1016/j.molcata.2005.11.008).
- 21 Duvenbeck A, Sroubek F, Sroubek Z, *et al.* Computer simulation of low-energy electronic excitations in atomic collision cascades[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2004, **225**(4): 464 - 477. DOI: [10.1016/j.nimb.2004.05.021](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2004.05.021).
- 22 Duvenbeck A, Sroubek Z, Wucher A. Electronic excitation in atomic collision cascades[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2005, **228**(1 - 4): 325 - 329. DOI: [10.1016/j.nimb.2004.10.065](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2004.10.065).
- 23 Duvenbeck A, Wucher A. Low-energy electronic excitation in atomic collision cascades: a nonlinear transport model[J]. *Physical Review B*, 2005, **72**(16): 165408. DOI: [10.1103/physrevb.72.165408](https://doi.org/10.1103/physrevb.72.165408).
- 24 Caro A, Victoria M. Ion-electron interaction in molecular-dynamics cascades[J]. *Physical Review A*, 1989, **40**(5): 2287 - 2291. DOI: [10.1103/physreva.40.2287](https://doi.org/10.1103/physreva.40.2287).

- 25 Zhurkin E E, Kolesnikov A S. Atomic scale modelling of Al and Ni(111) surface erosion under cluster impact[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms, 2003, **202**: 269 - 277. DOI: [10.1016/S0168-583X\(02\)01868-2](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)01868-2).
- 26 刘翠翠, 李治明, 韩金华, 等. 碳化硅结势垒肖特基二极管质子辐照损伤研究[J]. 核技术, 2023, **46**(2): 020203. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.020203](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.020203).
LIU Cuicui, LI Zhiming, HAN Jinhua, *et al.* Proton irradiation damage in silicon carbide junction barrier Schottky diode[J]. Nuclear Techniques, 2023, **46**(2): 020203. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.020203](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.020203).
- 27 刘翠翠, 郭刚, 李治明, 等. SiC MOSFET单粒子效应研究现状[J]. 核技术, 2022, **45**(1): 010001. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.010001](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.010001).
LIU Cuicui, GUO Gang, LI Zhiming, *et al.* Recent research progress of single particle effect of SiC MOSFET [J]. Nuclear Techniques, 2022, **45**(1): 010001. DOI: [10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.010001](https://doi.org/10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.010001).
- 28 Fang X Y, Wang K, Hou Z L, *et al.* Electronic scattering leads to anomalous thermal conductivity of n-type cubic silicon carbide in the high-temperature region[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2012, **24**(44): 445802. DOI: [10.1088/0953-8984/24/44/445802](https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/44/445802).
- 29 Wu J T, Xu Z, Zhao J, *et al.* MD simulation of two-temperature model in ion irradiation of 3C-SiC: effects of electronic and nuclear stopping coupling, ion energy and crystal orientation[J]. Journal of Nuclear Materials, 2021, **557**: 153313. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2021.153313](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153313).
- 30 Zhang C, Mao F, Zhang F S. Electron-ion coupling effects on radiation damage in cubic silicon carbide[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2013, **25**(23): 235402. DOI: [10.1088/0953-8984/25/23/235402](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/23/235402).
- 31 Katoh Y, Ozawa K, Shih C, *et al.* Continuous SiC fiber, CVI SiC matrix composites for nuclear applications: properties and irradiation effects[J]. Journal of Nuclear Materials, 2014, **448**(1 - 3): 448 - 476. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2013.06.040](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.06.040).
- 32 Nozawa T, Ozawa K, Choi Y B, *et al.* Determination and prediction of axial/off-axial mechanical properties of SiC/SiC composites[J]. Fusion Engineering and Design, 2012, **87**(5 - 6): 803 - 807. DOI: [10.1016/j.fusengdes.2012.02.026](https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2012.02.026).
- 33 Zhang C, Song H Z, Mao F, *et al.* Molecular dynamics simulation of irradiation damage of SiC/Gra/SiC composites[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms, 2017, **406**: 470 - 474. DOI: [10.1016/j.nimb.2017.04.068](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.04.068).
- 34 Senkov O N, Wilks G B, Miracle D B, *et al.* Refractory high-entropy alloys[J]. Intermetallics, 2010, **18**(9): 1758 - 1765. DOI: [10.1016/j.intermet.2010.05.014](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014).
- 35 Chuang M H, Tsai M H, Wang W R, *et al.* Microstructure and wear behavior of $Al_xCo_{1.5}CrFeNi_{1.5}Ti_y$ high-entropy alloys[J]. Acta Materialia, 2011, **59**(16): 6308 - 6317. DOI: [10.1016/j.actamat.2011.06.041](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.06.041).
- 36 Ma S G, Zhang Y. Effect of Nb addition on the microstructure and properties of AlCoCrFeNi high-entropy alloy[J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, **532**: 480 - 486. DOI: [10.1016/j.msea.2011.10.110](https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.10.110).
- 37 Zhang Y, Zuo T T, Tang Z, *et al.* Microstructures and properties of high-entropy alloys[J]. Progress in Materials Science, 2014, **61**: 1 - 93. DOI: [10.1016/j.pmatsci.2013.10.001](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001).
- 38 Wu Z, Bei H, Pharr G M, *et al.* Temperature dependence of the mechanical properties of equiatomic solid solution alloys with face-centered cubic crystal structures[J]. Acta Materialia, 2014, **81**: 428 - 441. DOI: [10.1016/j.actamat.2014.08.026](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.08.026).
- 39 Wu Z, Bei H, Otto F, *et al.* Recovery, recrystallization, grain growth and phase stability of a family of FCC-structured multi-component equiatomic solid solution alloys[J]. Intermetallics, 2014, **46**: 131 - 140. DOI: [10.1016/j.intermet.2013.10.024](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2013.10.024).
- 40 Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber W J. Effects of electron-phonon coupling on damage accumulation in molecular dynamics simulations of irradiated nickel[J]. Materials Research Letters, 2019, **7**(12): 490 - 495. DOI: [10.1080/21663831.2019.1659435](https://doi.org/10.1080/21663831.2019.1659435).
- 41 Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber W J. Effects of electron-phonon coupling and electronic thermal conductivity in high energy molecular dynamics simulations of irradiation cascades in nickel[J]. Computational Materials Science, 2019, **162**: 156 - 161. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.02.039](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.039).
- 42 Zarkadoula E, Samolyuk G, Xue H, *et al.* Effects of two-temperature model on cascade evolution in Ni and NiFe [J]. Scripta Materialia, 2016, **124**: 6 - 10. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2016.06.028](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.06.028).
- 43 Zhang Y W, Stocks G M, Jin K, *et al.* Influence of chemical disorder on energy dissipation and defect

- evolution in concentrated solid solution alloys[J]. *Nature Communications*, 2015, **6**: 8736. DOI: [10.1038/ncomms9736](https://doi.org/10.1038/ncomms9736).
- 44 Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber W J. Effects of the electron-phonon coupling activation in collision cascades [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2017, **490**: 317 - 322. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2017.04.020](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.04.020).
- 45 Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber W J. Effects of electronic excitation on cascade dynamics in nickel-iron and nickel-palladium systems[J]. *Scripta Materialia*, 2017, **138**: 124 - 129. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2017.05.041](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2017.05.041).
- 46 Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber W J. Effects of electronic excitation in 150 keV Ni ion irradiation of metallic systems[J]. *AIP Advances*, 2018, **8**(1): 015121. DOI: [10.1063/1.5016536](https://doi.org/10.1063/1.5016536).