DOI:10.19431/j. cnki. 1673-0062.2021.05.010

6H-SiC 辐照条件下缺陷形成过程的分子动力学模拟

周群颂^{1,2},何红字^{1,2},蒋尚廷²,李 晔²,吴沁懋^{1,2}, 陈志勇^{1,2},朱卫华^{1,2},王新林^{1,2*}

(1. 南华大学 电气工程学院,湖南 衡阳 421001;2. 超快微纳技术与激光先进制造湖南省重点实验室,湖南 衡阳 421001)

摘 要: 辐照环境会使材料出现位移损伤, 在材料内部产生缺陷。为了研究 6H-SiC 晶体材料在受到辐照时缺陷的形成过程,基于分子动力学方法, 采用 LAMMPS 软件 模拟了 6H-SiC 材料在不同辐照能量、不同温度时辐照缺陷的形成过程, 也进一步探 究了材料屈服强度受辐照的影响。结果表明, 缺陷数目随辐照能量增大而增多, 且呈 线性关系, 温度对缺陷数目的影响无明显规律, 屈服强度随辐照能量增大而减小, 并 且受到拉伸方向的影响。 关键词: 6H-SiC; 分子动力学; 位移损伤; 屈服强度 中图分类号: TN304.24 文献标志码: A

文章编号:1673-0062(2021)05-0063-05

Molecular Dynamics Simulation of Defect Formation Under Irradiation for 6H-SiC

ZHOU Qunsong^{1,2}, HE Hongyu^{1,2}, JIANG Shangting², LI Ye², WU Qingmao^{1,2}, CHEN Zhiyong^{1,2}, ZHU Weihua^{1,2}, WANG Xinlin^{1,2*}

(1. School of Electrical Engineering, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China;
2. Hunan Key Laboratory of Ultrafast Micro-Nano Technology and Laser Advanced Manufacturing, Hengyang, Hunan 421001, China)

Abstract: Irradiated environment will cause the material displacement damage and produce defects in the material. In order to study the defect formation process of 6H-SiC crystal material when it is irradiated, based on molecular dynamics method, LAMMPS software is used to simulate the formation process of radiation defect of 6H-SiC material at different irradiation energy and temperature, and the effect of radiation on the yield strength of the material is further explored. The results show that the number of defects increases linearly

收稿日期:2021-04-13

作者简介:周群颂(1996—),男,硕士研究生,主要从事射线辐照半导体材料方面的研究。E-mail:1565299246@qq. com。*通信作者:王新林(1970—),男,教授,博士,主要光电子与激光技术及应用方面的研究。E-mail: wxl_ly000@ aliyun. com

with the increase of irradiation energy, the effect of temperature on the number of defects has no obvious rule, and the yield strength decreases with the increase of irradiation energy and is affected by the tensile direction.

key words:6H-SiC; molecular dynamics; displacement damage; yield strength

0 引 言

6H-SiC 作为第三代半导体中的典型材料,具 有宽带隙、高击穿电压和较高饱和电子迁移率等优 点,可应用于防辐射电子器件和核反应堆屏蔽 层^[1-3]。在辐照条件下,6H-SiC 的电学性能和力学 性能会受到影响,原因是辐照会使材料内部产生缺 陷。因此,探究缺陷的形成过程具有重要意义。

SiC 在辐照条件下缺陷的形成过程引起了广 泛的关注。R. Devanathan 和 W. J. Weber 等人研 究了 SiC 的位移阈值能量,发现其具有很强的各 向异性^[4-6]。F. Gao 等人采用从头算的模拟方法 研究了 SiC 中缺陷的构型和性质,小空位缺陷簇 的原子结构,SiC 形成能、结合能与缺陷簇大小的 关系^[7]。C. Liu 等人统计分析了 SiC 在辐照条件 下级联碰撞产生缺陷簇组成和大小,并给出了空 位和间隙的团簇尺寸分布规律^[8]。张修瑜等人 模拟了 6H-SiC 的线性级联碰撞过程,分析了初级 碰撞原子(primary knock-on atom,PKA)种类和能 量对点缺陷和化学无序的影响^[9]。何涛用分子 动力学方法模拟了 4H-SiC 在辐照条件下 PKA 能 量对级联碰撞的影响^[10],分析了缺陷的变化规 律,但未考虑其它因素的影响。

目前的研究主要针对 SiC 中缺陷的产生及演 变,而对于缺陷导致的宏观性能的研究较少,本文 引入热浴层来探究温度和辐照能量对 6H-SiC 缺 陷演化的影响,以及产生的缺陷对 6H-SiC 屈服强 度的影响。可为研究辐照条件下 6H-SiC 的电学 和力学性能变化提供理论依据。

1 模型与方法

本研究采用的是 LAMMPS(large-scale atomic/ molecular massively parallel simulator)^[11]分子动力 学模拟软件。6H-SiC 原始晶胞结构如图 1 所示,是 一种六方晶体结构。因为 LAMMPS 对立方晶胞的 计算 更方便,所以先将 6H-SiC 转化为立方晶 胞^[12],晶胞划分方式如图 2 所示。6H-SiC 的原始 晶格参数为a=b=0.308 06 nm,c=1.511 73 nm,转 化为立方晶体结构的晶格参数为a=0.308 06 nm, b=0.533 58 nm,c=1.511 73 nm,之后再将其周期

性扩充成超晶胞。为了提高模拟效率,本文对超 晶胞的大小进行调整以适应不同大小的能量, 2 keV 及以下对应的超胞大小为 $40a \times 24b \times 10c$,包 含 230 400 个原子。2 keV 到 10 keV 对应的超胞 大小为48a×30b×12c.包含414 720个原子。模拟 方法是在中心区域上方的小范围内随机选择一个 Si 原子作为 PKA,并以与 Z 轴夹角 7°的速度入射, 以此方式模拟辐照能量的加载。模拟过程均采用 三位周期性边界条件。势函数采用的是 Tersoff/ ZBL^[13-15], Tersoff 势函数可以描述原子间的长程作 用力,ZBL 势函数可以描述原子在碰撞时的短程作 用力。在探究温度对缺陷形成过程的影响时,整个 模型先在正则系综下弛豫 20 ps,之后设置外围 1.5 nm 厚度的原子为热浴层,采用 langevin 热浴方 法控温(如图3所示),再将模型在微正则系综下模 拟级联碰撞的过程。在模拟辐照后力学性能时,先 将模型在等温等压系综下弛豫 20 ps 以消除初始应 力,之后再将模型以1%的形变率分别沿Z轴和X 轴拉伸,共150步,测其应力-应变曲线。



图 1 6H-SiC 原始晶胞结构 Fig. 1 Original cell structure of 6H-SiC



图 2 晶胞结构转化示意图 Fig. 2 Schematic diagram of cell structure transformation



图 3 外层热浴示意图 Fig. 3 Schematic diagram of outer hot bath

2 结果分析与讨论

2.1 辐照能量对级联碰撞的影响

缺陷类型用 OVITO (the open visualization tool)软件^[16]中的 Wigner-Seitz 模块来分析。图 4 (a)是不同能量的 PKA 入射后, Frenkel 缺陷对(由

一个空位和一个间隙原子组成)的数目随时间的 演化的结果,呈类似的趋势:首先由于级联碰撞迅 速增加,在0.2 ps内达到峰值,然后由于缺陷复 合逐渐减少,在2 ps 之后趋于稳定,该趋势与前 人对 4H-SiC 和 Si 的研究^[17-18]一致。由于能量越 高,到达峰值所需要的时间也越长,并且, Frenkel 缺陷对无论是峰值数量还是最后趋于稳定时的数 量,都与 PKA 的能量呈线性关系,如图 4(b) 所 示。图 4(c)、(d)展示的 C 空位和 Si 空位的演化 规律,空位的演化规律与 Frenkel 缺陷对类似,但 数量上以 C 空位居多,这是由于 C 的相对原子质 量比 Si 小,所以所需要的离位阈值能量较低^[5]。 图 4(e)、(f)展示的是反位原子的变化,反位原子 Sic 表示 Si 原子取代了原来晶格上的 C 原子,反 位原子 Cs 则是表示 C 原子取代了原晶格位置的 Si 原子,反位原子 Csi 在能量较低时很难产生,但 在能量较高时的数目会增加。





2.2 温度对级联碰撞的影响

图 5(a)为 PKA 在 4 keV 情况时不同温度下的缺陷演化过程,峰值时的缺陷对数量在 800 K 条件时最多,在缺陷复合之后稳定阶段时的缺陷 对数量在 100 K 时最多,随着温度的升高缺陷数 量总体趋势上减少。图 5(b)为不同温度条件下 的缺陷复合率,100 K 时的缺陷复合率为 35%,而 随着温度的增加,复合率在 300 K 时可达 45%,这 是由于高温加剧了原子的热运动,增加了空位与 间隙原子的复合率,导致缺陷数减少。

2.3 6H-SiC 力学性能的辐照影响

微观层面的缺陷会对宏观性能产生影响,力

学性能是其中之一。应力-应变曲线是反映材料 力学性能的重要参数^[19],为探究辐照能量对 6H-SiC 力学性能的影响,将模拟了辐照后的模型分 别沿 *X* 和 *Z* 方向拉伸,测得的应力-应变曲线如图 6 所示,缺陷浓度与屈服强度的关系如图 7 所示。 由应力-应变曲线得出,辐照后材料的屈服强度比 起辐照前有所下降,沿 Z 轴拉伸时,无辐照材料的 屈服强度为 129 GPa,6 keV 和 10 keV 辐照时的 屈服强度分别为 122 GPa 和 118 GPa。沿 X 轴拉 伸时,无辐照材料的屈服强度为 105 GPa,6 keV 和 10 keV 辐照时的屈服强度分别为 103.6 GPa 和 101.7 GPa。屈服强度降低的的原因是缺陷越 多在拉伸时缺陷簇更容易演化,形成位错,从而更 早的发生屈服现象。在沿 Z 轴拉伸时缺陷浓度 对屈服强度的影响大于沿 X 轴拉伸,这是因为 6H-SiC 结构上具有各向异性。



图 5 四种缺陷在不同温度下级联碰撞时随时间的演化

Fig. 5 Evolution of four kinds of defects in cascade collision at different temperatures



Fig. 6 Stress-strain curve



Fig. 7 Relationship between defect concentration and yield strength

3 结 论

采用分子动力学方法模拟了辐照环境中6H-SiC 不同点缺陷类型在不同环境条件下的演变规 律,包括不同的 PKA 能量,不同的温度,也模拟了 辐照对 6H-SiC 力学性能的影响,结论如下:

1)不同 PKA 能量下缺陷数均在 0.2 ps 内急 剧增加并在 1 ps 左右减少至稳定值,较低的能量 不容易产生反位原子 CSi。

2)在100 K~1 000 K范围内温度对缺陷数 目的影响无明显规律。

3) 辐照会降低 6H-SiC 的屈服强度,并且辐照能量越强,屈服强度越小。

上述结论可为探究 6H-SiC 在辐照下的电学 性质提供理论基础,也可为 6H-SiC 在核工业中力 学性能的研究提供理论依据。

参考文献:

- [1] FENICI P, REBELO A J F, JONES R H, et al. Current status of SiC/SiC composites R&D[J]. Journal of nuclear materials, 1998, 258:215-225.
- [2] NEUDECK P G. Progress in silicon carbide semiconductor electronics technology[J]. Journal of electronic materials, 1995,24(4):283-288.
- [3] CASADY J B, JOHNSON R W. Status of silicon carbide (SiC) as a wide-bandgap semiconductor for high-temperature applications: A review [J]. Solid-state electronics, 1996, 39(10):1409-1422.
- [4] DEVANATHAN R, DE LA RUBIA T D, WEBER W J. Displacement threshold energies in β -SiC[J]. Journal of nuclear materials, 1998, 253 (1/2/3) :47-52.
- [5] JIANG W, WEBER W J, THEVUTHASAN S, et al. Dis-

placement energy measurements for ion-irradiated 6H-SiC[J]. Nuclear instruments and methods in physics research section B: Beam interactions with materials and atoms, 1999, 148(1/2/3/4):557-561.

- [6] DEVANATHAN R, WEBER W J. Displacement energy surface in 3C and 6H SiC[J]. Journal of nuclear materials, 2000,278(2/3):258-265.
- [7] 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 section B:Beam interactions with materials and atoms, 2009, 267(18):2995-2998.
- [8] LIU C, SZLUFARSKA I. Distribution of defect clusters in the primary damage of ion irradiated 3C-SiC[J]. Journal of nuclear materials, 2018, 509:392-400.
- [9] 张修瑜,陈晓菲,王浩,等.6H-SiC 辐照点缺陷诱发化 学无序的分子动力学分析[J].无机材料学报,2020, 35(8):889-894.
- [10] 何涛,何红宇,周媛,等.分子动力学模拟4H-SiC 辐照下 缺陷形成机理[J].光电技术用,2017,32(5):45-51.
- [11] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of computational physics, 1995, 117(1):1-19.
- [12] LI W, WANG L, BIAN L, et al. Threshold displacement energies and displacement cascades in 4H-SiC: Molecular dynamic simulations [J]. AIP Advances, 2019,9(5):55007.
- [13] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [J]. Physical review B, 1989, 39(8):5566-5568.
- [14] TERSOFF J. Carbon defects and defect reactions in silicon[J]. Physical review letters, 1990,64(15):1757.
- [15] BIERSACK J P, ZIEGLER J F. Refined universal potentials in atomic collisions[J]. Nuclear instruments and methods in physics research, 1982, 194(1/2/3):93-100.
- [16] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool[J]. Modelling and simulation in materials science and engineering, 2009, 18(1):015012.
- [17] 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,2013:44-47
- [18] ZHOU Y, CHEN B, HE H, et al. Displacement cascades in monocrystalline silicon: Effects of temperature, strain, and PKA energy [J]. Nuclear technology, 2020, 206(1): 32-39.
- [19] WEN Y H, ZHU Z Z, ZHU R Z. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects[J]. Computational materials science, 2008,41(4):553-560.