材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2023080104

光电半导体材料辐照诱发微观缺陷的演化特性研究

王兴鸿[1]，王祖军[2*]，蔡星会[1*]，尹利元[3]，唐　宁[4]，晏石兴[4]，李传洲[4]

（1. 西安高科技研究所，西安 710025；2. 西北核技术研究所 强脉冲辐射环境模拟与效应全国重点实验室，西安 710024；
3. 兰州大学 核科学与技术学院 教育部特殊功能材料与结构设计重点实验室 稀有同位素前沿科学中心，兰州 730000；
4. 湘潭大学 材料科学与工程学院，湖南 湘潭 411105）

摘　要： 基于分子动力学计算方法，运用LAMMPS程序模拟了Si，GaAs，3C-SiC三种半导体材料中辐照引起的级联碰撞过程，并分析了晶体内微观缺陷的演化特性。模拟结果表明，级联碰撞会在晶体内部形成类似离位峰的结构，大多数空位缺陷聚集在损伤区域内部，而损伤区域外围分布的主要是间隙缺陷。通过对三种材料进行缺陷簇分析，发现Si中缺陷簇数量明显多于GaAs，缺陷簇最大尺寸达到了17个原子。此外，三种材料中的Frenkel对的数量变化过程大致相同，均呈现“上升，下降，稳定”的趋势，但3C-SiC中的缺陷数量要远小于Si和GaAs，表明3C-SiC具有更好的辐射抗性，其晶体结构在受到辐照后仍能保持相对稳定。

关键词： 半导体材料；辐照损伤；级联碰撞；分子动力学；缺陷

中图分类号： TN304　**文章编号：** 1001－5868(2023)06－0869－07

Characteristics of Defects Evolution in Photoelectric Semiconductor Materials Induced by Irradiation

WANG Xinghong[1], WANG Zujun[2], CAI Xinghui[1], YIN Liyuan[3], TANG Ning[4], YAN Shixing[4], LI Chuanzhou[4]

(1. Xi'an Research Institute of High-Technology, Xi'an 710025, CHN; 2. National Key Laboratory of Intense Pulsed Radiation Simulation and Effect, Northwest Institute of Nuclear Technol., Xi'an 710024, CHN; 3. Frontiers Science Center for Rare Isotopes, School of Nuclear Science and Techno., the Key Laboratory of Special Functional Materials and Structural Design, Ministry of Education, Lanzhou University, Lanzhou 730000, CHN; 4. School of Materials Science and Engin., Xiangtan University, Xiangtan 411105, CHN)

Abstract: Based on the Molecular Dynamics calculation method, the cascade collision process induced by Si, GaAs and 3C-SiC was simulated by using LAMMPS, and the evolution characteristics of the microscopic defects within the crystals were analyzed. The simulation results show that the cascade collision will form a structure similar to the displacement spike inside the crystal, and most of the vacancy defects gather inside the damage region, while the periphery of the damage region was mainly distributed with interstitial defects. Through clusters analysis in the three materials, it is found that the number and size of clusters in Si are more than that in GaAs, and the maximum size of the defect clusters reaches 17 atoms. Besides, the number of Frenkel pairs in the three materials changes in the same way, showing the trend of "rising, falling and stabilizing". However, the number of defects in 3C-SiC is much smaller than that in Si and GaAs, indicating that 3C-SiC has better radiation resistance and its crystal structure remains relatively stable after irradiation.

Key words: semiconductor materials; radiation damage; cascade collision; molecular dynamics; defect

收稿日期：2023－08－01.

基金项目：国家自然科学基金项目(U2167208,11875223)；全国重点实验室基金项目(NKLIPR1803,2012,2113).

* **通信作者：**王祖军，蔡星会　**E-mail：** wzj029@qq.com；huixing1975@sina.com

0 引言

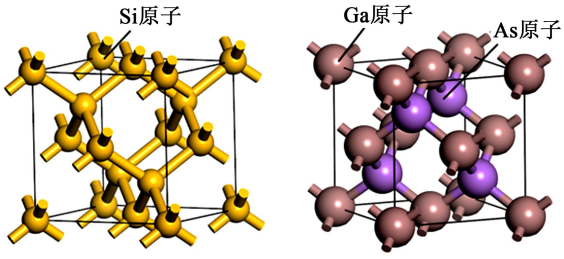
随着半导体材料的不断发展，由其衍生出的各类新型光电器件在更多领域发挥了不可替代的作用。近年来，随着人们加快对空间环境的探索以及核设施建设与应用的规模逐渐增大，对能够在空间辐射环境或核辐射环境下正常工作的光电器件的需求也更加迫切，这对光电器件抗辐照性能也提出了更大的挑战。

光电器件的辐照损伤效应涉及晶格原子位移、载流子输运和宏观参数变化等物理过程，是一个涵盖多时间和空间维度的研究课题[1-3]。国内外有关研究大多以辐照实验为主，分析不同粒子辐照环境对光电器件的影响[4-11]。但辐照实验需要借助粒子加速器或反应堆等装置，耗费大量的人力物力，研究的内容也大多局限于宏观层面，因此仿真模拟的手段越发受到重视。Goiffon 团队[12]采用计算机辅助设计（TCAD）半导体仿真模拟软件对 4T PPD CMOS 图像传感器的电离总剂量效应进行了研究，分析了随机噪声、量子效率和暗电流随辐射总剂量的变化趋势。谭群等[13]采用三维蒙特卡罗（MC）软件对电子在 CCD 中的能量沉积过程进行了研究，分析不同能量电子在 CCD 主要构成材料 Si 和 SiO_2 中的总质量阻止本领和射程。贺朝会团队[14]基于二体碰撞理论，开发了分子动力学（MD）和动力学蒙特卡罗（KMC）相结合的模拟方法，拓展了模拟的时间尺度，并以此方法研究了硅材料和二极管的单粒子位移损伤。2021 年以来，王祖军团队相继开展了 CCD[15]，CMOS[16]，以及太阳电池[17]等器件的粒子辐照实验，研究了不同能量、不同注量的粒子对器件性能参数的影响，此外还开展了基于 MD[18-19]，MC[20]，TCAD[21-22]方法的模拟研究，构建了从微观缺陷、像素单元，最终到宏观器件的多尺度辐照损伤效应模拟体系。然而，目前有关半导体辐照诱发微观缺陷的研究仍有所欠缺，还未形成缺陷的产生、迁移和复合全过程的完整理论体系，关于不同材料中缺陷演化特点的差异性也鲜有报道。

本文以 Si，GaAs，3C-SiC 三种典型半导体材料为对象，采用 MD 方法对辐照引起的级联碰撞过程进行模拟，研究辐照损伤结构与缺陷的产生与演化过程；通过分析体系热力学量与径向分布函数的变化趋势，得出不同半导体材料在级联碰撞中非晶化程度的差异；此外，在缺陷簇分析中，统计了不同类型缺陷形成的缺陷簇的尺寸与数量，得到了空位缺陷和间隙缺陷的分布特点。

1 模型与算法

Si 的原子结构为金刚石构型，是由两个相同的面心立方结构沿体对角线滑移四分之一形成的，其典型原子拓扑结构如图 1(a)所示。该晶胞中含有 8 个 Si 原子，每个原子与相邻的 4 个原子以相同的 Si－Si 键相连。GaAs 与 3C-SiC 的结构均为闪锌矿结构，与金刚石结构类似，也是由两个面心立方结构耦合而成的，区别在于构成金刚石结构的两个面心立方完全相同，而闪锌矿结构则是由两种不同原子的面心立方构成。闪锌矿结构的 GaAs 晶胞如图 1(b)所示，包含 4 个 Ga 原子和 4 个 As 原子，每个原子都与相邻的 4 个相异原子形成 Ga－As 键。要研究实际辐射环境造成的损伤，需要建立更大规模的原子结构模型，以模拟 PKA 在材料中造成的损伤。对于三种半导体材料，本文均建立 $10a \times 10a \times 10a$（$a$ 表示晶格常数，Si 为 5.430，GaAs 为 5.563，3C-SiC 为 4.348）规格的超晶胞，并进行能量弛豫，最终得到含有 8 000 个原子的体系，如图 2 所示。



(a) 金刚石构型 Si　　(b) 闪锌矿构型 GaAs

图 1 采用的原子晶胞构型

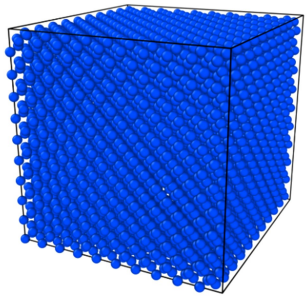


图 2 能量弛豫后的超晶胞模型

MD 理论的基本思想是通过求解牛顿方程来获得体系内所有粒子的位置和速度信息，进而获得体系宏观物理量的值。在 MD 模拟中，体系内所有粒子都遵循牛顿方程，存在以下关系式：

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

式中，$F_i(t)$为 t 时刻粒子所受的合力，m_i 和 v_i 分别是粒子的质量和速度。而粒子所受合力又可由经验势场 U 对粒子坐标 r_i 求导获得：

$$F_i=-\frac{\partial U}{\partial r_i} \tag{2}$$

因此，对于体系中的每一个粒子都有如下关系：

$$m_i\frac{\partial V_i}{\partial t}=F_i=-\frac{\partial U}{\partial r_i} \tag{3}$$

$$\frac{\partial r_i}{\partial t}=v_i(t) \tag{4}$$

只需给定一个体系的初始状态，每隔极短的时间按照上式计算一次体系内所有粒子的位置和速度，如此反复循环，即可得到体系中所有粒子各时刻的速度矢量与运动轨迹。对于复杂的多粒子体系，牛顿方程无法求得解析解，通常使用数值计算方法进行近似求解。Verlet 算法[23]兼顾了计算精度和运算速率，是目前计算软件中的主流应用算法。

本文采用 LAMMPS[24]（Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator）作为分子动力学计算工具，模拟不同材料中初级碰撞原子（PKA）造成的损伤以及缺陷演化过程。在描述原子间势场方面，Si 和 GaAs 采用 Tersoff 势函数，3C-SiC 采用 Tersoff/ZBL 势函数，这两种势函数已经成功应用于半导体材料辐照损伤的分子动力学模拟中[25-26]。以图 2 中建立的超晶胞作为辐照前的初始结构，体系的温度设置为 300 K，应用 Nose-Hoover 热浴法[27]来及时释放级联碰撞过程中产生的热量。按图 3 所示的方法进行级联碰撞模拟：将模型边界约为一个晶格长度的原子层设为温度恒定的正则系综，即 NVT 系综，起到温控器的作用；模型内部的其他部分设置为微正则系综，即 NVE 系综，作为原子相互作用的区域；随机选取顶部中央的原子作为 PKA，赋予等效于 1 keV 能量的速度，速度方向与 z 轴的夹角大约为 7°，以避免沟道效应。计算时间步长设置为 10^{-4} ps，模拟总时间为 3 ps。

模拟结果的可视化处理与缺陷的识别在 OVITO 软件[28]中进行，该软件能够以图片或动画的形式输出 LAMMPS 计算得到的轨迹文件，并且还能识别并区分结构中的各类缺陷。缺陷识别方法采用 Winger-Seitz 原胞法，该方法原理是选取初始无缺陷的结构作为参考，将其划分为若干个原胞，而后将级联碰撞后某时刻的晶体结构与参考结构进行对比。没有原子的原胞识别为空位，有一个以上原子的原胞识别为间隙，通过对比辐照前后结构种类，还可以区分不同类型的间隙或空位。

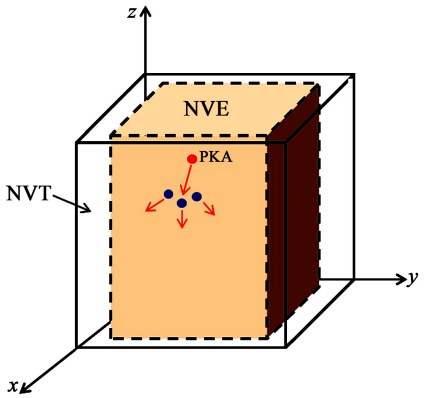


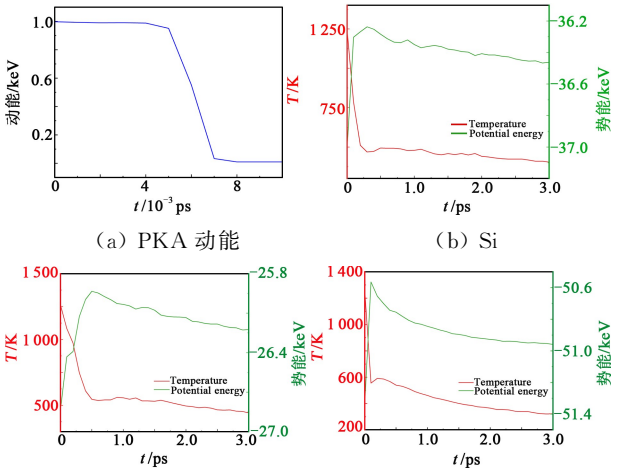
图 3　级联碰撞过程模拟示意图

2　结果与讨论

2.1　热力学量

体系的温度、动能和势能等热力学量的变化实质上是不同能量之间的转化，能一定程度上从能量角度反映粒子运动的整体趋势。图 4 给出了三种材料 PKA 入射后引起的级联碰撞过程中热力学量的变化。从统计结果可以看出，PKA 动能从初始的 1 keV 迅速降低到趋近于零，整个过程时间非常短，约为 7×10^{-3} ps，说明 PKA 在最初的几次碰撞中就将绝大多数的动能传递给其他晶格原子，最终停留在某一位置做小范围运动。与 PKA 碰撞后形成的其他次级碰撞原子继续影响更大范围的其他晶格原子，使级联碰撞得以持续发生。此外，还可以从 Si，GaAs，3C-SiC 三种材料中温度和势能随时间的变化趋势来分析原子间作用的剧烈程度。在级联过程早期，速度极快的 PKA 与晶格原子发生剧烈碰撞产生大量的热，因此体系的温度较高。随后，在温控器的作用下，温度逐渐降低，最终收敛于温度的预设值 300 K。温度的变化趋势说明，建模过程中设置的控温方法能够较好地模拟外部环境吸收级联过程产生的热量，维持体系温度稳定。体系的势能在辐照初期快速上升达到峰值，此时体系内各原子之间有较强的相互作用，大量缺陷在此阶段生成，整个体系处于极不稳定的状态。势能达到峰值后变化趋于缓慢，体系内原子之间的碰撞大部分已经结束。在势场的作用下，一部分原子开始发生缓慢位移，最终回到初始晶格位置，剩下的没有回到初始晶格位置

的原子成为稳态缺陷。体系温度和势能达到稳定的时间大致相同，这在一定程度上验证了模拟结构的合理性。此外，三种材料体系热力学量的变化特点各有差异，其中 GaAs 的势能和温度达到稳定所需的时间最长，约为 0.5 ps，Si 其次，3C-SiC 最短。并且，3C-SiC 的温度和势能收敛速度明显快于 Si 和 GaAs，势能值也是最低的，说明 3C-SiC 中连接原子的化学键强度高，晶体结构稳定，对抗原子位移的能力强。

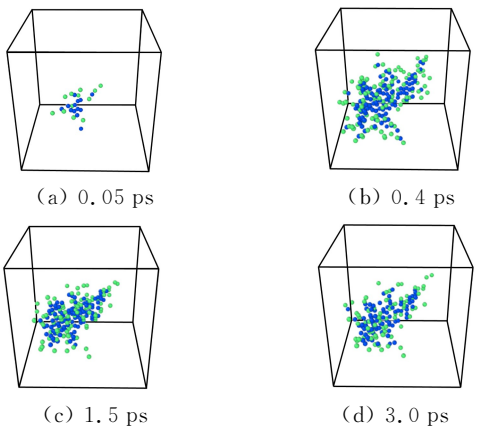


(a) PKA 动能 (b) Si

(c) GaAs (d) 3C-SiC

图 4 级联过程中热力学量的变化

图 5 给出了 Si 中级联碰撞过程产生缺陷的空间分布的可视化结果，其中蓝球表示硅空位 V_{Si}，绿球表示硅间隙 I_{Si}。从图中可以看出，大量缺陷在 PKA 入射径迹上迅速生成，数量在 0.4 ps 时达到峰值，而后逐渐减少，最终形成一个稳定缺陷结构，这与热力学量变化的情况相符合。在缺陷生成演化的过程中，空位和间隙的数量大致相同，说明在级联碰撞后产生的缺陷大多数为空位-间隙对，即 Frenkel 对。缺陷主要集中分布在一个固定区域，间隙缺陷主要分布在区域外侧，而空位缺陷则主要分布在区域内部，这种缺陷的空间分布状态与金属材料辐照损伤后出现的“离位峰”非常类似。GaAs 和 3C-SiC 中的缺陷空间分布趋势与 Si 差别不大，区别仅在于缺陷的峰值数与达到峰值的时间有所不同，关于这一点本文会在 2.2 节中进行详细分析。上述计算结果说明粒子辐照诱发缺陷会在半导体材料中形成一个原子稀疏的区域，这将严重影响其构成的器件，降低器件中的载流子寿命，从而影响器件的电学和光学性能等宏观参数。



(a) 0.05 ps (b) 0.4 ps

(c) 1.5 ps (d) 3.0 ps

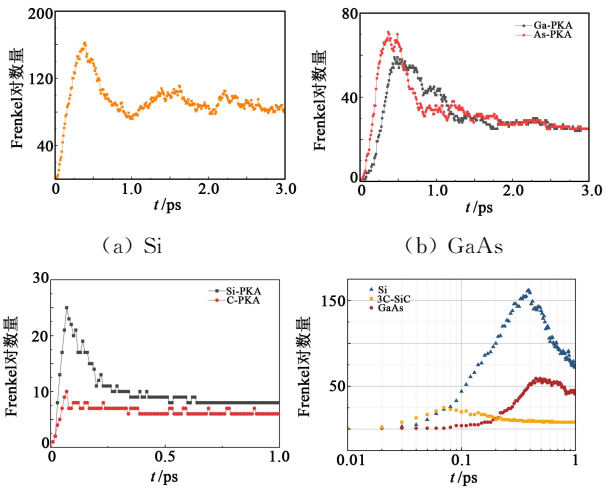
图 5 Si 中的缺陷分布可视化结果

2.2 缺陷演化过程

半导体材料受到辐照后，PKA 入射引起的缺陷演化过程大致可以分为弹道碰撞阶段、热峰阶段和稳定阶段。在弹道碰撞阶段，PKA 通过碰撞将动能传递给晶格原子使之产生位移，离位原子会继续与其他原子发生碰撞，形成一个级联过程。在这一阶段，大量缺陷沿 PKA 运动轨迹产生，缺陷的数量迅速上升，此时晶体内的原子运动最为激烈。在热峰阶段，原子之间的碰撞已经基本结束，缺陷的产生过程停滞，缺陷数量达到最大值。在稳定阶段，部分缺陷随时间推移开始重组复合，缺陷数量逐渐下降，最终达到一个稳定值。图 6(a)～(c)给出了 Si，GaAs，3C-SiC 三种材料 Frenkel 对数量随时间变化的关系，从图中可以看出缺陷的数量经历了“上升，下降，稳定”的过程，与理论预期一致。对于 GaAs 和 3C-SiC，由于两种体系内原子种类不止一种，需要考虑 PKA 的种类对级联碰撞过程的影响，因此本文分别选取了不同的 PKA，在保持其他初始条件相同的情况下分别进行模拟。比较计算结果可以得出，PKA 的种类并没有影响级联碰撞诱发缺陷演化的总体趋势，整个演化过程依然保持了三个阶段的特点，但改变了级联的特征参数。对于 GaAs，与 As-PKA 相比，Ga-PKA 引起的级联碰撞诱发的缺陷达到峰值的时间较长，缺陷峰值数较小，而最终缺陷稳定数则相差不大。对于 3C-SiC，C-PKA 引起的级联碰撞诱发的缺陷峰值数和稳定数都明显少于 Si-PKA，这可能是由于 C 的质量要比 Si 小，在弹道碰撞阶段所影响的晶体范围较小。此外，3C-SiC 在 1 keV 能量 PKA 下形成的缺陷数量很少，C-PKA 入射诱发的缺陷峰值数也仅达到 10，因此造成不同 PKA 诱发缺陷数量不同的原因也可能是缺陷数量太少而引起

的统计误差。

Si，GaAs，3C-SiC 三种材料缺陷演化过程对比如图 6(d)所示，其中 GaAs 和 3C-SiC 分别选择的是 Ga-PKA 和 Si-PKA 的计算结果，所有 PKA 的动能都设置为 1 keV，其他条件也保持一致。从图中可以明显看出三种材料的级联特征参数有很大区别：GaAs 中缺陷数到达峰值的时间最长，其次是 Si，3C-SiC 最短；Si 中缺陷峰值数最大，其次是 GaAs，3C-SiC 最小；三种材料的缺陷稳定数与缺陷峰值数的排列规律类似，从大到小依次是 Si，GaAs，3C-SiC。



(a) Si　(b) GaAs　(c) 3C-SiC　(d) 对比

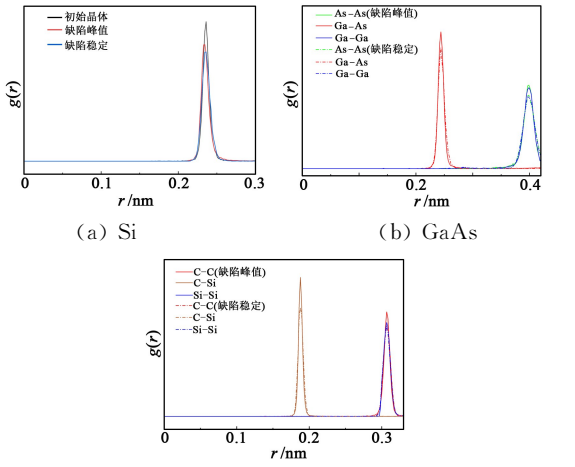
图 6　Frenkel 对数量随时间演化过程

2.3　径向分布函数

径向分布函数(Radial Distribution Function，RDF)是表征微观粒子体系的一个重要参数，其物理意义为在某距离处另一原子存在的相对概率，因此也被用于表示晶体内的缺陷演化特征[29]。径向分布函数 $g(r)$的值可由以下公式计算：

$$dn(r)=\frac{N}{V}g(r)4\pi r^2\mathrm{d}r \tag{5}$$

式中，N 和 V 分别代表给定的体系中原子总数和体积大小。图 7 给出了 Si，GaAs，3C-SiC 三种材料的 $g(r)$值在缺陷演化过程中的变化情况，对于 Si，分别计算了初始晶体、缺陷峰值和缺陷稳定三个阶段损伤区域内的 $g(r)$值。多元素体系的 GaAs 和 3C-SiC，则需要计算缺陷峰值和稳定两个阶段的所有原子组合的 $g(r)$值，图 7(b)和(c)中的颜色代表原子种类组合，虚线和实线用来区分缺陷峰值和稳定阶段的值。从计算结果可以看出，随着缺陷不断演化，晶体损伤区域内的 $g(r)$值降低，即非晶化程度不断提高，在三种材料中都存在类似的规律。此外，在 GaAs 和 3C-SiC 体系中还可以观察到不同化学键的辐射抗性也有区别。GaAs 中的 Ga－As 键在缺陷演化过程中变化很小，表现出比其他化学键更稳定的性质。3C-SiC 中的 Si－Si 键和 C－C 键不同阶段之间的差值也很小，说明损伤区域的无序性主要受 Si－C 键的断裂的影响。



(a) Si　(b) GaAs　(c) 3C-SiC

图 7　径向分布函数 RDF 的变化

2.4　缺陷簇

经过前文的分析可知，大量缺陷在半导体材料的损伤区域内产生，但缺陷的具体分布趋势没有明确表征出来。晶体内的部分缺陷会发生迁移聚集行为，从而形成缺陷簇，这些缺陷簇不仅自身几乎不参加缺陷的复合退火，还会严重阻碍其他点缺陷的迁移和复合，加重材料的辐照损伤。此外，一些缺陷簇在稳定后仍然存在于材料晶体结构中，影响材料的载流子输运特性，造成宏观光学和电学性能的衰减。因此，本节从缺陷簇角度分析缺陷的演化特性，使用截断距离法判定缺陷成簇与否，缺陷簇包含点缺陷数的数量视为缺陷簇的尺寸大小。

Si 和 GaAs 中空位缺陷、间隙缺陷在缺陷峰值阶段形成的缺陷簇尺寸与数量在表 1 中列出，由于 3C-SiC 中的缺陷数量少，没有形成明显的缺陷簇结构，因此本文没有给出相应的缺陷簇信息。从结果可以看出，与间隙缺陷相比，空位缺陷聚集趋势要更加明显，并且形成了尺寸超过 10 的大型缺陷，是构成晶体损伤区域的主要部分。横向对比不同材料可以发现，Si 中的空位缺陷、间隙缺陷都比 GaAs 中的更容易形成缺陷簇。Si 中的空位缺陷形成了尺寸为 17，13 的两个大型团簇，而 GaAs 中仅有一个由

16 个原子组成的大型团簇存在，其他缺陷簇都是尺寸在 5 以内的小型团簇。前文的缺陷空间分布可视化结果也表明空位缺陷集中在损伤区域的内部，外部则主要分布的是间隙缺陷，这与缺陷簇分析的结果相符合。

表 1 Si 和 GaAs 中空位和间隙形成的缺陷簇尺寸与数量

Si 空位		Si 间隙		GaAs 空位		GaAs 间隙	
尺寸	数量	尺寸	数量	尺寸	数量	尺寸	数量
2	6	2	10	2	4	2	3
3	1	4	1	3	2	4	1
4	1			4	1		
5	3			5	1		
8	2			16	1		
13	1						
17	1						

3 结论

基于 LAMMPS 程序，针对 Si，GaAs 和 3C-SiC 三种典型半导体材料的级联碰撞过程进行了分子动力学模拟。通过分析体系热力学量、径向分布函数和缺陷簇在级联过程中的变化情况，得到了材料晶体中辐照诱发缺陷的演化趋势与特点。PKA 在极短时间内的数次碰撞中将绝大部分自身动能转移给其他晶格原子，这些次级碰撞原子主导了后续级联碰撞的进程。晶体内部的缺陷演化呈现“上升，下降，稳定”的总体趋势，缺陷数量迅速增长达到峰值，随后逐渐下降至稳定值。对于 GaAs 和 3C-SiC 两种多元素体系，其中不同的化学键受级联碰撞的影响大小不同。与 GaAs 晶体中的其他键相比，Ga—As 键的性质最为稳定，而在 3C-SiC 中，Si—C 键的断裂则是缺陷产生的主要原因。在缺陷空间分布方面，晶体的损伤区域内部大部分为空位缺陷形成的大型团簇，外部则主要由离散的间隙缺陷构成，形成类似“离位峰”的结构，并且 Si 中的缺陷簇比 GaAs 中的尺寸更大，数量更多。三种材料在相同的初始条件下产生的缺陷数量区别很大，Si 中的缺陷数量最多，GaAs 其次，而 3C-SiC 中的缺陷显著少于其他两种材料，说明 3C-SiC 具有较强的辐射抗性和结构稳定性。本文的结论能够为选择合适的半导体材料制造适应极端辐射环境的光电器件提供仿真数据支撑，也可为提高现有器件的抗辐射能力或探索新的抗辐射方案提供理论参考。

参考文献：

[1] 王祖军，刘 静，薛院院，等. CMOS 图像传感器总剂量辐照效应及加固技术研究进展[J]. 半导体光电，2017，38(1)：1-7.
Wang Zujun，Liu Jing，Xue Yuanyuan，et al. Progress of total ionizing dose radiation effects and hardening technology of CMOS image sensors [J]. Semiconductor Optoelectronics，2017，38(1)：1-7.

[2] 王祖军，宁 浩，薛院院，等. 半导体激光器辐照损伤效应实验研究进展[J]. 半导体光电，2020，41(2)：151-158.
Wang Zujun，Ning Hao，Xue Yuanyuan，et al. Research progresses of radiation damage experiments in laser diodes[J]. Semiconductor Optoelectronics，2020，41(2)：151-158.

[3] 王祖军，王兴鸿，晏石兴，等. GaInP/GaAs/Ge 三结太阳电池辐照损伤效应及加固技术研究进展[J]. 半导体光电，2022，43(3)：490-504.
Wang Zujun，Wang Xinghong，Yan Shixing，et al. Progress of radiation effects on GaInP/GaAs/Ge triple junction solar cells [J]. Semiconductor Optoelectronics，2022，43(3)：490-504.

[4] Le Roch A，Virmontois C，Paillet P，et al. Comparison of X-ray and electron radiation effects on dark current non-uniformity and fluctuations in CMOS image sensors[J]. IEEE Trans. on Nuclear Science，2019，67(1)：268-277.

[5] 汪 波，李豫东，郭 旗，等. CMOS 有源像素传感器的中子辐照位移损伤效应[J]. 强激光与粒子束，2015，27(9)：210-214.
Wang Bo，Li Yudong，Guo Qi，et al. Neutron irradiation induced displacement damage effects on CMOS active pixel image sensor[J]. High Power Laser and Particle Beams，2015，27(9)：210-214.

[6] Brau J E，Igonkina O，Potter C T，et al. Investigation of radiation damage effects in neutron irradiated CCD [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A：Accelerators，Spectrometers，Detectors and Associated Equipment，2005，549(1)：117-121.

[7] Dai P，Ji L，Tan M，et al. Electron irradiation study of room-temperature wafer-bonded four-junction solar cell grown by MBE[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells，2017，171：118-122.

[8] Bebek C，Groom D E，Holland S E，et al. Proton radiation damage in high-resistivity n-type silicon CCDs [J]. Proc. SPIE，2002，4669：1-11.

[9] 李鹏伟，郭 旗，任迪远，等. 电荷耦合器件的 ^{60}Co γ 射线辐照损伤退火效应[J]. 原子能科学技术，2010，44(5)：603-607.
Li Pengwei，Guo Qi，Ren Diyuan，et al. Annealing effects of charge coupled devices after ^{60}Co γ irradiation [J]. Atomic Energy Science and Technol.，2010，44(5)：603-607.

[10] 胡建民，吴宜勇，钱 勇，等. GaInP/GaAs/Ge 三结太阳电池的电子辐照损伤效应[J]. 物理学报，2009，58(7)：5051-5056.
Hu Jianmin，Wu Yiyong，Qian Yong，et al. Damage of electron irradiation to the GaInP/GaAs/Ge triple-junction solar

cell[J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(7): 5051-5056.

[11] 李占行, 艾尔肯·阿不都瓦衣提, 玛丽娅·黑尼, 等. 1 MeV 电子辐照下晶格匹配与晶格失配 GaInP/GaInAs/Ge 三结太阳电池辐射效应研究[J]. 发光学报, 2017, 38(4): 463-469.
Li Zhanhang, Abuduwayiti Aierken, Maliya Heini, et al. Radiation effects of lattice matched and upright metamorphic GaInP/GaInAs/Ge triple-junction solar cells by 1 MeV electrons [J]. Chinese J. of Luminescence, 2017, 38(4): 463-469.

[12] Goiffon V, Estribeau M, Marcelot O, et al. Radiation effects in pinned photodiode CMOS image sensors: Pixel performance degradation due to total ionizing dose[J]. IEEE Trans. on Nuclear Science, 2012, 59(6): 2878-2887.

[13] 谭　群, 范杰清, 赵　强, 等. CCD 电子辐照效应三维蒙特卡罗模拟研究[J]. 强激光与粒子束, 2022, 34(4): 115-120.
Tan Qun, Fan Jieqing, Zhao Qiang, et al. Three-dimensional Monte Carlo simulation of electron radiation effects on CCD[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2022, 34(4): 115-120.

[14] 贺朝会, 唐　杜, 李永宏, 等. 硅材料和二极管的单粒子位移损伤的多尺度模拟研究[J]. 原子能科学技术, 2019, 53(10): 2106-2113.
He Chaohui, Tang Du, Li Yonghong, et al. Multi-scale simulation of single particle displacement damage in silicon and diode[J]. Atomic Energy Science and Technol., 2019, 53(10): 2106-2113.

[15] 王祖军, 薛院院, 王　迪, 等. 西安 200 MeV 质子应用装置 200 MeV 质子辐照 CCD 的实验结果与分析[J]. 现代应用物理, 2021, 12(2): 95-101.
Wang Zujun, Xue Yuanyuan, Wang Di, et al. Charge coupled device irradiated by 200 MeV protons at Xi'an 200 MeV proton application facility[J]. Modern Appl. Phys., 2021, 12(2): 95-101.

[16] 王祖军, 薛院院, 刘卧龙, 等. CMOS 图像传感器西安 200 MeV 质子应用装置 H-辐照效应实验研究[J]. 现代应用物理, 2021, 12(3): 128-132.
Wang Zujun, Xue Yuanyuan, Liu Wolong, et al. H-beams irradiation effect of CMOS image sensor at Xi'an 200 MeV proton application facility[J]. Modern Appl. Phys., 2021, 12(3): 128-132.

[17] Wang Z J, Xue Y Y, Yang X, et al. Radiation effects in GaInP/GaAs/Ge triple junction solar cells irradiated by 1 MeV and 10 MeV electrons[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2021, 1018: 165763.

[18] Jia T X, Wang Z J, Xue Y Y, et al. The influence of temperature and energy on defect evolution and clustering during cascade in GaAs [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2021, 502: 198-204.

[19] Jia T X, Wang Z J, Xue Y Y, et al. Numerical simulation of the primary displacement damage in $GaAs_{1-x}N_x$ with low nitrogen atomic content [J]. Computational Materials Science, 2021, 200: 110765.

[20] 薛院院, 王祖军, 刘　静, 等. CCD 质子辐照损伤效应的三维蒙特卡罗模拟[J]. 强激光与粒子束, 2018, 30(4): 89-94.
Xue Yuanyuan, Wang Zujun, Liu Jing, et al. Numerical calculation and analysis of proton radiation effects on CCD based on Monte Carlo method[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2018, 30(4): 89-94.

[21] Lai S K, Wang Z J, Huang G, et al. A simulation result of trapped charge in PPD CIS induced by total ionizing dose effect[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2023, 1050: 168069.

[22] 王祖军, 杨　勰, 赖善坤, 等. CMOS 图像传感器中子位移辐照损伤效应仿真模拟研究[J]. 现代应用物理, 2022, 13(3): 152-159.
Wang Zujun, Yang Xie, Lai Shankun, et al. Simulation of displacement damage of CMOS image sensors irradiated by neutron[J]. Modern Appl. Phys., 2022, 13(3): 152-159.

[23] Grubmüller H, Heller H, Windemuth A, et al. Generalized Verlet algorithm for efficient molecular dynamics simulations with long-range interactions [J]. Molecular Simulation, 1991, 6(1/3): 121-142.

[24] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. J. of Computational Phys., 1995, 117(1): 1-19.

[25] Zhang Q, Zhuang Y, Aierken A, et al. Probing the displacement damage mechanism in Si, Ge, GaAs by defects evolution analysis [J]. Computational Materials Science, 2022, 203: 111084.

[26] Liao W, He C, He H. Molecular dynamics simulation of displacement damage in 6H-SiC[J]. Radiation Effects and Defects in Solids, 2019, 174(9/10): 729-740.

[27] Evans D J, Holian B L. The Nose-Hoover thermostat[J]. The J. of Chemical Physics, 1985, 83(8): 4069-4074.

[28] 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): 15012.

[29] Dove M T, Artacho E, Todorov I T, et al. Atomistic simulations of resistance to amorphization by radiation damage[J]. Physical Review B, 2006, 73(17): 174207.

作者简介：

王兴鸿(1999—)，男，江西省鹰潭市人，硕士生，主要研究方向为辐射效应；

王祖军(1979—)，男，博士，研究员，主要专业方向为光电器件的辐射效应；

蔡星会(1975—)，男，博士，副教授，主要专业方向为辐射评估与防护。