

快重离子辐照下氮化镓微观损伤机制的速度效应研究*

梁家雨¹⁾ 何绍威¹⁾ 白雨蓉¹⁾ 张裕欣¹⁾ 臧航¹⁾ 李培¹⁾ 李永宏¹⁾ 柳

文波¹⁾ 何欢^{1)2)†} 贺朝会^{1)2)†}

1) (西安交通大学, 核科学与技术学院, 西安 710049)

2) (高能高功率脉冲电源全国重点实验室, 西安 710049)

摘 要

本文采用双温模型耦合分子动力学的多尺度模拟方法, 系统探究了快重离子速度效应对氮化镓 (GaN) 辐照损伤的微观影响机制。结果表明, 在相近电子能损条件下, 入射离子速度越低, 更为局域化的能量沉积造成的晶格损伤程度越严重。以 Ta 离子辐照为例, 当入射速度由 6.47 MeV/u 降至 2.71 MeV/u 时, 由 N₂ 气泡构成的连续柱状离子径迹更加显著, 非晶核心区半径由 2.21 nm 扩大至 2.46 nm, 径迹中心 N₂ 气泡的最大直径由 3.2 nm 增至 3.6 nm。此外, 离子径迹周围伴生的大量富镓缺氮的亚稳态闪锌矿相 GaN 纳米域, 以及与之呈现强烈空间关联性的螺位错网络, 两者密度均发生明显上升。这种由低速离子引发的高密度微观缺陷可能会提升垂直漏电通道的形成概率, 进而成为加剧 GaN 器件单粒子烧毁风险的重要潜在因素。本研究为理解快重离子辐照下 GaN 器件的电学性能退化机理与抗辐射加固设计提供了重要的理论依据与数据支撑。

关键词: 氮化镓, 快速重离子, 辐照损伤, 速度效应, 离子径迹

基金: 中国核工业集团领创科研项目基金、国家自然科学基金 (批准号: 12405298)、中国博士后科学基金 (批准号: 2024M762610) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: xtr062025004)。

† 通信作者.E-mail: huanhe@xjtu.edu.cn, hechaohui@xjtu.edu.cn

第一作者.E-mail: liangjiayu@stu.xjtu.edu.cn

1 引言

作为第三代半导体材料，氮化镓（gallium nitride, GaN）凭借其卓越的物理特性，在抗辐射电子器件领域展现出广阔的应用前景，如高电子迁移率晶体管（high electron mobility transistors, HEMTs）。相较于硅基器件，GaN HEMTs 不仅具有更高的转换效率、更大的工作电压和更快的开关速度，更展现出优异的热稳定性与更强的抗电离辐射能力^[1-4]。这些特性使 GaN 成为太空及高能物理实验设施等极端环境下器件制造的首选材料。

尽管 GaN 具有极强的抗辐射能力，但在实际应用中 GaN 基器件面临快速重离子（swift heavy ion, SHI）辐照时仍会表现出显著的单粒子敏感性进而引发严重的性能退化问题^[5-7]。基于被广泛应用于研究快重离子辐照效应的非弹性热峰（iTS）模型^[8]，Sequeira 等人深入至微观晶格损伤演化层面的研究从根本上解释了这一器件失效行为。他们发现强再结晶效应是 GaN 抵抗强电离辐射的核心机制，并建立了快重离子的电子能损与熔融非晶化截面之间的定量经验关系^[9,10]。Mahfuz 等人进一步借助该理论探究了重离子累积注量对 GaN 辐照损伤的影响，证实高注量下离子径迹的重叠会导致晶格内部纳米孔洞等微观缺陷的尺寸显著增加^[11]。

然而，在实际的离子与固体相互作用中，快重离子的电子能损并非决定微观损伤形貌的唯一参量，离子入射速度同样起着至关重要的调控作用^[12]。Rymzhanov 等人指出，低速与高速重离子在靶材料中产生损伤的电子能损阈值并不相同^[13,14]。这种被称为速度效应的现象，其物理本质在于不同速度的离子激发的次级电子具有不同的径向传输范围。目前这一速度效应已在多种氧化物和半导体材料中得到证实。例如，在 LiNbO_3 和 KTaO_3 中，研究发现在相似电子能损下，低速离子由于能量沉积更加局域化，往往会产生比高速离子更显著的潜径迹，或主导完全不同的损伤与退火机制^[15,16]。特别是在与 GaN 同属宽禁带半导体的碳化硅（SiC）

中，最新实验表明离子速度直接决定了电离诱导缺陷退火的激发阈值与演化效率^[17]。这充分说明离子入射速度的差异深刻影响着材料内部热峰的径向动态演化及最终的晶格损伤程度。

迄今为止，快重离子速度效应对 GaN 微观晶格损伤的具体影响机制尚不明晰。为深入探究这一演化规律，本文针对相同电子能损条件下不同入射速度的快重离子辐照 GaN 材料展开了系统的多尺度模拟分析。文章详细探讨了入射离子速度对 GaN 内部能量传递、晶格瞬时熔融与重结晶以及辐照损伤的调控作用，为深入理解快重离子辐射下 GaN 器件电学性能退化机理并预测微观损伤缺陷提供了关键的理论与数据支撑。

2 模拟方法

2.1 双温模型

目前，解释快重离子造成材料内部晶格位移与微观损伤的主流理论主要有库仑爆炸模型^[18]与非弹性热峰（iTS）模型。库仑爆炸模型指出，高能离子电离轨迹上的原子导致电子射出形成带正电的离子核心，进而产生极强的静电排斥引发原子位移乃至爆炸性分离。然而，对于具备一定载流子迁移率的半导体而言，电子的快速屏蔽与弛豫效应往往限制了该机制的主导作用。相比之下，iTS 模型应用最为广泛。

iTS 模型指出，快重离子穿透靶材料时，首先沿离子轨迹形成圆柱形电离核心区，即离子径迹。在 10^{-16} 至 10^{-15} s 的极短时间内，能量主要沉积于靶材的电子子系统中。随后，位于离子径迹中心的受激电子通过热扩散将能量传递给周围电子。与此同时，电子-声子耦合作用介导了能量从电子子系统向晶格子系统的转移。离子径迹中心的原子在获得足够能量后，通过晶格振动将能量传递给相邻原子。iTS 模型通常借助双温模型（TTM）进行数学表述。在双温模型框架下，材

料系统被划分为电子与晶格两个子系统。电子子系统由电子热容 C_e 和电子热导率 K_e 表征，晶格子系统则由晶格热容 C_l 和晶格热导率 K_l 描述。电子-声子耦合常数 g 作为连接上述两大子系统的核心参数，主导着二者之间的温度传递与能量交换。所有物理场在数学上均由一组耦合的微分方程表示，并通过交换项与附加源项相互关联^[3,19,20]：

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(K_e(T_e) \nabla T_e) - g(T_e)(T_e - T_l) + A(r, t), \quad (1)$$

$$C_l(T_l) \frac{\partial T_l}{\partial t} = \nabla(K_l(T_l) \nabla T_l) + g(T_e)(T_e - T_l), \quad (2)$$

式中 T_e 与 T_l 、 C_e 与 C_l 、 K_e 与 K_l 分别代表电子与晶格子系统的温度、热容及热导率； g 为电子-声子耦合常数。这些随温度 T 变化的热力学参数均已在前期工作中详细列出^[3]，电子参数及电子-声子耦合常数基于第一性原理计算获得，晶格参数由实验数据拟合得出。 $A(r, t)$ 为入射离子在半径 r 和时间 t 内沉积在电子系统中的能量^[21,22]。通过自主开发的 Femto-2TM 程序对 TTM 方程进行数值求解^[3]。

为探究快重离子辐照的速度效应，选取工程实验中常用的 Xe、Ta 两类重离子作为辐照源。针对两种离子各自的布拉格曲线，分别选取低能与高能辐照工况开展对比，可在维持电子能损基本不变的条件下，引入明显的离子入射速度差异。所构建的 GaN 超胞模型尺寸为 $32.16 \text{ nm} \times 32.16 \text{ nm} \times 52.4 \text{ nm}$ 。该模型基于晶格常数为 $3.216 \text{ \AA} \times 3.216 \text{ \AA} \times 5.24 \text{ \AA}$ 的纤锌矿 GaN 原胞扩胞 $100a_0 \times 100b_0 \times 100c_0$ 获得，总原子数达 4×10^6 个。模拟过程中所有离子均沿 GaN 晶体 $[0001]$ 晶向垂直中心入射。四种快重离子入射 GaN 时产生的电子能损由 Geant4 程序计算得出，并与其他关键辐照参数一同列于表 1。在 Geant4 仿真中，GaN 靶材尺寸设定为 $32.16 \text{ nm} \times 32.16 \text{ nm} \times 2000 \text{ nm}$ ，密度取 6.15 g/cm^3 ；核心粒子输运过程由 QGSP_BIC 列表描述。四种快重离子在 GaN 材料中产生初始能量沉积 $A(r, t)$ 的空间分布如图 1 所示。

表 1 快重离子辐照参数

Table 1. SHI irradiation parameters.

快重离子种类	能量 / MeV	电子能损/(keV·nm ⁻¹)	离子速度 / (MeV·u ⁻¹)
Xe	225	28.86	1.70
	1100	29.74	8.33
Ta	490	42.45	2.71
	1171	43.76	6.47

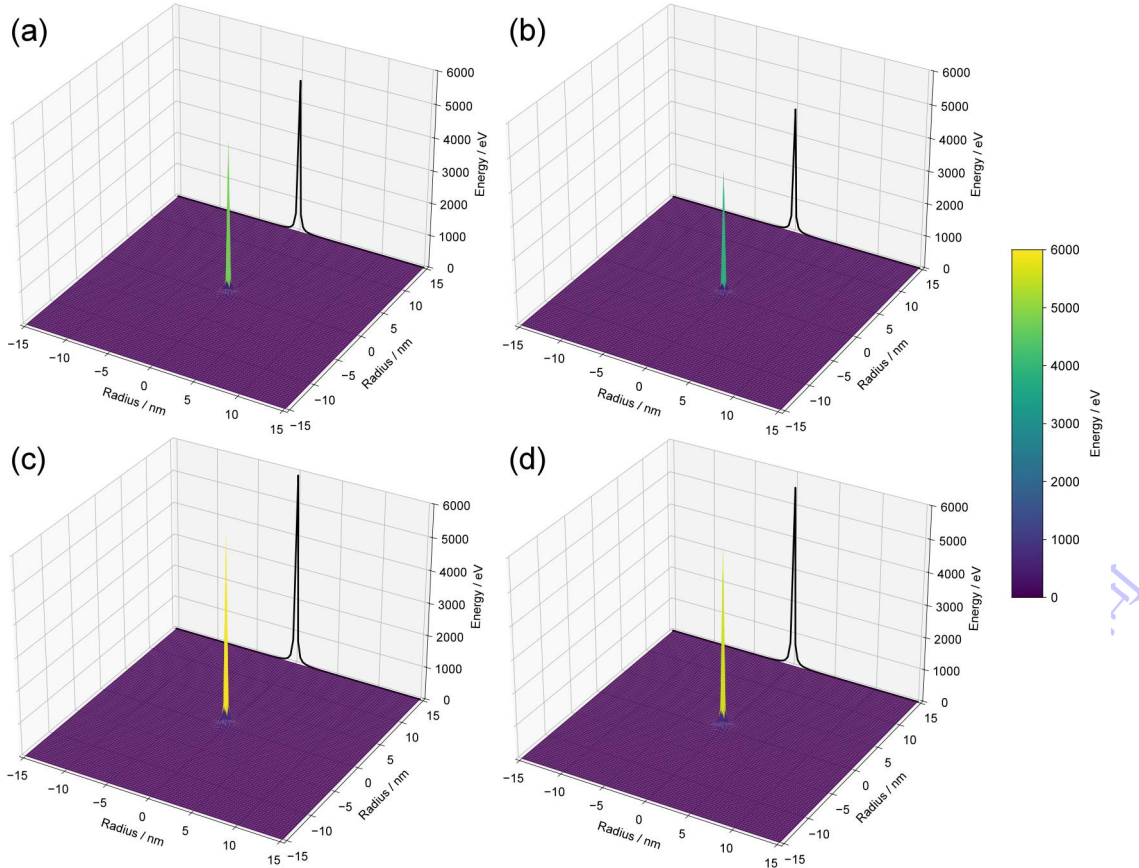


图1 不同快重离子辐照下,GaN 初始能量沉积空间分布 (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe;
(c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta

Fig. 1. Spatial distribution of initial energy deposition in GaN under different SHI irradiation: (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta.

2.2 分子动力学模拟

快重离子入射引发的辐照效应主要体现为离子轨迹周围原子的瞬时加热，本研究首先通过 TTM 模拟对这种热激发的空间分布进行了定量描述。鉴于 TTM 框架无法揭示材料在原子尺度的结构响应，研究进一步采用分子动力学（MD）模

拟来探究快重离子入射后体系内部的长期演化过程。在 MD 模型构建中, GaN 材料尺寸与 TTM 模拟中一致, 并将其划分为以离子轨迹为中心的多个同心圆柱层。每层内的原子被赋予随机取向的动量, 其大小依据 TTM 模拟输出的径向能量高斯分布进行取样。

MD 模拟基于 LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*)^[23]软件完成。计算过程均采用三维周期性边界条件, 积分时间步长设定为 0.5 fs, 模拟总演化时长为 500 ps。为模拟体系向周围环境的热耗散, 对平行于离子入射方向的 10 Å 厚度边界层施加 Langevin 恒温器。该温控区域距离离子入射中心足够远, 因此对径迹周围原子的激发动力学影响可忽略不计。同时, 考虑到超快晶格加热在离子径迹附近产生的极高压力, 研究选用辐照损伤领域成熟的 Tersoff-ZBL 混合势来精确刻画短程原子排斥力及 GaN 内部的整体相互作用^[24,25]。LAMMPS 输出的模拟数据最终通过 OVITO 软件进行可视化与统计分析^[26]。

3 结果与讨论

3.1 热峰作用下的飞秒超快动力学

基于 TTM 描述的飞秒超快动力学框架, 快重离子辐照 GaN 后离子径迹中心电子与晶格子系统的温度、能量演化规律如图 2 所示。在约 10^{-17} s 的极短时间内, 电子子系统温度和能量瞬间升至极高水平。随后, 在电子间热扩散与电子-声子耦合作用的共同驱动下, 电子子系统的温度和能量在 10^{-17} s 至 10^{-14} s 期间快速回落, 并最终缓慢趋近于零。与此同时, 晶格子系统通过电子-声子耦合吸收激发电子传递的能量, 其温度与能量相应升高, 并在 10^{-13} s 附近达到峰值。越过该峰值后, 受晶格内部能量传导与热扩散作用的影响, 晶格子系统的温度与能量进入缓慢下降阶段。

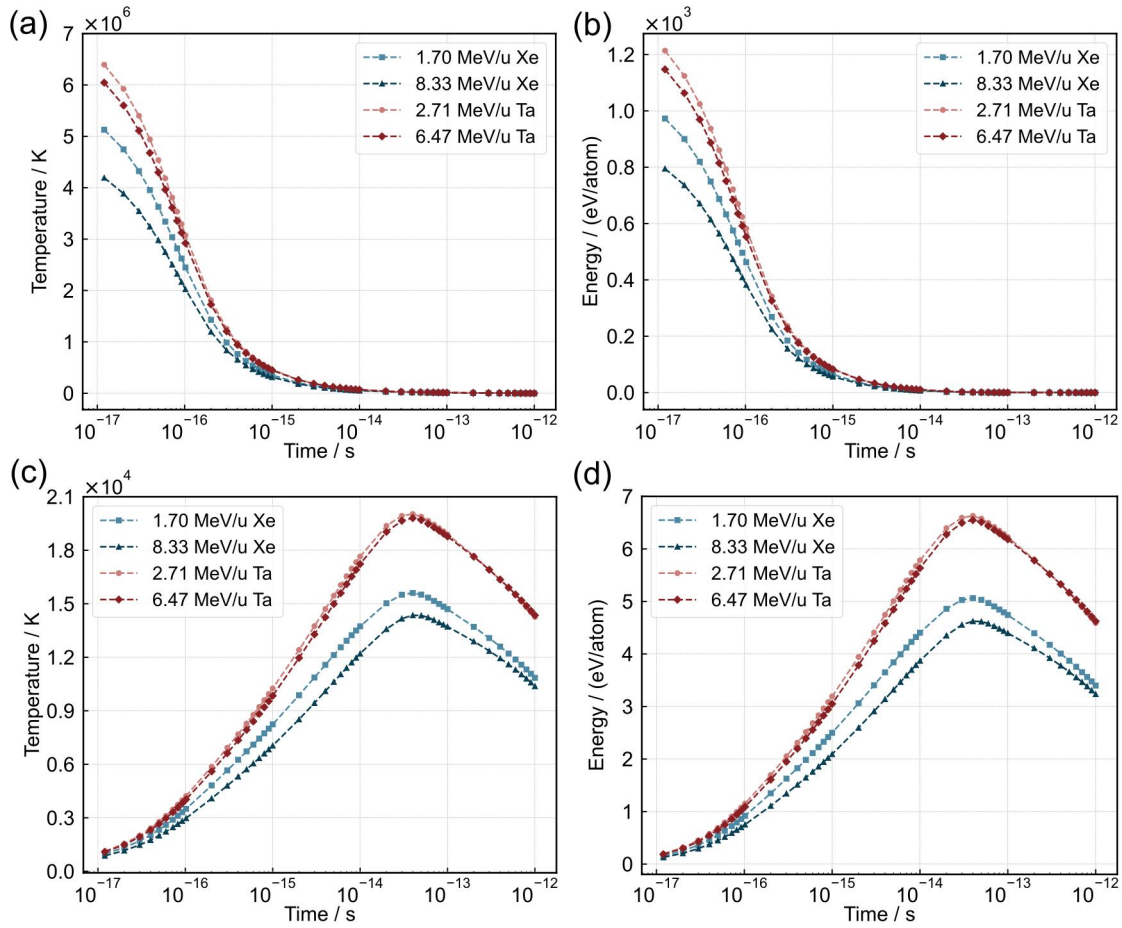


图 2 不同快重离子辐照下, GaN 离子径迹中心温度和能量的时间演化趋势 (a) 电子温度; (b) 电子能量; (c) 晶格温度; (d) 晶格能量

Fig. 2. Time evolution of temperature and energy at the ion track center of GaN under different SHI irradiation: (a) electronic temperature; (b) electronic energy; (c) lattice temperature; (d) lattice energy.

显然, 快重离子的电子能损值越大 (2.71 和 6.47 MeV/u Ta), 其在电子子系统中产生的初始能量沉积以及形成的电子温度峰值也就越高, 进而传递给晶格系统的温度和能量也相应增多。此外, 在电子能损值几乎相等的前提下, 入射离子的速度越低, 其在径迹中心产生的初始能量沉积与温度峰值也越大, 晶格随之产生的热峰响应也更为剧烈。这一现象的物理本质源于次级电子的径向扩散机制。当入射离子速度较低时, 其激发的次级电子初始动能较小, 径向射程相应缩短。因此, 在电子能损相同的条件下, 低速离子将能量高度集中于

横截面更为狭小的圆柱形核心区域内。这种能量在空间分布上的高度局域化显著增加了径迹中心的能量沉积密度，从而在电子与晶格子系统中均形成了极高的温度与能量峰值。

不同快重离子辐照下 GaN 晶格能量的时空分布演化特征如图 3 所示。由图可知，晶格能量在空间上高度集中于离子径迹中心，并沿径向逐渐衰减。随着入射离子速度的提升，传递至晶格中心的峰值能量 E_{peak} 呈现出明显的递减趋势。例如，1.70 MeV/u Xe 离子在径迹中心产生的 E_{peak} 为 4.53 eV/atom；而在 8.33 MeV/u Xe 离子辐照下，该值降低为 4.12 eV/atom。此外，快重离子辐照沉积于晶格原子中的能量会在材料内部形成瞬时熔融区。基于热峰响应中熔化能量的计算依据 $E_m = \int_0^{T_m} C_l(T_l) dT_l + E_l$ ，得到 GaN 晶格熔融所需的能量阈值为 0.93 eV/atom^[3]。根据 TTM 框架下的终止准则^[3]，在飞秒超快动力学过程结束时刻，1.70 MeV/u Xe 离子辐照产生的瞬时熔融半径约为 5.41 nm；而 8.33 MeV/u Xe 离子辐照下的瞬时熔融半径则缩小至 5.25 nm。这些数据充分表明，相同电子能损值下，低速离子能够在飞秒时间尺度内向晶格子系统传递更多能量，从而产生更大的瞬时熔融非晶区。

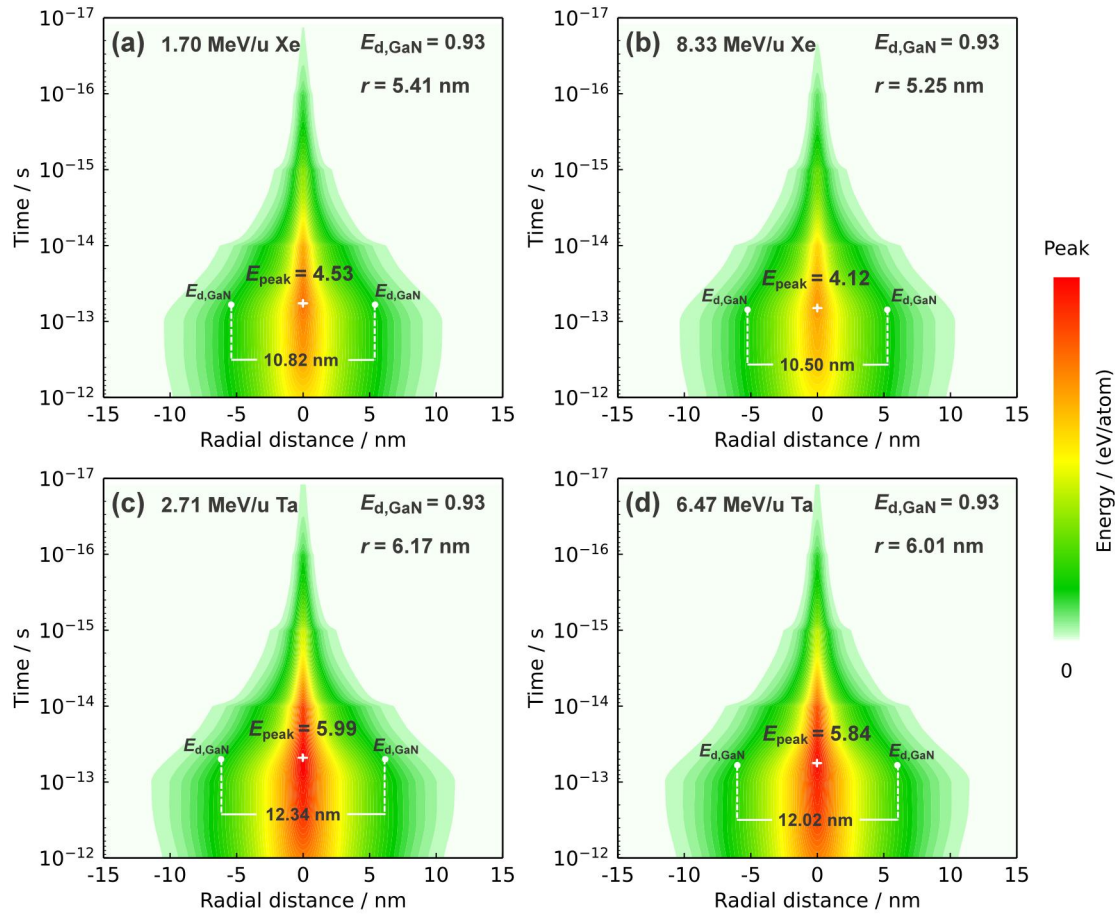


图3 不同快重离子辐照下, GaN 晶格能量的时空分布 (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta

Fig. 3. Spatiotemporal distribution of lattice energy in GaN under different SHI irradiation: (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta.

以 1.70 MeV/u Xe 离子入射为例, 图 4 展示了飞秒超快动力学演化终止时刻, GaN 体系内电子与晶格子系统温度和能量的空间分布特征。可以看到, 离子径迹中心处电子温度 T_e 与晶格温度 T_l 趋于一致。经电子-晶格能量耦合传递后, 电子子系统能量已降至极低水平并趋近于零。沉积在晶格子系统中的能量则作用于 GaN 晶格原子, 为后续长时间尺度分子动力学演化提供初始条件。

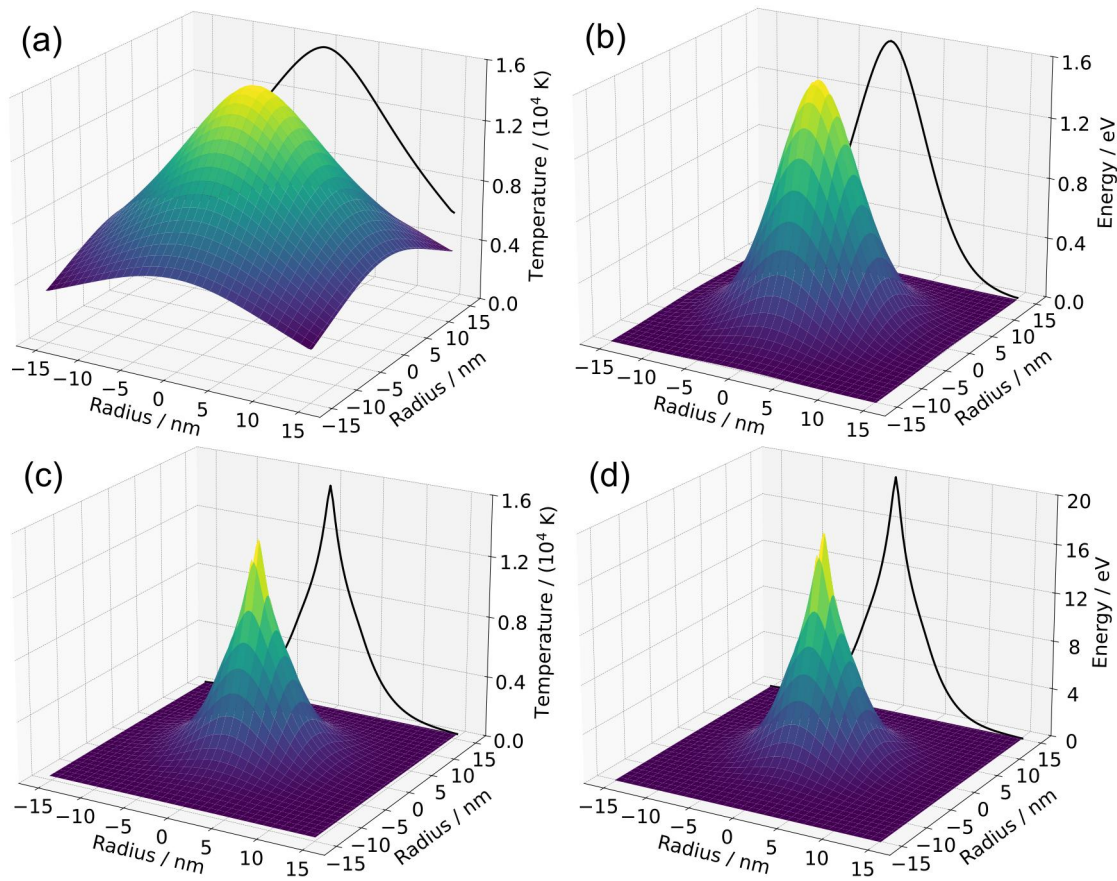


图4 1.70 MeV/u Xe辐照下 GaN 内温度和能量的空间分布 (a) 电子温度; (b) 电子能量; (c) 晶格温度; (d) 晶格能量

Fig. 4. Spatial distribution of temperature and energy in GaN under 1.70 MeV/u Xe irradiation: (a) electronic temperature; (b) electronic energy; (c) lattice temperature; (d) lattice energy.

3.2 重结晶

晶格在极端热力学驱动下的熔融与重结晶是决定最终损伤形貌的核心过程。

以 1.70 MeV/u Xe 离子辐照为例, 选取三个典型时刻的横截面示意图开展分析, 如图 5 所示。在 1 ps 初始阶段, 快重离子辐照诱导的强热峰效应促使 GaN 晶格发生瞬时熔融, 沿离子径迹形成半径约 3.5 nm 的圆柱形非晶熔融区。在前 20 ps 内, 离子径迹中心处的超高温驱动非晶熔融区沿径向持续扩张, 直至达到约 4.2 nm 的最大半径。此后, 在边界热浴层作用下, GaN 晶格不断向外部环境散失热量, 体系整体温度逐步下降。冷却过程中晶格重结晶成为主导机制, 由非晶区外缘向离子径迹中心逐步推进。当体系温度降至室温时, 重结晶过程基本

完成，在 500 ps 稳定阶段 GaN 内部最终残留特定半径约为 1.3 nm 的非晶核心区。

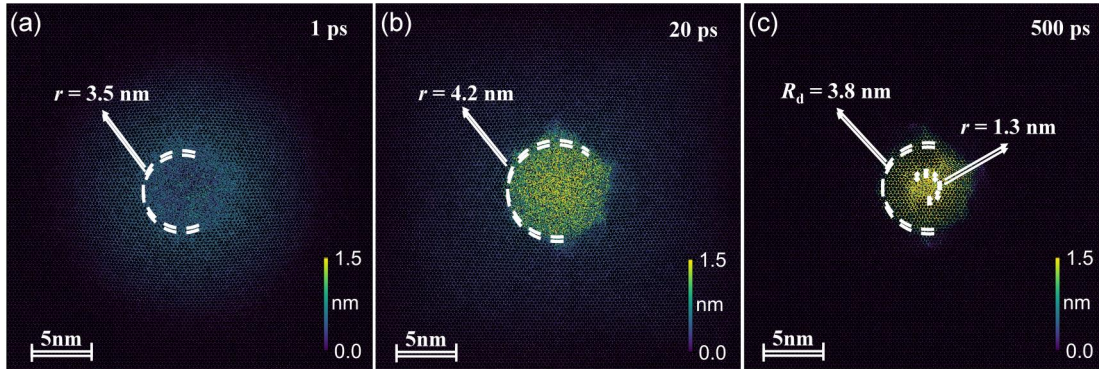


图 5 1.70 MeV/u Xe 离子辐照下 GaN 的横截面示意图 (a) 1ps; (b) 20ps; (c) 500ps

其中 r 代表非晶熔融区半径， R_d 代表原子位移半径。图中颜色代表原子相对于初始位置的位移大小。

Fig. 5. The cross-sectional schematics of GaN under 1.70 MeV/u Xe irradiation: (a) 1ps; (b) 20ps; (c) 500ps. Here, r denotes the amorphous molten region radius, and R_d represents the atomic displacement radius. The color scheme represents the displacement magnitude of atoms relative to original positions.

图 6 纤锌矿 GaN 体系中 Ga 原子密排六方（HCP）结构占比随时间的演化曲线，从原子尺度进一步揭示了这一重结晶过程。快重离子入射瞬间产生的极端热尖峰引发纤锌矿 GaN 晶格局域熔融，致使 Ga 原子 HCP 结构占比骤降。演化前期，由于非晶熔融区径向扩张与边缘重结晶的竞争关系，HCP 结构占比呈现持续性波动特征，整体有向上的结构恢复趋势。约 20ps 之后，重结晶行为占据主导地位，Ga 原子 HCP 晶体结构逐步恢复并保持稳定。最终的 Ga 原子 HCP 结构占比表明，相同电子能损值下，入射离子速度越低，重结晶完成后稳态 GaN 体系内 Ga 原子 HCP 结构占比越低，快重离子辐照对纤锌矿 GaN 结构造成的晶格损伤越显著。此外，这种由速度效应引发的晶格损伤差异会随着入射离子电子能损值的增大而更加显著。

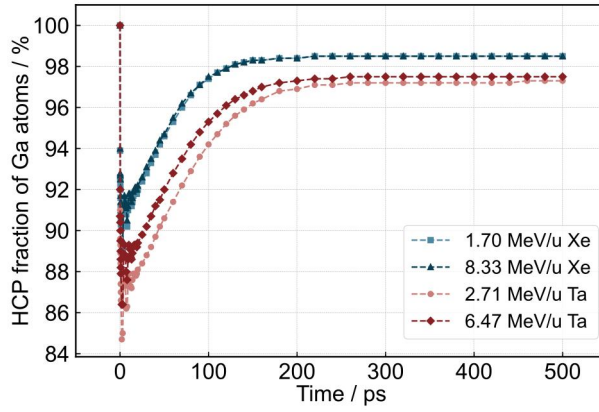


图 6 不同快重离子辐照下 Ga 原子 HCP 结构占比

Fig. 6. HCP structure fraction of Ga atoms under different SHI irradiation.

以局部结构熵作为衡量晶格无序性的物理指标，对四种快重离子辐照 GaN 形成的非晶核心区域进行系统量化，对应的熵径向分布曲线如图 7 所示。高无序度的非晶核心区表现为明显的局域高熵平台。例如图 7(a)中得出的 1.70 MeV/u Xe 离子非晶核心区半径为 1.33 nm，该数值与图 5 横截面结构观测到的非晶核心区尺寸基本一致。熵值的径向分布规律清晰表明，中心高熵平台的径向半径随着离子电子能损的增加以及入射速度的降低而逐渐增大。电子能损更大的 Ta 离子产生的非晶核心半径显著大于 Xe 离子。此外，在电子能损相近的情况下，速度效应尤为明显。低速离子由于初始能量沉积在空间上更为局域化，导致热峰区域在冷却阶段更难实现完全的重结晶，最终残留的非晶核心半径因此大于高速离子。

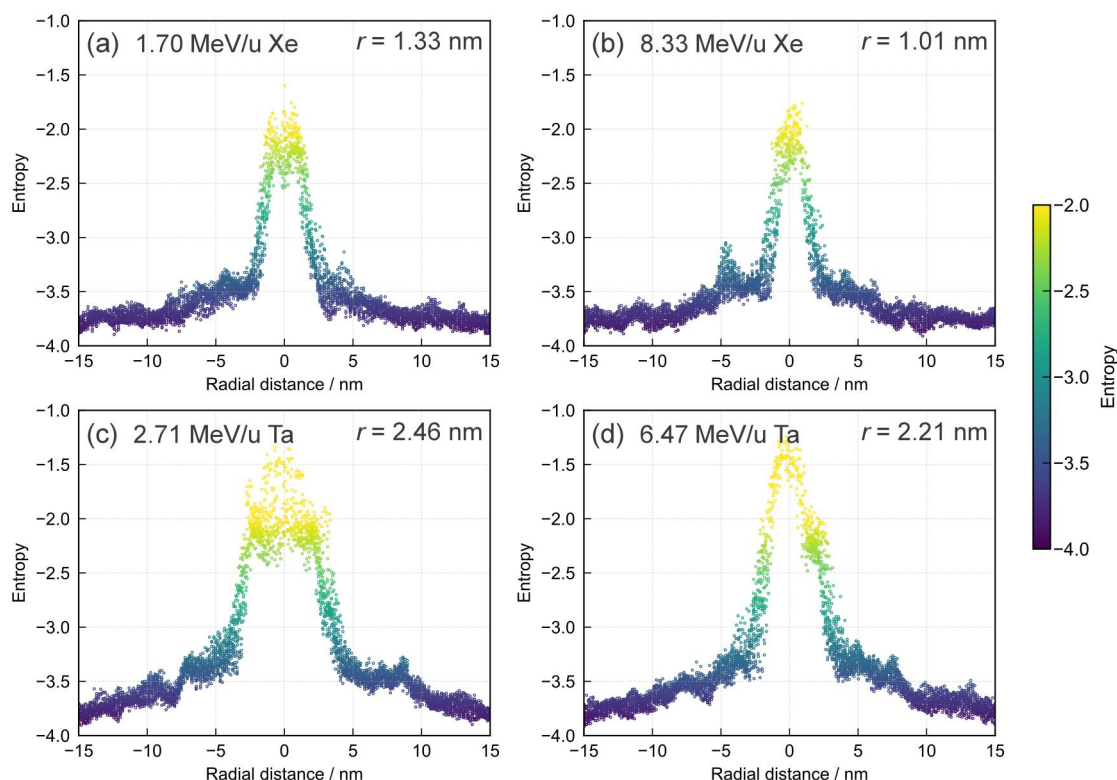


图 7 不同快重离子辐照下, GaN 局部熵值的径向分布 (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe;
(c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta

Fig. 7. Radial profiles of local structural entropy of GaN under different SHI irradiation: (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta.

具体而言, 在 Xe 离子辐照条件下, 随着入射速度由 8.33 MeV/u 降至 1.70 MeV/u, 非晶核心区半径相应由 1.01 nm 扩大至 1.33 nm。相似的规律在 Ta 离子体系中也得到了验证, 6.47 MeV/u 与 2.71 MeV/u 的入射速度分别对应 2.21 nm 与 2.46 nm 的核心区半径。如图 8 所示, 相近电子能损值下, 这些非晶核心区的定量尺寸与宏观实验表征结果高度吻合^[10]。低速重离子引发非晶核心区半径的增大进一步证明速度效应对材料内部结构损伤的加剧作用。

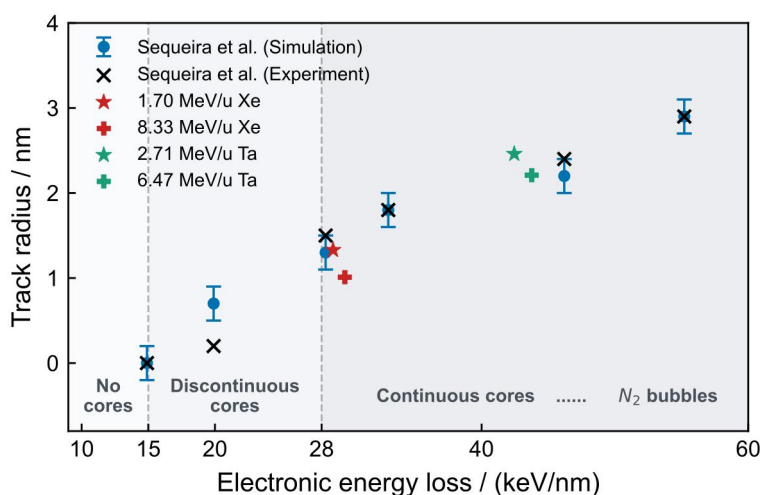


图 8 快重离子辐照 GaN 形成的非晶径迹半径与实验数据的定量对比^[9,10]

Fig. 8. Quantitative comparison of amorphous track radii in GaN under SHI irradiation with experimental data^[9,10].

3.3 辐照损伤

快重离子辐照作用下形成的最终离子径迹直观反映了材料内部留存的永久性晶体结构损伤。图 9 展示了四种快重离子辐照后 GaN 内部离子径迹的微观剖面形貌，整体均呈现出由高度无序的非晶区与离散纳米气泡所组成的连续柱状结构。电子能损的大小主导了损伤形貌的剧烈程度。在约 29 keV/nm Xe 离子（1.70 MeV/u 和 8.33 MeV/u）辐照下，离子径迹的形貌特征相对较弱，仅在径迹中心出现少量不连续的离散气泡。而当电子能损增大至约 43 keV/nm 时，Ta 离子（2.71 MeV/u 和 6.47 MeV/u）辐照形成的柱状径迹内部则演化出清晰可见且连续分布的大尺寸气泡结构。

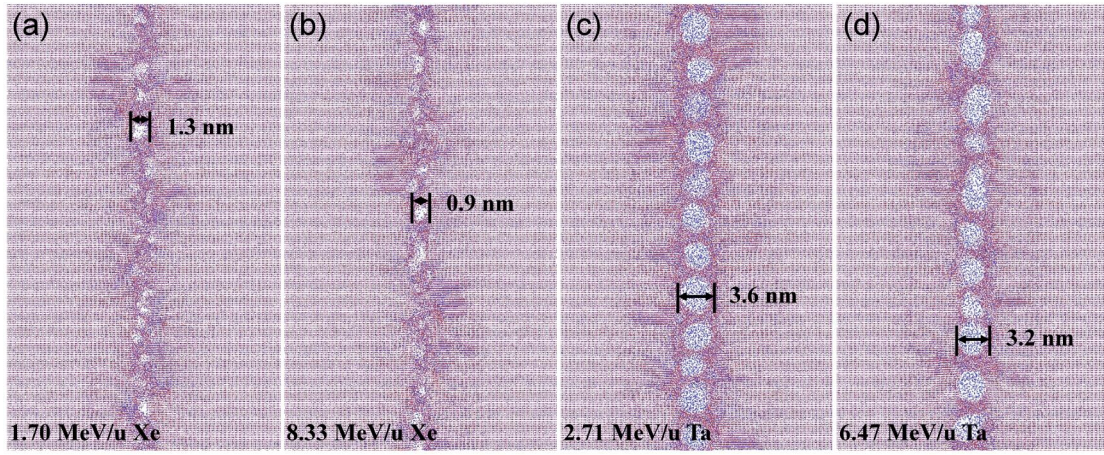


图 9 不同快重离子辐照下 GaN 离子径迹示意图 (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta

Fig. 9. Schematics of ion tracks in GaN under different SHI irradiation: (a) 1.70 MeV/u Xe; (b) 8.33 MeV/u Xe; (c) 2.71 MeV/u Ta; (d) 6.47 MeV/u Ta.

相近电子能损条件下径迹的具体空间尺寸受离子入射速度的调控。剖面观测结果表明，离子径迹随入射速度的提升呈现出较为明显的收缩特征，内部可辨识气泡的尺寸变化作为一项定量指标反映了这一收缩过程。当 Xe 离子的入射速度由 1.70 MeV/u 提高到 8.33 MeV/u 时，径迹中心可辨识气泡的直径由 1.3 nm 缩小至 0.9 nm。相似地，Ta 离子速度由 2.71 MeV/u 提高到 6.47 MeV/u，其中心可辨识气泡的最大直径相应由 3.6 nm 缩小至 3.2 nm。

离子径迹的形成伴随着材料内部剧烈的原子移位与晶格重排，为揭示其微观结构演化机制，分别对不同快重离子辐照下 GaN 体系中 Ga-Ga 键和 N-N 键的径向分布函数（radial distribution function, RDF）进行分析，如图 10 所示。

由图可知，Ga-Ga 键与 N-N 键均在约 3.2 Å 处形成 RDF 主峰，该特征键长与 GaN 的晶格常数高度匹配，对应完整的晶体结构特征。除此之外，Ga-Ga 键和 N-N 键分别在约 2.85 Å 和 1.15 Å 处出现微弱的次级特征峰。其中，2.85 Å 对应液态 Ga 的特征键长^[27]，1.15 Å 对应 N₂ 分子的特征键长^[28]。

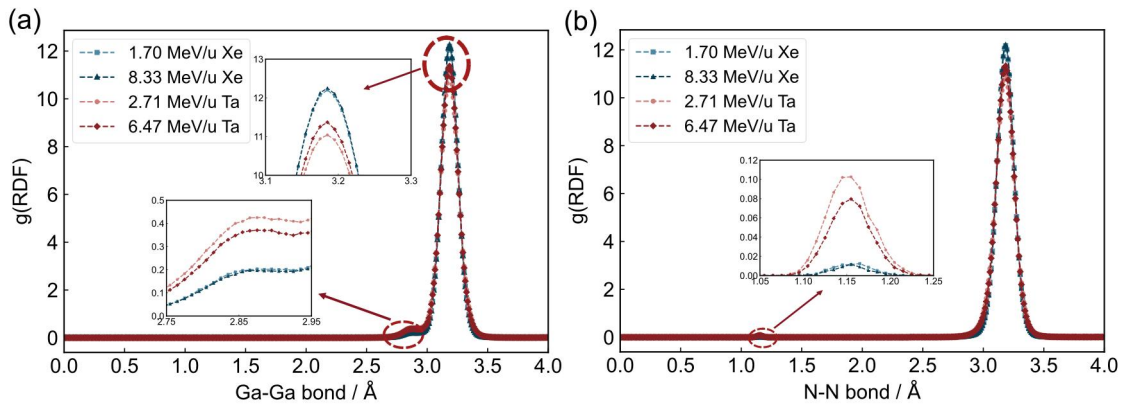


图 10 不同快重离子辐照下 GaN 径向分布函数 (a) Ga-Ga 键; (b)N-N 键

Fig. 10. Radial distribution function in GaN under different SHI irradiation: (a) Ga-Ga bonds; (b) N-N bonds.

次级特征峰的出现映射了径迹区域晶体结构分解与重组的全过程。快重离子辐照诱发的极端热峰效应使离子径迹中心区域发生瞬时熔融，致使纤锌矿 GaN 晶体结构分解，生成液态 Ga 与 N_2 分子。然而，重结晶过程并不能完全恢复 GaN 的完整晶体结构，仍有部分分解产生的 Ga 团簇与 N_2 分子残留于离子径迹中心区域。结合图 9 的剖面形貌分析， N_2 分子大量聚集并最终演化为径迹中心清晰可见的纳米气泡，Ga 团簇及重结晶的纤锌矿 GaN 则紧密环绕分布于 N_2 气泡周围。

进一步比对不同速度下的径向分布函数峰值可知，相同电子能损值下，随着入射离子速度的降低，3.2 Å 处的晶体主峰强度呈现出明显的下降趋势。相应地，约 2.85 Å 处的液 Ga 峰与约 1.15 Å 处的 N_2 分子峰值则逐渐升高，表明晶体结构分解程度进一步加剧。图 11 定量统计了不同快重离子辐照后 GaN 体系内产生的 N_2 分子线密度。以 Ta 离子辐照为例，2.71 MeV/u 的低速入射产生了 $11.37 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ 的 N_2 分子线密度，当速度提升至 6.47 MeV/u 时该线密度降低至 $8.25 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ 。该数据进一步证实较低入射速度的快重离子会引发纤锌矿 GaN 结构更严重的分解，进而在离子径迹中心产生更多数量的 N_2 分子。

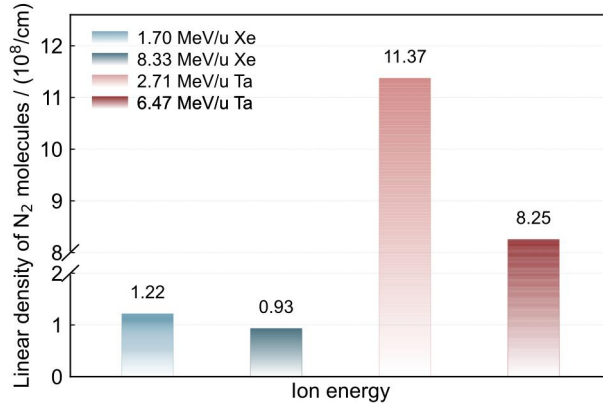


图 11 不同快重离子辐照下 GaN 中 N₂ 分子线密度

Fig. 11. Linear density of N₂ molecules in GaN under different SHI irradiation.

除了晶体结构损伤,快重离子辐照在 GaN 内部产生了一定数量的扩展缺陷,其中以原子位错最为显著。图 12 展示了不同辐照条件下 GaN 内部总位错密度的时间演化规律。随着熔融重结晶过程的推进,位错密度持续增加并趋于稳定,且表现出随入射离子速度降低而增大的普遍趋势。以 Ta 离子为例,当入射速度由 6.47 MeV/u 降低至 2.71 MeV/u 时,体系稳态总位错密度由约 $1.42 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 提升至约 $1.47 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。相似的演化规律在 Xe 离子辐照条件下也得到了充分印证,1.70 MeV/u 的低速入射产生的位错密度同样高于 8.33 MeV/u 的高速入射。

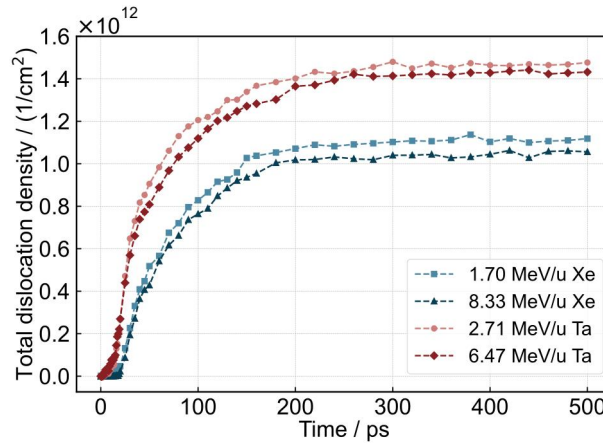


图 12 不同快重离子辐照下 GaN 中总位错密度时间演化

Fig. 12. Evolution of total dislocation density in GaN under different SHI irradiation.

微观缺陷的空间分布特征显示,各类位错均围绕离子径迹非晶核心区分布,主要包括螺位错与刃位错两类,如图 13 (a) 所示。相较于高速离子辐照,低

速离子由于初始能量沉积在空间上更为局域化，产生了更为密集的位错网络，尤其是螺位错的比例显著升高。此外，离子径迹周围形成了大量具有面心立方（FCC）结构的原子团簇，即 GaN 的典型亚稳相闪锌矿相，其空间分布如图 13（b）所示。结合图 13（a）对比分析发现，该闪锌矿纳米域的分布区域与螺位错富集区域在空间上高度重合。这种亚稳相与位错网络的空间伴生现象源于热峰驱动的超快非平衡动力学机制。快重离子辐照形成的瞬时极端高温高压环境促使径迹周边晶格发生超快熔融。随后的冷却过程本质上是液相 GaN 的外延重结晶过程。然而，这种超快熔融-淬火过程偏离了热力学平衡态，使得部分熔融区原子没有足够的时间弛豫到能量最低的稳定纤锌矿构型，而是形成能量相对较高的亚稳态闪锌矿结构。

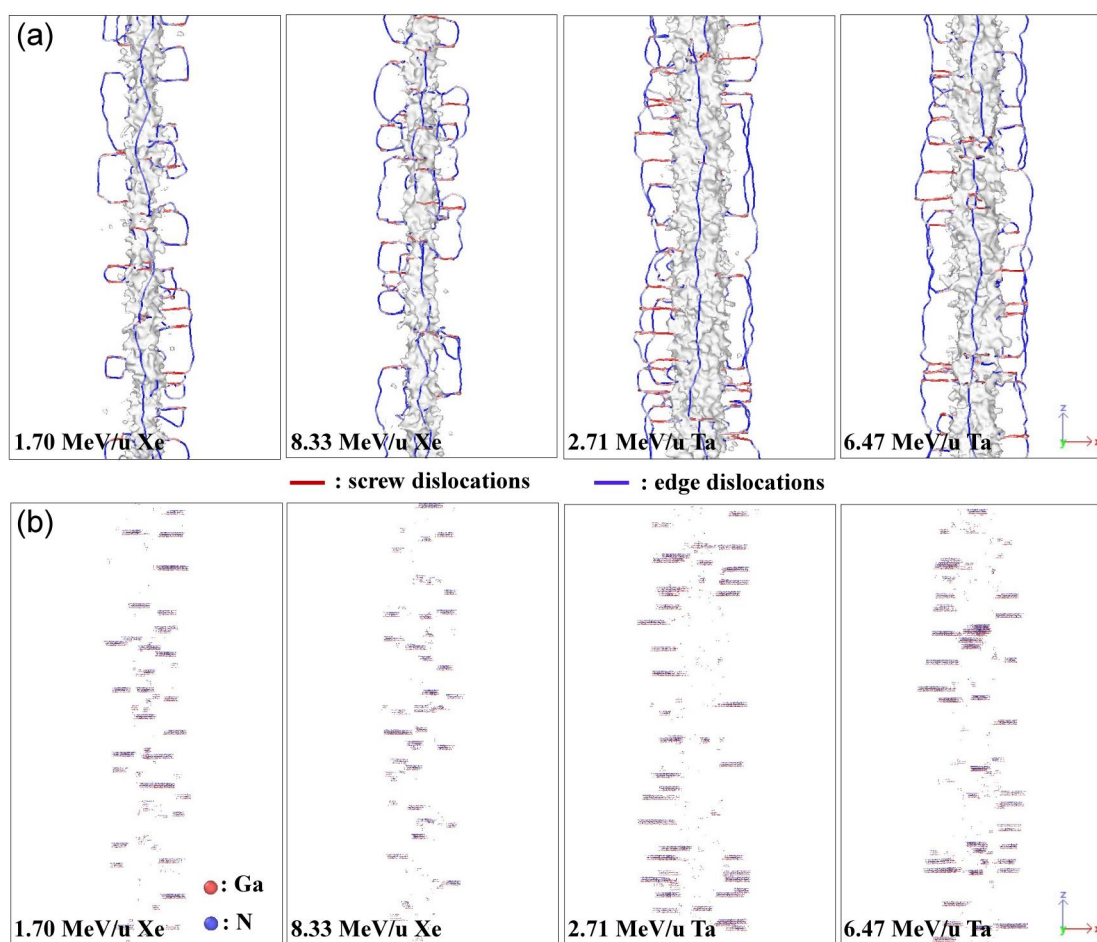


图 13 不同快重离子辐照 GaN (a) 位错空间分布；(b) 闪锌矿 GaN 空间分布

Fig. 13. Under different SHI irradiated GaN: (a) dislocation distribution; (b) zincblende GaN

distribution.

为了进一步探究速度效应对闪锌矿纳米域的具体影响,图 14 定量统计了不同快重离子辐照诱导形成的闪锌矿纳米域内原子的线密度。在 Ta 离子辐照下, 2.71 MeV/u 的低速离子产生的 FCC 结构 Ga 原子与 N 原子线密度分别高达 $9.61 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ 与 $7.57 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$, 显著高于 6.47 MeV/u 高速离子对应的 $8.94 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ 与 $6.52 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ 。同样在 Xe 离子辐照条件下, 低速入射也产生了更高密度的闪锌矿纳米域组分。

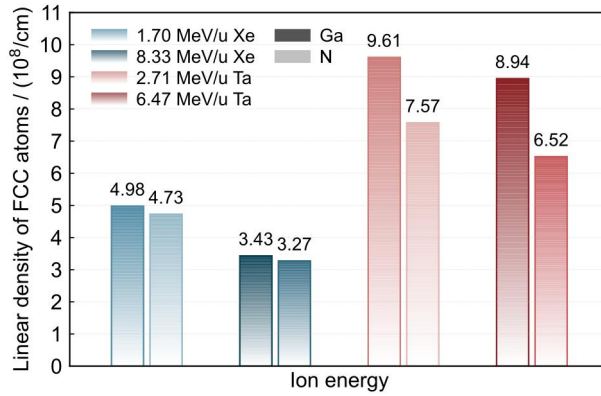


图 14 不同快重离子辐照下 GaN 中 FCC 结构原子线密度

Fig. 14. Linear density of FCC atoms in GaN under different SHI irradiation.

值得注意的是,在所有辐照条件下,闪锌矿纳米域内的 Ga 原子线密度始终高于 N 原子线密度。该现象可归因于径迹中心部分 N 原子结合形成了 N_2 分子从而造成了局域的富镓缺氮配比。在 GaN 体系中,这类富含 N 空位的局部团簇往往具备显著的浅施主特性提供丰富的自由载流子。相关理论计算与宏观器件实验的交叉印证表明,空间上高度伴生的螺位错网络能够凭借其特有的局域势阱与缺陷态有效捕获并传导这些过剩载流子,从而构建出微观漏电通道^[29-31]。由于低速快重离子在空间上表现出更强烈的能量局域化,这不仅加剧了径迹中心的非晶化与 N_2 气泡聚集,同时还在外围诱发了密度更高的富镓闪锌矿纳米域与螺位错网络。基于这种微观缺陷在空间上的高度重叠效应合理推断,

低速快重离子辐照可能会提升连续漏电通道的形成概率，进而成为加剧 GaN 器件在极端辐射环境下发生单粒子烧毁风险的重要潜在因素。

4 结论

本文基于多尺度模拟框架深入揭示了快重离子辐照下纤锌矿 GaN 的速度效应机制。研究表明，在相近电子能损条件下入射离子速度越低，更为局域化的能量沉积所造成的晶格损伤程度越严重。这种加剧的损伤效应源于低速离子激发的极端热峰引发了更为剧烈的超快非平衡熔融与淬火过程。随着入射离子速度的降低，离子径迹半径和 N_2 气泡尺寸明显增大，体系内 N_2 分子线密度、总位错密度与闪锌矿相原子线密度也随之升高，由此产生的高密度微观缺陷可能会提升垂直漏电通道的形成概率。这一演化规律从微观晶格层面揭示了 GaN 器件单粒子烧毁风险加剧的内在诱因，为理解快重离子辐照下 GaN 器件的电学性能退化机理提供关键数据支撑。

参考文献

- [1] Lei Z S, Sun X W, Liu Z J, Song T, Tian J H, China 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 198102 [雷振帅, 孙小伟, 刘子江, 宋婷, 田俊红 2022 物理学报 **71** 198102]
- [2] Singh K, Verma M, Rathi V, Kumar V, Kanjilal D, Brajpuriya R K, Kumar A 2025 *J Mater Sci: Mater Electron* **36** 1795
- [3] Liang J, He S, Liao W, Bai Y, Li W, Shi T, Zang H, Wei J, He H, He C 2026 *Journal of Applied Physics* **139** 085701
- [4] He H, Liu W, Zhang P, Liao W, Tong D, Yang L, He C, Zang H, Zong H 2020 *Materials* **13** 3627
- [5] Pearton S J, Haque A, Khachatryan A, Ildefonso A, Chernyak L, Ren F 2021 *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **10** 075004
- [6] Chen R, Liang Y N, Han J W, Wang X, Yang H, Chen Q, Yuan R J, Ma Y Q, Shangguan S P, China 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 116102 [陈睿, 梁亚楠, 韩建伟, 王璇, 杨涵, 陈钱, 袁润杰, 马英起, 上官士鹏 2021 物理学报 **70** 116102]
- [7] Giofre R, Colantonio P, Costanzo F, Vitobello F, Lopez M, Cabria L 2021 *IEEE Microw. Wireless Compon. Lett.* **31** 296
- [8] Toulemonde M, Dufour C, Paumier E 1992 *Phys. Rev. B* **46** 14362
- [9] Sequeira M C, Mattei J G, Vazquez H, Djurabekova F, Nordlund K, Monnet I, Mota-Santiago P, Kluth P, Grygiel C, Zhang S, Alves E, Lorenz K 2021 *Commun Phys* **4** 51
- [10] Sequeira M C, Djurabekova F, Nordlund K, Mattei J, Monnet I, Grygiel C, Alves E, Lorenz K 2022 *Small* **18** 2102235

- [11] Mahfuz M, Reza F, Liu X, Chu R, Lang M, Snure M, Wang X, Jin M 2024 *Applied Physics Letters* **124** 112104
- [12] Toulemonde M, Assmann W, Dufour C, Meftah A, Trautmann C 2012 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **277** 28
- [13] Rymzhanov R A, Medvedev N, Volkov A E 2023 *J Mater Sci* **58** 14072
- [14] Rymzhanov R A, Gorbunov S A, Medvedev N, Volkov A E 2019 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **440** 25
- [15] Velişa G, Iancu D, Zarkadoula E, Tong Y, Zhang Y, Weber W J 2024 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **57** 365303
- [16] Han X, Huang Q, Crespillo M L, Zarkadoula E, Liu Y, Wang X, Liu P 2022 *Journal of Materials Science & Technology* **116** 30
- [17] Hanžek J, Fazinić S, Kumar S, Karlušić M 2024 *Radiation Physics and Chemistry* **215** 111362
- [18] Fleischer R L, Price P B, Walker R M, Hubbard E L 1967 *Phys. Rev.* **156** 353
- [19] Zhao Z H, Qu G H, Yao J C, Min D M, Zhai P F, Liu J, Li S T, China 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 116102 [赵中华, 渠广昊, 姚佳池, 闵道敏, 翟鹏飞, 刘杰, 李盛涛 2021 物理学报 **70** 355]
- [20] Toulemonde M, Dufour Ch, Meftah A, Paumier E 2000 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with*

- [21] Duffy D M, Rutherford A M 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 016207
- [22] Rutherford A M, Duffy D M 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 496201
- [23] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, Bolintineanu D S, Brown W M, Crozier P S, In 'T Veld P J, Kohlmeyer A, Moore S G, Nguyen T D, Shan R, Stevens M J, Tranchida J, Trott C, Plimpton S J 2022 *Computer Physics Communications* **271** 108171
- [24] He H, He C, Zhang J, Liao W, Zang H, Li Y, Liu W 2020 *Nuclear Engineering and Technology* **52** 1537
- [25] Nord J, Albe K, Erhart P, Nordlund K 2003 *J. Phys.: Condens. Matter* **15** 5649
- [26] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [27] Di Cicco A, Filippini A 1993 *Journal of Non-Crystalline Solids* **156–158** 102
- [28] Jerabek P, Frenking G 2014 *Theor Chem Acc* **133** 1447
- [29] Ren Y, Liu H, Song X, Gu G, Lv Y, Feng Z, Li Y, Pang C, Yu Y, Gao C, Zhou S, Ni Y 2026 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **73** 1932
- [30] Yao Y, Huang S, Cao R, Zhang Z, Wang X, Jiang Q, Shi J, Zhang C, Liu J, Wei K, Pei Y, Zhang H, Qian H, Guo F, Li G, Tang N, Luo J W, Ge W, Liu X, Shen B, Chen K J 2025 *Nat Commun* **16**
- [31] Xie Y, Shi H, Huang M, Chu W, Chen S, Gong X G 2026 *Phys. Rev. B* **113** 195203

Velocity effect on microscopic damage mechanisms of gallium nitride under swift heavy ion irradiation *

LIANG Jiayu ¹⁾ HE Shaowei ¹⁾ BAI Yurong ¹⁾ ZHANG Yuxin ¹⁾ ZANG Hang ¹⁾

LI Pei ¹⁾ LI Yonghong ¹⁾ LIU Wenbo ¹⁾ HE Huan ^{1)2)†} HE Chaohui ^{1)2)†}

1) (School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

2) (National Key Laboratory for High Energy Pulsed Power, Xi'an 710049, China)

Abstract

This study employs a multiscale simulation method coupling the two-temperature model with molecular dynamics to systematically investigate the microscopic mechanisms underlying the swift heavy ion (SHI) velocity effect on irradiation damage in gallium nitride (GaN). The simulations describe the coupled energy transfer between the electronic and lattice subsystems on the femtosecond timescale, together with transient lattice melting, recrystallization, and microscopic defect evolution on the atomic scale. The results indicate that, under similar electronic energy loss conditions, a lower incident ion velocity leads to highly localized energy deposition and consequently more severe lattice damage. Taking Ta ion irradiation as an example, when the incident velocity decreases from 6.47 MeV/u to 2.71 MeV/u, the continuous ion tracks composed of N₂ bubbles become more pronounced. Specifically, the radius of the amorphous core expands from 2.21 nm to 2.46 nm, and the maximum diameter of the central N₂ bubbles enlarges from 3.2 nm to 3.6 nm. Meanwhile, N₂ molecules linear density rises from $8.25 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ to $11.37 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$, indicating that low-velocity ions induce more severe decomposition of the wurtzite GaN lattice. Furthermore, there is a proliferation in the densities of both the abundant Ga-rich and N-deficient metastable zincblende GaN nanodomains generated around the ion tracks and the screw dislocation networks that exhibit a strong spatial correlation with them. The high density of microscopic defects induced by low-velocity ions could elevate the probability of forming vertical leakage channels, thus serving as a critical potential factor that exacerbates the risk of single-event burnout in GaN devices. This study provides an essential theoretical basis and data support for understanding the electrical performance degradation mechanisms of GaN devices under SHI irradiation and for advancing radiation-hardening designs.

Keywords: gallium nitride, swift heavy ion, irradiation damage, velocity effect, ion

track

* Project supported by Innovation Scientific Program of CNNC, National Natural Science Foundation of China (NSFC) (No. 12405298), China Postdoctoral Science Foundation funded project (No. 2024M762610) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (No. xtr062025004).

† Corresponding author.E-mail: huanhe@xjtu.edu.cn, hechaohui@xjtu.edu.cn

The first author.E-mail: liangjiayu@stu.xjtu.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿