

基于分子动力学的纤锌矿 AlN 位移阈能与初级碰撞损伤模拟研究

王立罡, 王柳翔, 赵 强*

华北电力大学核科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年5月18日; 录用日期: 2026年6月4日; 发布日期: 2026年7月15日

摘 要

位移阈能是表征材料初始辐照损伤能力的重要参数。本文采用分子动力学方法研究了纤锌矿 AlN 中 Al 和 N 原子的方向相关位移阈能及初级碰撞级联损伤行为。位移阈能计算在 $10 \times 10 \times 6$ 超胞中进行, 选取 $[0001]$ 、 $[10\bar{1}0]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 四个典型晶向; 单级联碰撞模拟采用 $20 \times 20 \times 12$ 超胞, 考察 Al-PKA 和 N-PKA 沿 $[0001]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 晶向、在 100、500 和 1000 eV 条件下的损伤演化。通过初末态构型比较和晶格位点匹配方法, 对空位、间隙及反位缺陷进行了识别与统计。结果表明: Al 和 N 原子的位移阈能均具有明显各向异性, 其中 Al 原子沿 $[0001]$ 、 $[10\bar{1}0]$ 、 $[10\bar{1}1]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 晶向的位移阈能分别为 44、14、10 和 9 eV, N 原子分别为 30、9、7 和 9 eV, 表明 N 子晶格更易发生稳定离位; 残余缺陷总数随 PKA 能量升高显著增加, 并伴随反位缺陷形成; 与 $[0001]$ 晶向相比, $[11\bar{2}0]$ 晶向表现出更强的损伤空间展宽和更高的残余缺陷保留倾向。本文结果可为 AlN 辐照损伤模型参数选取及抗辐照器件设计提供原子尺度依据。

关键词

氮化铝, 分子动力学, 位移阈能, 碰撞级联, 反位缺陷, 辐照损伤

Molecular Dynamics Study of Threshold Displacement Energies and Primary Collision Cascade Damage in Wurtzite AlN

Ligang Wang, Liuxiang Wang, Qiang Zhao*

School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

Received: May 18, 2026; accepted: June 4, 2026; published: July 15, 2026

*通讯作者。

文章引用: 王立罡, 王柳翔, 赵强. 基于分子动力学的纤锌矿 AlN 位移阈能与初级碰撞损伤模拟研究[J]. 核科学与技术, 2026, 14(3): 131-143. DOI: 10.12677/nst.2026.143012

Abstract

Threshold displacement energy is a key parameter for characterizing the onset of radiation damage in materials. In this work, molecular dynamics simulations were performed to investigate the direction-dependent threshold displacement energies of Al and N atoms and the primary collision cascade damage behavior in wurtzite AlN. The threshold displacement energy calculations were carried out in a $10 \times 10 \times 6$ supercell along four representative crystallographic directions, namely, $[0001]$, $[10\bar{1}0]$, $[10\bar{1}1]$, and $[11\bar{2}0]$. Single-cascade simulations were performed in a $20 \times 20 \times 12$ supercell to examine damage evolution induced by Al-PKAs and N-PKAs along the $[0001]$ and $[11\bar{2}0]$ crystallographic directions at 100, 500, and 1000 eV. Vacancies, interstitials, and antisite defects were identified and quantified by comparing the initial and final atomic configurations using a lattice-site matching method. The results show that the threshold displacement energies of both Al and N atoms exhibit pronounced anisotropy. For Al atoms, the threshold displacement energies along $[0001]$, $[10\bar{1}0]$, $[10\bar{1}1]$, and $[11\bar{2}0]$ are 44, 14, 10, and 9 eV, respectively, whereas those for N atoms are 30, 9, 7, and 9 eV, indicating that the N sublattice is more susceptible to stable atomic displacement. The number of residual defects increases significantly with increasing PKA energy and is accompanied by the formation of antisite defects. Compared with the $[0001]$ crystallographic direction, the $[11\bar{2}0]$ crystallographic direction shows stronger spatial spreading of cascade damage and a higher tendency for residual defect retention. These results provide atomistic support for the parameterization of radiation-damage models and the design of radiation-tolerant AlN-based devices.

Keywords

Aluminum Nitride, Molecular Dynamics, Threshold Displacement Energy, Collision Cascade, Antisite Defect, Radiation Damage

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

氮化铝(AlN)是一种重要的宽禁带半导体和结构功能陶瓷材料,具有高热导率、高熔点、良好的化学稳定性以及优异的电绝缘性能,在高功率电子器件、深紫外光电子器件、压电器件以及核能和空间辐照环境相关器件中具有良好的应用前景。在上述服役条件下,材料不可避免地受到中子、离子、电子等高能粒子辐照,进而诱发原子离位、空位、间隙原子、反位缺陷及其复杂缺陷结构。这些辐照诱导缺陷将进一步影响材料的结构稳定性、热输运性能和电学特性,因此有必要从原子尺度揭示 AlN 初始辐照损伤的形成机制。

位移阈能(Ed)是表征材料抗辐照损伤能力的重要参数,通常定义为晶格原子离开平衡位置并在弛豫后形成稳定 Frenkel 对所需的最小初级离位原子(primary knock-on atom, PKA)能量。该参数不仅直接影响位移截面和 dpa 估算结果,也是多尺度辐照损伤模型的重要输入。对于二元化合物 AlN 而言,Al 和 N 原子在质量、局域配位环境和成键特征等方面存在差异,其位移阈能可能并不相同;同时,纤锌矿 AlN 具有各向异性的六方晶体结构,不同晶向上的原子排列和键合取向存在明显差别,因而其离位行为也应具有显著的方向依赖性。

实验上,特定原子和特定晶向位移阈能的直接测量较为困难,而分子动力学方法能够在原子尺度上追踪 PKA 弹道碰撞、能量传递、缺陷形成及热弛豫过程,因而成为研究辐照初始损伤的重要手段。近年来,国内外针对 AlN 辐照效应、位移损伤和点缺陷行为已开展了较多研究。已有实验研究表明,AlN 在离子辐照条件下具有较好的结构稳定性,但器件性能仍可能因位移损伤而发生退化[1][2];理论和模拟研究表明,AlN 中本征缺陷及辐照诱导缺陷的形成与演化对其辐照响应具有重要影响[3]-[6]。此外,针对 AlN 及相关氮化物体系的分子动力学研究表明,位移阈能和缺陷生成行为对原子种类、晶向及入射能量均较为敏感[7][8]。

尽管已有研究为认识 AlN 的辐照损伤行为提供了重要基础,但针对纤锌矿 AlN 中 Al 和 N 原子沿多条典型晶向的系统位移阈能计算,以及不同 PKA 能量下单级联碰撞形成与演化规律的研究仍相对有限。特别是对于各向异性位移阈能、反位缺陷形成以及损伤空间展宽特征之间的关联机制,仍有待进一步明确。与此同时,在高能短程碰撞过程中,常规经验势对强排斥相互作用的描述存在局限,因此有必要在适当势函数处理基础上开展更具针对性的模拟研究。

基于此,本文采用分子动力学方法研究纤锌矿 AlN 中 Al 和 N 原子沿典型晶向的位移阈能,并进一步模拟不同 PKA 能量下的单级联碰撞损伤行为。通过比较不同原子种类、不同入射方向和不同能量条件下的缺陷形成、空间分布及演化特征,揭示纤锌矿 AlN 初始辐照损伤的原子尺度各向异性规律。本文结果可为 AlN 辐照损伤模型构建及抗辐照器件设计提供参考。

2. 模型与方法

2.1. 计算模型

本文研究对象为六方纤锌矿结构 AlN,空间群为 P63mc。其常规晶胞含 4 个原子,其中 Al 原子和 N 原子各 2 个。在此基础上构建周期性超胞模型,用于位移阈能和碰撞级联模拟。纤锌矿 AlN 的晶体结构、原子种类、晶格矢量、堆积序列以及本文涉及的典型晶向如图 1 所示。位移阈能计算采用 $10 \times 10 \times 6$ 超胞,体系约含 2400 个原子;单级联碰撞模拟采用 $20 \times 20 \times 12$ 超胞,体系约含 19,200 个原子。所有计算均采用三维周期性边界条件,以表征体相 AlN 的辐照初始损伤行为。

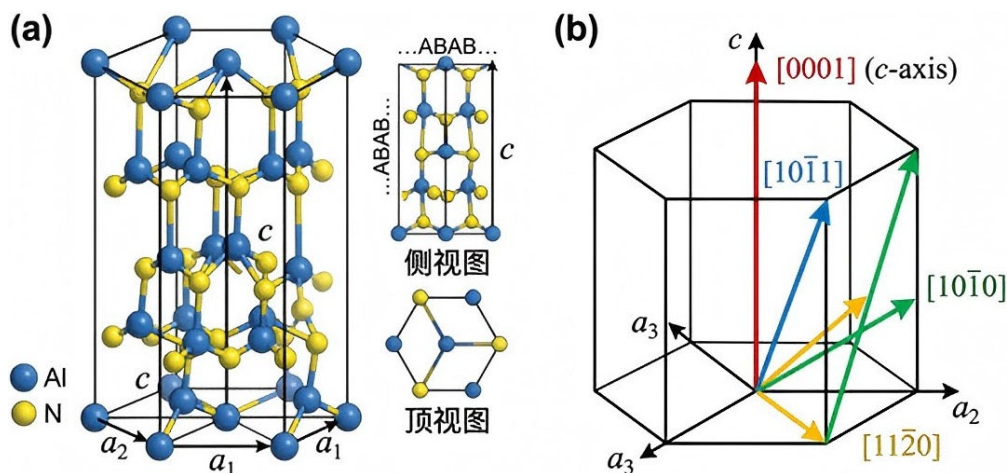


Figure 1. Wurtzite AlN (a) detailed crystal structure and orientations including atomic species, lattice vectors, and stacking sequence (with side and top views), and (b) simplified hexagonal unit cell highlighting key crystallographic direction vectors for cascade collision simulations

图 1. 纤锌矿 AlN (a)包含原子种类、晶格矢量、堆积序列(附侧视图和顶视图)和晶胞参数的详细晶体结构,以及(b)突出显示用于级联碰撞模拟的关键晶体学方向矢量的简化六方晶胞

2.2. 原子间相互作用势

AlN 原子间相互作用采用 Tungare 等提出的 Tersoff 势描述平衡态附近的成键特征[9]。考虑到辐照碰撞过程中原子间可能发生极短程接近, 常规经验势难以准确表征高能弹道阶段的强排斥相互作用, 因此在 Tersoff 势基础上引入 ZBL 短程排斥势[10]。两种势函数在短程范围内进行平滑连接, 连接区间取 0.2~1.0 Å。该势函数处理方式兼顾了 AlN 晶体的平衡结构特征和高能碰撞过程中的核间排斥作用, 适用于位移阈能和初级碰撞级联模拟。

2.3. PKA 选取与初始条件

初级离位原子选取自超胞中心附近的晶格原子, 以减弱边界效应对碰撞过程的影响。对于给定的 PKA 能量 E_{PKA} , 其初始速度由经典动能关系 $E_{\text{PKA}} = mv^2/2$ 确定, 其中 m 为 PKA 质量, v 为初始速度。计算中将 PKA 初速度沿预设晶向分解并赋值。

位移阈能计算选取 $[0001]$ 、 $[10\bar{1}0]$ 、 $[10\bar{1}1]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 四个典型晶向, 用于分析纤锌矿 AlN 中原子离位行为的各向异性。单级联碰撞模拟则选取 $[0001]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 两个代表性方向, 以考察不同晶向下损伤演化及缺陷保留特征。

2.4. 位移阈能计算方法

位移阈能计算在 $10 \times 10 \times 6$ 超胞中进行。每个工况首先进行能量最小化, 随后在 300 K 下进行热平衡; 平衡结束后, 对选定 PKA 赋予初始速度, 并在微正则系综下模拟其弹道碰撞过程; 碰撞结束后继续进行弛豫和冷却, 以获得稳定末态构型。

为保证高能碰撞过程的数值稳定性, 弹道阶段时间步长取 0.0001 ps, 后续弛豫阶段时间步长取 0.001 ps。位移阈能采用逐级扫描方法确定: 首先在若干离散能量点进行粗扫描, 再对临界能区进行加密计算。对于每一元素和晶向组合, 以形成稳定 Frenkel 对概率不低于 0.5 的最低 PKA 能量定义为其位移阈能 E_d 。

2.5. 单级联碰撞模拟设置

单级联碰撞模拟在 $20 \times 20 \times 12$ 超胞中开展。考察的 PKA 类型为 Al-PKA 和 N-PKA, 入射方向为 $[0001]$ 和 $[11\bar{2}0]$, 初始能量分别为 100、500 和 1000 eV。为减小统计涨落, 每组工况均进行 3 次独立重复计算, 共获得 36 组单级联模拟结果。

级联模拟过程包括初始平衡、弹道碰撞、热弛豫和冷却 4 个阶段。与位移阈能计算相比, 级联模拟采用更小的弹道阶段时间步长 0.00005 ps, 并适当延长后续弛豫时间, 以更充分地描述高能碰撞后缺陷的形成、迁移及部分回复过程。

2.6. 缺陷识别方法

位移阈能和级联损伤的缺陷识别均基于初态与末态构型的比较。对于位移阈能计算, 通过比较原子在初态和末态中的分数坐标位移判断是否发生稳定离位; 当位移超过设定阈值时, 认为形成稳定缺陷, 并据此判定是否产生 Frenkel 对。

对于单级联碰撞模拟, 采用晶格位点匹配方法识别空位、间隙和反位缺陷。首先对末态构型进行整体漂移修正; 随后以初始晶格位点为参考, 分别建立 Al 子晶格和 N 子晶格位点集合, 并对末态原子进行最近位点搜索。位点判据半径取 2.0 Å: 若正常晶格位点在末态未被占据, 则记为空位; 若原子偏离任一正常位点或多个原子对应同一位点, 则记为间隙原子; 若 Al 原子占据 N 子晶格位点附近, 则记为 Al_N

反位缺陷；若 N 原子占据 Al 子晶格位点附近，则记为 N_{Al} 反位缺陷。

此外，为表征损伤区的空间分布特征，进一步统计各类缺陷相对于 PKA 初始位置的径向距离，并按 5 Å 壳层宽度进行分布分析。

2.7. 结果统计

位移阈能结果通过不同能量下稳定 Frenkel 对形成概率的统计获得，最终提取不同元素在各晶向上的 Ed 值。单级联模拟结果则进一步统计残余缺陷总数、缺陷类型组成、反位缺陷数量及其径向分布特征，并据此开展后续结果分析。

3. 结果与分析

3.1. Al 和 N 原子位移阈能的各向异性

图 2 和表 1 给出了纤锌矿 AlN 中 Al 和 N 原子沿不同晶向的位移阈能。结果表明，两类原子的位移阈能均表现出明显的方向依赖性，且 Al 原子的位移阈能整体高于 N 原子。对于 Al 原子，沿 [0001]、[10 $\bar{1}$ 0]、[10 $\bar{1}$ 1] 和 [11 $\bar{2}$ 0] 晶向的位移阈能分别为 44、14、10 和 9 eV；对于 N 原子，相应数值分别为 30、9、7 和 9 eV。该结果表明，在相同晶向条件下，N 子晶格更易发生稳定离位。

从晶向效应看，[0001] 晶向对应的位移阈能最高，说明沿 c 轴方向形成稳定 Frenkel 对需要更高的能量输入；相比之下，[10 $\bar{1}$ 0]、[10 $\bar{1}$ 1] 和 [11 $\bar{2}$ 0] 晶向的位移阈能明显较低，表明这些方向上的局域原子排布和能量传递路径更有利于离位缺陷形成。以 Al 原子为例，[0001] 晶向的位移阈能约为 [11 $\bar{2}$ 0] 晶向的 4.9 倍；对于 N 原子，[0001] 晶向的位移阈能约为 [10 $\bar{1}$ 1] 晶向的 4.3 倍。说明若在辐照损伤模型中忽略晶向效应而采用单一平均阈值，将难以准确描述纤锌矿 AlN 的初始损伤行为。

位移阈能由多次能量扫描的统计结果确定。本文以形成稳定 Frenkel 对概率不低于 0.5 的最低能量作为位移阈能定义，从而兼顾了临界能区缺陷形成的统计涨落特征。总体而言，纤锌矿 AlN 的位移阈能同时受原子种类和晶向控制，并呈现出“N 原子低于 Al 原子、[0001] 晶向高于其余晶向”的基本规律。本文得到的 N 原子位移阈能整体低于 Al 原子，这与已有分子动力学研究的总体趋势一致[11][12]。

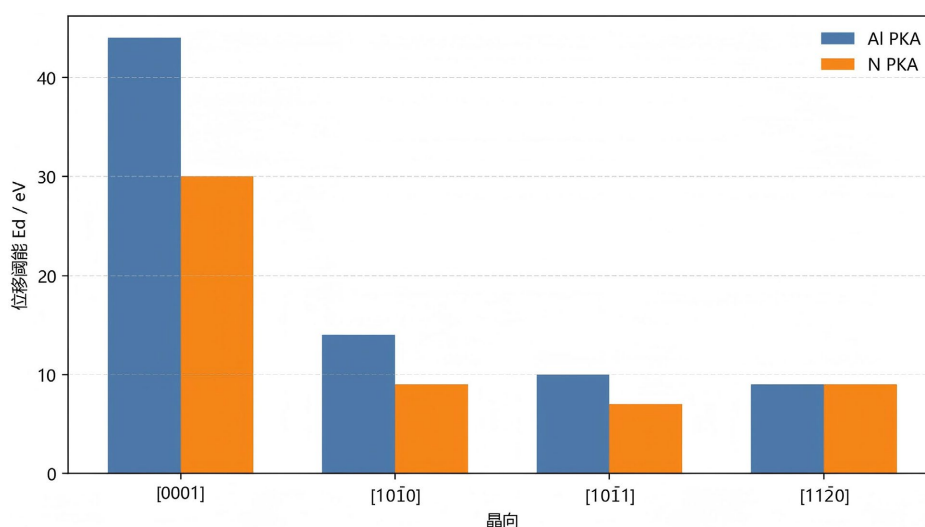


Figure 2. Threshold displacement energies of Al and N atoms along different crystallographic directions

图 2. Al 和 N 原子沿不同晶向的位移阈能

Table 1. Threshold displacement energies of Al and N atoms along different crystallographic directions
表 1. Al 和 N 原子沿不同晶向的位移阈能

元素	晶向	位移阈能/eV	临界下限/eV	概率阈值
Al	[0001]	44.00	42.00	0.5
Al	$[10\bar{1}0]$	14.00	12.00	0.5
Al	$[10\bar{1}1]$	10.00	5.00	0.5
Al	$[11\bar{2}0]$	9.00	8.00	0.5
N	[0001]	30.00	25.00	0.5
N	$[10\bar{1}0]$	9.00	8.00	0.5
N	$[10\bar{1}1]$	7.00	6.00	0.5
N	$[11\bar{2}0]$	9.00	8.00	0.5

3.2. 不同 PKA 能量下残余缺陷数量变化规律

图 3 和表 2 给出了不同 PKA 能量和晶向条件下的残余缺陷总数。结果表明，残余缺陷总数随 PKA 能量升高而显著增加。对于 Al-PKA，沿 [0001] 晶向时，残余缺陷总数平均值由 100 eV 下的 7.67 增加至 500 eV 下的 35.00，并在 1000 eV 时达到 75.67；沿 $[11\bar{2}0]$ 晶向时，相应数值分别为 9.33、35.33 和 67.33。对于 N-PKA，沿 [0001] 晶向时残余缺陷总数分别为 6.33、41.33 和 75.33；沿 $[11\bar{2}0]$ 晶向时分别为 6.33、35.33 和 69.00。

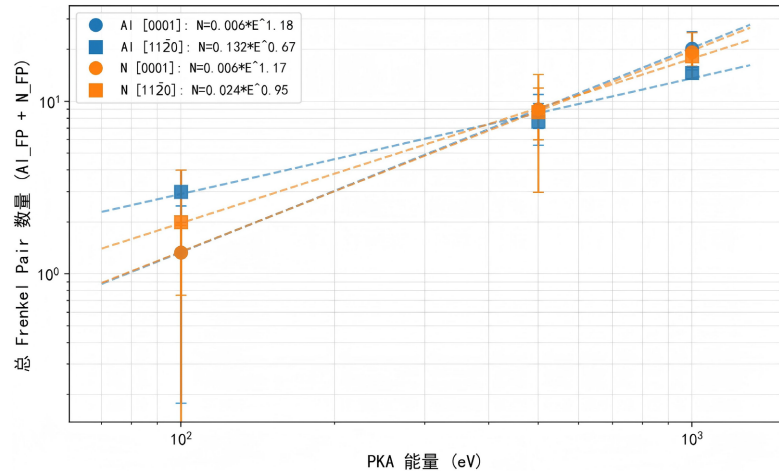


Figure 3. Total number of residual defects under different PKA energies and crystallographic directions
图 3. 不同 PKA 能量和晶向下的残余缺陷总数

上述结果表明，随着 PKA 能量提高，参与离位和重排的原子数迅速增加，碰撞损伤由低能条件下的局域点缺陷逐步演化为高能条件下的多缺陷耦合结构。就 PKA 类型差异而言，在 500 eV 条件下，N-PKA 沿 [0001] 晶向产生的平均残余缺陷数最高，为 41.33，略高于 Al-PKA 在同方向下的 35.00，表明在中等能量范围内 N-PKA 可能诱发更强的局域级联响应。随着能量升高至 1000 eV，Al-PKA 和 N-PKA 在 [0001] 晶向下的残余缺陷总数趋于接近，说明在更高能量下，多次碰撞、热弛豫和缺陷复合过程削弱了初始 PKA 类型对最终缺陷总量的影响。

从方向效应看， $[11\bar{2}0]$ 晶向在部分工况下表现出略高的缺陷保留，但这种差异并不随能量单调保持一致。这说明高能级联损伤并不完全由低能位移阈能决定，后续碰撞扩展、局域热化和缺陷复合过程同样发挥重要作用。因此，位移阈能更适合表征损伤萌生难易，而级联模拟则反映了高能辐照条件下更完整的损伤演化特征。

Table 2. Total number of residual defects under different PKA energies and crystallographic directions
表 2. 不同 PKA 能量和晶向下的残余缺陷总数

PKA 类型	晶向	能量/eV	重复数	残余缺陷总数	回转半径/Å	最大半径/Å
Al-PKA	[0001]	100.0	3	7.67 ± 2.52	3.15 ± 1.59	11.33 ± 3.27
Al-PKA	[0001]	500.0	3	35.00 ± 2.65	5.58 ± 0.74	26.32 ± 0.95
Al-PKA	[0001]	1000.0	3	75.67 ± 4.04	7.87 ± 2.17	37.57 ± 6.74
Al-PKA	$[11\bar{2}0]$	100.0	3	9.33 ± 2.08	4.49 ± 0.45	14.74 ± 2.33
Al-PKA	$[11\bar{2}0]$	500.0	3	35.33 ± 5.69	10.86 ± 3.46	37.82 ± 9.35
Al-PKA	$[11\bar{2}0]$	1000.0	3	67.33 ± 12.10	12.10 ± 3.22	47.97 ± 5.39
N-PKA	[0001]	100.0	3	6.33 ± 1.53	3.29 ± 0.81	11.60 ± 0.09
N-PKA	[0001]	500.0	3	41.33 ± 4.16	5.32 ± 1.68	23.99 ± 5.32
N-PKA	[0001]	1000.0	3	75.33 ± 10.12	7.41 ± 0.23	36.88 ± 3.51
N-PKA	$[11\bar{2}0]$	100.0	3	6.33 ± 5.13	3.91 ± 1.12	17.46 ± 0.72
N-PKA	$[11\bar{2}0]$	500.0	3	35.33 ± 12.66	9.91 ± 0.55	38.12 ± 5.73
N-PKA	$[11\bar{2}0]$	1000.0	3	69.00 ± 5.57	11.14 ± 2.18	48.66 ± 6.40

3.3. 缺陷类型组成及反位缺陷特征

图 4 和表 3 给出了不同工况下空位、间隙和反位缺陷的统计结果。结果表明，AlN 的级联损伤并非仅表现为简单的 Frenkel 对形成，而是呈现出空位、间隙与反位缺陷并存的复合损伤特征。

随着 PKA 能量升高，空位和间隙原子数量均明显增加，且间隙原子的增长幅度通常更大。以 Al-PKA 沿 $[0001]$ 晶向为例，100 eV 时平均 Al 空位、N 空位、Al 间隙和 N 间隙分别为 1.67、2.00、3.33 和 4.00；当能量升高至 1000 eV 时，相应数值增至 18.00、15.33、34.67 和 28.33。对于 N-PKA 沿 $[0001]$ 晶向，100 eV 时对应数值分别为 2.33、1.33、4.00 和 2.67，而在 1000 eV 时增至 19.67、14.33、37.33 和 27.67。说明无论初始 PKA 类型为 Al-PKA 还是 N-PKA，级联碰撞最终均会在两个子晶格中诱发明显的残余损伤。

除常规空位和间隙外，各工况中均可观察到一定数量的反位缺陷。以 $[0001]$ 晶向为例，Al-PKA 条件下，Al_N和 N_{Al}的平均数量由 100 eV 时的 0.67 和 0.33 增加至 1000 eV 时的 4.00 和 4.33；N-PKA 条件下，相应数值由 1.67 和 0.33 增加至 5.67 和 2.00。表明高能碰撞不仅会诱发晶格离位，还会促使部分原子跨子晶格占位，从而形成局域化学环境改变更为显著的反位缺陷。这一结果与已有关于氮化物体系辐照缺陷复杂化的认识一致[3] [4] [8]。

从晶向比较看， $[11\bar{2}0]$ 晶向下部分反位缺陷数量高于 $[0001]$ 晶向。例如，Al-PKA 在 1000 eV、 $[11\bar{2}0]$ 晶向下的 Al_N平均数量为 6.67，高于 $[0001]$ 晶向下的 4.00；N-PKA 在 1000 eV、 $[11\bar{2}0]$ 晶向下的 N_{Al}平均数量为 2.67，也高于 $[0001]$ 晶向下的 2.00。说明 $[11\bar{2}0]$ 晶向更开放的碰撞传播路径有利于异种原子跨子晶格占位，从而提高反位缺陷的保留概率。

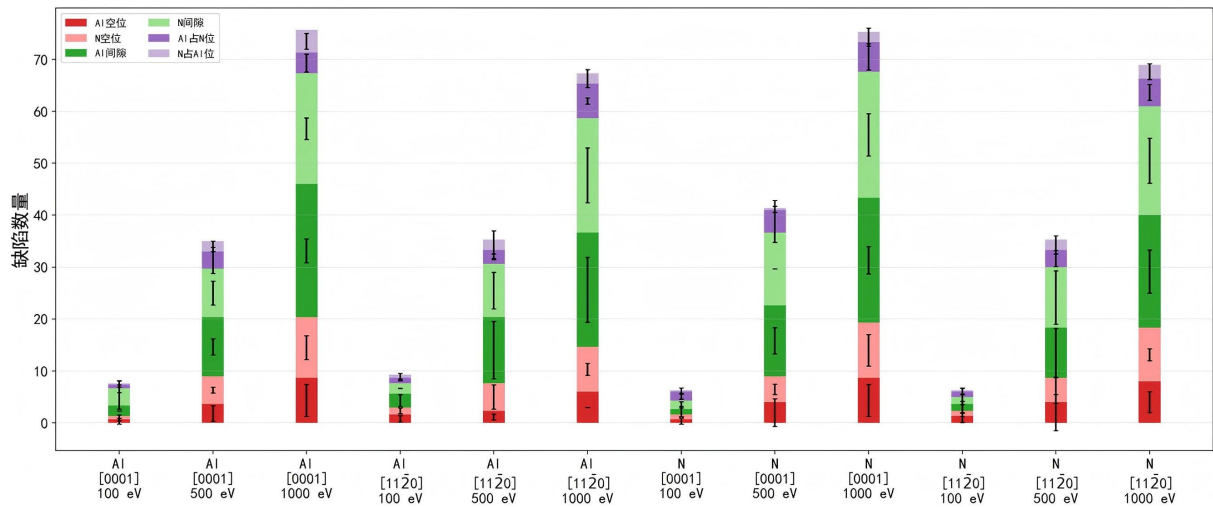


Figure 4. Defect-type distributions and antisite defect distributions under different conditions
图 4. 不同工况下的缺陷类型组成及反位缺陷分布

Table 3. Statistics of vacancies, interstitials, and antisite defects under different conditions
表 3. 不同工况下的空位、间隙和反位缺陷统计

PKA 类型	晶向	能量/eV	重复数	Al 空位	N 空位	Al 间隙	N 间隙	Al 占 N 位	N 占 Al 位
Al-PKA	[0001]	100.0	3	0.67 ± 0.58	0.67 ± 0.58	2.00 ± 0.00	3.33 ± 2.31	0.67 ± 1.15	0.33 ± 0.58
Al-PKA	[0001]	500.0	3	3.67 ± 1.53	5.33 ± 0.58	11.33 ± 1.53	9.33 ± 2.31	3.33 ± 2.52	2.00 ± 1.00
Al-PKA	[0001]	1000.0	3	8.67 ± 3.06	11.67 ± 2.31	25.67 ± 2.31	21.33 ± 2.08	4.00 ± 1.73	4.33 ± 1.53
Al-PKA	[11-20]	100.0	3	1.67 ± 0.58	1.33 ± 0.58	2.67 ± 1.15	2.00 ± 0.00	1.00 ± 0.00	0.67 ± 0.58
Al-PKA	[11-20]	500.0	3	2.33 ± 0.58	5.33 ± 2.31	12.67 ± 5.51	10.33 ± 3.51	2.67 ± 0.58	2.00 ± 2.65
Al-PKA	[11-20]	1000.0	3	6.00 ± 0.00	8.67 ± 1.15	22.00 ± 6.24	22.00 ± 5.29	6.67 ± 0.58	2.00 ± 1.73
N-PKA	[0001]	100.0	3	0.67 ± 0.58	1.00 ± 0.00	1.00 ± 1.00	1.67 ± 0.58	1.67 ± 0.58	0.33 ± 0.58
N-PKA	[0001]	500.0	3	4.00 ± 2.65	5.00 ± 1.00	13.67 ± 2.52	14.00 ± 0.00	4.33 ± 4.04	0.33 ± 0.58
N-PKA	[0001]	1000.0	3	8.67 ± 3.06	10.67 ± 3.06	24.00 ± 2.65	24.33 ± 4.04	5.67 ± 2.52	2.00 ± 1.73
N-PKA	[11-20]	100.0	3	1.33 ± 0.58	1.00 ± 1.73	1.33 ± 1.15	1.33 ± 2.31	1.00 ± 0.00	0.33 ± 0.58
N-PKA	[11-20]	500.0	3	4.00 ± 3.46	4.67 ± 2.52	9.67 ± 4.73	11.67 ± 5.13	3.33 ± 1.53	2.00 ± 1.73
N-PKA	[11-20]	1000.0	3	8.00 ± 2.00	10.33 ± 1.15	21.67 ± 4.16	21.00 ± 4.36	5.33 ± 1.53	2.67 ± 1.53

3.4. 损伤空间分布及晶向展宽特征

图 5、图 6 和图 7 给出了不同工况下残余缺陷的径向分布、累计分布及空间展宽特征。结果表明，损伤区空间尺度随 PKA 能量升高而明显增大，且不同晶向之间存在显著差异。

对于 Al-PKA，沿[0001]晶向时，缺陷团簇回转半径由 100 eV 下的 3.15 Å 增加至 500 eV 下的 5.58 Å，并在 1000 eV 时达到 7.87 Å；对应最大展宽半径由 11.33 Å 增至 26.32 Å 和 37.57 Å。沿[11-20]晶向时，回转半径分别为 4.49、10.86 和 12.10 Å，最大展宽半径分别为 14.74、37.82 和 47.97 Å。对于 N-PKA，[0001]晶向下的回转半径分别为 3.29、5.32 和 7.41 Å，而[11-20]晶向则为 3.91、9.91 和 11.14 Å；在 1000 eV 条件下，[11-20]晶向的最大展宽半径可达 48.66 Å，高于[0001]晶向的 36.88 Å。

图 5 和图 6 表明, $[0001]$ 晶向下损伤更趋于局域集中, 而 $[11\bar{2}0]$ 晶向下缺陷分布更分散、展宽更明显。图 7 进一步表明, 不同晶向具有不同的原子排布和能量耗散通道, 从而导致碰撞传播方式和残余缺陷空间组织形态存在差异。较大的空间展宽意味着缺陷间平均距离增大, 不利于后续复合, 这也解释了 $[11\bar{2}0]$ 晶向下较高的缺陷保留倾向。

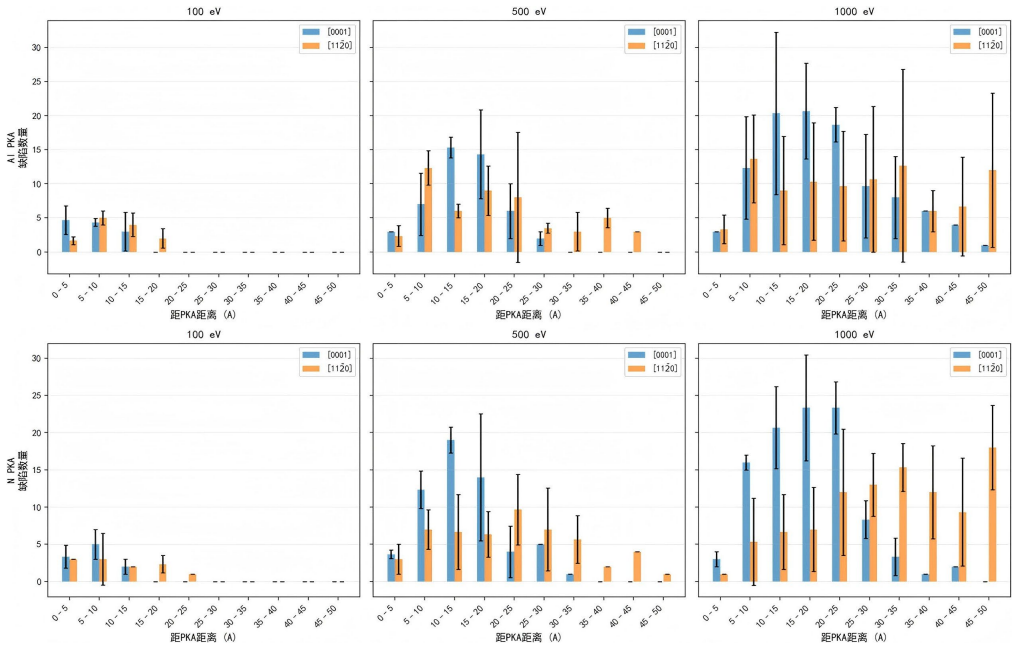


Figure 5. Radial distributions of residual defects
图 5. 残余缺陷的径向分布

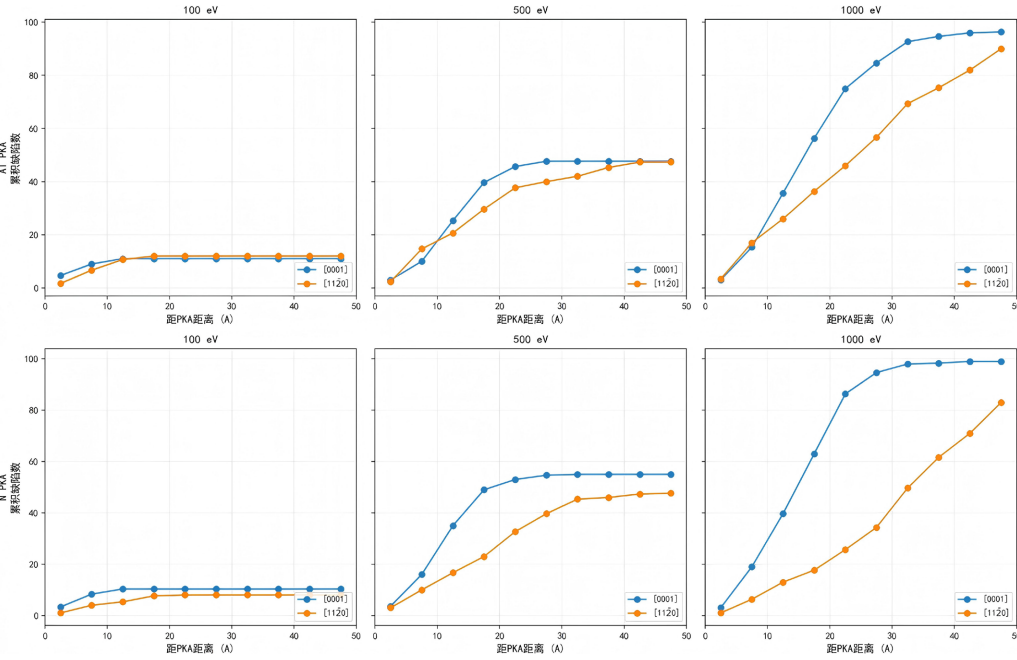


Figure 6. Cumulative radial distributions of residual defects
图 6. 残余缺陷的累计径向分布

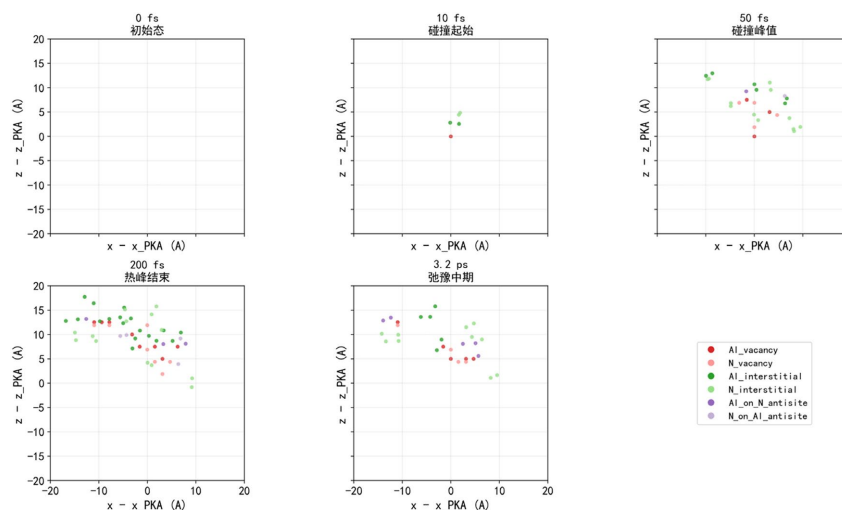


Figure 7. Spatial spreading characteristics of cascade damage along different crystallographic directions
图 7. 不同晶向下级联损伤的空间展宽特征

3.5. 级联损伤的时间演化特征

图 8~图 11 和表 4 给出了 Al-PKA 在 500 eV 条件下两个代表性晶向的时间演化结果。结果表明，两种晶向下的损伤演化均表现出“快速产生、达到峰值、部分复合、最终稳定残留”的典型特征。

如图 10 所示， $[0001]$ 晶向下的缺陷数量在约 200 fs 达到较高峰值后开始回落，并由峰值 53 个下降至稳定阶段的 33 个，表明该方向下部分初生缺陷在后续热弛豫过程中发生了较为明显的复合。如图 11 所示， $[11\bar{2}0]$ 晶向下的缺陷数量由峰值 48 个下降至稳定阶段的 38 个，下降幅度较小，说明该方向下残余缺陷保留比例更高。

图 8 和图 9 所示的级联演化快照与上述统计结果一致。 $[11\bar{2}0]$ 晶向产生的损伤区更为分散，缺陷之间在后续演化中重新接近并复合的概率较低，因此更容易保留稳定残余损伤；而 $[0001]$ 晶向下缺陷分布相对集中，缺陷复合更为充分。说明级联损伤的最终保留状态不仅取决于初始碰撞能量，还与缺陷空间分布及其后续动力学演化密切相关。

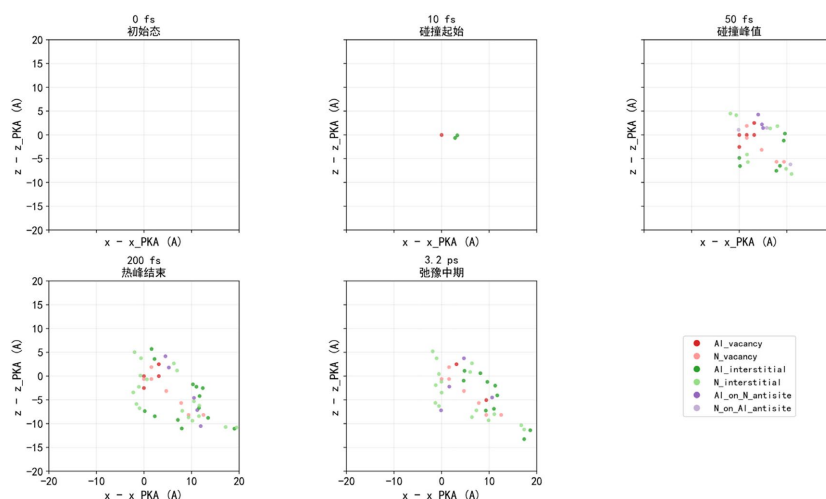


Figure 8. Snapshots of cascade damage evolution for Al-PKA at 500 eV along the $[0001]$ crystallographic direction
图 8. Al-PKA 在 500 eV、 $[0001]$ 晶向下的级联损伤演化快照

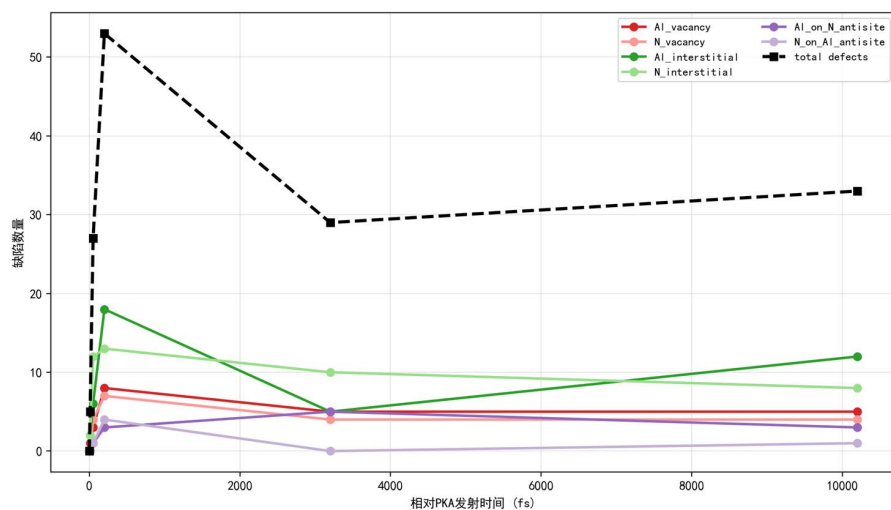


Figure 9. Snapshots of cascade damage evolution for Al-PKA at 500 eV along the $[11\bar{2}0]$ crystallographic direction

图 9. Al-PKA 在 500 eV、 $[11\bar{2}0]$ 晶向下的级联损伤演化快照

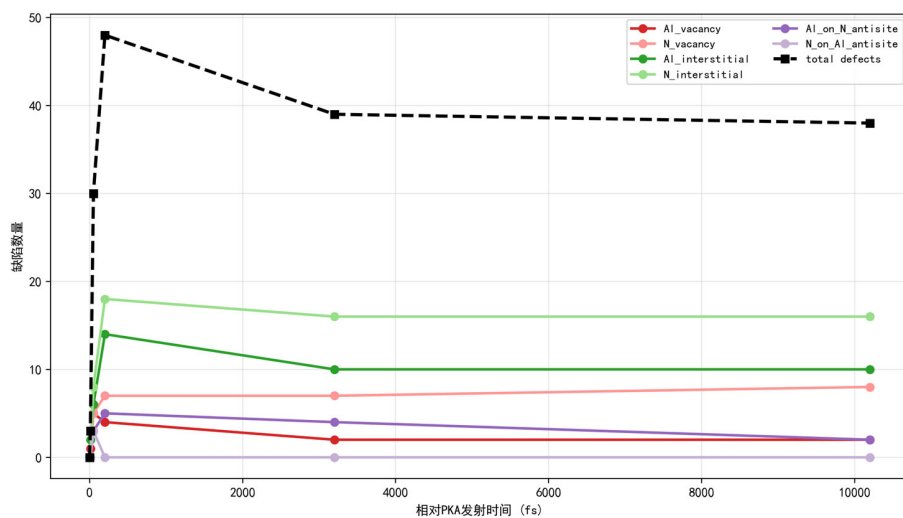
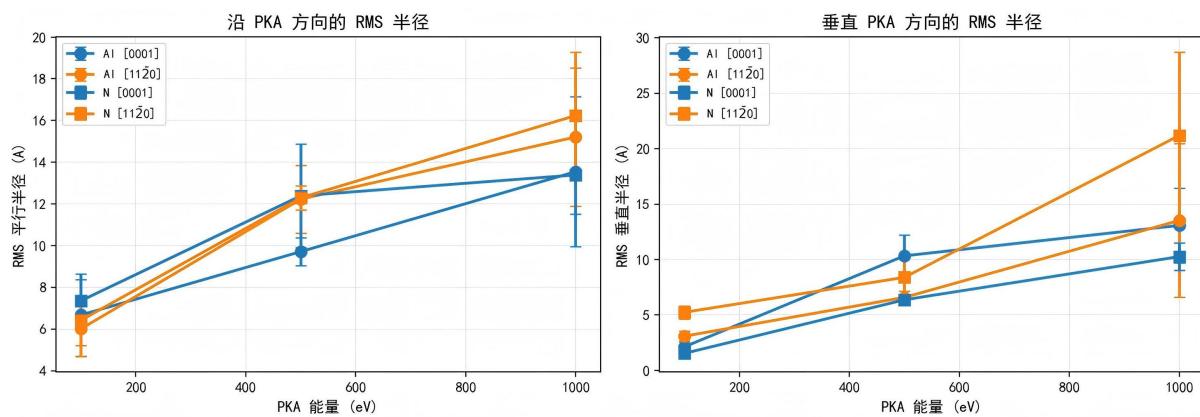


Figure 10. Time evolution of residual defect number for Al-PKA at 500 eV along the $[0001]$ crystallographic direction

图 10. Al-PKA 在 500 eV、 $[0001]$ 晶向下的残余缺陷数量演化



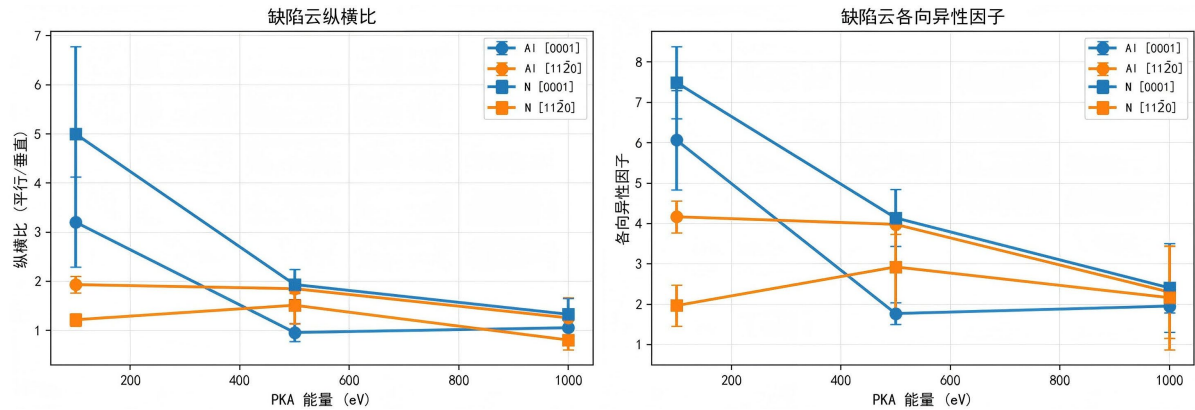


Figure 11. Time evolution of residual defect number for Al-PKA at 500 eV along the $[11\bar{2}0]$ crystallographic direction

图 11. Al-PKA 在 500 eV、 $[11\bar{2}0]$ 晶向下的残余缺陷数量演化

Table 4. Time evolution characteristics of cascade damage for Al-PKA at 500 eV

表 4. 500 eV 下 Al-PKA 级联损伤的时间演化特征

晶向	时间/fs	残余缺陷 总数	Al 空位	N 空位	Al 间隙	N 间隙	Al 占 N 位	N 占 Al 位
[0001]	0.00	0	0	0	0	0	0	0
[0001]	10.00	5	1	0	2	2	0	0
[0001]	50.00	27	3	4	6	12	1	1
[0001]	200.00	53	8	7	18	13	3	4
[0001]	3200.00	29	5	4	5	10	5	0
[0001]	10200.00	33	5	4	12	8	3	1
$[11\bar{2}0]$	0.00	0	0	0	0	0	0	0
$[11\bar{2}0]$	10.00	3	1	0	2	0	0	0
$[11\bar{2}0]$	50.00	30	5	5	6	8	3	3
$[11\bar{2}0]$	200.00	48	4	7	14	18	5	0
$[11\bar{2}0]$	3200.00	39	2	7	10	16	4	0
$[11\bar{2}0]$	10200.00	38	2	8	10	16	2	0

4. 结论

本文采用分子动力学方法研究了纤锌矿 AlN 中 Al 和 N 原子的位移阈能及初级碰撞级联损伤行为，获得如下结论：

(1) Al 和 N 原子的位移阈能均具有明显的晶向依赖性。Al 原子沿 $[0001]$ 、 $[10\bar{1}0]$ 、 $[10\bar{1}1]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 晶向的位移阈能分别为 44、14、10 和 9 eV，N 原子分别为 30、9、7 和 9 eV。总体上，N 子晶格较 Al 子晶格更易发生稳定离位。

(2) 单级联碰撞模拟表明，残余缺陷总数随 PKA 能量升高显著增加，说明 AlN 中的初始辐照损伤随入射能量提高由少量局域点缺陷逐步发展为多缺陷耦合结构。

(3) 级联损伤中除空位和间隙外，还可形成一定数量的反位缺陷，表明高能碰撞不仅导致常规 Frenkel

型缺陷产生, 还会诱发跨子晶格占位和局域结构重排, AlN 的初始辐照损伤具有明显的复合缺陷特征。

(4) 与 $[0001]$ 晶向相比, $[11\bar{2}0]$ 晶向在相同能量条件下表现出更强的损伤空间展宽和更高的残余缺陷保留倾向, 反映出纤锌矿 AlN 中显著的晶向相关能量耗散行为。

(5) 代表性 500 eV 级联过程表现出“快速产生 - 部分复合 - 稳定残留”的典型演化特征, 其中 $[11\bar{2}0]$ 晶向的残余缺陷保留更为明显。

综上, 纤锌矿 AlN 的初始辐照损伤同时受到原子种类、晶向和 PKA 能量的共同影响。本文结果可为 AlN 辐照损伤模型参数选取及抗辐照器件设计提供原子尺度依据。

参考文献

- [1] Kozlovskiy, A.L., Shlimas, D.I., Kenzhina, I.E., Borgekov, D.B. and Zdorovets, M.V. (2020) Dynamics of Radiation Damage in AlN Ceramics under High-Dose Irradiation, Typical for the Processes of Swelling and Hydrogenation. *Crystals*, **10**, Article No. 546. <https://doi.org/10.3390/cryst10060546>
- [2] Lynes, D.D., Young, J., Lang, E. and Chandrahali, H. (2023) Impact of Silicon Ion Irradiation on Aluminum Nitride-Transduced Microelectromechanical Resonators. *Advanced Materials Interfaces*, **10**, Article ID: 2300240. <https://doi.org/10.1002/admi.202300240>
- [3] Anderson, S., Khafizov, M. and Chernatynskiy, A. (2024) Threshold Displacement Energies and Primary Radiation Damage in AlN from Molecular Dynamics Simulations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **547**, Article ID: 165228. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165228>
- [4] Hauck, A.S., Jin, M. and Tuttle, B.R. (2024) Atomic Displacement Threshold Energies and Defect Generation in GaN, AlN, and AlGaIn: A High-Throughput Molecular Dynamics Investigation. *Applied Physics Letters*, **124**, Article ID: 152107. <https://doi.org/10.1063/5.0190371>
- [5] Kempner, M., Sestito, J.M., Wang, Y. and Zarkadoulas, E. (2023) Molecular Dynamics Simulations of Cascade Events in AlN. *Results in Materials*, **17**, Article ID: 100383. <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2023.100383>
- [6] Osetsky, Y., Du, M.H., Samolyuk, G., Zinkle, S.J. and Zarkadoulas, E. (2022) Native and Radiation Induced Point Defects in AlN and Sc-Doped AlN. *Physical Review Materials*, **6**, Article ID: 094603. <https://doi.org/10.1103/physrevmaterials.6.094603>
- [7] Jin, M., Reza, F., Hauck, A., Mahfuz, M., Wang, X., Chu, R., *et al.* (2025) Examining Composition-Dependent Radiation Response in AlGaIn Alloys. *Acta Materialia*, **289**, Article ID: 120891. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2025.120891>
- [8] Liu, Y., Xiong, Z. and Ouyang, X. (2023) Molecular Dynamics Study on the Mechanism of Gallium Nitride Radiation Damage by Alpha Particles. *Materials*, **16**, Article No. 4224. <https://doi.org/10.3390/ma16124224>
- [9] Tungare, M., Shi, Y., Tripathi, N., Suvarna, P. and Shahedipour-Sandvik, F. (2011) A Tersoff-Based Interatomic Potential for Wurtzite AlN. *Physica Status Solidi (a)*, **208**, 1569-1572. <https://doi.org/10.1002/pssa.201001086>
- [10] Ziegler, J.F., Biersack, J.P. and Littmark, U. (1985) *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press.
- [11] Gergs, T., Mussenbrock, T. and Trieschmann, J. (2023) Charge-Optimized Many-Body Interaction Potential for AlN Revisited to Explore Plasma-Surface Interactions. *Scientific Reports*, **13**, Article No. 5287. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-31862-8>
- [12] Hussein, S.A. (2024) Characterization of Damage in Aluminum Nitride under Helium Ion Irradiation. Master's Thesis, An-Najah National University.