

碳离子碰撞单壁碳纳米管的动力学

张 超¹ 王东琪^{*2} 潘成岭¹ 盛绍顶¹

(¹安徽理工大学材料科学与工程学院, 淮南 232001)

(²中国科学院高能物理研究所多学科中心, 北京 100049)

摘要: 采用分子动力学方法研究了碳离子碰撞碳纳米管中顶位、键中心和六元环中心的动力学过程。通过分析低、中、高 3 种入射能分别对碰撞过程的影响, 探索了典型缺陷形成的微观演化过程。研究表明, 碰撞碳纳米管中不同空间位置, 其碰撞结果差异较大, 其中顶位碰撞阈能最低, 约为 20 eV; 碰撞六元环中心时碳管会发生严重变形, 损伤最为严重。通过分析入射离子动能、碳纳米管热动能、质心动能以及势能随时间的演化规律, 阐述了碰撞过程中的能量转移机制。

关键词: 碳纳米管; 分子动力学; 碰撞; 能量转移

中图分类号: O561.5 文献标识码: A 文章编号: 1001-4861(2016)06-0954-07

DOI: 10.11862/CJIC.2016.131

Collision Dynamics of a Carbon Ion Impinging a Single-Walled Carbon Nanotube

ZHANG Chao¹ WANG Dong-Qi^{*2} PAN Cheng-Ling¹ SHENG Shao-Ding¹

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

(²Multidisciplinary Initiative Center, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The collision dynamics of a carbon ion impinging a carbon atomic site, the center of a C-C bond and the hollow site at the center of a hexagonal ring of a single-walled carbon nanotube has been studied by molecular dynamics simulations. The microscopic evolution processes of the defect formation are explored by analyzing the collisions initiated with low, medium and high incident energy, respectively. Considerable difference is observed among the collisions at different impact sites in view of the incident threshold energy and the defect formation. For the collision at the carbon atomic site, the incident threshold energy is 20 eV, which is the lowest energy of defect formation. For the hollow site, the carbon nanotube is seriously deformed after collision. An energy conversion mechanism is proposed, based on the analysis of the time evolutions of energies. The kinetic energy of the incident ion is consumed in the form of the thermal kinetic energy, center-of-mass kinetic energy and potential energy of the carbon nanotube, which explains the energy transfer between the incident carbon ion and the nanotube.

Keywords: carbon nanotube; molecular dynamics; collision; energy transfer

收稿日期: 2015-12-30。收修改稿日期: 2016-04-15。

国家自然科学基金(No.11505003, 21201006, 21473206), 中国科学院百人计划(No.Y2291810S3)和安徽省自然科学基金(No.1608085QA20)资助项目。

*通信联系人。E-mail: dwang@ihep.ac.cn

0 引言

碳纳米管由于其独特的一维纳米结构^[1],使其在轴向方向上具有超常的电学性质、热学性质和力学性质^[2-6]。由于电子或离子辐照纳米材料后能够使其结构发生变化,性能得以提高^[7-10],所以国内外有许多研究者利用该方法研究了荷能粒子束辐照碳纳米管的性能变化^[11-14]。Raghuveer等^[15]采用Ga⁺离子沿着管轴方向辐照多壁碳纳米管,以改变碳纳米管的结构和组分,从而使其在电子器件方面具有重要应用。Tolvane等^[16]通过密度泛函理论方法结合低温扫描隧道显微镜技术,研究了Ar⁺离子束辐照单壁碳纳米管的实验,结果发现,辐照后碳纳米管的电子结构发生了明显变化,该结果对于以纳米管为基础的光电子和量子光学上具有潜在的应用。Zhao等^[17]利用第一性原理与经验势分子动力学方法分别计算了低能离子碰撞碳纳米管过程中缺陷形成的能量阈值,结果发现,入射离子与碳纳米管之间形成的化学键能够明显降低缺陷形成的能量阈值,从而增强碳纳米管辐照损伤的概率。本课题组曾利用经验势分子动力学和密度泛函基础的紧束缚方法分别研究了碳纳米管辐照过程中缺陷形成的空间效应和能量效应,详细分析了辐照过程中入射离子与碳纳米管之间的能量转移和电荷转移过程^[18-19],这些结果对于碳纳米管的材料改性,以及对于以碳纳米管为基础的电子器件方面具有重要的理论价值。

尽管目前已有许多研究者研究了碳纳米管中缺陷形成的类型及其概率,然而,对于粒子轰击碳纳米管过程中典型缺陷形成的微观演化过程,特别是在原子尺度上缺陷的形成过程尚不清楚,需要对碳纳米管的辐照损伤过程进行深入研究。本文采用经验势分子动力学方法研究了碳离子碰撞单壁碳纳米管的动力学过程,探索了碳纳米管中不同碰撞点下典型缺陷的微观演化行为。此外,本文还对入射粒子的动能、靶材料的热动能、质心动能以及势能分别随时间的演化行为进行了分析,阐释了碰撞过程中的能量转移机制。

1 计算模型与方法

1.1 初始结构

本文选用具有金属性的(9,0)单壁碳纳米管作为研究对象,Z轴方向的长度约为2.56 nm。首先采用共轭梯度法对碳纳米管结构进行优化,在优化后

的碳纳米管中部区域选取3种碰撞点,分别为顶位(top)、C-C键中心(bond)和六元环中心(hollow),如图1所示(为更加清楚地观察原子的演化过程,将部分近邻原子标记为不同颜色)。此外,分别在3种碰撞点正上方建立1个入射碳原子,入射原子与碳纳米管表面原子之间的初始距离保持在1.50 nm以上,以避免初始状态具有相互作用。

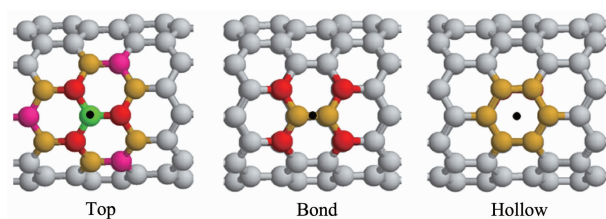


图1 碰撞点示意图(图中黑点表示碰撞点)

Fig.1 Schematic representation of impact locations
(Black dots indicate the impact locations)

1.2 原子间势函数

模拟计算中碳纳米管中C-C键相互作用采用TLHT势函数^[20]来描述,TLHT势类似于Tersoff^[21]和Brenner^[22]势函数,已成功用于研究碳基材料^[23-24],并能够与实验结果很好地吻合。入射碳原子和碳纳米管之间的相互作用采用Lenard-Jones(LJ)势,该势既可以描述长程相互作用,也可以描述短程相互作用,因此许多研究者用它来描述高能粒子与材料的相互作用过程^[23-24]。本课题组曾详细研究过LJ势描述碳原子之间相互作用的短程范围和长程范围,证实了该种势函数能够较为合理地描述高能粒子间的碰撞过程^[25]。

1.3 模拟细节介绍

入射碳离子能量选取为1~70 eV,由于碰撞能量较低,碰撞过程中起主要作用的是核阻止过程,所以电子阻止对碰撞结果的影响可以忽略^[14,17]。此外,由于低电荷态对碰撞过程的影响非常微小,可以忽略不计,因此,为了与实验结果进行类比,本文所指入射碳原子统称为入射碳离子^[17]。

在模拟之前,为了避免初始温度对辐照动力学的影响,体系的初始温度设为0 K。在模拟过程中,采用Verlet速度算法来求解牛顿积分运动方程,在碰撞阶段和弛豫阶段分别采用0.01 fs和1 fs的时间步长,系统分别演化1 000 fs和9 000 fs,以确保演化过程中系统的能量守恒和动量守恒。为了观察原子的演化过程,采用了可视化软件VMD^[26],且软件中原子间形成化学键的阈值距离设定为0.18

nm。此外,为了反映原子间成键情况,本文利用电荷自洽的密度泛函基础的紧束缚(SCC-DFTB)方法^[27],研究了碰撞后碳纳米管的电荷密度分布。

2 结果与讨论

2.1 碳离子轰击碳纳米管中 top 位的动力学过程

首先,赋予入射碳离子一初始动能(E_{in}),并使动能的初始速度方向沿着碳纳米管的径向方向。当入射动能 $E_{in} < 20$ eV 时,实验观察到 top 位原子(即初级碰撞原子(PKA)),先是离开了原来的晶格位置,随后快速恢复至前壁中的原来位置,具体演化过程如图 2 中 $E_{in}=15$ eV 时原子结构的微观演化过程。从图中可以看出,当模拟时间 $t=100$ fs 时,PKA(绿色原子)已发生一定的位移,并与最近邻的 1 个原子之间的化学键发生了断裂。但随后 PKA 又逐渐返回至碳纳米管前壁,如图中 $t=120$ fs 所示,并最终恢复至原来的晶格位置,这主要是由于 PKA 从碰撞过程中获得的动能不足以克服离位势垒,导致 PKA 又恢复至原来位置,因此碳纳米管仍然保持完好的结构和管形,没有缺陷形成,如图 2 中 $t=10\ 000$ fs 时的结构图和电荷密度图所示。

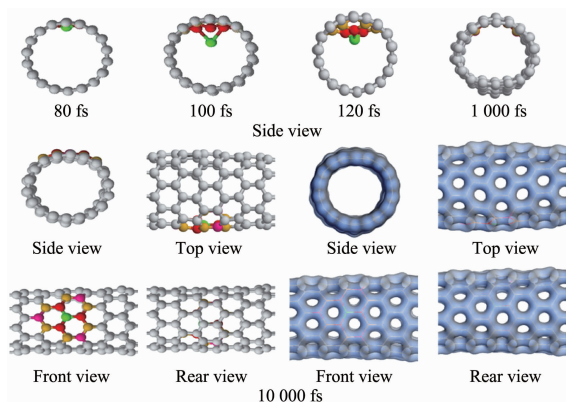


图 2 入射能为 15 eV 碰撞 top 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.2 Atomic processes and the final charge density for the case of top site at incident energy of 15 eV

当 $E_{in}=20$ eV 时,PKA 能够从碰撞过程中获得足够的能量克服离位势垒,并运动至碳纳米管后壁,具体演化过程如图 3 所示。从图中可以看出,当 $t=100$ fs 时,PKA(绿色原子)已经离开了碳纳米管的前壁,并于 $t=150$ fs 时运动至后壁。随后 PKA 与后壁原子发生相互作用,挤压后壁原子使其成为间隙原子,而 PKA 自身占据后壁的晶格格点位置。碳纳米管前壁由于丢失了 1 个原子后而在原来格点位

置留下了 1 个空结点,该结点附近的原子由于存在不饱和的悬挂键,最终演化为 5-1DB 缺陷构型^[28],如图 3 中 Front view 所示。从上述结果可以看出,使 PKA 产生离位的载能碳离子入射阈值为 20.0 eV,该值与 Warner 等^[29]利用电子束辐照单壁碳纳米管引起结构变化的电子束阈值 80.0 keV(约为 15.0 eV 碳离子的能量^[14])基本吻合,之所以大于实验值主要是由于经验势模型自身的缺陷所引起的。尽管与实验结果有一定的差距,但是在可接受的范围内,因此并不影响本文对碳离子碰撞单壁碳纳米管动力学过程的研究。

图 4 展示了入射离子能量为 40 eV 时碳纳米管原子结构的演化过程。从图中可以观察到,当 $t=60$ fs 时,PKA 已经离开碳管的前壁,并于 $t=150$ fs

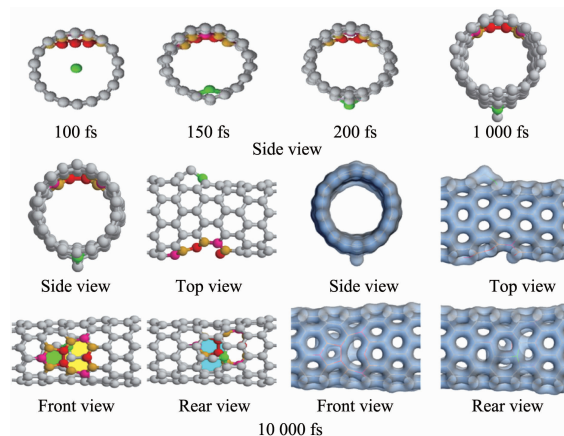


图 3 入射能为 20 eV 碰撞 top 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.3 Atomic processes and the final charge density for the case of top site at incident energy of 20 eV

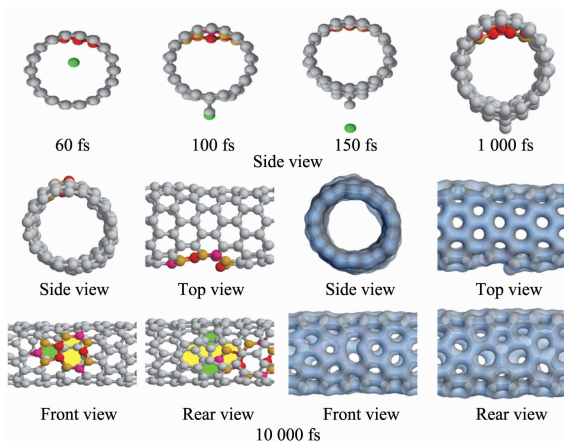


图 4 入射能为 40 eV 碰撞 top 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.4 Atomic processes and the final charge density for the case of top site at incident energy of 40 eV

时穿过后壁,最终脱离了碳纳米管体系。碳管前壁由于少了1个原子形成了5-1DB缺陷构型,如图4中Front view所示。碳纳米管后壁在PKA穿透后最终演化成为典型的5-7-7-5缺陷构型,即Stone-Wales缺陷^[30],如图4中Rear view所示。该缺陷由于能够增强石墨烯片层结构的皱曲,并在石墨烯结构卷曲成碳纳米管和富勒烯过程中扮演着重要角色,因此受到国内外许多研究者的广泛关注^[14]。随着碳离子入射能的增加,碳纳米管中产生缺陷的概率增加,同时产生缺陷的构型也变的越来越复杂。

3.2 碳离子轰击碳纳米管中 bond 位的动力学过程

图5、图6和图7分别展示了入射能为30、35和50 eV的碳离子轰击碳纳米管中C-C键中心的动力学过程。当 $E_{in}=30$ eV且 $t=100$ fs时,与碰撞键相连的2个碳原子(图5中黄色原子,侧面仅能观察到1个原子)离开了原来位置,并与前壁中其它原子间的化学键发生了断裂。当 $t=150$ fs时,从图中可以观察到,2个原子又被前壁原子所吸引而恢复了部分断裂的化学键,并于 $t=300$ fs时恢复至碳纳米管的前表面。从 $t=10\ 000$ fs的原子结构图和电荷密度分布图可以看出,最终碳纳米管仍然保持完好的管状结构。

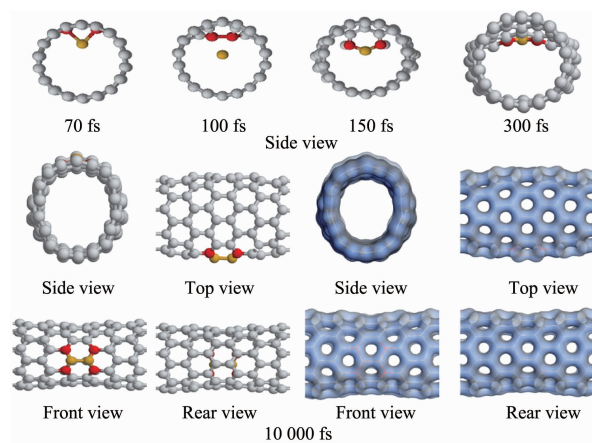


图5 入射能为30 eV碰撞bond位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.5 Atomic processes and the final charge density for the case of bond site at incident energy of 30 eV

当碳离子入射能增加至35 eV时,与碰撞键相连的2个碳原子将有足够的能量离开碳纳米管前壁并运动至后壁,具体演化过程如图6所示。从图中可以观察到,当 $t=80$ fs时,2个黄色原子均已离开原来位置,并于 $t=150$ fs时,运动至碳纳米管后壁

并挤压后壁原子。从 $t=10\ 000$ fs时的最后构型图和电荷密度分布图可以发现,2个黄色原子均已成为碳纳米管后壁的间隙原子,导致后壁形成了7-5-5-7缺陷构型,即Inverse Stone-Wales(ISW)缺陷构型^[31],如图6中Rear view所示。该缺陷由于能够改变碳纳米材料局部的曲率,使材料内部产生气泡,因此,受到了国内外许多研究者的广泛关注^[14]。碳纳米管前壁由于少了2个原子,导致原来与这2个原子相连的4个红色原子具有不饱和的悬挂键,使得它们两两连接,最终演化形成为5-8-5缺陷构型,如图6中Front view所示。

对于入射能为50 eV情况,当 $t=53$ fs时,与键

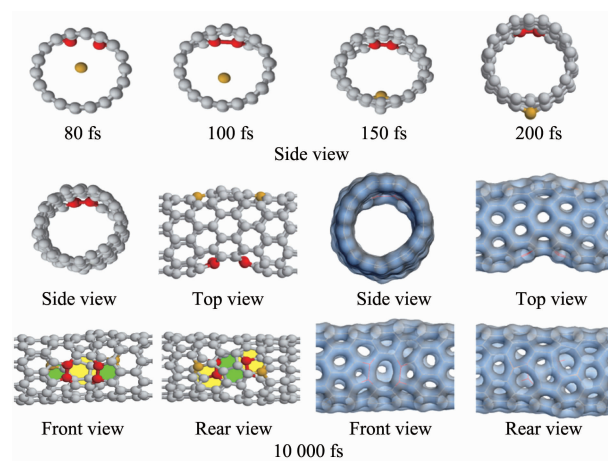


图6 入射能为35 eV碰撞bond位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.6 Atomic processes and the final charge density for the case of bond site at incident energy of 35 eV

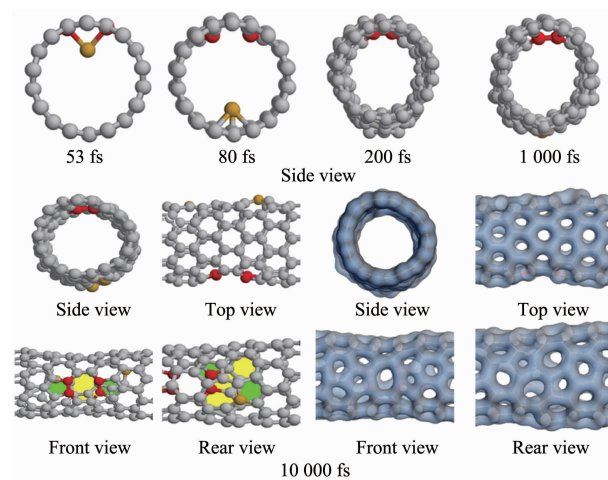


图7 入射能为50 eV碰撞bond位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.7 Atomic processes and the final charge density for the case of bond site at incident energy of 50 eV

相连的 2 个碳原子逐渐离开了原来的晶格位置,并于 $t=80$ fs 时运动至纳米管的后壁,如图 7 所示。从 $t=200$ fs 的结构图可以看出,碳纳米管后表面不再平整,拥有了间隙原子,而从最后的结构图和电荷密度图($t=10\ 000$ fs)可以发现,碳纳米管后壁形成了 5-7-7-5 构型(即上文中 $E_{in}=40$ eV,碰撞 top 位时的缺陷结构)。前壁由于少了 2 个碳原子最终形成成为 5-8-5 缺陷构型,如图 7 中 Front view 所示。当 $E_{in}>55$ eV 时,碰撞后碳纳米管发生严重变形。

3.3 碳离子轰击碳纳米管中 hollow 位的动力学过程

入射碳离子与碳纳米管六元环中心碰撞以后,产生了更多复杂的缺陷构型。图 8 展示了入射离子能量为 40 eV 碰撞碳纳米管的结构演化图,从图中可以看出,六元环中 6 个原子(图中黄色原子,侧面仅能观察到 3 个原子)受到入射离子碰撞后,整体具有离开原来位置的趋势,但从最后的结构演化图($t=10\ 000$ fs)可以看出,六元环中的原子均已恢复至碳纳米管的前壁,碳纳米管仍然保持完好的管状结构,没有缺陷形成。

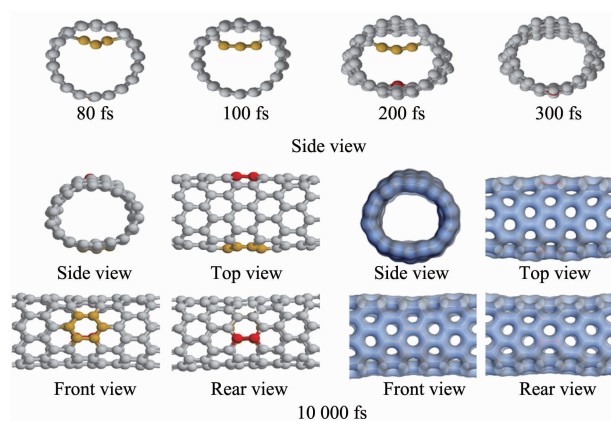


图 8 入射能为 40 eV 碰撞 hollow 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.8 Atomic processes and the final charge density for the case of hollow site at incident energy of 40 eV

当入射能增加至 45 eV 时,在 $t=80$ fs 时(如图 9 所示),六元环中 6 个原子与前壁其它原子间的化学键均已发生断裂并向管内运动;当 $t=100$ fs 时,六元环中有 4 个原子又分别被前壁原子吸引而恢复了断裂的化学键;当 $t=200$ fs 时,六元环中余下的 2 个原子分别被碳管后壁的 2 个原子(图中红色球)吸引而形成了共价键。通过对体系进行弛豫后发现,当 $t=10\ 000$ fs 时,碳纳米管内部出现了 sp^3 杂化构型,

如图 9 Side view 中原子 1 所示。此外,从图中 Top view 可以看出,碳纳米管管体发生严重弯曲,管体中部收缩变细。

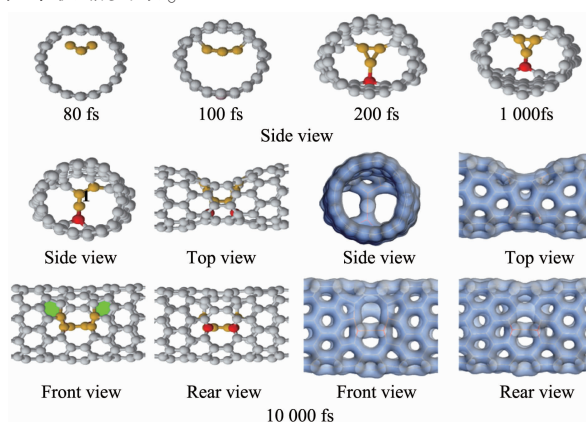


图 9 入射能为 45 eV 碰撞 hollow 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.9 Atomic processes and the final charge density for the case of hollow site at incident energy of 45 eV

当 $E_{in}=60$ eV 时,碳离子撞击碳纳米管六元环以后,六元环快速离开前壁,运动至后壁,并挤压后壁原子而占据了晶格格点位置,最终使后壁形成了一根很短的原子线,如图 10 中 Top view 所示。前壁由于少了 6 个碳原子,最终演化成为一个大的空洞(hole),如图 10 中 Front view 所示。

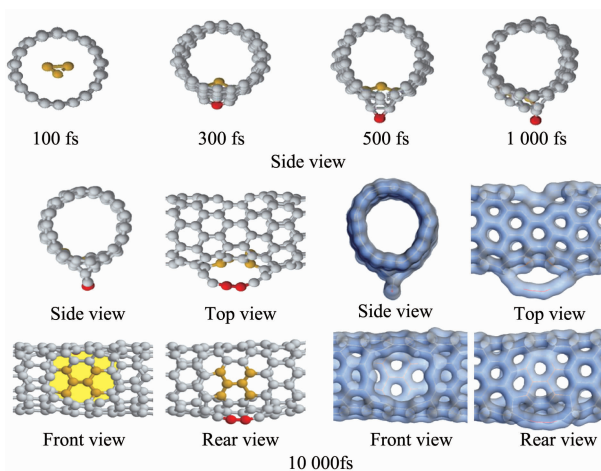


图 10 入射能为 60 eV 碰撞 hollow 位时原子演化过程和最终电荷密度图

Fig.10 Atomic processes and the final charge density for the case of hollow site at incident energy of 60 eV

3.4 碳离子与碳纳米管碰撞过程的能量变化

图 11 展示了入射碳离子初始能量为 35 eV,碰撞 C-C 键中心时入射离子和碳纳米管的质心距离,系统的动能 E_k 、势能变化 ΔE_p 和总能量变化 ΔE_t 分

别随模拟时间的变化情况。从图中可以看出,入射离子和碳纳米管质心的初始距离在 1.50 nm 以上,碰撞后入射离子逐渐靠近碳纳米管,当模拟时间 $t \approx 52$ fs 时,两者质心距离最近,约为 0.51 nm。随着时间的演化,两者之间的距离逐渐变大,表明碰撞以后,入射离子因受到碳纳米管巨大的斥力作用而发生反弹,最终远离了碳纳米管。继续观察图 11 可以得到,系统的初始动能为 35 eV,对应于入射离子的初始能量,当 $t \approx 46$ fs 以后,系统动能突然下降,并于 $t \approx 52$ fs 时下降至最低值,约为 12.2 eV。与此同时,系统势能快速上升,两者恰好互补,这表明在此阶段中入射离子正与碳纳米管之间发生激烈的碰撞,从而导致系统的动能和势能发生剧烈变化。系统动能和势能振荡一段时间后至 $t=400$ fs 时逐渐趋于稳定,表明此时体系已达到平衡。此外,从总能量变化 ΔE_t 可以看出,在整个模拟过程中,体系总能量基本守恒(均方根误差约为入射能的 0.3%)。

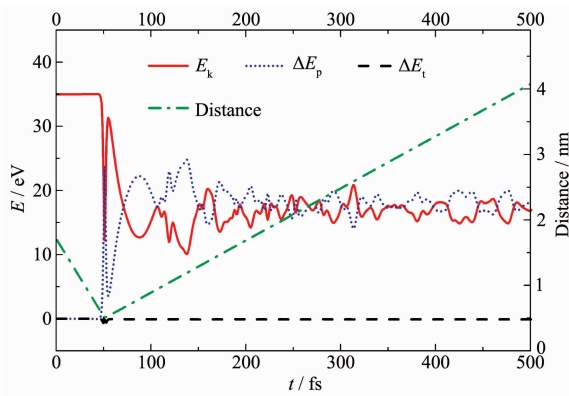


图 11 入射能为 35 eV 碰撞 bond 位时入射离子和碳纳米管之间的质心距离(Distance), 系统的动能(E_k), 势能变化(ΔE_p)和总能量变化(ΔE_t)分别随模拟时间的演化关系

Fig.11 Time evolutions of the center-of-mass distance between the incident ion and the carbon nanotube (Distance), the kinetic energy (E_k), the changes of the potential energy (ΔE_p) and the total energy (ΔE_t) of the system at the incident energy of 35 eV for the case of bond site

此外,为了探索碰撞过程中的能量转移机制,本文分析了入射离子的动能和碳纳米管的能量分别随模拟时间的演化行为。图 12 展示了碰撞过程中,入射离子的动能(E_k^P)、碳纳米管的热动能(E_{th}^{CNT})、质心动能(E_c^{CNT})(碳纳米管总动能=热动能+质心动能)和势能(E_p^{CNT})分别随模拟时间的演化行为。从图

12(a)可以看出,入射离子的初始动能为 35 eV,在 $t=46$ fs 附近,入射离子动能突然下降,并于 $t \approx 52$ fs 时, E_k^P 下降至最低值,约为 0 eV,随后又上升至约 3.8 eV 并保持不变,结合上图可以知道,该能量即为入射离子碰撞后反弹的残余动能,从而很容易计算得到碰撞过程中入射碳离子的能量变化约为 31.2 eV。从图 12(b)可以看出,当 $t \approx 46$ fs 时, E_{th}^{CNT} 曲线快速上升,并于 $t \approx 52$ fs 时上升至最大值,约为 27.2 eV。随后, E_{th}^{CNT} 快速下降,振荡一阶段以后,当 $t \approx 400$ fs 时, E_{th}^{CNT} 基本趋于平衡。通过对平衡后的演化过程进行统计平均,可以得到碳纳米管的平均热动能约为 13.7 eV,对应温度为 495 K,该值远低于碳纳米管的熔化温度,表明此时的碳纳米管结构已经稳定。此外,从图 12(c)可以看出,碰撞后碳纳米管将获得一质心动能,约为 0.3 eV。

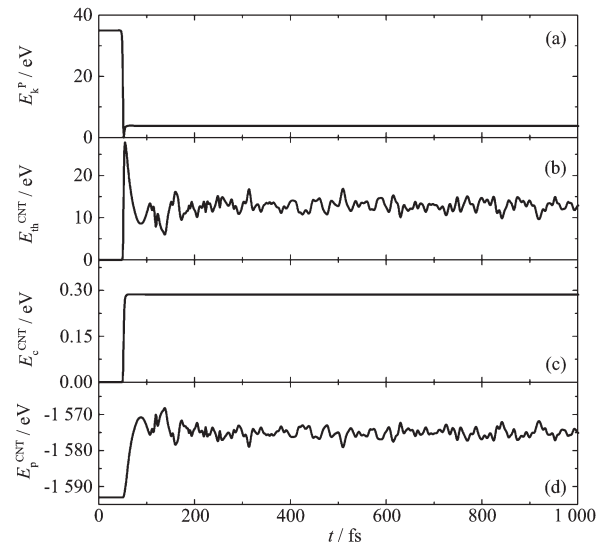


图 12 入射能为 35 eV 碰撞 bond 位时入射离子动能(E_k^P), 碳纳米管的热动能(E_{th}^{CNT}), 质心动能(E_c^{CNT})和势能(E_p^{CNT})分别随模拟时间的演化关系

Fig.12 Time evolutions of the kinetic energy of incident ion (E_k^P) (a), the thermal kinetic energy (E_{th}^{CNT}) (b), the center-of-mass kinetic energy (E_c^{CNT}) (c), and the potential energy (E_p^{CNT}) (d) of carbon nanotube at the incident energy of 35 eV for the case of bond site

图 12(d)展示了碳纳米管势能(E_p^{CNT})随模拟时间的变化行为,从图中可以看出, E_p^{CNT} 的初始值约为 -1593.0 eV。碰撞后,当 $t \approx 52$ fs 时, E_p^{CNT} 快速上升,并于 $t=400$ fs 时趋于平衡。通过对平衡后的碳纳米管势能进行统计分析,可以得到平衡时的势能约为 -1575.9 eV,因此碰撞过程中碳纳米管的势能变

化约为 17.1 eV。从碳纳米管的平均热动能、质心动能和势能能量变化 (分别为 13.7、0.3 和 17.1 eV) 可以看出,三者之和恰好为入射离子在碰撞前后的能量损失,即入射离子转移至碳纳米管的能量约为 31.1 eV,转移至碳纳米管的能量一部分转化为碳纳米管的热动能,一部分转化为其质心动能,还有一部分转化为碳纳米管的势能。

3 结 论

本文采用分子动力学方法,研究了碳离子轰击碳纳米管中顶位、C-C 键中心和六元环中心的碰撞动力学行为,计算了碳纳米管中产生缺陷的辐照阈能约为 20 eV。此外,本文还研究了每一种碰撞情况下,低、中、高 3 种入射能分别辐照碳纳米管后原子结构的微观演化过程和典型缺陷的形成过程,观察到了 5-1DB、5-8-5、SW 和 ISW 等典型缺陷的微观演化行为。通过分析入射能为 35 eV,轰击 C-C 键中心时入射离子的动能,碳纳米管的热动能、质心动能和势能分别随时间的演化行为,发现碰撞后碳纳米管的平均热动能、质心动能和势能三者之和恰好等于入射离子的能量损失,表明入射碳离子转移给碳纳米管的能量分别转化为碳纳米管的热动能、质心动能和势能,阐释了碰撞过程中的能量转移机制。

本文的研究结果对于深入理解单壁碳纳米管的辐照损伤过程具有重要的理论价值,然而,全面理解单壁碳纳米管的辐照损伤行为,还需深入研究不同直径和手性的单壁碳纳米管的辐照损伤过程。由于随着管径增加,碳纳米管表面曲率变小,即表面张力变小,从而导致不同管径的碳纳米管受到入射离子的能量响应不同,产生的结构缺陷也不同。但是,由于碰撞过程中总能量守恒,因此不同直径和手性的单壁碳纳米管在碰撞过程中能量转移机制相同,即入射离子的能量损失将完全转化为碳纳米管的热动能、质心动能和势能。

参考文献:

- [1] Iijima S. *Nature*, **1991**,**354**:56-58
- [2] JIN Zhe(金哲), TANG Kai(汤凯), HU Ya-Ping(胡亚平), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2015**,**31**(4): 725-730
- [3] XIAO Zhen-Kun(肖镇昆), WU Lei(吴磊), MI Rao(米饶), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2015**,**31**(1): 114-120
- [4] LIU Li-Hu(刘立虎), CHEN Shu-Lin(陈述林), LIU Fan(刘凡), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2015**,**31**(4):703-709
- [5] Perebeinos V, Tersoff J. *Phys. Rev. Lett.*, **2015**,**114**:085501
- [6] Ma X D, Roslyak O, Duque J G, et al. *Phys. Rev. Lett.*, **2015**, **115**:017401
- [7] Katoh Y, Ozawa K, Shih C, et al. *J. Nucl. Mater.*, **2014**,**448**: 448-476
- [8] Rymzhanov R A, Medvedev N A, Volkov A E. *Nucl. Instrum. Methods B*, **2015**,**354**:292-296
- [9] Zhang Y, Edmondson P D, Varga T, et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2011**,**13**:11946-11950
- [10] Li Y L, Hu S Y, Henager Jr C H, et al. *J. Nucl. Mater.*, **2012**,**427**:259-267
- [11] Shtogun Y V, Woods L M. *J. Appl. Phys.*, **2010**,**107**:061803
- [12] Lee G D, Wang C Z, Yoon E, et al. *Appl. Phys. Lett.*, **2010**, **97**:093106
- [13] Holmström E, Toikka L, Krasheninnikov A V, et al. *Phys. Rev. B*, **2010**,**82**:045420
- [14] Krasheninnikov A V, Nordlund K. *J. Appl. Phys.*, **2010**,**107**: 071301
- [15] Raghuvier M S, Ganesan P G, D'Arcy-Gall J, et al. *Appl. Phys. Lett.*, **2004**,**84**:4484
- [16] Tolvanen A, Buchs G, Ruffieux P, et al. *Phys. Rev. B*, **2009**, **79**:125430
- [17] Zhao S J, Xue J M, Wang Y G, et al. *Appl. Phys. A*, **2013**, **12**:6955
- [18] Zhang C, Mao F, Dai J X, et al. *Comput. Mater. Sci.*, **2014**, **93**:15-21
- [19] Zhang C, Mao F, Zhang F S, et al. *Chem. Phys. Lett.*, **2012**, **541**:92-95
- [20] Takai T, Lee C, Halicioglu T, et al. *J. Phys. Chem.*, **1990**, **94**:4480
- [21] Tersoff J. *Phys. Rev. Lett.*, **1998**,**61**:2879
- [22] Brenner D W. *Phys. Rev. B*, **1990**,**42**:9458
- [23] Mao F, Zhang C, Zhang Y, et al. *Chin. Phys. Lett.*, **2012**,**29**: 076101
- [24] Wang Z X, Ke X Z, Zhu Z Y, et al. *Phys. Rev. B*, **2000**,**61**: R2472
- [25] Zhang C, Mao F, Zhang F S. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, **2013**,**64**:10401
- [26] Humphrey W, Dalke A, Schulten K J. *Mol. Graphics*, **1996**, **14**:33
- [27] Elstner M, Porezag D, Jungnickel G, et al. *Phys. Rev. B*, **1998**,**58**:7260
- [28] Lu A J, Pan B C. *Phys. Rev. Lett.*, **2004**,**92**:105504
- [29] Warner J H, Schffell F, Zhong G F, et al. *ACS Nano*, **2009**, **3**:1557
- [30] Stone A J, Wales D J. *Chem. Phys. Lett.*, **1986**,**128**:501
- [31] Lusk M T, Wu D T, Carr L D. *Phys. Rev. B*, **2010**,**81**:155444