

内嵌金属的多壁碳纳米管辐射损伤研究

马佳文^{1,2,3} 巩文斌⁴ 张伟^{1,3} 许子健^{1,3} 王呈斌^{1,3} 任翠兰^{1,3} 怀平^{1,3} 朱志远^{1,3}

1 (中国科学院上海应用物理研究所嘉定园区上海 201800)

2 (中国科学院大学北京 100049)

3 (中国科学院微观界面物理与探测重点实验室上海 201800)

4 (中国科学院纳米技术与纳米仿生研究所苏州 215123)

摘要辐射损伤性能是制约核电池效能和使用寿命的重要因素。美国研究者 Popa-Simil 提出基于碳纳米管、金属复合结构材料的概念核电池,可实现核能到电能的高效转换,其设计中利用了碳纳米管的抗辐射损伤特性。本文通过建立包覆金属铜的多壁碳纳米管模型,采用分子动力学方法,对内嵌金属的多壁碳纳米管体系进行了辐射损伤的模拟研究。从配位缺陷数、溅射原子数、完美结构缺陷(Perfect structure defect,PST)原子数以及总的辐射损伤量等方面,与无内嵌金属的碳纳米管体系进行了分析对比。发现在有金属铜内嵌的情况下,溅射原子产额与无金属内嵌情况差别不大,但配位数缺陷和 PST 缺陷减小。表明内嵌金属起到支撑的效果,降低多壁碳纳米管在辐照下的形变,增强了其自修复能力,从而使得辐照耐受性能有所增强。

关键词辐射损伤,碳纳米管,分子动力学,核电池

中图分类号 TL11

DOI:10.11889/j.0253-3219.2016.hjs.39.060503

Theoretical study on irradiation damage of metal-filled multi-walled carbon nanotubes

MA Jiawen^{1,2,3} GONG Wenbin⁴ ZHANG Wei^{1,3} XU Zijian^{1,3} WANG Chengbin^{1,3} REN Cuilan^{1,3}
HUAI Ping^{1,3} ZHU Zhiyuan^{1,3}

1(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Jiading Campus, Shanghai 201800, China)

2(University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

3(Key Laboratory of Interfacial Physics and Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

4(Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano-Bionics, Chinese Academy of Sciences, Suzhou 215123, China)

Abstract Background: Nuclear battery is a promising energy transfer device with outstanding performance. Since the 1950s, a lot of studies have been made on the transfer of nuclear energy to electric energy through a small device. However, irradiation damage affects the efficiency and lifetime of nuclear battery. Popa-Simil proposed a theoretical model based on multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) and metal which can achieve high energy transfer efficiency. The irradiation tolerance of MWNTs with metal embedded should be evaluated. **Purpose:** This study aims to investigate the irradiation tolerance of the model of a multi-walled carbon nanotube with copper atoms embedded and compare it with one containing no copper atoms to find out the effect of metal inside nanotubes on the irradiation tolerance. **Methods:** Based on empirical analytical potentials, molecular dynamics (MD) method was applied to

国家自然科学基金(No.11205232、No.11505266、No.11075196)、中国科学院战略先导科技专项(No.XDA02040100)资助

第一作者:马佳文,男,1991年出生,2013年毕业于复旦大学,现为硕士研究生,研究领域为粒子束与纳米结构的相互作用

通信作者:朱志远, E-mail: zhuzhiyuan@sinap.ac.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.11205232, No.11505266, No.11075196), the Strategically Leading Program of Chinese Academy of Sciences (No.XDA02040100)

First author: MA Jiawen, male, born in 1991, graduated from Fudan University in 2013, master student, focusing on the interaction between ion beam and nano structures

Corresponding author: ZHU Zhiyuan, Email: zhuzhiyuan@sinap.ac.cn

收稿日期:2016-03-11, 修回日期:2016-04-08

investigate irradiation damage of the multi-walled nanotube structure with copper inside. We chose six incident energy points, which are 100eV, 200eV, 400eV, 600eV, 800eV and 1000eV, and each energy point contained 150 independent bombarding incidents. The system was annealed after the irradiation stage then the defects were counted and analyzed. **Results:** Three different defect types, which are the coordination defect, sputtered atoms and perfect structure defect (PST), and the total damage (defined as the summation of these three defect amounts) were evaluated as the irradiation tolerance of the system. In metal-filled MWNT system, the number of coordination defects, PST defects and total damage are smaller than that of independent MWNT system, while the number of sputtered atoms is similar with that of independent MWNT system, while some of its mechanism is different. **Conclusion:** With metal inside MWNTs, the total damage by irradiation is reduced and the irradiation tolerance of this system is promoted by metal. It can be used to improve performance of nuclear batteries as major materials.

Keywords Irradiation damage, Carbon nanotubes, Molecular dynamics, Nuclear battery

核电池又称同位素电池, 是利用放射性同位素衰变放出的荷能粒子, 如 α 、 β 粒子和 γ 射线等, 将其能量转化为电能的装置, 具有体积小、重量轻、寿命长的优点, 应用前景广阔。20 世纪 50 年代至今, 研究人员已经发现了很多用于核电转化的技术方法, 但都有一个不可避免的问题, 就是材料受辐射损伤所致的核电池效能和寿命下降。为解决此问题, 研究人员尝试了各种可作为核电池元件的材料。其中 Wacharasindhu 研究小组将液态半导体材料 Se 和 β 放射性核素 S^{35} 混合, 作为微型核电池的材料元件^[1]。此外还有一些使用 SiC、GaN 等宽禁带材料的研究工作^[2-3]。后来, 美国的 Popa-Simil 提出了基于碳纳米管、金属复合结构材料的概念核电池^[4-5], 在多壁碳纳米管 (Multi-walled carbon nanotubes, MWNTs) 中包覆高电子密度的金属材料, 碳纳米管外为低电子密度的 LiH, LiH 俘获通过辐照产生的次级电子, 从而形成内外电位差。此设计的转化效率可大于 50%, 因此是一种很有前景的设计。

同样在碳纳米管金属复合结构的核电池方案中, 也不可避免地面临着辐射损伤的问题。关于碳纳米管的辐射损伤, 已经有不少相关的研究。其中 Krashennnikov 小组研究了包括单壁碳纳米管在离子辐照条件下缺陷产生的情况^[6-7]、多壁碳纳米管在重离子辐照下的沟道效应^[8]等。许子健等^[9-10]对多种离子的辐照效应进行了研究, 发现了元素的化学性在其中的作用, 还通过模拟说明了不同手性碳纳米管的辐射损伤差别及成因。内包金属的碳纳米管的制备、结构和性质已经有许多研究^[11-14], 但是在碳纳米管中包覆金属的辐射损伤研究还很少, 本文就是为探索碳纳米管与金属的复合结构材料对辐照的耐受性如何, 采用分子动力学 (Molecular dynamics, MD) 方法进行了模拟研究, 对比了有金属内嵌和无金属内嵌的两种情况, 分析比较了它们的耐辐照性能。

1 结构模型与理论方法

进行模拟计算前, 首先构建一个外面是三层壁的碳纳米管, 从内往外分别是 (16,0)、(24,0)、(32,0) 型的锯齿形碳纳米管的模型。碳纳米管的直径分别是 0.626 nm、0.939 nm、1.253 nm, 管壁的间距约为 0.313 nm, 长度为 4.26 nm。在三层碳纳米管的最里层空间填充了面心立方结构的金属 Cu, 沿管轴方向为 (111) 晶向, 对填充的结构用分子动力学方法进行了优化, 并观察获得的结构, 发现内嵌的金属 Cu 自动形成了几条原子链螺旋缠绕的结构。这与之前 Fan 等^[15]的研究结果一致。

本文采用的是经典分子动力学方法, 主要考虑多壁碳纳米管中不同碳纳米层之间的作用、碳纳米管内的碳原子相互作用、最里层空间的铜原子与碳原子的相互作用以及铜原子之间的相互作用。

针对模型中碳原子之间的相互作用, 我们采用 Brenner II 势^[16]来模拟。由于碰撞会涉及到近距离的原子间相互作用, 而 Brenner II 在描述近程相互作用时是不合理的, 所以我们利用一个 Fermi 函数 $F(r)$, 把 ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark) 势^[17]光滑地与 Brenner 势进行连接, 从而用 ZBL 势来描述近程的原子间相互作用。ZBL 势是通过蒙特卡罗方法获得的, 跟第一性原理计算出来的相互作用一致。我们具体采用的连接公式如下:

$$V(r) = V_{cep}(r)[1 - F(r)] + V_{bo}(r)F(r) \quad (1)$$

$$F(r) = (1 + e^{-b_i(r-r_i)})^{-1} \quad (2)$$

式中: V_{cep} 是近程相遇排斥势 (Close encounter potential), 此处为 ZBL 势; V_{bo} 是成键势 (Bond order), 此处代指 Brenner 势, 根据文献^[18]Fermi 函数 $F(r)$ 中的 $b_i = 140 \text{ nm}^{-1}$ 、 $r_i = 0.095 \text{ nm}$ 。修正前后的 Brenner

势对比如图 1 所示。利用这种方法连接而得的势，能够很好地描述原子间高能碰撞时候的动力学过程，并且已经成功运用于一些模拟研究的工作中^[19-20]。

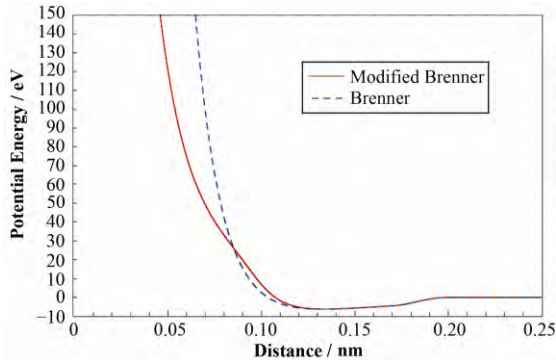


图 1 修正前后的 Brenner 势函数对比图
Fig.1 Comparison chart of original Brenner and modified Brenner.

Cu 原子之间的相互作用，我们采用 EAM 势来模拟^[21]。C 和 Cu 之间的相互作用，采用 Lennard-Jones 势来模拟，参数按照文献[22]中的数值， $\epsilon=0.019996\text{eV}$ ， $\sigma=0.3225\text{nm}$ 。其中由于也涉及到碰撞，因此也同样地用 ZBL 势来替换近程部分。

众所周知，辐照的过程都是入射粒子击出靶原子，然后首次击出的原子再与其它原子碰撞形成级联。击出原子能量高时，能量损失于非弹性碰撞；击出原子能量低时，能量主要损失于弹性碰撞。我们这里主要考虑首次击出原子在能量 100-1000eV 范围内的碰撞级联，选取碳原子作为入射粒子，初始动能分别取 100eV、200eV、400eV、600eV、800eV、1000eV，每个初始入射能量模拟 150 个独立的轰击过程。所有初始的碳离子都被限制在位于碳纳米管上方的一个矩形平面内，且均匀分布于该矩形内，该平面与管轴平行，粒子入射方向垂直于该平面，如图 2 所示，三层碳管中心为铜原子。

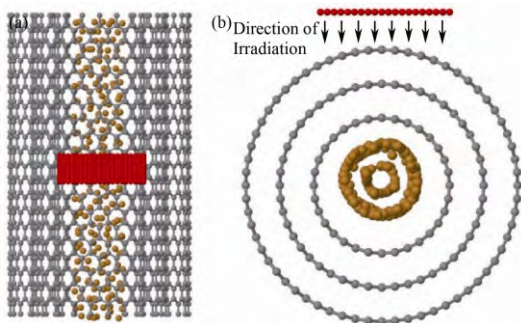


图 2 计算模拟的模型示意图(a)俯视图，(b)正视图
Fig.2 The schematic structure of our simulation.
(a) Top view, (b) Front view

2 结果与讨论

经过模拟计算，最终产生的缺陷中，产量最高的是空位缺陷(Vacancies)和吸附原子(Adatoms)，这

与其他结果一致^[23]。由于热扩散的缘故，一段时间后空位和吸附原子会重新复合形成新的结构，由此设定，每次独立的碰撞过程之后，用 30ps 时间来让系统弛豫，并经过退火到 26.85°C，这样的条件下只能使极不稳定的空位-吸附原子对发生湮灭，并且在 30ps 弛豫过后，缺陷的产额基本不会受到影响，所以在让系统弛豫之后统计体系的配位数缺陷和完美结构缺陷(Perfect structure defect,PST)数目。另外，由于每次碰撞事件中只有一个离子与碳纳米管相互作用，因此模拟的情况实际上对应的是低剂量的离子辐照。

同时，为对照得出包覆金属后的影响，也对同样的体系，无内嵌金属的情况进行了模拟计算，得到二者配位缺陷数如图 3 所示，为计算碳纳米管结构整体对辐照的耐受性，图 3 中每个数据点的配位缺陷数均为 150 次碰撞事件的平均值。

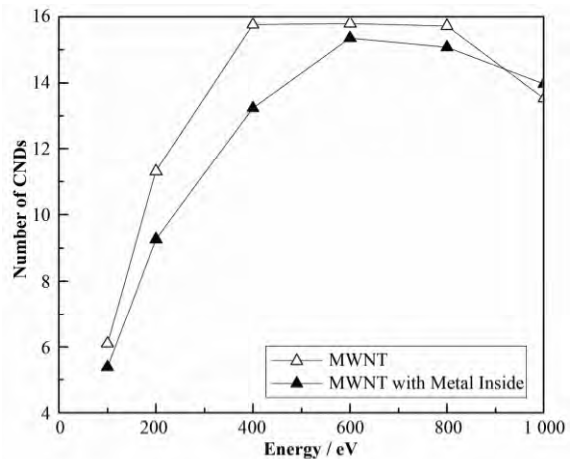


图 3 平均配位缺陷数随入射能量的变化关系
Fig.3 Average coordination defect numbers of both independent and metal-filled MWNT system as a function of ion incident energy.

从图 3 中可以看出，对于这两种情况，当入射能量低于 400eV 时，辐照产生的配位缺陷数目都随入射能量而快速上升。当能量高于 400eV 后，配位缺陷数随能量上升变得缓慢甚至平缓。在离子能量更高的区域，出现配位缺陷数随能量增加而下降的情况，这是由于随着能量逐渐上升，离子轰击所造成的缺陷趋于饱和所造成的。同时，在整体趋势上，碳纳米管内嵌金属 Cu 颗粒的体系中，配位缺陷数目比无金属内嵌的三层碳纳米管要少。我们认为这主要是由于碳管中心的金属与管壁的相互作用，对整个体系有一定的支撑效果，使得在离子辐照下的形变程度降低，有助于碳管的自修复，增强了整体体系的耐辐照性能。

进一步计算了有金属内嵌体系和无金属内嵌体系中，每层管壁上碳原子的平均离位能，也就是该管壁上的平均缺陷形成能，如表 1 所示。表 1 中每层原子的击出方向与垂直经过管轴，且两个体系都选取了每层管壁上的 6 个点作平均。从表 1 可以看出，两个体系最大的差别在于最内层管壁，这是因为有金属内嵌体系中，最内层管壁上碳原子被击出时会受到内层金属的阻碍作用，因此平均离位能相比无金属内嵌体系会明显增加。同时，在无金属内嵌体系中，最外层和中间层的离位能都比最内层大，是因为前两层的击出过程都会有下一层管壁的阻碍作用，而最内层没有。

表 1 两种体系中每层管壁的平均缺陷形成能(eV)
Table 1 The defect formation energy of each tube wall of the two different systems (eV).

位置 Position	最外层管壁 Outside tube wall	中间层管壁 Middle tube wall	最内层管壁 Inside tube wall
无金属内嵌 Without metal	42.10	48.50	29.08
有金属内嵌 Metal inside	44.25	46.00	42.40

图 4 是离子辐照碳纳米管所产生的溅射产额。可以看到，溅射原子数随能量的变化与图 3 中配位缺陷数的变化趋势类似，有金属内嵌的溅射原子数产额与无金属情况差别不大。首先对于两种情况，溅射原子数都随着入射能量而快速增加，并且在入射能量高于 800eV 后，溅射原子数增加的趋势有所放缓。参考单壁碳管的结果^[9]，发现由于多壁碳管中层与层之间的相互作用，使得原子比单壁碳管中的原子更难轰击出去，因此在三层碳管的体系中，溅射原子随能量增加的速度要更慢，且整体数目也更少。但在三层碳管中心加入铜原子后，由于铜原子对入射离子的反弹效果，使得已形成的配位缺陷的区域有被二次轰击的可能，但同时也相应地减少了入射离子穿透金属，轰击另一边管壁的可能，二者效果相互抵消，造成溅射原子数产额的结果差别不大。从图 5 中可以看到，有金属内嵌后，溅射原子中被反弹的份额有所增加，并且在中高能量区域更加明显，这与图 4 中的趋势一致，说明加入了金属后，溅射原子总体数目虽然差别不大，但金属对碳原子的反弹却在其产生机制中起到了更大的作用。另外，根据单壁碳纳米管的结果，可以推测，当能量进一步升高时，溅射原子数的变化会像文献[9]中的单壁碳管一样趋于稳定。

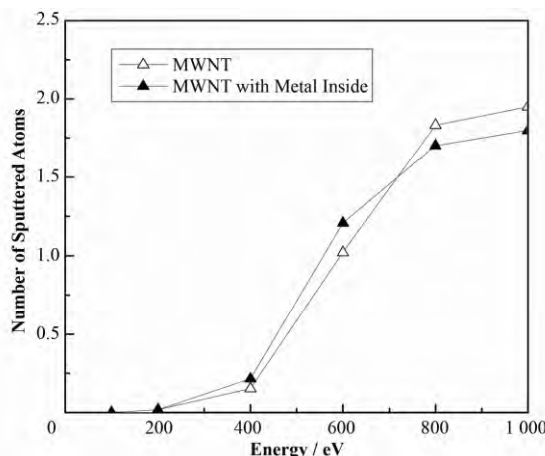


图 4 平均溅射原子数随入射能量的变化关系
Fig.4 Average numbers of sputtered atoms of both independent and metal-filled MWNT system as a function of ion incident energy.

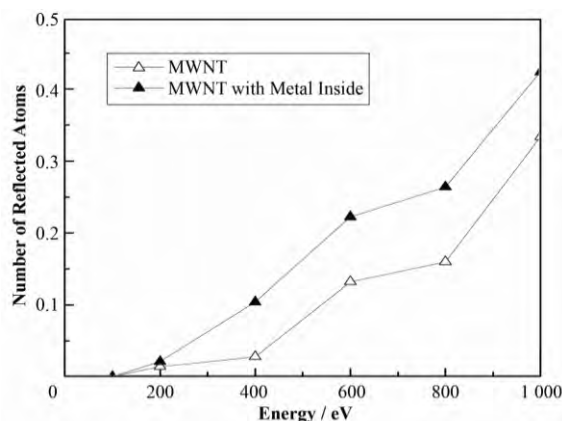


图 5 溅射原子产额中反弹部分的平均原子数
Fig.5 Average numbers of the reflected part in sputtered atoms of both independent and metal-filled MWNT system as a function of ion incident energy.

图 6 显示了 PST^[24]随能量的变化关系。一般设置一个阈值，如果一个原子的 PST 值大于该阈值，那么就认为这是一个 PST 缺陷原子。每个原子 *i* 的 PST 值计算方法如下：

$$P_{st}(i) = \frac{1}{p_u(i)} \left(\sum_j [\theta_i(j) - \theta_i^p(j)]^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

$$p_u(i) = \left(\sum_j [\theta_i^u(j) - \theta_i^p(j)]^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

式中： $\theta_i(j)$ 表示第 *i* 个原子与其最邻近的 n_{nb} 个原子之间的键角，一共 $n_{nb}(n_{nb}-1)/2$ 个，其中 n_{nb} 是近邻数，根据理想晶体结构来确定，计算的碳纳米管情

形中, n_{nb} 的值取 3; $\theta_i^p(j)$ 表示一个完美晶格中的键角分布, 这里指的是在单层石墨烯中的键角分布, 也就是 120° , $\theta_i^u(j) = j\pi/n_{nb}(n_{nb}-1)/2$ 是均匀角分布。根据式(3)、(4)可以计算每个原子的 PST 值, 计算中设定 PST 阈值为 0.14, 由此得到的 PST 缺陷原子数随能量的变化关系如图 6 所示。从图 6 中可以看出, PST 的缺陷数目随能量的变化趋势和配位缺陷数目的变化情况类似。当入射能量小于 400eV 时, PST 缺陷数随能量而快速上升, 当入射能量大于 400eV 时, PST 缺陷数随能量的变化开始缓慢, 甚至当入射能量高于 600eV 时, 出现 PST 缺陷数目减少的情况, 这同样也是缺陷数目饱和所致。同时, 图 6 中有金属内嵌的多壁碳管体系中, PST 缺陷数目较无金属内嵌的体系低, 这主要也是由于碳管中心的铜原子与管壁的碳原子相互作用, 对整个碳管体系的支撑作用, 从而有助于碳管的自修复过程, 降低了 PST 缺陷数目。

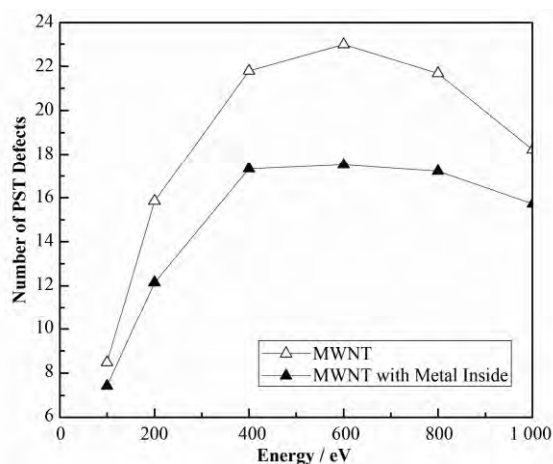


图 6 平均 PST 缺陷数随入射能量的变化关系

Fig.6 Average PST numbers of both independent and metal-filled MWNT system as a function of ion incident energy.

最后, 为考察碳离子辐照下碳纳米管体系的总体辐射损伤, 图 7 是配位缺陷数、溅射原子数和 PST 缺陷原子数的总和及其随入射能量的变化关系。可以看到, 二者总体上的变化趋势类似, 入射能量低时, 辐射损伤总量随能量而增加, 入射能量逐渐升高, 损伤总量逐渐达到饱和, 当入射能量再升高时, 辐照所致的损伤会略微减少。但有金属内嵌的体系, 总体损伤量较低, 但在 200eV 以下的低能区域和 1000eV 以上的高能区域不明显。

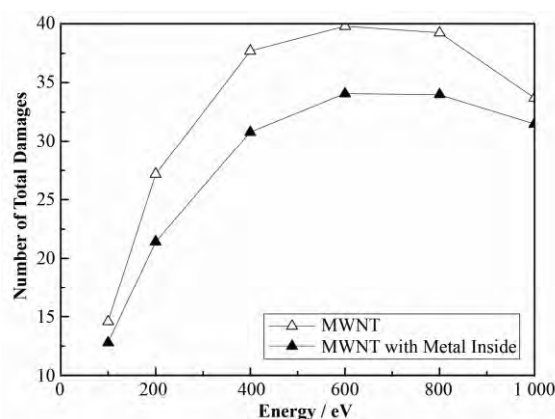


图 7 辐射损伤总量随入射能量的变化关系

Fig.7 Numbers of total defects of both independent and metal-filled MWNT system as a function of ion incident energy.

3 结语

本文在 Popa-Simil 提出的基于碳纳米管、金属复合结构材料的概念核电池的基础上, 针对核电池材料的辐射损伤性能, 对包覆了金属铜的多壁碳纳米管结构的辐照耐受性进行了研究。主要采用了经典的分子动力学方法, 使用多种解析势描述原子间的相互作用, 研究了在碳离子辐照条件下, 内嵌金属的多壁碳纳米管结构的损伤情况, 并与无内嵌金属的碳纳米管体系进行了对比。通过对配位缺陷数、溅射原子数和 PST 缺陷原子数等进行分析, 发现内嵌金属后, 辐照所产生的三种结构缺陷都和无金属内嵌的体系不同, 以此为基础, 我们也对总体的辐射损伤量进行了考察, 并得出内嵌金属后, 多壁碳纳米管的整体辐照耐受性有所提高的结论。因此, 用内嵌金属的碳纳米管作为核电池的材料, 认为将会有效提升核电池的性能。

致谢本文计算资源由中国科学院超算中心、上海超算中心和北京超算中心提供, 特此感谢。

参考文献

- 1 Wacharasindhu T, Kwon J W, Meier D E, *et al.* Radioisotope microbattery based on liquid semiconductor[J]. Applied Physics Letters, 2009, **95**(1): 4103. DOI: 10.1063/1.3160542
- 2 San H, Yao S, Wang X, *et al.* Design and simulation of GaN based Schottky betavoltaic nuclear micro-battery[J]. Applied Radiation and Isotopes, 2013, **80**: 17-22. DOI: 10.1016/j.apradiso.2013.05.010
- 3 Eiting C J, Krishnamoorthy V, Rodgers S, *et al.* Demonstration of a radiation resistant, high efficiency SiC betavoltaic[J]. Applied Physics Letters, 2006, **88**(6): 4101. DOI: 10.1063/1.2172411

- 4 Popa-Simil L. Nanotube potential future in nuclear power[C]. MRS Proceedings, Cambridge University Press, 2008, **1081**: P15-15. DOI: 10.1557/PROC-1081-P15-15
- 5 Popa-Simil L. Direct energy conversion nano-hybrid fuel[C]. MRS Proceedings, Cambridge University Press, 2008, **1104**: NN07-20. DOI: 10.1557/PROC-1104-NN07-20
- 6 Krasheninnikov A V, Nordlund K, Keinonen J. Production of defects in supported carbon nanotubes under ion irradiation[J]. Physical Review B, 2002, **65**(16): 165423. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.165423
- 7 Krasheninnikov A V, Nordlund K, Sirviö M, *et al.* Formation of ion-irradiation-induced atomic-scale defects on walls of carbon nanotubes[J]. Physical Review B, 2001, **63**(24): 245405. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.245405
- 8 Krasheninnikov A V, Nordlund K. Channeling of heavy ions through multi-walled carbon nanotubes[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2005, **228**(1): 21–25. DOI: 10.1016/j.nimb.2004.10.016
- 9 Xu Z J, Zhang W, Zhu Z, *et al.* Molecular dynamics study of damage production in single-walled carbon nanotubes irradiated by various ion species[J]. Nanotechnology, 2009, **20**(12): 125706. DOI: 10.1088/0957-4484/20/12/125706
- 10 Xu Z J, Zhang W, Zhu Z, *et al.* Effects of tube diameter and chirality on the stability of single-walled carbon nanotubes under ion irradiation[J]. Journal of Applied Physics, 2009, **106**(4): 043501. DOI: 10.1063/1.3194784
- 11 Bao J, Tie C, Xu Z, *et al.* A facile method for creating an array of metal-filled carbon nanotubes[J]. Advanced Materials, 2002, **14**(20): 1483–1486. DOI: 10.1002/1521-4095(20021016)14:20<1483::AID-ADMA1483>3.0.CO;2-6
- 12 Che G, Lakshmi B B, Martin C R, *et al.* Metal-nanocluster-filled carbon nanotubes: catalytic properties and possible applications in electrochemical energy storage and production[J]. Langmuir, 1999, **15**(3): 750–758. DOI: 10.1021/la980663i
- 13 Rossella F, Soldano C, Bellani V, *et al.* Metal-filled carbon nanotubes as a novel class of photothermal nanomaterials[J]. Advanced Materials, 2012, **24**(18): 2453–2458. DOI: 10.1002/adma.201104393
- 14 Toh S, Kaneko K, Hayashi Y, *et al.* Microstructure of metal-filled carbon nanotubes[J]. Journal of Electron Microscopy, 2004, **53**(2): 149–155. DOI: 10.1093/jmicro/53.2.149
- 15 Fan X, Dickey E C, Eklund P C, *et al.* Atomic arrangement of iodine atoms inside single-walled carbon nanotubes[J]. Physical Review Letters, 2000, **84**(20): 4621–4624. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.4621
- 16 Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, *et al.* A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, **14**(4): 783–802. DOI: 10.1088/0953-8984/14/4/312
- 17 Ziegler J F, Biersack J P. The stopping and range of ions in matter[M]. US:Springer, 1985. DOI: 10.1007/978-1-4615-8103-1_3
- 18 Nordlund K, Keinonen J, Mattila T. Formation of ion irradiation induced small-scale defects on graphite surfaces[J]. Physical Review Letters, 1996, **77**(4): 699–702. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.699
- 19 Pomoell J, Krasheninnikov A V, Nordlund K, *et al.* Stopping of energetic ions in carbon nanotubes[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2003, **206**: 18–21. DOI: 10.1016/S0168-583X(03)00703-1
- 20 Krasheninnikov A V, Nordlund K. Irradiation effects in carbon nanotubes[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2004, **216**: 355–366. DOI: 10.1016/j.nimb.2003.11.061
- 21 Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys[J]. Physical Review B, 1986, **33**(12): 7983–7991. DOI: 10.1103/PhysRevB.33.7983
- 22 Jalili S, Mochani C, Akhavan M, *et al.* Molecular dynamics simulation of a graphite-supported copper nanocluster: thermodynamic properties and gas adsorption[J]. Molecular Physics, 2012, **110**(5): 267–276. DOI: 10.1080/00268976.2011.640953
- 23 Krasheninnikov A V, Banhart F. Engineering of nanostructured carbon materials with electron or ion beams[J]. Nature Materials, 2007, **6**(10): 723–733. DOI: 10.1038/nmat1996
- 24 Nordlund K, Averback R S. Point defect movement and annealing in collision cascades[J]. Physical Review B, 1997, **56**(5): 2421–2431. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.2421