

Cu 掺杂类金刚石薄膜应力降低机制的第一性原理研究

张而耕¹, 牛帅¹, 陈强¹, 潘文高², 李朝阳²

(1.上海应用技术大学 上海物理气相沉积(PVD)超硬涂层及装备工程技术研究中心, 上海 201418; 2.上海离原环境科技有限公司, 上海 200241)

摘要:目的 比较不同浓度 Cu 掺杂类金刚石薄膜的性能变化规律, 并分析 Cu 掺杂对薄膜性能变化的作用机制。方法 建立密度为 2.03 g/cm³、2.87 g/cm³ 的不同 Cu 原子数分数(1.56%~7.81%)掺杂类金刚石薄膜(Cu-DLC)初始模型, 采用 NVT 和 NOSE 温度调节法模拟熔融退火及淬火过程, 以及基于广义梯度近似(GGA)的共轭梯度法优化几何模型, 运用 CASTEP 计算 Cu-DLC 模型的径向分布函数(RDF)、sp³-C 含量、体积模量、键长和键角分布等, 并探讨 Cu 掺杂对 DLC 膜应力变化的影响机制。结果 随 Cu 含量的增加, 薄膜中 sp³-C 杂化比例增加。与 DLC 相比, Cu 掺杂 DLC 的 RDF 中第一峰和第二峰的位置发生显著偏移, 薄膜中残余应力随着 Cu 含量的增加先减小后增大, Cu 含量为 1.56% 时, 残余应力最小(7.2 GPa)。Cu 含量增加导致总键角分布的峰值降低, 峰宽向小键角移动, 总键长分布峰值降低, 在长键长方向产生小而宽的峰。结论 C—Cu 的弱键特性及扭曲的键角、键长得到松弛, 对薄膜残余压应力的降低有显著作用, 在较高 Cu 浓度条件下, 扭曲的 C—C 键比例增加, 形成了更多扭曲的 C—Cu 和 Cu—Cu 结构是导致残余应力增加的关键因素。

关键词: Cu-DLC; 第一性原理; 应力降低; 径向分布函数; 残余应力; 键长; 键角

中图分类号: TG174.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2020)02-0295-06

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2020.02.037

First-principles on Stress Reduction Mechanism of Copper Doped Diamond-like Carbon Films

ZHANG Er-geng¹, NIU Shuai¹, CHEN Qiang¹, PAN Wen-gao², LI Chao-yang²

(1.Shanghai Engineering Research Center of Physical Vapor Deposition (PVD)
Superhard Coating and Equipment, Shanghai Institute of Technology, Shanghai 201418, China;
2.Shanghai Liyuan Environmental Technology Limited Company, Shanghai 200241, China)

ABSTRACT: The work aims to compare the evolution laws in the properties of diamond-like carbon films doped with different concentrations of copper and analyze the mechanism of the effects of copper doping on the properties of diamond-like carbon

收稿日期: 2019-06-17; 修订日期: 2019-07-30

Received: 2019-06-17; Revised: 2019-07-30

基金项目: 上海市科委重点支撑计划(17090503800)

Fund: Key Support Plan of Shanghai Science and Technology Committee (170905038000)

作者简介: 张而耕(1973—), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为超硬纳米微米 PVD 涂层、机械制造、材料失效分析等。邮箱: zhangeg@yeah.net

Biography: ZHANG Er-geng (1973—), Male, Doctor, Professor, Research focus: ultra hard nano-micron PVD coating, machinery manufacturing, materials failure analysis. E-mail: zhangeg@yeah.net

引文格式: 张而耕, 牛帅, 陈强, 等. Cu 掺杂类金刚石薄膜应力降低机制的第一性原理研究[J]. 表面技术, 2020, 49(2): 295-300.

ZHANG Er-geng, NIU Shuai, CHEN Qiang, et al. First-principles on stress reduction mechanism of copper doped diamond-like carbon films[J]. Surface technology, 2020, 49(2): 295-300.

films. The initial models of copper-DLC doped with different concentrations of copper (1.56at.%~7.81at.%) and densities of 2.03 g/cm³ and 2.87 g/cm³ were established. The melting annealing and quenching processes were simulated by NVT and NOSE temperature regulation methods, and the geometric model was optimized by conjugate gradient method based on generalized gradient approximation (GGA). The radial distribution functions (RDF), sp³-C content, bulk modulus, bond length and bond angle distribution of the copper-DLC model were calculated by CASTEP and the effects of Cu doping on the stress change of DLC films were also discussed. The proportion of sp³-C hybridization increased with the increase of Cu content. Compared with DLC, the location of the first and second peaks in RDF of Cu-doped DLC shifted significantly. The residual stress in the films decreased first and then increased with the increase of the content of Cu. The residual stress was the smallest when the content of Cu was 1.56at.%(7.2 GPa). With the increase of Cu content, the peak value of the total bond angle distribution decreased, the peak width moved to the small bond angle, and the peak value of the total bond length distribution decreased, resulting in a small and wide peak in the long bond length direction. The weak bond properties of C—Cu and the relaxation of twisted bond angles and bond lengths have significant effects on the reduction of residual compressive stress. At higher concentration of Cu, the proportion of twisted C—C bonds increases, and more twisted C—Cu and Cu—Cu structures are formed, which is the key factor leading to the increase of residual stress.

KEY WORDS: Cu-DLC; first principle; stress reduction; radial distribution function; residual stress; bond length; bond angle

类金刚石(DLC)薄膜由于具有独特的结构和优异的机械、电子、光学等性能而受到了广泛关注^[1],它作为保护涂层不仅可以应用于工业制造,还可应用于太阳能电池、磁盘储存装置、医疗设备等领域^[2-4]。然而,较高的残余压应力将DLC薄膜的厚度限制在纳米级,成为制约薄膜应用的主要原因。已经有实验表明,元素掺杂可有效降低DLC膜的生长应力^[4]。Dwivedi等^[5]通过PECVD工艺制备含Cu类金刚石(Cu-DLC)薄膜的残余应力(<1 GPa)与纯DLC膜相比有显著降低,并且他们发现Cu的掺入增加了sp²杂化含量,使薄膜类石墨化程度提高,从而降低了薄膜残余应力。Chen等^[6]还发现,在DLC基质中嵌入Cu纳米颗粒可将薄膜应力降低至0.7 GPa,他们认为Cu和C之间的弱键允许在晶粒-基质(Cu-C)截面处发生滑动,这可能是导致应力降低的一种机制。研究表明,无定形碳结构中的残余压应力与原子键的畸变密切相关。从原子尺度的角度来看,金属原子的加入带来了结构的复杂性。但由于目前对原子键结构的实验表征方法有限,导致掺杂金属原子对原子键结构的影响不明确,并引起对应力降低机理的争议。

理论模拟技术为深入了解原子结构、明确金属掺杂DLC(Me-DLC)薄膜的应力降低机制提供了一种可靠方法。以往对于DLC薄膜应力的研究大多集中在sp³-C含量及入射粒子能量变化等方面^[7-9],对DLC膜中掺杂金属元素的研究极其有限,尤其是对于通过经典分子动力学(MD)模拟Me-DLC薄膜生长的研究。近年来,Li等^[10]用四面体键模型对所有过渡金属(TM)原子与C原子的键合特征进行了从头计算,发现随着掺杂TM的3d电子的增加,TM与C原子的键合特性由键合(Sc、Ti)转变为非键合(V、Cr、Mn、Fe),最后转变为反键合(Co、Ni、Cu),解释了由于总能量的变化导致键角扭曲的现象。虽然以往

的研究解释了原子键结构变形产生的应变能使应力发生改变,但仍需通过探究掺杂金属原子引起的结构变化来阐明应力降低机制及结构与性能的关系。

本文采用密度泛函理论(DFT)从头算的方法,研究了不同Cu浓度下的Cu-DLC薄膜的结构和性质。与传统的MD方法相比,无经验参数的从头算模拟方法具有明显的优越性。通过对径向分布函数(RDF)、残余压应力、体积模量、键长和键角分布等性能的研究,揭示结构性能与Cu含量的关系,并最终阐明应力降低机理。

1 模型建立及计算

文中模拟计算均基于Materials Studio软件中的CASTEP模块^[11-12]。初始构型为64个原子组成的具有恒定体积和周期性边界条件的立方体胞元,密度为2.87、2.03 g/cm³,Cu的原子数分数为0%、1.56%、3.13%、4.69%、6.25%、7.81%(0%~7.81%)。为获得完整的Cu-DLC模型,需要采用从头算分子动力学(AIMD)模拟的熔融淬火和几何优化,以便于描述DLC模型,并揭示其结构和性能之间的内在关系^[14,17-18]。在AIMD模拟过程中,系统采用正则系综(NVT)下NOSE进行温度调节。首先将系统升温至8000 K,平衡1 ps,时间步长为1 fs,使Cu、C原子熔化充分并有足够的时间扩散迁移,然后以1.6×10⁴ K/ps的冷却速率将系统温度从8000 K快速冷却到1 K(如图1),随后对系统进行基于共轭梯度法的几何优化^[19],令原子位置完全弛豫。截断能设置为500 eV,关联泛函选择广义梯度近似(GGA)并采用Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)参数^[13],能量收敛范围小于10⁻⁵ eV/atom,收敛过程直到每个原子上的Hellmann-Feynman力低于0.1 eV/nm,将K点设置为Γ点(1×1×1)并对布里渊区进行收敛计算。

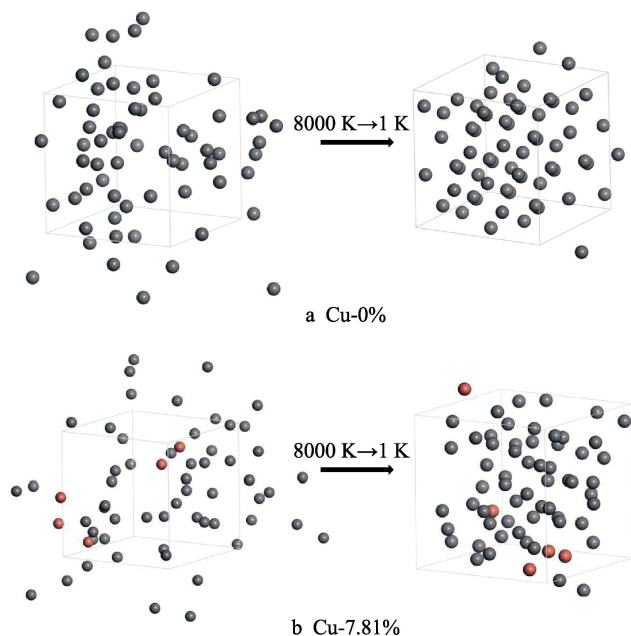


图 1 密度为 2.03 g/cm^3 的 Cu-DLC 模型在系统温度由 8000 K 降至 1 K 的模型变化图

Fig.1 Model change diagram of the temperature of the copper-DLC model system with a density of 2.03 g/cm^3 from 8000 K to 1 K

为得到比 DLC 网络中 Cu 原子直接取代 C 原子更典型的 Cu-DLC 模型, 在 2.87 g/cm^3 和 2.03 g/cm^3 的密度条件下, 通过取代液态碳样品中的 C 原子来引入 Cu 原子^[14,18]。模型优化后, 对 DLC 膜与 Cu-DLC 膜进行比较, 计算分析 Cu-DLC 膜中的 RDF、 sp^3 含量、残余应力、体积模量及键长和键角的分布, 并讨论其性能差异。

2 结果与讨论

在对薄膜结构进行表征前, 先分析高浓度 (原子数分数为 39%) Cu 掺杂的 DLC 系统中的 RDF $g(r)$, 确定 Cu 原子与 C 原子之间键合与否。如图 2 所示, 将 RDF 曲线到达第一个最小值时的距离设为截止距离, 其中 C—C 的截止距离为 0.158 nm , C—Cu 的截止距

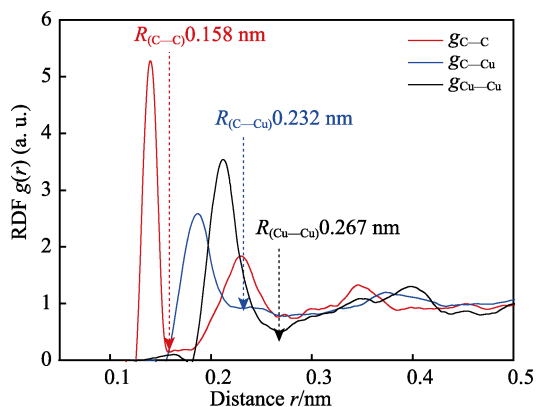


图 2 高浓度 Cu 掺杂 Cu-DLC 膜的 RDF 图
Fig.2 RDF of Cu-DLC film with high concentration of Cu

离为 0.232 nm , Cu—Cu 的截止距离为 0.267 nm ^[20]。

图 3 为不同浓度 Cu 掺杂 DLC 薄膜的亚稳态无定形非晶网络结构。纯 DLC 膜中低密度 (2.03 g/cm^3) 比高密度 (2.87 g/cm^3) 的膜结构松散, 其结构中含有较多关联性较弱的平面链结构, 薄膜中 sp^3 -C 含量分别为 13.28% 、 54.61% 。由于掺杂的 Cu 原子可以与附近多个碳原子产生相互作用, 因此网络模型中 sp^3 杂化结构随 Cu 原子浓度的增加而增加, 两种密度 Cu-DLC 膜中的 Cu 原子数分数为 7.81% 时, 薄膜中的 sp^3 -C 含量分别为 39.53% 、 73.96% 。数值模拟结果表明, 在高浓度 Cu 掺杂的 DLC 薄膜中, Cu 原子间会相互聚集成键, 呈偏聚效应。主要原因是 Cu 原子和 C 原子之间为反键合特性, 显著消弱系统中的键合强度及结构稳定性。同样有学者研究发现, Cu 原子与 C 原子间的键合能力弱, 难以形成碳化物, Cu 金属团簇极易在碳基基质中形成^[6,10]。

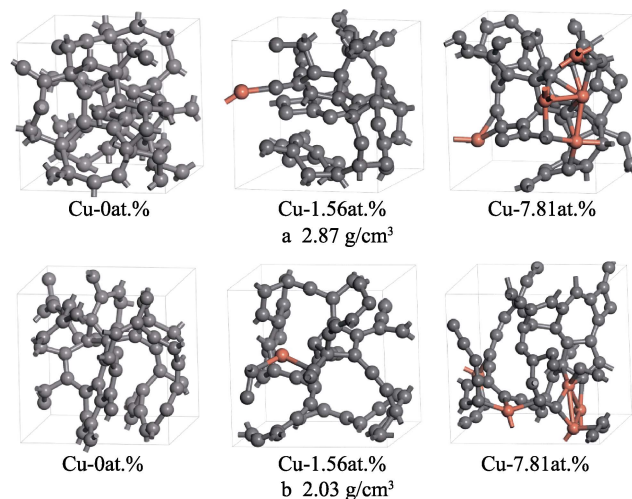


图 3 不同密度下不同 Cu 浓度的 Cu-DLC 薄膜原子结构 (黑色、红色分别表示 C 原子和 Cu 原子)

Fig.3 Atomic structure of Cu-DLC films with Cu concentrations of $0\text{at.}\%$, $1.56\text{at.}\%$, and $7.81\text{at.}\%$ at the densities of (a) 2.87 g/cm^3 , and (b) 2.03 g/cm^3 , where black and red colors indicate the C and Cu atoms, respectively

图 4 为不同浓度 Cu 掺杂 DLC 薄膜的 RDF, 薄膜均呈现长程无序和短程有序的典型非晶态特征。对于纯 DLC 薄膜, 随密度的增加, C—C 第一峰的位置从 0.146 nm 移到 0.15 nm 。RDF 中第一峰的位置与原子键键长相关, 第二峰的位置与原子键键长和键角均相关^[21-22]。密度为 2.87 g/cm^3 和 2.03 g/cm^3 的掺 Cu DLC 膜的第一、第二峰的峰位与纯 DLC 膜存在偏差, 表明原子键结构中键长、键角发生了变化。

图 5 为薄膜残余压应力和体积模量与 Cu 浓度的关系。应力 σ 和体积模量 B 的计算方程为:

$$P = \frac{P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}}{3} \quad (1)$$

$$B = -V \frac{dP}{dV} \quad (2)$$

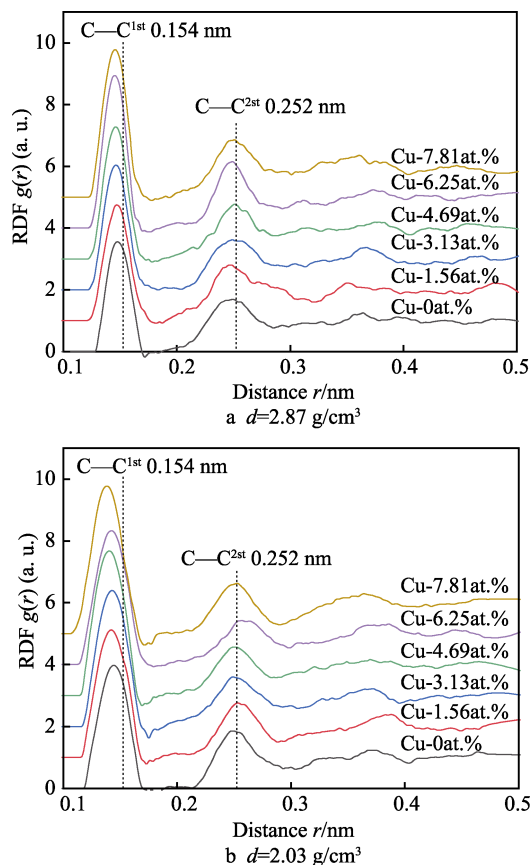


图4 不同浓度 Cu 掺杂 DLC 薄膜的 RDF 图
(垂直虚线代表金刚石的第一、第二峰的位置)
Fig.4 RDF diagrams of DLC films doped with different concentrations of copper (vertical dotted lines represent the positions of the first and second peaks of diamond)

$$\sigma = \frac{3}{2}P \quad (3)$$

式中: P 为静水压力; P_{xx} 、 P_{yy} 、 P_{zz} 为应力张量的对角分量; V 为系统体积; B 为体积模量。根据 McKenzie 的方法 (方程式 (3))^[27-28], 密度为 2.87 g/cm^3 的纯 DLC 薄膜具有 25.3 GPa 的高残余压应力, 低密度的纯 DLC 膜 (2.03 g/cm^3) 产生约 3.7 GPa 的拉伸应力。如图 5a 所示, 在 2.87 g/cm^3 的 DLC 膜中引入 Cu 原子后, 随着 Cu 浓度的增加, 残余应力先急剧减小然后增大, 当 Cu 原子数分数为 1.56% 时, 薄膜拥有最小的残余压应力, 约为 7.2 GPa , 与纯 DLC 膜相比, 降低了 71.5% ; 当 Cu 原子数分数达到 7.81% 时, 残余压应力增加到 29.3 GPa 。实验中也同样证实了残余应力随 Cu 浓度的变化规律^[6]。此外, 图 5a 还表明, 随着 Cu 浓度的增加, DLC 膜的体积模量逐渐降低, 导致上述现象的主要原因为 Cu 金属团簇的形成破坏了碳网络的连续性。然而, 在密度为 2.03 g/cm^3 的 Cu-DLC 薄膜中 (图 5b), 拉伸应力占主导地位, 残余应力值为负, 该值先下降后增加。当 Cu 原子数分数为 3.13% 时, 应力值为 -12.8 GPa , 体积模量与密度为 2.87 g/cm^3 的 Cu-DLC 薄膜接近。

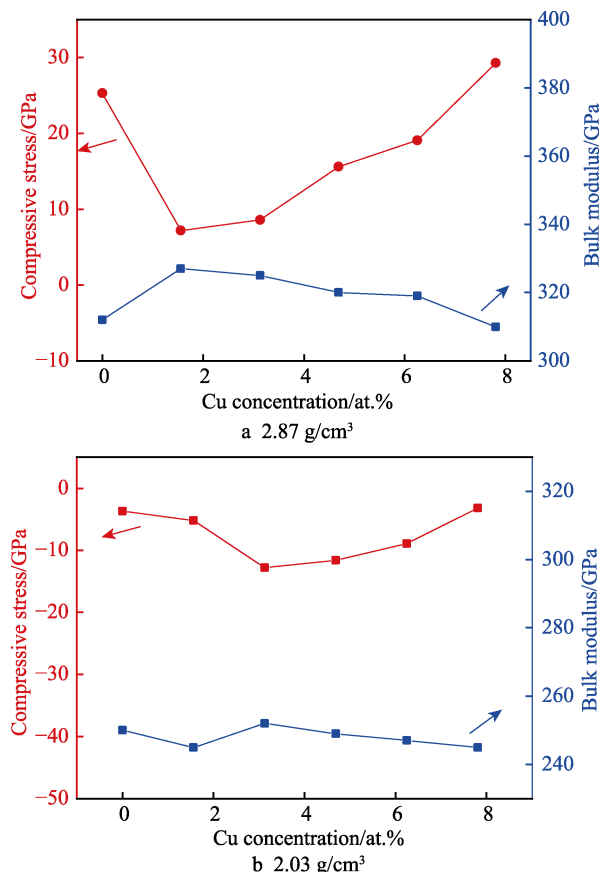


图5 不同密度下 Cu-DLC 膜的残余应力和
体积模量与 Cu 浓度的函数关系
Fig.5 Compressive stress and bulk modulus of
Cu-DLC films as a function of Cu concentrations at
densities of 2.87 g/cm^3 (a) and 2.03 g/cm^3 (b)

为深入研究 Cu-DLC 薄膜的结构演化, 揭示 Cu 掺杂引起的应力降低机理, 需对 Cu-DLC 薄膜的原子键结构进行研究。以密度为 2.87 g/cm^3 的 Cu-DLC 薄膜为例, 探讨原子键结构与残余应力的关系。图 6a、b 分别为 Cu 原子数分数为 1.56% 、 7.81% 的 DLC 膜和纯 DLC 膜的总键角和总键长分布, 其中总键角分布由所有组合的键角分布组成, 总键长分布由 C—C、C—Cu 和 Cu—Cu 键的键长分布组成。图 6a 表明, 高 Cu 浓度的 DLC 膜中, 总键角分布的峰值低, 峰宽向小键角移动, 这是由于结构中存在的 C—Cu 键角产生的影响。Cu 原子数分数为 7.81% 的 Cu-DLC 膜的总键长分布在 0.2 nm 附近产生一个小而宽的峰 (图 6b)。图 7 为 Cu 原子数分数为 7.81% 的 Cu-DLC 薄膜 RDF, 该图对 C—C、C—Cu 和 Cu—Cu 键的 RDF 进行分解, 很明显能够看出 C—Cu 和 Cu—Cu 的键长比 C—C 更长, 因此可以判断图 6b 中出现的小而宽峰来自 C—Cu 和 Cu—Cu。

Li 等人^[29]发现键角 ($<109.5^\circ$) 和键长 ($<0.142 \text{ nm}$) 的畸变导致了碳网络结构产生较高的残余应力。因此, 进一步研究了 Cu-DLC 薄膜中的 C—C—C 键角和 C—C 键长。石墨、金刚平均键角分别为 120° 、 109.5° ,

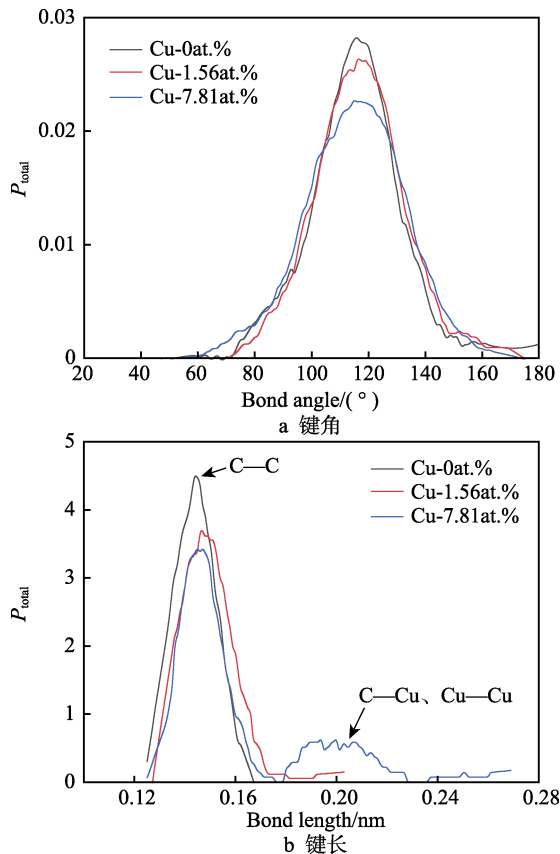


图 6 密度为 2.87 g/cm^3 的 Cu-DLC 薄膜中键角和键长分布
Fig.6 Bond angle (a) and bond length (b) distribution in Cu-DLC films with density of 2.87 g/cm^3

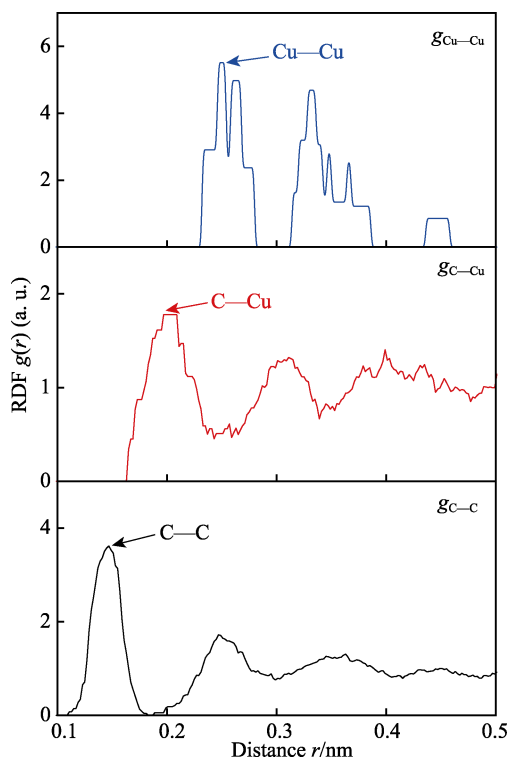


图 7 密度为 2.87 g/cm^3 、Cu 原子数分数为 7.81% 的 Cu-DLC 膜中 $g_{\text{C-C}}$ 、 $g_{\text{C-Cu}}$ 、 $g_{\text{Cu-Cu}}$ 的 RDF 分解图
Fig.7 Decomposed RDF spectra of $g_{\text{C-C}}$, $g_{\text{C-Cu}}$ and $g_{\text{Cu-Cu}}$ in Cu-DLC film with Cu concentration of 7.81at.% and density of 2.87 g/cm^3

平均键长分别为 0.142、0.154 nm。如图 8 所示, 与纯 DLC 薄膜相比, 当 Cu 原子数分数从 0% 增加到 1.56% 时, 键长小于 0.142 nm、键角小于 109.5° 的高度扭曲的键合结构数量减少, 意味着 DLC 薄膜中掺杂少量的 Cu 可以有效地松弛碳基质网络中扭曲的键合结构, 从而显著降低薄膜内的残余应力值。以往研究发现, Cu 和 C 原子之间具有形成反键的键合特性, 这导致了系统整体强度的降低^[10]。因此, Cu 掺杂引起的 DLC 薄膜残余应力降低的基本机制主要是由于形成了较弱的 C—Cu 键, 降低了结构中扭曲的键长、键角比例。然而, 在较高的 Cu 浓度 (7.81%) 中, C—C 键长的畸变率显著增加, 并且由于较高的 Cu 浓度还形成了许多扭曲的 C—Cu 和 Cu—Cu 结构, 这也是导致残余应力增加的原因。在密度为 2.03 g/cm^3 的 Cu-DLC 薄膜中, 也发现了相同的原子键结构变化。

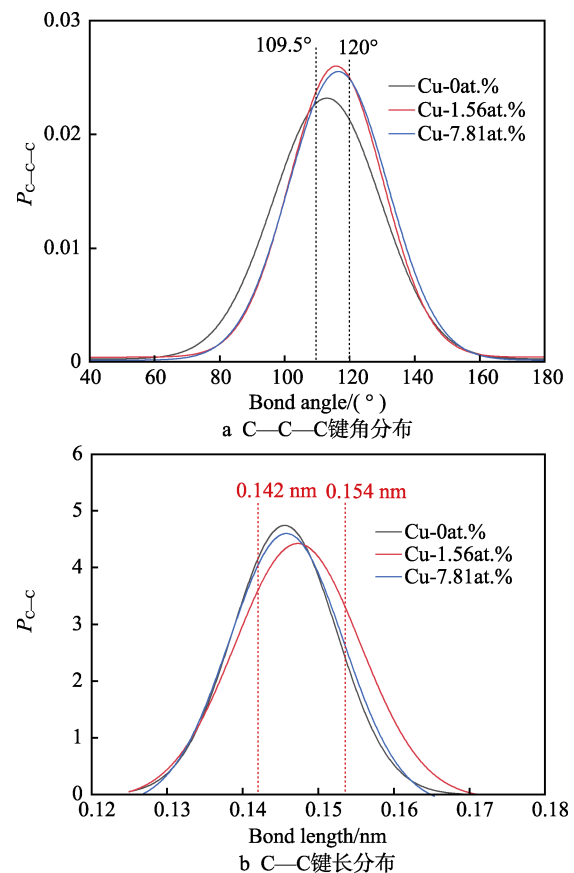


图 8 C—C—C 键角和 C—C 键长分布
Fig.8 C—C—C bond angle distribution (a) and C—C bond length distribution (b)

3 结论

1) 高密度 (2.87 g/cm^3) Cu-DLC 薄膜应力随 Cu 含量的增加, 呈先降低后增加的变化趋势, 当 Cu 含量为 1.56% 时, 应力达到最低值 (7.2 GPa), 在低密度 (2.03 g/cm^3) 下有相似的应力变化趋势。

2) Cu 掺杂后 DLC 膜中产生 Cu 金属团簇, 使 Cu-DLC 膜的体积模量降低。

3) Cu-DLC 薄膜残余应力降低的主要原因是 C-Cu 弱键合特性以及扭曲的键长、键角发生松弛, 当 Cu 含量为 7.81% 时, 扭曲的 C—C 键长比例增加及 C—Cu、Cu—Cu 键结构产生畸变是导致残余应力增加的关键因素。

参考文献:

- [1] 陈青云, 施凯敏, 苏敏华, 等. 类金刚石膜研究进展[J]. 材料工程, 2017, 45(3): 119-128.
CHEN Qing-yun, SHI Kai-min, SU Min-hua, et al. Progress of diamond-like carbon films[J]. Journal of materials engineering, 2017, 45(3): 119-128.
- [2] 熊礼威, 彭环洋, 张莹, 等. 类金刚石薄膜的摩擦性能及其应用[J]. 表面技术, 2016, 45(1): 80-88.
XIONG Li-wei, PENG Huan-yang, ZHANG Ying, et al. Tribological properties and application of diamond-like carbon film[J]. Surface technology, 2016, 45(1): 80-88.
- [3] 张碧云, 曲燕青, 谢红梅, 等. 类金刚石膜的制备技术及应用领域概况[J]. 表面技术, 2007, 36(3): 70-73.
ZHANG Bi-yun, QU Yan-qing, XIE Hong-mei, et al. Review of preparation and application of diamond-like carbon films[J]. Surface technology, 2007, 36(3): 70-73.
- [4] 孙德恩, 董洪铭, ZHANG Sam, 等. 元素掺杂类金刚石碳膜降内应力研究综述[J]. 表面技术, 2018, 47(6): 107-115.
SUN De-en, DONG Hong-ming, ZHANG Sam, et al. Internal stress reduction in diamond-like carbon coatings via elemental doping: A review[J]. Surface technology, 2018, 47(6): 107-115.
- [5] DWIVEDI N, KUMAR S, MALIK H K, et al. Investigation of properties of Cu containing DLC films produced by PECVD process[J]. Journal of the physics and chemistry of solids, 2012, 73(2): 308-316.
- [6] CHEN C C, HONG C N. Structure and properties of diamond-like carbon nanocomposite films containing copper nanoparticles[J]. Applied surface science, 2005, 242(3-4): 261-269.
- [7] ZHENG B, ZHENG W T, YU S S, et al. Growth of tetrahedral amorphous carbon film: Tight-binding molecular dynamics study[J]. Carbon, 2005, 43(9): 1976-1983.
- [8] NEYTS E, BOGAERTS A, GIJBELS R, et al. Molecular dynamics simulations for the growth of diamond-like carbon films from low kinetic energy species[J]. Diamond and related materials, 2004, 13(10): 1873-1881.
- [9] PAILTHORPE B A. Molecular-dynamics simulations of atomic processes at the low-temperature diamond (111) surface[J]. Journal of applied physics, 1991, 70(2): 543.
- [10] LI X, LEE K R, WANG A. Chemical bond structure of metal-incorporated carbon system[J]. Journal of computational and theoretical nanoscience, 2013, 10(8): 1688-1692.
- [11] KRESSE G. Efficient iterative schemes for ab-initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical review B(condensed matter), 1996, 54(16): 11169-11186.
- [12] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set[J]. Computational materials science, 1996, 6(1): 150.
- [13] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Perdew, burke, and ernzerhofreply[J]. Physical review letters, 1998, 80(4): 891-891.
- [14] ZHENG B, ZHENG W T, ZHANG K, et al. First-principle study of nitrogen incorporation in amorphous carbon[J]. Carbon, 2006, 44(5): 962-968.
- [15] ALVAREZ F, VALLADARES R M. Ab-initio generation of amorphous carbon structures[J]. Diamond and related materials, 2002, 11(3-6): 1015-1018.
- [16] MARKS N A, MCKENZIE D R, PAILTHORPE B A, et al. Ab-initio simulations of tetrahedral amorphous carbon[J]. Phys rev B(condens matter), 1996, 54(14): 9703-9714.
- [17] BILEK M M M, MCKENZIE D R, MCCULLOCH D G, et al. Ab-initio simulation of structure in amorphous hydrogenated carbon[J]. Physical review B(condens matter), 2000, 62(5): 3071-3077.
- [18] GAMBIRASIO A, BERNASCONI M. Ab-initio study of boron doping in tetrahedral amorphous carbon[J]. Physical review B(condensed matter), 1999, 60(17): 12007-12014.
- [19] GILLAN M J. Calculation of the vacancy formation energy in aluminium[J]. Journal of physics condensed matter, 1989, 1(4): 689.
- [20] HAERLE R, GALLI G, BALDERESCHI A. Structural models of amorphous carbon surfaces[J]. Applied physics letters, 1999, 75(12): 1718-1720.
- [21] LI F, LANNIN J S. Radial distribution function of amorphous carbon[J]. Physical review letters, 1990, 65(15): 1905-1908.
- [22] GILKES K W, GASKELL P H, ROBERTSON J. Comparison of neutron-scattering data for tetrahedral amorphous carbon with structural models[J]. Physical review B(condens matter), 1995, 51(18): 12303.
- [23] MCCULLOCH D G, MCKENZIE D R, GORINGE C M. Ab-initio simulations of the structure of amorphous carbon[J]. Physical review B, 2000, 61(3): 2349-2355.
- [24] MARKS N A, BERNASCONI M, PARRINELLO M. Microscopic structure of tetrahedral amorphous carbon[J]. Physical review letters, 1996, 76(5): 768-771.
- [25] GALLI G, MARTIN R M, CAR R, et al. Structural and electronic properties of amorphous carbon[J]. Chem inform, 1989, 20(37): 555-558.
- [26] GALLI G, MARTIN R M, CAR R, et al. Carbon: The nature of the liquid state[J]. Physical review letters, 1989, 63(9): 988-991.
- [27] MCKENZIE D R, MULLER D, PAILTHORPE B A. Compressive-stress-induced formation of thin-film tetrahedral amorphous carbon[J]. Physical review letters, 1991, 67(6): 773-776.
- [28] MARKS N A. Evidence for subpicosecond thermal spikes in the formation of tetrahedral amorphous carbon[J]. Physical review B, 1997, 56(56): 2441-2446.
- [29] LI X, KE P, HE Z, et al. Structural properties and growth evolution of diamond-like carbon films with different incident energies: A molecular dynamics study[J]. Applied surface science, 2013, 273(6): 670-675.