

熔融温度对 DLC 薄膜杂化状态影响的分子动力学研究

罗宏博^{1,2*} 杨来东¹ 连潇¹ 王建吉¹ 朱砚³

(1. 陇东学院 智能制造学院 庆阳 745000; 2. 西安理工大学 机械与精密仪器工程学院 西安 710048;

3. 金川集团股份有限公司选矿厂 金昌 737103)

The Effect of Melting Temperature on Hybridization State of DLC Film Based on the Molecular Dynamic Simulation

LUO Hongbo^{1,2*}, YANG Laidong¹, LIAN Xiao¹, WANG Jianji¹, ZHU Yan³

(1. School of Intelligent Manufacturing, Longdong University, Qingyang 745000 China; 2. School of Mechanical and Precision Instrument Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China;

3. Beneficiation Plant of Jinchuan Group Co. Ltd., Jinchang 737103, China)

Abstract In this paper, the molecular model of diamond was established based on the Tersoff potential function and molecular dynamics (MD) method. Through analyzing the atomic bonding structure, radial distribution function (RDF) curves, and the atoms' coordination number during different melting temperatures and cooling processes, the formation mechanism of atomic morphology hybridization during the preparation of diamond like carbon (DLC) films was revealed at the atomic scale. The results show that the DLC film is mainly composed of C- sp^3 and C- sp^2 hybrid phases. When the temperature is lower than 6000 K, the melting and cooling process will not cause the structural transformation of the C- sp^3 hybrid, and the properties of the films are relatively stable. When the temperature is higher than 7000 K, a large number of C- sp^3 hybrid atoms are transformed to C- sp^2 and C- sp^1 during melting. In the cooling and relaxation equilibrium process, the high energy state C- sp^3 hybrid atoms will be transformed to C- sp^2 , but the number of C- sp^1 hybrid has little change. The melting temperature has a major effect on the percentage content of C- sp^3 and C- sp^2 phases during the preparation of DLC films. When the content of C- sp^2 hybridization exceeds 40% in the system, the properties of the films tend to be graphitic.

Keywords Molecular dynamic, Melting temperature, Radial distribution function, Coordination number, Diamond Like Carbon, Hybridization

摘要 文章基于 Tersoff 势函数, 采用分子动力学方法建立金刚石的分子模型, 分析了不同熔融温度和冷却过程对原子键合结构, 径向分布函数曲线和配位数的影响, 从原子尺度阐明了 DLC 薄膜制备过程中原子形态杂化的形成机理。研究发现: DLC 薄膜主要由 C- sp^3 和 C- sp^2 杂化相组成, 当温度低于 6000 K 时, 熔融和冷却基本不会使 C- sp^3 杂化发生结构转变, 薄膜的性能比较稳定。当温度高于 7000 K 时, 熔融过程中有大量的 C- sp^3 杂化原子转变为 C- sp^2 和 C- sp^1 , 冷却和弛豫平衡会引起高能态 C- sp^3 杂化原子转变为 C- sp^2 , 但 C- sp^1 杂化的含量基本不变。熔融温度主要影响 DLC 薄膜制备过程中 C- sp^3 和 C- sp^2 相的百分比含量, 当体系中 C- sp^2 含量超过 40%, 薄膜的性能将趋向于石墨。

关键词 分子动力学 熔融温度 径向分布函数 配位数 类金刚石 杂化

中图分类号: TG156.21

文献标识码: A

doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202311007

近年来, 各种形式的碳如富勒烯 (C60)、碳纳米管(单壁和多壁)以及 DLC(Diamond Like Carbon)的

发展, 为科学技术和工程应用带了重大进步^[1]。碳产品的多种同素异形体和多功能性源于其杂化轨

收稿日期: 2023-11-13

基金项目: 庆阳市科技计划青年基金项目 (QY-STK-2022A-018); 甘肃省重点研发计划项目 (23YFNM0002)

* 联系人: E-mail: rd20043533@126.com

道和键态, 拥有的 sp^1 , sp^2 , sp^3 三种杂化轨道, 形成了单键, 双键及三键三种化学键态。非晶碳主要以薄膜的形式存在, 其不同的键合方式和比例使其拥有优异的应用特性^[2-3]。DLC 薄膜是一种非晶亚稳态碳基薄膜, 其结构主要由类金刚石相的 sp^3 杂化键, 以及类石墨相的 sp^2 杂化键组成, 且在低密度的结构中含有少量的 sp^1 杂化键。这种杂化混合结构从而使 DLC 集高硬度、低摩擦、减摩耐磨特性于一身, 具有优异的力学性能和摩擦学性能, 是一种典型的固体自润滑材料^[4-5]。

在实际应用中, DLC 涂层通常只有几纳米厚, 存在如热稳定性差, 残余内应力大, 与基体的结合强度低, 容易剥落等缺陷。针对现有缺陷, 国内外研究人员通过实验和理论计算对 DLC 的成膜机理和性能提升开展了广泛而深入的研究。Shao 等^[6]通过分子动力学方法研究了 γ -Fe/CrN 基体上不同密度下 DLC 薄膜的变形行为, 结果显示 sp^3 含量对 DLC 力学性能的影响较大。曾等^[7]研究了退火温度对 DLC 膜热稳定性及摩擦学性能的影响, 研究表明, 当退火温度低于 200℃ 时, DLC 薄膜的 sp^3 杂化键基本不会发生变化, 随着退火温度的升高, sp^3 杂化键向 sp^2 杂化键的转化加快, 石墨化加剧。张等^[8]基于分子动力学研究了不同入射能量下 DLC 薄膜的具体形态及 sp 杂化特性。张等^[9]通过分子动力学模拟了 Si 掺杂 DLC 薄膜的制备和摩擦磨损性能, 结果表明: C- sp^3 杂化分布在摩擦表面区域时, 摩擦力随夹杂含量的增加而下降, 分布在薄膜中间层和底层时, 杂化原子结构会阻碍晶体结构形变的传播, 但对摩擦学性能影响不大。

温度是 DLC 薄膜成膜过程中的关键影响因素, 本文采用分子动力学(MD; Molecular Dynamic)方法, 模拟金刚石加热熔化再快速冷却的过程, 通过分析径向分布函数, 杂化含量和模拟过程的配位数变化,

从微观角度分析熔融温度对 DLC 内部原子键合结构和性能影响的内在机理, 为高性能 DLC 薄膜的制备和性能提升提供指导。

1 模型及方法

本文建立的分子动力学仿真模型如图 1 所示, 为了减小尺寸的影响, 在 x , y , z 三个方向设置为周期性边界条件, 模型尺寸的大小为 $20 \text{ a} \times 20 \text{ a} \times 10 \text{ a}$ ($\text{a} = 3.57 \text{ \AA}$), 原子总数为 32800 个。DLC 的 MD 模拟中, 其成膜方法主要有两种, 一种是离子沉积法或溅射法; 另一种是液相淬火法^[10]。与第一种方法相比, 第二种方法制备方便, 节省时间, 具有物理意义且建模结果可靠, 能为实际薄膜制备提供关键物理参数依据, 揭示液相淬火制备 DLC 薄膜过程熔融温度对 DLC 薄膜杂化状态的影响机理。因此, 本文选用第二种, 通过金刚石在不同温度加热熔化至液相, 然后快速冷却的方法模拟 DLC 薄膜制备, 整个过程分为以下 4 个步骤(如图 2 所示, 熔融温度 7000 K), 首先在初始温度 300 K 下, 在 NVT 系综下对金刚石进行分子动力学模型充分弛豫, 以消除晶体的内应力, 接着在 10 ps 内将温度分别升高到 5000、6000、7000、8000 K(熔融温度), 并保持在这个温度下 5 ps(保温)。然后在 4 ps 内由最高温度快速冷却至 300 K, 最后, 让系统在 300 K 下弛豫平衡 10 ps^[11], 使系统内的内能和结构达到稳定状态。

势函数是影响分子动力学计算准确性的关键。在碳材料中 C-C 原子间常用到的势函数有反应经验键阶 (REBO), 第二代 REBO (REBO2)^[12-13], 自适应分子间反应经验键序 (AIREBO)^[13], 反应性 Force Field (ReaxFF)^[14] 和 Tersoff^[15]。相关文献已对各种势函数进行了比较研究, ReaxFF^[14] 比 Tersoff 更能精确地评估 sp^2 耦合, 因为 ReaxFF 还考虑了原子间的范德华力。但是, 使用 ReaxFF 执行模拟需要比

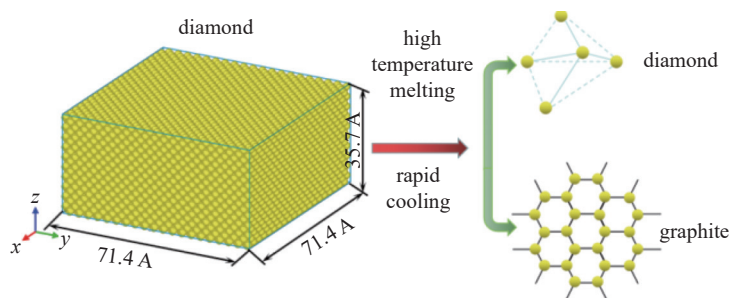


图1 DLC 分子动力学计算模型

Fig. 1 Molecular dynamics simulation model of DLC

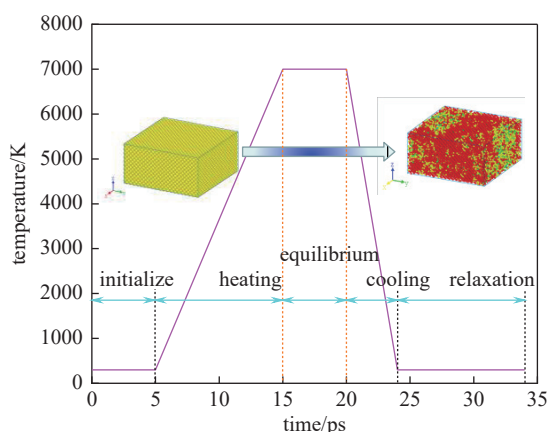


图2 DLC 薄膜的制备过程 (7000 K)

Fig. 2 Process of DLC films preparation (7000 K)

使用 Tersoff 更多的计算成本 (大约是 Tersoff 的 100 倍), 因此 ReaxFF 在目前的计算条件下是不切实际的, 且在 DLC 薄膜的液相淬火制备中, 范德华力对计算结果准确的影响较小。因此, 作者采用 Tersoff 势函数进行 C-C 原子间的力场约束, Tersoff 原子势具有两体势的形式, 其中键序参数的大小可以准确描述共价键相连原子之间的相互作用^[16], 势函数中具体参数如表 1 所示。Tersoff 势函数形式可表示为:

$$\begin{cases} E = \sum_i V_{ij} \\ V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \end{cases} \quad (1)$$

式中: f_R 为排斥项, f_A 为吸引项, f_c 为截断函数, b_{ij} 为多体相互作用键序系数, r_{ij} 为原子 i, j 间的距离。

表 1 Tersoff 势函数中的参数

Tab. 1 Parameters of Tersoff potential

参数	值
γ	2.0813×10^{-4}
S	1.22
β/m^{-1}	2.1×10^{10}
D_0/eV	6.0
r_0/m	1.39×10^{-10}
c	330
d	3.5
R/m	2.15×10^{-10}
D/m	0.35×10^{-10}

模拟计算过程时间步长设为 1 fs, 分子动力学模拟与计算采用 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) 进行, 可视化及其仿真数据是通过开放可视化工具 OVITO^[17] 软件

实现的。

2 结果与讨论

2.1 不同熔融温度下的径向分布函数

径向分布函数(RDF: Radial Distribution Function)可以定性的描述晶体及非晶体材料内部原子的分布, 从而直观的表征材料的无序化程度和非晶状态。同时, 还可以根据曲线波峰的位置, 形状来分析材料内部的结构变形和原子的成键形式。原子径向分布函数:

$$g(r) = \frac{dN}{\rho 4\pi r^2 dr} \quad (2)$$

式中: $g(r)$ 描述了模型区域密度与平均密度的比值, 区域大小为到指定原子的距离为 r , 厚度为 Δr 的球壳^[18]。本文通过 MD 计算, 得到了不同熔融温度下 C 原子在某一截断半径内, 其临近原子分布概率的数据, 得到了图 3 所示的不同熔融温度下 DLC 薄膜的 RDF 曲线, 表现出明显的短程有序和长程无序的经典非晶特征, 曲线的峰值位置, 与体系整体的有序排列的程度和结构特征相互对应。已有资料研究表明: 非晶材料的 RDF 曲线第一峰的位置主要与原子键键长相关, 第二峰的位置主要与原子键键长和键角相关。从图 3 可以看到不同熔融温度下得到的 DLC 薄膜 RDF 曲线基本相似。图中 RDF 曲线第一临近峰位置位于 1.42 Å (理想石墨结构键长) 和 1.54 Å 之间 (理想金刚石结构键长), 反映出这种非晶结构是由 C- sp^3 和 C- sp^2 杂化原子混合组成。不同熔融温度下 DLC 薄膜的径向分布曲线不完全重合, 温度越高, 第一峰的峰值越低, 温度越低, 第一峰的峰值越高, 第一峰峰值的大小与横向键长对

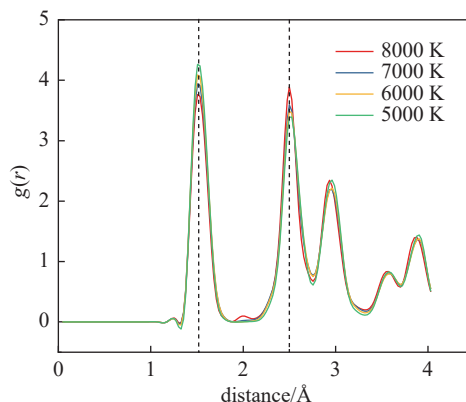


图3 不同熔融温度下 DLC 薄膜的 RDF

Fig. 3 RDF under different melting temperatures of DLC

应原子的含量对应(即 $C-sp^3$ 和 $C-sp^2$), 第二峰的峰值高低与第一峰的正好相反, 而且第二峰的位置在 2.5 Å 处, 不同熔融温度下, 第二峰的位置基本不变, 这与 Tersoff 势函数中截断函数的截断半径取值大小有关, 本文中 Tersoff 势函数的截断距离取为 2.5 Å。

2.2 不同熔融温度下的原子配位数

配位数是指直接与中心原子配位的原子数目(最近邻原子数目), 通过计算熔融过程系统中指定原子的配位数变化, 定量的分析材料中各种碳的杂化形式, 能够更精确的分析熔融温度对于 DLC 结构转变的影响。Bewilogua 等^[5,19]指出, DLC 主要由 $C-sp^3$ 杂化(配位数为 4)和 $C-sp^2$ 杂化(配位数为 3)的碳原子构成, 原子颜色按照配位数着色(红色为 4, 黄色为 3, 绿色为 2, 蓝色为 1), 其余 sp^1 (配位数 ≤ 2) 杂化的碳原子含量极少。

图 4 显示了金刚石融冷却过程中不同阶段系统内 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 杂化键的分布, 当熔融温度低于 6000 K 时, 系统中几乎没有出现配位数小于 4 的原子, 即 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 的含量为零, 当熔融温度增加到 6000 K 以上是, 系统出现了配位数小于 4 的原子, 这时系统中的 $C-sp^3$ 处于高能态, $C-sp^3$ 杂化键极易向 $C-sp^2$ 转变, 而且冷却和冷却后的弛豫平衡过程都会使 $C-sp^3$ 杂化键转向 $C-sp^2$ 杂化键, 且在熔融温度 8000 K 时, 冷却弛豫平衡后 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 杂化键的含量最高, 即越趋向于石墨化。图 5 显示了不同熔融温度下各阶段系统中配位数小于 4 的原子含量。当温度低于 6000 K 系统升温、冷却和平衡弛豫过程都没有出现 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 杂化结构的碳原子, 也就是在此温度下未发生杂化结构的转变, 当温度高于 7000 K 时, 系统中开始出现 $C-sp^3$ 向 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 的转变, 而且快速冷却和弛豫平衡过程中都会有 $C-sp^2$ 杂化和 $C-sp^1$ 杂化含量的增加。图 6 显示熔融后系统中 $C-sp^2$ 杂化和 $C-sp^1$ 杂化的含量, 7000 K 时系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 9.5%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 3.7%, 当温度为 8000 K 时, 系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 22.9%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 5.8%。

2.3 熔融后原子的配位数分布

图 7 显示了不同温度冷却后系统中原子配位数的分布, 当熔融温度在 6000 K 下, 在融化后系统中出现的少量配位数小于 4 的原子, 快速冷却后, 这些原子消失, 这说明在低熔融温度下形成的 $C-sp^2$,

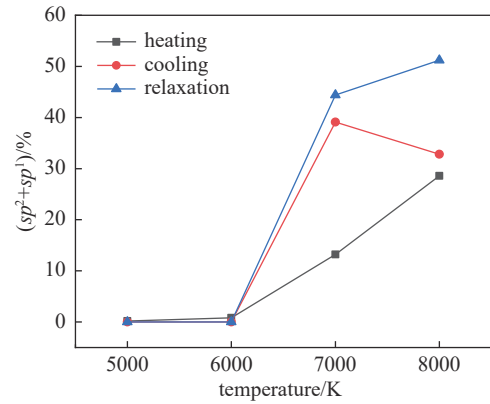


图4 金刚石融冷却过程 sp^2+sp^1 含量变化

Fig. 4 The content of sp^2+sp^1 changes during melting and cooling of diamond

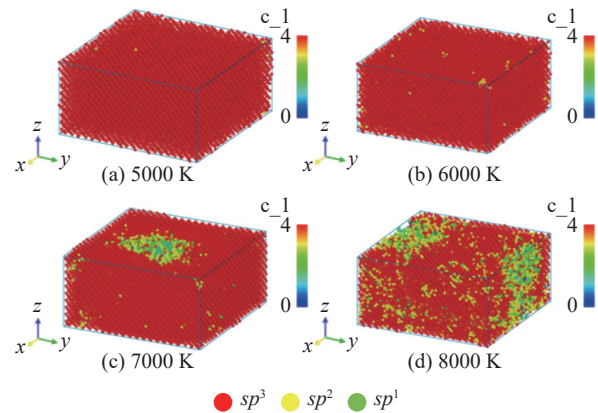


图5 不同熔融温度升温后体系的配位数

Fig. 5 The coordination number of system atoms after heating under different melt temperatures

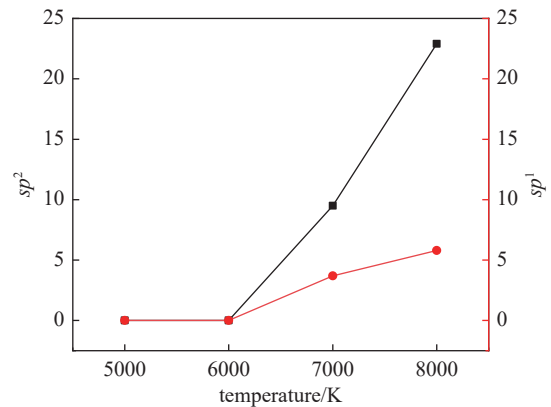


图6 熔融后体系 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 的含量

Fig. 6 The content of $C-sp^2$ and $C-sp^1$ in the system after melting

其状态极不稳定, 在冷却过程发生了 $C-sp^2$ 向 $C-sp^3$ 的转变。研究表明, 非晶碳材料中结构键的稳定性是由原子间的势能决定的, 势能越低, 结构越稳

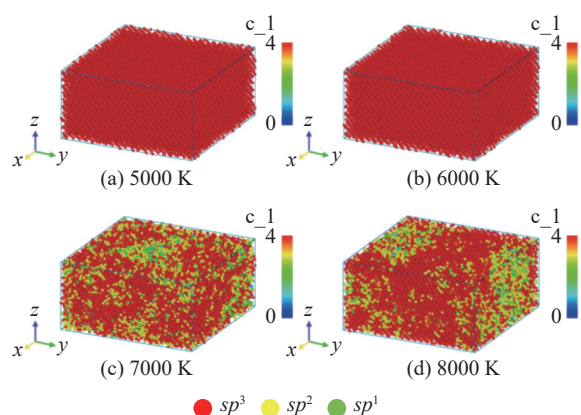


图7 不同熔融温度冷却后体系原子的配位数

Fig. 7 The coordination number in the system under different melting temperatures after cooling

定。所以,熔融温度越高,系统中高能态的 $C-sp^3$ 杂化原子,通过结构转变,形成低能态的 $C-sp^3$, $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 。

图8显示了不同熔融温度冷却后系统中 $C-sp^2$ 杂化和 $C-sp^1$ 杂化的含量,7000 K 时系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 31.9%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 7.2%, 当温度为 8000 K 时,系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 27.3%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 5.5%。快速降温过程,系统的势能降低,大量的 $C-sp^3$ 杂化原子转变为 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$,使 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 含量上升。图9显示了不同熔融温度冷却并弛豫平衡后系统中 $C-sp^2$ 杂化和 $C-sp^1$ 杂化的含量,7000 K 时系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 37.1%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 7.3%, 当温度为 8000 K 时,系统中 $C-sp^2$ 杂化的含量是 45.4%, $C-sp^1$ 杂化的含量是 5.8%。在弛豫平衡过程中,整个体系中不稳定的高能态 $C-sp^3$ 杂化结构会转变为 $C-sp^2$ 杂化结

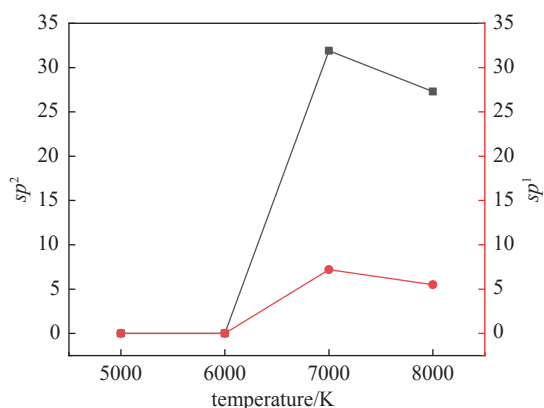


图8 不同熔融温度冷却后 DLC 中 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 的含量

Fig. 8 The content of $C-sp^2$ and $C-sp^1$ under different melting temperatures after cooling

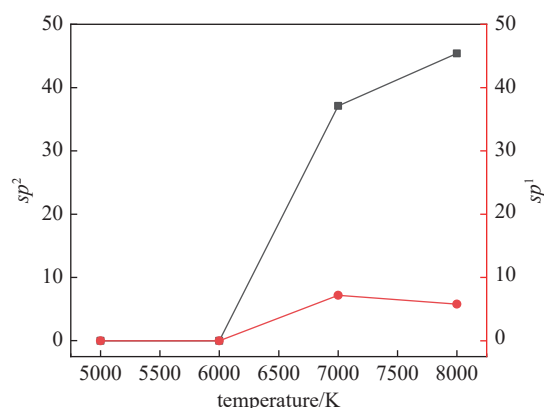


图9 不同熔融温度冷却并弛豫后 DLC 中 $C-sp^2$ 和 $C-sp^1$ 的含量

Fig. 9 The content of $C-sp^2$ and $C-sp^1$ in DLC under different melting temperatures after cooling and relaxation

构,引起模拟体系 $C-sp^2$ 杂化的含量上升,但弛豫前后,系统中 $C-sp^1$ 杂化的含量几乎没有变化,说明弛豫过程,主要是不稳定的 $C-sp^3$ 杂化转变为 $C-sp^2$ 杂化,不会发生 $C-sp^3$ 杂化向 $C-sp^1$ 杂化的转变。

3 结论

基于分子动力学方法,研究了金刚石的熔融冷却过程的原子键合形式,揭示了 DLC 薄膜的形成机理,从原子角度分析了 DLC 薄膜形成过程的 RDF 和配位数分布,得出以下结论。

(1)当熔融温度低于 6000 K 时,模拟系统内原子的整体结构为 $C-sp^3$ 杂化,基本不会发生杂化原子之间结构的转变。

(2)当熔融温度高于 7000 K 时,冷却和弛豫平衡过程都会使大量的 $C-sp^3$ 杂化原子转变为 $C-sp^2$ 杂化,使体系 $C-sp^2$ 杂化含量上升,石墨化含量增加,但 $C-sp^1$ 的含量基本没有发生变化。

(3)熔融冷却过程, DLC 薄膜的结构主要由 $C-sp^3$ (金刚石相)和 $C-sp^2$ (石墨相)组成,其含量比例是影响 DLC 薄膜性能的关键。

参考文献

- [1] Rahman S, Song J G, Yeo C D. Computational study on surface energy of amorphous DLC with respect to hybridization state of carbon and potential functions[J]. Diamond & Related Materials, 2019, 95: 127-134
- [2] Sha Z D, Branicio P S, Sorkin V, et al. Effects of grain size and temperature on mechanical and failure properties of ultrananocrystalline diamond[J]. Diamond & Related Materials, 2011, 20(10): 1303-1309

- [3] Wu Shuaizheng, Zhang Shuling, Huang Tenglong, et al. Research progress of thick diamond like carbon coating[J]. Hot Working Technology, 2023, 52(10): 14–19 (武帅政, 张树玲, 黄腾龙, 等. 厚类金刚石膜研究进展 [J]. 热加工工艺, 2023, 52(10): 14–19 (in chinese))
- [4] Huang Zehuai, Xiao Jianrong. Effect of annealing on the structure and mechanical properties of hafnium-doped diamond-like carbon films[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2022, 41(6): 551–556 (黄泽怀, 肖剑荣. 退火对铪掺杂类金刚石薄膜结构和力学性能的影响 [J]. 真空科学与技术学报, 2022, 41(6): 551–556 (in chinese))
- [5] Bewilogua K, Hofmann D. History of Diamond-like carbon Films — From First Experiments to Worldwide Applications[J]. Surface and Coatings Technology, 2014, 242(4): 214–225
- [6] Shao W, Shi Z J, Rao L X, et al. Molecular dynamics simulation on deformation behavior of DLC films based on γ -Fe/CrN matrix[J]. Materials Today Communications, 2022, 25: 101460
- [7] Zeng Qunfeng, Liu Guan, Peng Runling, et al. Influence of annealing temperature on thermal stability and tribological properties of Diamond Carbon coating[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2015, 35(5): 601–607 (曾群锋, 刘官, 彭润玲, 等. 退火温度对 DLC 膜热稳定性及摩擦学性能的影响 [J]. 真空科学与技术学报, 2015, 35(5): 601–607 (in chinese))
- [8] Zhang Yujun, Dong Guangneng, Mao Junhong, et al. Molecular dynamics simulation of growth of Diamond-Like Carbon films[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2007, 27(6): 455–459 (张宇军, 董光能, 毛军红, 等. 类金刚石膜形态的分子动力学模拟研究 [J]. 真空科学与技术学报, 2007, 27(6): 455–459 (in chinese))
- [9] Zhang Yan, Xiao Wanshen. Molecular dynamic investigation microscopic wear behavior of diamond-like diamond film[J]. Journal of Material Science & Technology, 2018, 36(06): 927–931+940 (张岩, 肖万伸. 类金刚石薄膜微观磨损行为的分子动力学模拟 [J]. 材料科学与工程学报, 2018, 36(06): 927–931+940 (in chinese))
- [10] Uhlmann S, Frauenheim T, Lifshitz Y. Molecular dynamics study of the fundamental processes involved in subplantation of diamond like carbon[J]. Physical Review Letters, 1998, 81(3): 641
- [11] Wang Hequan, Zhang Xinyu. Study on damping properties of TiAl coatings based on molecular dynamics simulation[J]. Hot Working Technology, 2020, 49(8): 95–98 (王贺权, 张馨予. 基于分子动力学模拟的 TiAl 涂层的阻尼性能研究 [J]. 热加工工艺, 2020, 49(8): 95–98 (in chinese))
- [12] Brenner D W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films[J]. Physical Review B Condensed matter, 1990, 42(15): 9458–9471
- [13] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions[J]. Journal of Chemical Physics, 2000, 112(14): 6472–6486
- [14] Van D A C T, Dasgupta S, Lorant F, et al. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons[J]. Journal of Physical Chemistry A, 2001, 105(41): 9396–9409
- [15] Tersoff J. Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon[J]. Physical Review Letters, 1988, 61(25): 2879–2882
- [16] Zhu Annan Liu Yaguang, Yu Peng. The study on thermal conductivities of thin films of Diamond-Like Carbon by molecular dynamics simulation[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2022, 43(05): 1385–1392 (朱桢楠, 刘亚光, 余鹏. 类金刚石薄膜导热系数的分子动力学模拟研究 [J]. 工程热物理学报, 2022, 43(05): 1385–1392 (in chinese))
- [17] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito-the open visualization tool[J]. Modeling and Simulation in Material Science and technology, 2010, 18(1): 015012
- [18] Zhang Ergeng, Niu Shuai, Chen Qiang, et al. First-principles on stress reduction mechanism of copper doped diamond-like carbon films[J]. Surface Technology, 2020, 49(02): 295–300 (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(02): 295–300(in chinese))
- [19] Liu J, Muñios H V, Nordlund K, et al. Molecular dynamics simulation of the effects of swift heavy ion irradiation on multilayer graphene and diamond-like carbon[J]. Applied Surface Science, 2020, 527: 146495