

# 载能氢同位素原子与石墨 (001) 面碰撞的分子动力学研究\*

孙继忠<sup>†</sup> 张治海 刘升光 王德真

(大连理工大学物理与光电工程学院, 大连 116024)

(2011年5月26日收到; 2011年7月11日收到修改稿)

采用分子动力学方法研究了载能 H 同位素原子与石墨晶体碰撞的同位素效应. 碳氢系统的强共价键作用和石墨层间的弱 van der Waals 力分别用 REBO 和 Ito 半经验势函数来描述. 研究发现: 随着入射原子质量的增加, 上表面吸附几率和反射几率的峰值都会向高能区移动; 相比于 H,  $^2\text{H}$  入射原子,  $^3\text{H}$  入射原子具有较高的吸附几率——包括上表面吸附和内部吸附; 穿透石墨晶体,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子所需的能量较高; 原子质量和原子入射能量都会影响入射粒子与不同石墨层之间的能量传递过程. 这些结果对理解碳基材料的  $^3\text{H}$  滞留机制有重要意义.

**关键词:** 分子动力学方法, H 同位素, 石墨

**PACS:** 52.65.Yy, 67.63.-r, 81.05.uf

## 1 引言

碳基材料具有良好的热传导性、较低的韧致辐射和复合辐射, 被广泛用作聚变装置的面向等离子体壁材料, 也将继续用作国际热核聚变实验堆 (ITER) 的偏滤器靶面. 然而碳基材料具有较高的化学腐蚀率<sup>[1]</sup>和很强的  $^3\text{H}$  滞留能力<sup>[2]</sup>, 这严重影响了碳基材料进一步的应用<sup>[3,4]</sup>. 最近 JT-60U 上的结果<sup>[5]</sup>显示碳基材料的  $^2\text{H}$  滞留量在一定的条件下可以降低到很低. 这一正面的结果又点燃了人们对碳基材料的预期, 为此日本和欧洲共同体正在建设 ITER 的卫星装置——全碳壁的 JT-60SA. H 及其同位素原子—— $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  与石墨相互作用的机理<sup>[6]</sup>需要进一步被理解. 传统的基于两体碰撞近似的物理溅射理论无法很好地定量描述低能碰撞问题<sup>[7,8]</sup>, 特别在聚变装置的偏滤器装置附近<sup>[9]</sup>.

分子动力学方法可以很好地模拟低能粒子相互碰撞过程<sup>[10-12]</sup>. Ito 等人采用修改后的 REBO 势<sup>[13]</sup>分别研究了单一低能 H 原子轰击单层石墨<sup>[14,15]</sup>及低能 H 原子连续轰击多层石墨<sup>[16]</sup>. 模

拟结果表明: 当 H 原子以不同能量入射时, 碳氢粒子间的碰撞过程可分为吸附、反射和穿透; H 原子与多层石墨碰撞, 出现层层剥落现象, 产物多为链状结构, 只有少量 H 原子吸附在产物中. 但是, 在对应的聚变装置中实验检测到的反应产物多为  $\text{CH}_x$  自由基, 与模拟结果不符. Salonen 等<sup>[7,17]</sup>采用分子动力学方法研究了 H 原子与氢化的非晶石墨的相互作用, 提出了一种新的溅射机制——快速化学溅射, 并且成功地解释了碳氢化合物随 H 原子的通量增加而减小的现象. 但是由于制备氢化的非晶石墨靶的方法的原因, 石墨靶材料溅射出的物种多为 C 原子和二体化合物<sup>[18]</sup>. 显然, 制备符合实际装置氢化碳基靶材料的方法需要更进一步研究. 精确的微观氢碳作用信息有助于设计新的制备方法. Sun 等<sup>[8,19,20]</sup>研究了低能 H 原子与单层石墨以及多层石墨之间的碰撞, 分析了碳氢粒子碰撞过程中的能量损失和能量传递, 并且研究了石墨层之间的长程相互作用对碰撞的影响. 结果发现: 碰撞过程呈现复杂的多体效应, 两体碰撞近似理论完全失效; 当入射能量高于 20.0 eV 时, 长程相互作用显著增加

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2008CB717801, 2010CB832901) 和中央高校基本科研业务费专项资金资助 (DUT10ZD111) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: jsun@dlut.edu.cn

了 H 原子的反射几率.

在 Sun 等人工作的基础上, 我们从 H 原子扩展到  $^2\text{H}$  和  $^3\text{H}$  原子, 研究了吸附、反射、穿过程程的同位素效应以及入射  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子与不同石墨层之间的能量传递过程. 这些结果对于制备非晶石墨靶材料有着重要的意义, 而制备非晶石墨靶材料是采用分子动力学方法进一步研究非晶石墨腐蚀中最为关键的一步. 同时, 这些结果对理解碳基材料的  $^3\text{H}$  滞留机制及设计  $^3\text{H}$  清除方案有借鉴意义.

## 2 计算模型与方法

晶体石墨中 C-C 原子之间的相互作用可以按照其作用的强弱分为两类: 强共价相互作用和弱的 van der Waals 力. 这两种不同的相互作用使晶体石墨具有层状结构. 层内 C-C 原子以六方点阵形式排列, 形成  $\text{sp}^2$  键, 为强共价相互作用; C 层按 ABAB 或 ABC 结构交替排列, 层间存在弱 van der Waals 相互作用. 本文采用 REBO 势函数<sup>[21]</sup> 描述碳氢系统的强共价键作用, 采用 Ito 等提出的半经验势函数<sup>[13]</sup> 来描述石墨层间的弱 van der Waals 力.

REBO 势函数是由 Tersoff 势函数<sup>[22]</sup> 发展而来的, 可以很好地模拟共价键的各种性质, 包括键长、键角和键能等. REBO 势函数的形式如下:

$$U = \left[ \sum_{i,j>i} V^R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij}(r_{ij})V^A(r_{ij}) \right], \quad (1)$$

其中  $V^R$  和  $V^A$  分别表示对势中的排斥和吸引部分, 并且它们采用了光滑的截断函数使势函数作用范围缩小在  $2.0 \text{ \AA}$  以内.  $\bar{b}_{ij}$  为表征多体相互作用的键序函数, 其具体的数学表达式见文献 [20].

Ito 等人提出的半经验势函数<sup>[13]</sup> 采用特殊的截断函数能够自动地分辨 C 原子是否来自于同一个分子, 以达到自动决定两 C 原子之间是否有长程相互作用的目的. 因此这个势函数能够很好地表征不同石墨的堆栈结构. 其具体形式如下:

$$U_{IL} = \sum_{i,j \neq i} C_{ij} V_{IL}(r_{ij}), \quad (2)$$

其中  $V_{IL}$  是表征 C-C 原子之间相互作用的二体势函数, 它在  $3.35 \text{ \AA}$  处有一个极小值, 这对应于石墨层间的平衡距离.  $C_{ij}$  是特殊的截断函数, 表征三体相互作用.

在 Sun 等开发出的分子动力学程序<sup>[8]</sup> 的基

础上, 我们加入了 Ito 等提出的半经验势使整个程序可以更加完整地描述石墨晶体. 为了研究低能  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子与石墨层的能量传递过程, 我们采用的总模拟时间长度为  $100.0 \text{ fs}$ . 选定此时间尺度既可以减少不必要的计算量, 又可以很好地研究这一能量传递过程. 在此时间尺度下, 采用微正则系综描述碰撞过程, 即在模拟过程中模拟的总原子数、体积、总能量保持不变. 本文选择的石墨晶体由四层石墨烯构成, 包含有 640 个 C 原子. 每层石墨烯大小为  $19.68 \text{ \AA} \times 21.30 \text{ \AA}$ , 石墨烯间距离为  $3.35 \text{ \AA}$ , 按照 ABAB 结构交替排列. 图 1 给出了模拟示意图. 石墨烯平行于 X-Y 平面, 并在 X-Y 方向设置周期性边界条件, 在 Z 方向无周期性边界条件. 与  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子之间最大作用域为  $1.8 \text{ \AA}$ . 因此,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子以高于第一层石墨烯  $2.0 \text{ \AA}$  的距离向石墨晶体轰击, 这样在模拟的初始时刻入射原子不会与石墨层发生作用. 入射原子的初始 X-Y 坐标是随机选定的. 入射原子的速度为  $(0, 0, v_0)$ , 其中  $v_0 = \sqrt{2E^k/m}$ ,  $E^k$  为入射原子的初始动能,  $m$  为入射原子的质量. 入射原子的初始动能范围为  $1.0 \text{ eV} - 50.0 \text{ eV}$ . 模拟的时间步长为  $0.005 \text{ fs}$ , 石墨晶体的初始温度为  $300 \text{ K}$ , C 原子的初始速度由 Maxwell-Boltzmann 分布随机抽取. 为了得到统计的结果, 对于每一种入射原子、每一种入射动能的情况, 本工作重复模拟了 800 次. 每次入射过程都是独立的, 忽略累计效应.

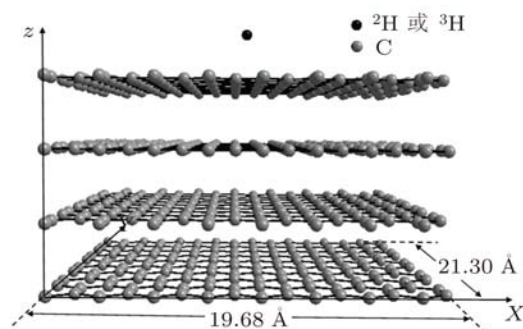


图 1 模拟示意图

## 3 模拟结果及讨论

### 3.1 不同过程发生概率的比较

当  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子以不同的能量入射石墨晶体时,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子与石墨晶体之间的碰撞可以分为上表面吸附、反射、内部吸附和穿透四个过程, 这与 H 原子和石墨晶体之间的碰撞过程是相同的. 经过统

计平均, 计算出不同过程的发生几率与入射能量之间的关系. 图 2 为不同入射原子上表面吸附率随入射能量变化的比较曲线. 可以看到: 随着入射原子的质量的增加, 入射原子有发生上表面吸附过程的几率更高, 尤其是入射能量低于 9.0 eV 时; 对于 H 入射原子明显出现的多处极小峰值的现象,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子并未出现, 这表明石墨层之间的长程相互作用对  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的上表面吸附过程的影响不显著; 对于 H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子, 上表面吸附几率的极大值位置分别为 3.0 eV, 4.0 eV, 4.0 eV, 即随着入射原子的质量增加, 上表面吸附几率的峰值向高能区移动.

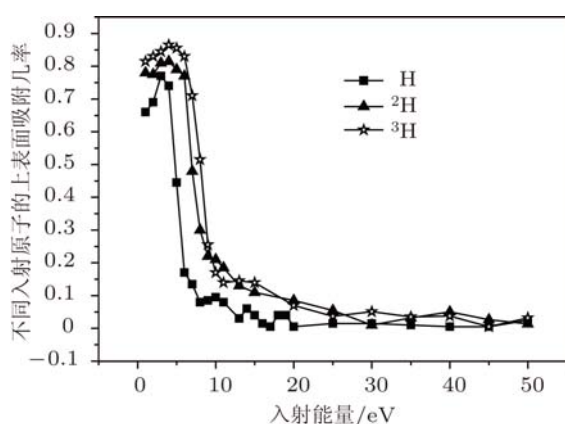


图 2 在不同入射能量下, H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的上表面吸附几率

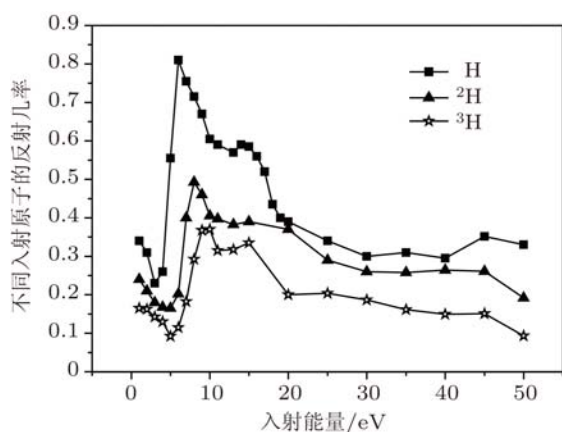


图 3 在不同入射能量下, H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的反射几率

图 3 为不同入射原子反射几率随入射能量变化的比较曲线. 从图中可以看到: 与  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子相比, H 原子被石墨晶体反射的几率更高. 例如, H 原子的反射率最高可达 81.0%,  $^3\text{H}$  原子为 43.0%,  $^2\text{H}$  原子仅为 34.0%;  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子的反射几率均未出现第二极大峰值现象. 这说明, 与 H 原子相比, 石墨层之间的长程相互作用对  $^2\text{H}$  和  $^3\text{H}$  原子的反射

过程影响比较小, 对于 H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子, 反射几率的峰值位置分别位于 6.0 eV, 8.0 eV, 9.0 eV, 即随着入射原子的质量的增加, 入射原子的反射几率的峰值位置向高能区移动, 这与上表面吸附几率相类似. 反射几率的极小值位置对应于上表面吸附几率的峰值位置, 可参见图 2. 当入射原子的能量高于 25.0 eV 时, H 原子的反射几率趋于平缓, 但是对于  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子, 反射几率却近似线性地下降, 其中当入射能量为 50 eV 时,  $^3\text{H}$  原子的反射几率可降低至 6.4%.

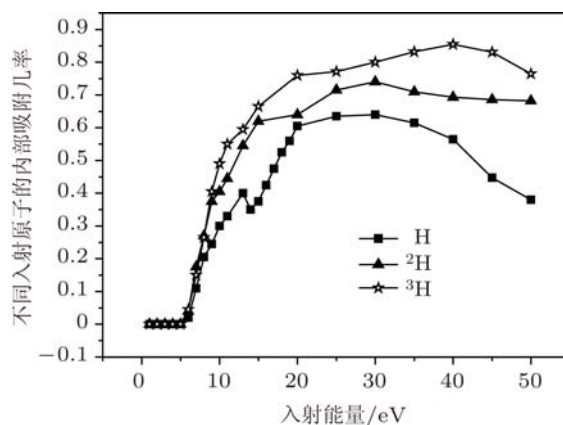


图 4 在不同入射能量下, H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的内部吸附几率

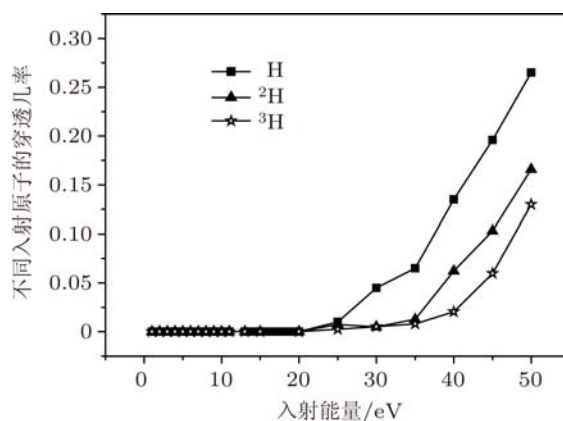


图 5 在不同入射能量下, H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的穿透几率 (对每一能量值, 对每种入射粒子模拟 800 次随机入射后的统计平均结果)

图 4 为不同入射原子内部吸附几率随入射能量变化的比较曲线. 可以看到: 当能量小于 5.0 eV 时, H,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子都不会吸附于石墨的内部, 它们或者被石墨晶体反射, 或者吸附于石墨晶体的上表面; 当能量在 5.0 eV—20.0 eV 范围时, 入射原子的内部吸附几率迅速增加, 当入射能量在 20.0 eV—35.0 eV 范围时, 内部吸附几率变化趋于平稳; 当

入射能量高于 35.0 eV 时, H 原子的内部吸附几率开始下降, 这是由于 H 原子的反射几率趋于平缓而穿透几率增加, 可参见图 3 和图 5; 当入射能量在 20.0 eV—35.0 eV 范围时, 对于  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子, 内部吸附几率变化不显著; 在整个能量变化范围内, 与 H,  $^2\text{H}$  原子相比,  $^3\text{H}$  原子具有更高的内部吸附几率. 图 5 为不同入射原子的穿透几率随入射能量的变化曲线. 尽管穿透过程的阈值能量与石墨晶体中

包含的石墨烯的层数有关, 但是可以看到: 对于包含有四层石墨烯的石墨晶体而言, 氢同位素原子穿透过程的阈值能量是不同的. 对于 H 原子, 穿透过程的阈值为 25.0 eV, 而对于  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子分别为 35.0 eV 和 40.0 eV. 与 H 原子相比,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子穿透石墨层的几率更低. 综合图 2—5,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子吸附于石墨的几率更高, 或者吸附于石墨的上表面, 或者吸附于石墨的内部.

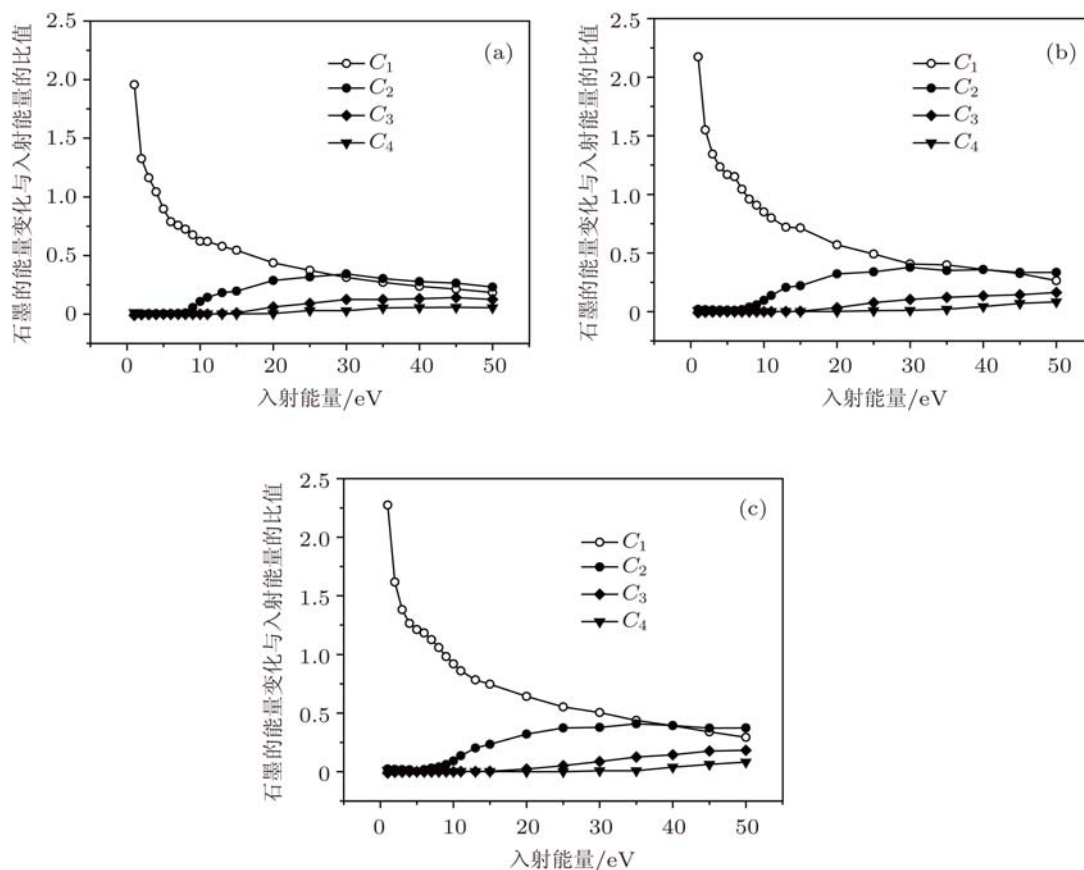


图 6 石墨烯的能量变化与入射原子的入射能量的比值随着入射能量的变化曲线 (a) 入射原子为 H; (b) 入射原子为  $^2\text{H}$ ; (c) 入射原子为  $^3\text{H}$ . 其中  $C_1, C_2, C_3, C_4$  分别表示第一、二、三、四层石墨烯的能量变化与入射原子能量的比值

### 3.2 入射原子与石墨层间的能量传递行为

为描述方便, 引入参数  $C_1, C_2, C_3, C_4$  描述入射原子的能量在不同石墨层内的传递过程. 其中  $C_1, C_2, C_3, C_4$  分别表示第一、二、三、四层石墨烯的能量变化与入射原子的初始能量的比值. 对于不同的入射原子, 图 6 给出了  $C_1, C_2, C_3, C_4$  随着入射原子初始能量的变化曲线. 对于不同的氢同位素原子,  $C_1, C_2, C_3, C_4$  的变化趋势是相同的: 当入射原子的初始能量很低时, 入射原子只与第一层石墨烯发生作用, 能量大部分传递给第一层石墨烯,

随着能量的增加, 入射原子会相继跟第二、三、四层石墨烯发生作用, 故  $C_2, C_3, C_4$  的值会相继增加. 对于  $^2\text{H}, ^3\text{H}$  入射原子,  $C_1, C_2$  的值略高于 H 入射原子, 而  $C_3, C_4$  的值会略低于 H 入射原子. 这再次<sup>[8]</sup>表明入射原子与石墨层间的能量传递过程不是简单的二体传递过程. 对于 H 入射原子, 当入射能量高于 28.0 eV 时,  $C_2$  大于  $C_1$ , 这表明 H 原子传递给第二层石墨烯的能量比传递给第一层的多, 而对于  $^2\text{H}, ^3\text{H}$  入射原子, 此能量值分别为 30.0 eV 和 35.0 eV.

图 7 给出了在不同的入射能量下不同入射原



子的深度分布图. 由于石墨烯间距离为 3.35 Å, 图中入射深度的峰值位置分别对应于各石墨层间隙的中间位置. 从图中可以看到, 在不同的入射能量下,  $^3\text{H}$  原子在第一层石墨烯与第二层石墨烯之间的滞留量都高于  $\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  原子. 随着入射原子的能量

增加,  $\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的入射深度几率分布差异变小. 考虑到 ITER 一部分等离子体以脱靶方式运行, 入射到偏滤器靶上的粒子能量在 1 eV 左右, 可推断  $^3\text{H}$  原子在石墨靶中深度分布相对  $\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  原子会更浅.

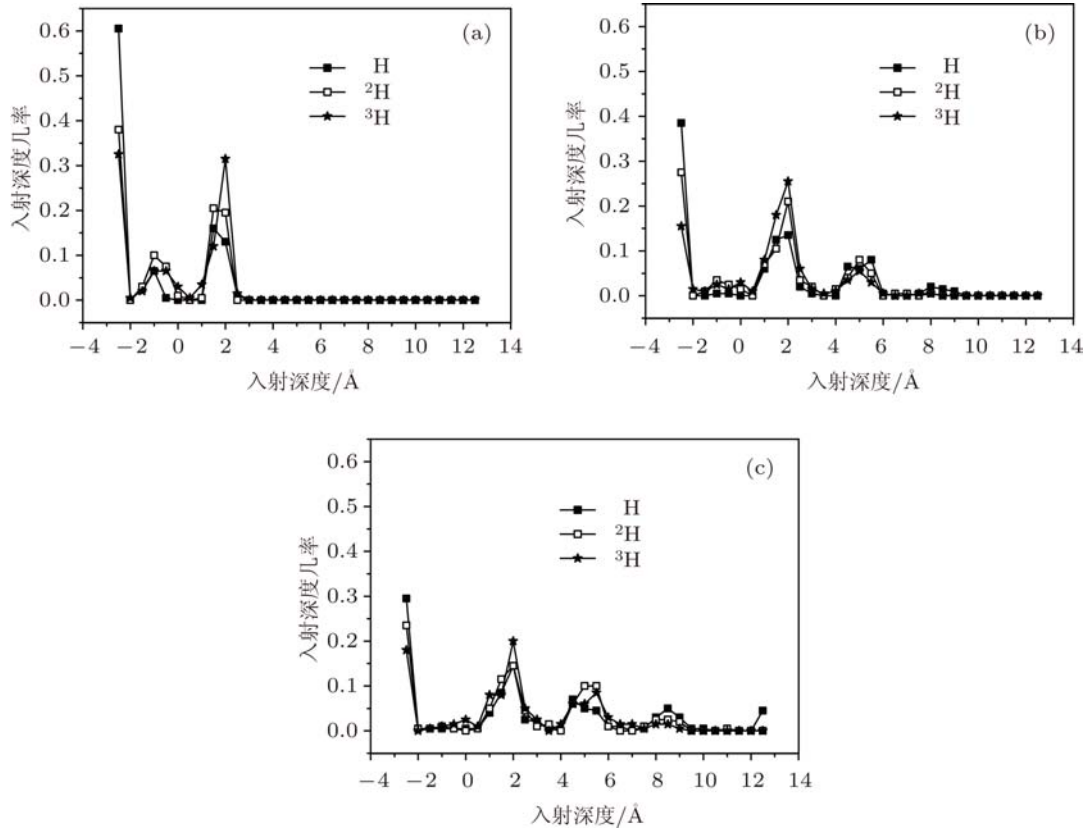


图 7 不同氢同位素原子的入射深度几率分布 (a) 入射能量为 10.0 eV; (b) 入射能量为 20.0 eV; (c) 入射能量为 30.0 eV. 入射深度为负值表示入射原子被反射或者吸附于石墨层的上表面

### 3.3 结果讨论

本文采用的计算模型只含有四层石墨烯, 故会出现穿透石墨烯现象. 在实际或实验中, 它对应于入射原子吸附于石墨的内部. 当入射原子吸附于石墨时, 被吸附的 C 原子会从  $sp^2$  态变为  $sp^3$  态, 并偏离原石墨烯平面 [8]. 而石墨烯需要一定的时间去响应这一过程. 当入射原子小于 7.0 eV 时, 在入射原子离开入射原子与靶原子作用范围之前, 第一层石墨烯有足够的时间响应形变, 最终入射原子吸附于第一层石墨烯; 当入射原子的能量足够高的时候, 第一层石墨烯无法快速响应形变, 最终入射原子会与其他层的石墨烯发生作用或者被反射. 我们假设对于  $\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子, 它们受到的来自石墨烯的平均作用力  $\bar{F}$  是相同的. 这个假设暗含: 当不同

质量的入射原子以相同的能量、相同的入射点轰击石墨烯的时候, 它们的部分轨迹是相同的. 当不同质量的入射原子损失的动能很小而且相同时,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子的动量变化量也就会大一些. 则根据动量定理公式

$$\Delta P = \bar{F} \cdot \Delta t, \quad (3)$$

石墨烯与  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子的作用时间也就相应的长一些, 石墨烯则会有更长的时间响应形变.  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子则被石墨烯吸附的几率更高. 这可以定性地解释图 2.

在入射原子轰击石墨烯的第一次相对运动中, 入射原子的动能或者会出现零值或者不会出现零值. 若未出现, 则入射原子会打破这层石墨烯的束缚而穿过这层石墨烯, 这一现象对应于本模拟的内

部吸附过程和穿透过程. 若出现零值, 入射原子就会有被石墨烯反射的几率. 此时入射原子就会被反向加速. 根据 (3) 式, 在相同的石墨烯响应形变时间内,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子获得的动能值会较  $\text{H}$  入射原子的小一些, 被束缚的几率也就大一些, 即  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子的反射几率会比  $\text{H}$  入射原子的小, 正如图 3 所示.

当入射原子脱离了一层石墨烯的束缚时, 入射原子的能量会损失. 在两体碰撞近似中, 入射粒子的能量损失分成两部分, 一部分为弹性碰撞能量损失, 另一部分为非弹性碰撞能量损失. 在弹性碰撞中, 靶原子吸收的能量可以由下式得出:

$$T = \frac{4mm_c}{(m+m_c)^2} E \sin^2(\theta/2). \quad (4)$$

其中  $m$  为入射原子的质量,  $m_c$  为靶原子的质量,  $E$  为入射原子的能量,  $\theta$  为散射角. 非弹性碰撞部分通常根据 Lindhard 理论<sup>[23]</sup> 计算. 由于其值很小, 此处忽略. 假设不同质量的入射原子的散射角相同, 则  $\text{H}$  原子的能量损失比  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  的能量损失小.  $\text{H}$  原子则有更多的能量与其他层的石墨烯发生作用, 即  $\text{H}$  原子的入射深度会更大. 在有限层的石墨烯模型中,  $\text{H}$  原子穿透石墨的几率更高, 对应于图 5.

由于石墨烯响应形变的时间不仅与入射原子

的轰击点位相关, 还与入射原子的入射动能有关, 因此很难从模拟结果中给出定量的讨论. 由于入射原子与石墨烯的相互作用表现为多体相互作用, 上面分析大量地进行了二体相互作用假设, 所以上面分析只能是定性的.

## 4 结论

本文采用分子动力学方法, 研究了低能  $\text{H}$  原子及其同位素与四层无缺陷石墨烯的碰撞过程. 研究得到了不同入射原子的四种不同过程的发生几率以及能量在入射原子与不同石墨层之间的传递行为. 研究表明: 与  $\text{H}$  原子相比, 石墨层之间的长程相互作用对  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  原子的上表面吸附过程和反射过程影响很小; 随着入射原子质量的增加, 入射原子的上表面吸附几率和反射几率的峰值都会向高能区移动, 但前者峰值变大, 后者峰值变小; 原子质量和原子入射能量都会影响入射粒子与不同石墨层之间的能量传递过程; 与  $\text{H}$  入射原子相比,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$  入射原子需要更高的能量才可以穿透石墨晶体; 对于不同的入射能量,  $^3\text{H}$  原子在第一层石墨烯与第二层石墨烯之间的滞留量都高于  $\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  原子.

- [1] Roth J, Garcia-Rosales C 1996 *Nucl. Fusion* **36** 1647
- [2] Liu S G, Sun J Z, Dai S Y, Stirner T, Wang D Z 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 073302
- [3] Janeschitz G, Borrass K, Federici G, Igitkhanov Y, Kukushkin M, Pacher H D, Pacher G W, Sugihara M 1995 *J. Nucl. Mater.* **220** 73
- [4] Li Q C, Zheng Y Z, Cheng F Y, Deng X B, Deng D S, You P L, Liu G A, Chen X D 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 507 (in Chinese) [李齐良, 郑永真, 程发银, 邓小波, 邓冬生, 游佩林, 刘贵昂, 陈向东 2001 物理学报 **50** 507]
- [5] Tanabe T, Masaki K, Sugiyama K, Yoshida M 2009 *Phys. Scr.* **T138** 014006
- [6] Alimov V Kh, Roth J 2007 *Phys. Scr.* **T128** 6
- [7] Salonen S, Nordlund K, Keinonen J, Wu C H 2001 *Phys. Rev. B* **63** 195415
- [8] Sun J Z, Li S Y, Stirner T, Chen J L, Wang D Z 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 113533
- [9] Mech B V, Haasz A A, Davis J W 1998 *J. Nucl. Mater.* **255** 153
- [10] Wang Z X, Yu G Q, Ruan M L, Zhu F Y, Zhu D Z, Pan H C, Xu H J 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1524 (in Chinese) [王震遐, 俞国庆, 阮美龄, 朱福英, 朱德彰, 潘浩昌, 徐洪杰 2000 物理学报 **49** 1524]
- [11] Hu X J, Dai Y B, He Y X, Shen H S, Li R B 2001 *Acta Phys. Sin.* **51** 1388 (in Chinese) [胡晓君, 戴永兵, 何贤昶, 沈荷生, 李荣斌 2001 物理学报 **51** 1388]
- [12] Li R, Hu Y Z, Wang H, Zhang Y J 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5455 (in Chinese) [李瑞, 胡元中, 王慧, 张宇军 2006 物理学报 **55** 5455]
- [13] Ito A, Nakamura H 2008 *Commun. Comput. Phys.* **4** 592
- [14] Ito A, Nakamura H 2006 *J. Plasma Phys.* **72** 805
- [15] Ito A, Nakamura H, Takayama A 2007 *arXiv*: 0703377 [cond-mat]
- [16] Ito A, Wang Y, Irle S, Morokuma K, Nakamura H 2009 *J. Nucl. Mater.* **390** 183
- [17] Salonen S, Nordlund K, Keinonen J, Wu C H 2001 *J. Nucl. Mater.* **290** 144
- [18] Marian J, Zepeda-Ruiz L A, Couto N, Bringa E M, Gilmer G H, Stangeby P C, Rognlien T D 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 044506
- [19] Li S Y, Sun J Z, Zhang Z H, Liu S G, Wang D Z 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 057901 (in Chinese) [李守阳, 孙继忠, 张治海, 刘升光, 王德真 2011 物理学报 **60** 057901]
- [20] Zhang Z H, Sun J Z, Liu S G, Wang D Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047901 (in Chinese) [张治海, 孙继忠, 刘升光, 王德真 2012 物理学报 **61** 047901]
- [21] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys. Cond. Matter* **14** 783
- [22] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [23] Linhard J, Scharff M 1961 *Phys. Rev.* **124** 128

# Molecular dynamics simulation of energetic hydrogen isotopes bombarding the crystalline graphite(001)\*

Sun Ji-Zhong<sup>†</sup> Zhang Zhi-Hai Liu Sheng-Guang Wang De-Zhen

(School of Physics and Optoelectronic Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 26 May 2011; revised manuscript received 11 July 2011)

## Abstract

Molecular dynamics simulation is applied to the investigation of the isotopic effects during a hydrogen isotope atom bombarding the crystalline graphite containing four graphene sheets. Both Brenner's reactive empirical bond order potential and Ito's interlayer intermolecular potential are adopted to represent "ABAB" stacking of graphite. The simulation results reveal that the mass of the incident species has a big influence on the absorption on and the reflection from the upside graphite surface, the peaks of which shift toward higher end side of incident energy as the mass increases. The absorption coefficient of the incident tritium is large, compared with that of the incident either hydrogen or deuterium. To penetrate the four-sheet graphite at some striking locations, deuterium and tritium need more kinetic energy. It is found that both the mass and the incident energy of the incident species affect the energy transfer to background substrate. These results would be important for understanding the tritium retention occurring in fusion devices.

**Keywords:** molecular dynamics simulation method, hydrogen isotope effect, graphite

**PACS:** 52.65.Yy, 67.63.-r, 81.05.uf

---

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2008CB717801 and 2010CB832901) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. DUT10ZD111).

<sup>†</sup> E-mail: jsun@dlut.edu.cn