

Si – Ga 共掺杂金刚石铜复合材料 界面性能的第一性原理研究

曾勇谋¹, 刘莹^{1,2}, 胡梦晗¹, 王铁彬¹, 于捷¹, 曹宇^{1,3}, 周晓龙²

(1. 梧州学院 机械与资源工程学院, 梧州 543002; 2. 昆明理工大学 材料科学与工程学院, 昆明 650093;
3. 梧州学院 梧州风光能源装备工程技术研究中心, 梧州 543002)

摘要: 为了研究金刚石/铜复合材料界面性能, 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法计算了 Si 和 Ga 原子掺杂金刚石/铜界面结构形成能、态密度、电荷密度. 结果表明: 形成能越低掺杂的界面结构越稳定, 所以 Si 原子掺杂间隙 2 位置的金刚石(100)/铜(111)界面模型最稳定(-7.339 eV), Si 原子掺杂第一层 Cu 原子位置金刚石(111)/铜(111)界面最稳定(-2.846 eV), Ga 原子掺杂间隙 1 位置的金刚石(100)/铜(111)界面模型最稳定(-5.791 eV), Ga 原子掺杂第一层 Cu 原子位置金刚石(111)/铜(111)界面最稳定(-0.895 eV). 由于 Si – Ga 原子共掺杂金刚石(100)和铜(111)界面形成能降低($E_f = -13.259$ eV), 费米能级态密度有所增加(7.578 electrons/eV), 电子转移形成键合, Si – Ga 原子共掺杂金刚石(100)/铜(111)间隙位置的界面最稳定. 因此 Si – Ga 原子共掺杂是提高金刚石/铜界面界面性能的有效手段.

关键词: 掺杂; 界面性能; 复合材料; 第一性原理

中图分类号: TB333 文献标志码: A DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.036005

First-principles study of interface properties of Si and Ga doped diamond/copper composites

ZENG Yong-Mou¹, LIU Ying^{1,2}, HU Meng-Han¹, WANG Tie-Bin¹, YU Jie¹, CAO Yu^{1,3}, ZHOU Xiao-Long²

(1. School of Mechanical and Resource Engineering, Wuzhou University, Wuzhou 543002, China;
2. Faculty of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China;
3. The Wind and Solar Energy Equipments Engineering Research Center in Wuzhou, Wuzhou University, Wuzhou 543002, China)

Abstract: A first – principles method based on the density functional theory is used to calculate the formation energies, densities of states, and charge densities of Si and Ga doped diamond/copper composite interface structures in order to study the interface property of diamond/copper composite. The results show that because the lower the formation energy, the more stable the interface structure, the interface models with stable structures are Si doped diamond(100)/copper(111) into interval II, Si doped diamond(111)/copper(111) into the first layer of copper atom, Ga doped diamond(100)/copper(111) into interval I and Ga doped diamond(111)/copper(111) into the first layer of copper atom. Because of the decrease of formation energy in Si and Ga doped diamond/copper composites interfaces, the density of state in Fermi level increases and the chemical bond is formed, the interface models of Si and Ga doped diamond/copper composites are the stable structure. Therefore, the Si and Ga doped is an effective means to improve the interface property of diamond/copper composite.

Key words: Doping; Interfacial property; Composite material; First-principles

收稿日期: 2023-08-18

基金项目: 梧州高新区梧州学院产学研项目(2020G11)

作者简介: 曾勇谋(1982—), 男, 广西贵港人, 学士, 主要从事材料加工. E-mail: zengym003@163.com

通信作者: 曹宇. E-mail: caoyu_th@foxmail.com

1 引言

随着先进制造业的飞速发展，在现代切削加工过程中，对切削刀具的性能提出了更高的要求（高精度、高效率、高稳定性等）。金刚石因其有极高硬度、高导热性、低摩擦系数和低热膨胀系数等优点，被广泛应用于航空航天、电工电子、特种陶瓷等领域的切削加工^[1-3]。但是金刚石具有极强的化学惰性，与金属材料润湿性差，刀具中的金刚石仅以机械力与基体材料相连接^[4]。而金刚石/金属复合材料做为新一代电子封装材料也存在界面力学性能差的问题。所以改善金刚石与金属材料界面性能已经成为近年来研究的热点问题^[5-7]。

金刚石表面金属化和金属材料合金化是调控金刚石/金属复合材料的界面性能的主要手段^[8-16]：金刚石表面掺杂某些金属元素（Ti、V、Zr、Mo 等），形成稳定的碳化物，这些碳化物与金属材料具有良好的浸润性，因此可以提高界面性能。金属材料掺杂活性元素（B、N、Ti、Si、S 等），可以有效改善金刚石/金属复合材料界面浸润性和界面结构，从而提高界面性能。本文想同时应用以上两种手段，通过 2 种不同元素共同掺杂方式改善金刚石/金属复合材料界面性能。为了降低掺杂而产生的晶格畸变缺陷，优先选取同族（或同周期）原子半径相近的两种元素。因此本文以金刚石/铜复合材料界面为研究对象，采用基于第一性原理的密度泛函理论方法，运用 Dmol3 软件包，模拟计算 Si（碳元素的相邻同族元素）和 Ga（铜元素的同周期相近元素）进行共掺杂金刚石/铜复合材料模型，并对几何结构、形成能、态密度、电荷密度等进行分析，为高强度金刚石/金属复合材料研发提供理论支撑。

2 计算方法与建模

2.1 计算方法

基于密度泛函理论的第一性原理方法，使用 Materials Studio 中的 Dmol3 模块对模型进行结构优化，并计算了结合能、电子结构和态密度。在计算中，交换关联能采用广义梯度近似（Generalized gradient approximation, GGA）中的 PBE（Perdew - Becke - Ernnerhof）泛函进行处理^[17-19]。经过计算测试，最终布里渊区中 k 点的选取方法为 Monkhorst - Pack 网络的 k 点网络为 3 × 3 × 1，能

量计算收敛判据为原子能量最大改变量 1×10^{-5} Ha，原子最大应力 0.02 Ha/Å，最大截断能为 500 eV，电子自洽迭代收敛标准为 1×10^{-5} eV/atom。

形成能是衡量掺杂稳定性的最重要物理量之一，掺杂后形成能越低，说明掺杂结构越稳定^[20]。具体公式如式(1)所示，其中 E_f 表示形成能， E_{doped} 表示掺杂后体系能量， E_{pure} 表示掺杂前体系能量， mE_C 表示掺杂了 m 个 C 原子能量， nE_D 表示替代了 n 个 D 原子能量。

$$E_f = E_{\text{doped}} - E_{\text{pure}} - mE_C + nE_D \tag{1}$$

2.2 模型建立

在晶体学中，金刚石和铜的布拉维点阵均为面心立方。金刚石的(100)和(111)晶面最稳定，铜的(111)晶面最稳定，且容易裸露在实际材料表面。因此建立金刚石(100)/铜(111)和金刚石(111)/铜(111)界面结构模型如图 1 所示。

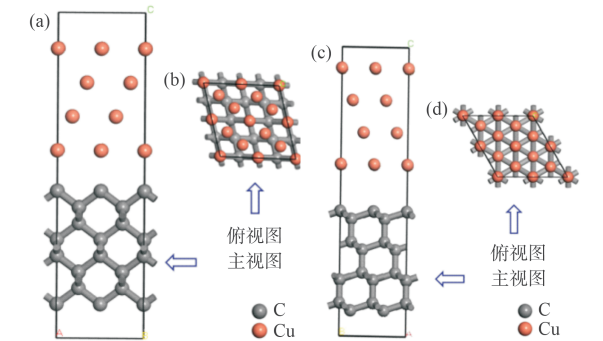


图 1 界面结构模型：(a) 金刚石(100)/铜(111)界面主视图；(b) 金刚石(100)/铜(111)界面俯视图；(c) 金刚石(111)/铜(111)界面主视图；(d) 金刚石(111)/铜(111)界面俯视图；

Fig. 1 Interface structure model: (a) vertical view of diamond(100)/Cu(111); (b) front view of diamond(100)/Cu(111); (c) vertical view of diamond(111)/Cu(111); (d) front view of diamond(111)/Cu(111).

首先优化和计算了金刚石、铜的晶格常数和表面能。金刚石优化后的晶格常数为 3.556 Å，与文献的数据 3.560 Å 相近^[21]。铜优化后的晶格常数为 3.613 Å，与文献的数据 3.616 Å 相近^[22]。即说明本文采用的计算方法对该体系是适用的，且计算模型和参数选取满足精度要求。

3 结果与讨论

3.1 形成能

金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面分别掺杂 Si 和 Ga 原子，掺杂位置

为: Cu 原子(第一层和第二层)位置、C 原子位置(第一层和第二层)和间隙位置(1 和 2 位置), 共 24 个掺杂位置, 具体如图 2 所示. 根据形成能的计算公式(如公式(1))计算形成能结果见表 1 所示. 形成能为负值说明这些界面结构在热力学上可以在一定条件下自发形成. Si-金刚石(100)/铜(111)界面最低形成能(−7.339 eV)小于 Ga-金刚石(100)/铜(111)界面的最低形成能(−5.791 eV), 说明 Si-金刚石(100)/铜(111)界面结构最稳定, 即 Si 原子掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙 2 位置. Si-金刚石(111)/铜(111)界面最低形成能(−2.846 eV)小于 Ga-金刚石(111)/铜(111)界面的最低形成能(−0.895 eV), 说明 Si-金刚石(111)/铜(111)界面结构最稳定, 即 Si 原子掺杂在金刚石(111)/铜(111)界面第一层 Cu 原子位置. Si-金刚石(100)/铜(111)界面最低形成能(−7.339 eV)小于 Si-金刚石(111)/铜(111)界面最低形成能(−2.846 eV), 说明 Si-金刚石(100)/铜(111)界面结构最稳定, 即 Si 原子掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙 2 位置.

金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/

铜(111)界面分别选取 2 个形成能最低位置, 按照正交试验方法, 建立 8 种 Si-Ga 原子共掺杂模型(掺杂位置如图 2 所示). 根据形成能的计算公式(如公式(1))计算形成能结果见表 2 所示. 双原子掺杂界面模型的形成能均为负值说明这些界面结构在热力学上均可以在一定条件下自发形成. Si-Ga 原子共掺杂金刚石(100)/铜(111)界面形成能均小于 Si-金刚石(100)/铜(111)界面形成能和 Ga-金刚石(100)/铜(111)界面形成能, 这说明 Si-Ga 原子共掺杂金刚石(100)/铜(111)界面结构最稳定. Si-Ga 原子共掺杂金刚石(111)/铜(111)界面最低形成能(−2.848 eV)略微小于 Si-金刚石(111)/铜(111)界面最低形成能(−2.846 eV), 其它 3 种 Si-Ga 原子共掺杂大于 Si-金刚石(111)/铜(111)界面最低形成能, 这说明 Si-Ga 原子共掺杂未能有效改善金刚石(111)/铜(111)界面结构稳定性. 综上所述 Si-Ga 原子共掺杂可以有效提高金刚石(100)/铜(111)界面结构稳定性, 即 Si 和 Ga 原子分别掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙 1 和 2 位置, 具体模型如图 3 所示.

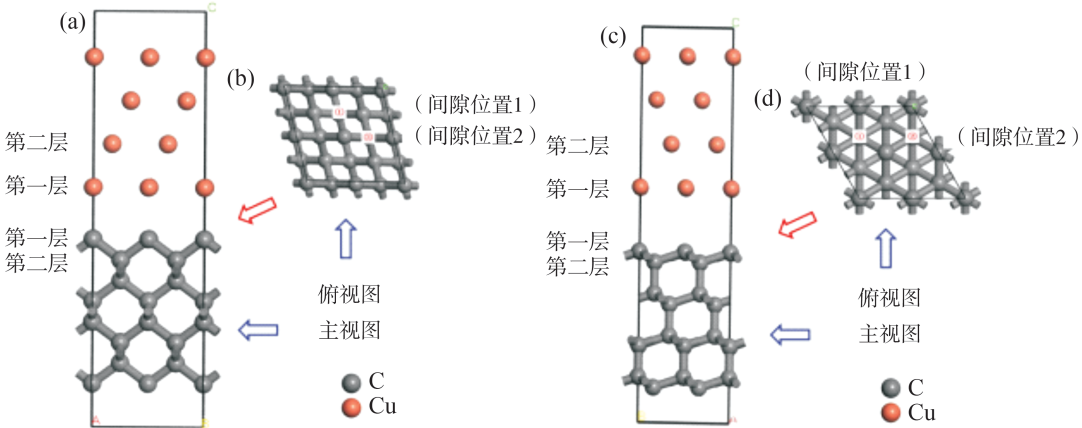


图2 掺杂位置: (a)金刚石(100)/铜(111)界面主视图; (b)金刚石(100)/铜(111)界面俯视图; (c)金刚石(111)/铜(111)界面主视图; (d)金刚石(111)/铜(111)界面俯视图;

Fig. 2 Doping positions: (a) vertical view of diamond (100)/Cu (111); (b) front view of diamond (100)/Cu (111); (c) vertical view of diamond (111)/Cu (111); (d) front view of diamond (100)/Cu (111).

3.2 态密度

掺杂 Si、Ga 和 Si-Ga 原子前后的金刚石(100)/铜(111)界面结构最稳定模型的态密度如图 4 所示. 根据电子态密度计算结果, 4 种界面模型的费米能级处态密度均不为 0, 即 4 种界面结构均具有金属属性. 在费米能级处, Si-金

石(100)/铜(111)界面的态密度(8.563 electrons/eV) > Ga-金刚石(100)/铜(111)界面的态密度(7.705 electrons/eV) > Si-Ga-金刚石(100)/铜(111)界面的态密度(7.578 electrons/eV) > 金刚石(100)/铜(111)界面的态密度(6.603 electrons/eV), 这说明 Si、Ga、Si-Ga 原子掺杂提高了金

表 1 形成能
Table 1 Formationenergies

| 界面 | 掺杂原子 | 掺杂位置 | 形成能 E_f/eV |
|---------------------|------|--------|---------------------|
| 金刚石(100)/ 铜(111) | Si | 第一层 C | 3.502 |
| | Si | 第二层 C | 3.882 |
| | Si | 第一层 Cu | -2.464 |
| | Si | 第二层 Cu | -1.958 |
| | Si | 间隙 1 | -7.198 |
| | Si | 间隙 2 | -7.339 |
| | Ga | 第一层 C | 5.582 |
| | Ga | 第二层 C | 5.396 |
| | Ga | 第一层 Cu | -0.720 |
| | Ga | 第二层 Cu | -0.446 |
| | Ga | 间隙 1 | -5.791 |
| | Ga | 间隙 2 | -5.727 |
| 金刚石(111)/ 铜(111) | Si | 第一层 C | 6.108 |
| | Si | 第二层 C | 8.241 |
| | Si | 第一层 Cu | -2.846 |
| | Si | 第二层 Cu | -1.875 |
| | Si | 间隙 1 | -2.088 |
| | Si | 间隙 2 | -1.991 |
| | Ga | 第一层 C | 9.074 |
| | Ga | 第二层 C | 8.616 |
| | Ga | 第一层 Cu | -0.895 |
| | Ga | 第二层 Cu | -0.296 |
| | Ga | 间隙 1 | 0.475 |
| | Ga | 间隙 2 | 0.641 |

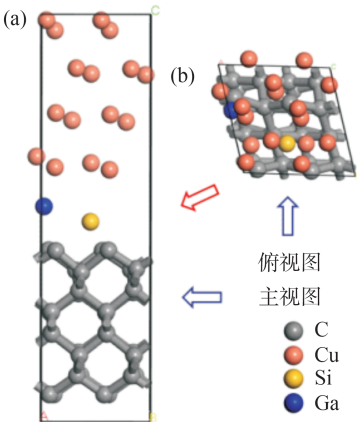


图 3 Si - Ga 原子共掺杂金刚石(100)/铜(111)界面
结构最稳定模型
Fig. 3 Stable model of Si and Ga dopeddiamond(100)/
Cu(111) composite.

表 2 形成能
Table 2 Formationenergies

| 界面 | Si 原子掺杂位置 | Ga 原子掺杂位置 | 形成能 E_f/eV |
|---------------------|-----------|-----------|---------------------|
| 金刚石(100)/ 铜(111) | 间隙 1 | 间隙 1 | -13.255 |
| | 间隙 1 | 间隙 2 | -13.259 |
| | 间隙 2 | 间隙 1 | -12.697 |
| | 间隙 2 | 间隙 2 | -12.769 |
| 金刚石(111)/ 铜(111) | 第一层 Cu | 第一层 Cu | -2.848 |
| | 第一层 Cu | 第二层 Cu | -2.794 |
| | 间隙 1 | 第一层 Cu | -1.380 |
| | 间隙 1 | 第二层 Cu | -1.974 |

刚石(100)/铜(111)界面的稳定性，这与形成能的结果一致. Ga、Si - Ga 原子掺杂金刚石(100)/铜(111)界面的态密度在出现了新峰值，这表面 Ga 原子与界面原子的轨道存在一点杂化作用.

3.3 电荷密度

为了了解掺杂 Si 和 Ga 原子与金刚石(100)/铜(111)界面原子间的相互作用，本文计算了掺杂前后的金刚石(100)/铜(111)界面结构稳定模型的电荷密度. 根据电荷密度图 5 所示，未掺杂的金刚石(100)/铜(111)界面处有极少的部分的白色区域，表示表示金刚石表面的原子仅得到极少部分的电荷，并且白色区域方向性不明显. 而分别掺杂 Si 和 Ga 原子模型的界面处，Si 和 Ga 原子周围白色区域有所增加，并且呈现了方向性，表示 Si 和 Ga 原子与金刚石(100)/铜(111)界面之间不仅存在一定量的电荷转移，并且有一定的键合作用. 在 Si - Ga 原子共掺杂的界面处，Si 和 Ga 原子周围白色区域有所增加，并且在 Si 和 Ga 原子之间存在一部分白色区域，表示 Si 和 Ga 原子共掺杂不仅与金刚石(100)/铜(111)界面之间存在一定量的电荷转移，Si 和 Ga 原子之间也存在一定的电荷转移，这表明在界面处形成了空间键合作用. 结合形成能和态密度分析，推断金刚石(100)/铜(111)界面由于 Si - Ga 原子共掺杂，形成了复杂空间结构的键合作用，所以才使得金刚石(100)/铜(111)界面结构更加稳定.

4 结 论

本文采用基于 DFT 的第一性原理方法，以金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面为研究对象，并对掺杂 Si、Ga、Si - Ga

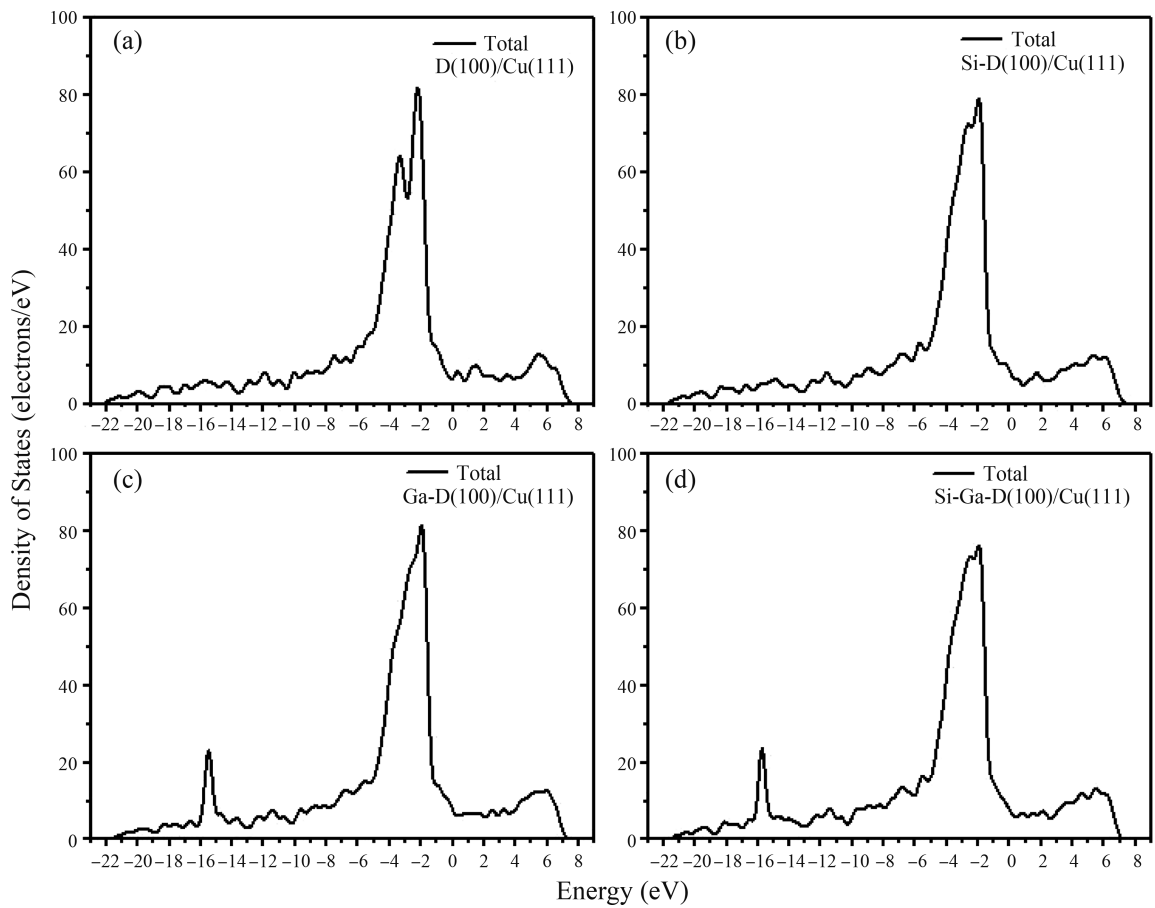


图4 态密度: (a)金刚石(100)/铜(111); (b)Si-金刚石(100)/铜(111); (c)Ga-金刚石(100)/铜(111); (d)Si-Ga-金刚石(100)/铜(111)

Fig. 4 Density of states: (a) diamond(100)/Cu(111); (b) Si-diamond(100)/Cu(111); (c) Ga-diamond(100)/Cu(111); (d) Si-Ga-diamond(100)/Cu(111).

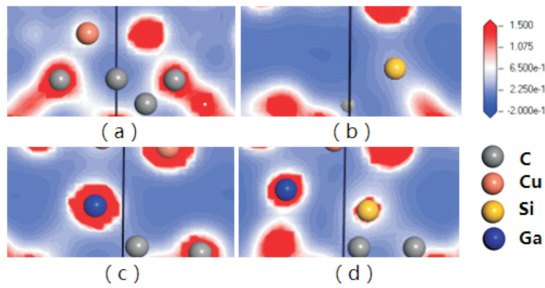


图5 电荷密度: (a)金刚石(100)/铜(111); (b)Si-金刚石(100)/铜(111); (c)Ga-金刚石(100)/铜(111); (d)Si-Ga-金刚石(100)/铜(111)

Fig. 5 Charge densities: (a) diamond(100)/Cu(111); (b) Si-diamond(100)/Cu(111); (c) Ga-diamond(100)/Cu(111); (d) Si-Ga-diamond(100)/Cu(111).

原子的金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面模型进行计算,模拟研究界面性能.结构表明:

(1)通过对掺杂Si原子的金刚石(100)/铜

(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面模型进行形成能分析,确定了稳定的Si-金刚石(100)/铜(111)界面模型和Si-金刚石(111)/铜(111)界面模型.即,Si原子容易掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙2位置,Si原子容易掺杂在金刚石(111)/铜(111)界面的第一层Cu原子位置.

(2)通过对掺杂Ga原子的金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面模型进行形成能分析,确定了稳定的Ga-金刚石(100)/铜(111)界面模型和Ga-金刚石(111)/铜(111)界面模型.即,Ga原子容易掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙1位置,Ga原子容易掺杂在金刚石(111)/铜(111)界面的第一层Cu原子位置.

(3)通过对共掺杂Si-Ga原子的金刚石(100)/铜(111)界面和金刚石(111)/铜(111)界面模型进行形成能分析,确定了稳定的Si-Ga-金刚石(100)/铜(111)界面模型.即,Si和Ga原子容易掺杂在金刚石(100)/铜(111)界面的间隙位置.

(4) 通过对共掺杂 Si - Ga 原子的金刚石(100)/铜(111)界面模型进行态密度和电荷密度分析, 由于 Si 和 Ga 原子掺杂, 提高了费米能级附近的态密度, 即提高了金刚石(100)/铜(111)界面稳定性. 由于 Si 和 Ga 原子掺杂, 使得一定量的电荷发生了转移, 在 Si 和 Ga 原子与金刚石(100)和铜(111)面之间形成了键合, 使得金刚石(100)/铜(111)界面更加稳定.

参考文献:

- [1] Zhao Y, Liu H G, Yu T B, *et al.* Fabrication of high hardness microarray diamond tools by femtosecond laser ablation[J]. *Opt. Las. Tech.*, 2021, 140: 107.
- [2] Wang H, Yang J, Sun F H. Cutting performances of MCD, SMCD, NCD and MCD/NCD coated tools in high-speed milling of hot bending graphite molds[J]. *J. Mater. Proc. Tech.*, 2020, 276: 116401.
- [3] Li G X, Rahim M Z, Pan W C, *et al.* The manufacturing and the application of polycrystalline diamond tools - a comprehensive review[J]. *J. Manuf. Proc.*, 2020, 56: 400.
- [4] Zhu P, Zhang Q, Gou H S, *et al.* First-principles calculation of diamond/Al interface properties and study of interface reaction[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2021, 70: 287 (in Chinese) [祝平, 张强, 苟华松, 等. 金刚石/铝复合材料界面性质第一性原理计算及界面反应[J]. 物理学报, 2021, 70: 287]
- [5] Dai S G, Li J W, Lu N X. Research progress of diamond/copper composites with high thermal conductivity[J]. *Diam. Rel. Mater.*, 2020, 108: 93.
- [6] Zhu P, Wang P P, Shao P Z, *et al.* Research progress in interface modification and thermal conduction behavior of diamond/metal composites[J]. *Int. J. Min., Met. Mater.*, 2022, 29: 339.
- [7] Han J J, Chen B W, Lu P X, *et al.* First-principles calculations of diamond/copper (silver, titanium carbide) interface properties[J]. *Diam. Abr. Eng.*, 2022, 42: 535 (in Chinese) [韩金江, 陈冰威, 路朋献, 等. 金刚石/铜(银, 碳化钛)界面性质的第一性原理计算[J]. 金刚石与磨料磨具工程, 2022, 42: 535]
- [8] Guo J, Meng Y Q, Sun J F, *et al.* Research progress in the preparation and interface modification of high thermal conductivity diamond/copper composites[J]. *Mater. Rep.*, 2022, 36: 104 (in Chinese) [郭靖, 孟永强, 孙金峰, 等. 高导热金刚石/铜复合材料的制备与界面调控研究进展[J]. 材料导报, 2022, 36: 104]
- [9] Chen M H, Li H Z, Wang C R, *et al.* Progress in heat conduction of diamond/Cu composites with high thermal conductivity[J]. *Rare Met. Mater. Eng.*, 2020, 49: 46 (in Chinese) [陈明和, 李宏钊, 王长瑞, 等. 高导热金刚石/铜复合材料的导热研究进展[J]. 稀有金属材料与工程, 2020, 49: 46]
- [10] Liu Y, Cui Y, Guo K J, *et al.* Research progress in high thermal conductivity diamond/aluminum composites[J]. *J. Mater. Eng.*, 2020, 48: 44 (in Chinese) [刘园, 崔岩, 郭开金, 等. 高导热金刚石/铝复合材料的研究进展[J]. 材料工程, 2020, 48: 44]
- [11] Han J J, Yang X F, Ren Y, *et al.* Effects of alloying elements on diamond/Cu interface properties based on first-principles calculations[J]. *J. Phys.*, 2023, 35: 115.
- [12] Saba F, Zhang F M, Liu S L, *et al.* Reinforcement size dependence of mechanical properties and strengthening mechanisms in diamond reinforced titanium metal matrix composites[J]. *Composites B: Eng.*, 2019, 167: 7.
- [13] Kumar D, Dwarapudi S, Sista K S, *et al.* Iron powder-based metal matrix for diamond cutting tools: a review[J]. *ISIJ Int.*, 2020, 60: 71.
- [14] Zhang H D, Zhang J J, Liu Y, *et al.* Unveiling the interfacial configuration in diamond/Cu composites by using statistical analysis of metallized diamond surface[J]. *Scr. Mater.*, 2018, 152: 84.
- [15] Xie H N. *First principles study on Mo doping effect at diamond /Al and diamond /Cu interfaces* [D]. Tianjin Univ., 2021 (in Chinese) [谢昊男. 金刚石/铝和金刚石/铜界面钼掺杂效应的第一性原理研究[D]. 天津大学, 2021]
- [16] Sun S Y, Chi Z B, Xu P P, *et al.* First-principles study of formation and performance of diamond (111)/Al interface[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2021, 70: 188101 (in Chinese) [孙士阳, 迟中波, 徐平平, 等. 金刚石(111)/Al界面形成及性能的第一性原理研究[J]. 物理学报, 2021, 70: 188101]
- [17] Xie H N, Chen Y T, Zhang T B, *et al.* Adhesion, bonding and mechanical properties of Mo doped diamond/Al (Cu) interfaces: a first principles study[J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2020, 15: 46817.
- [18] Zhang H L, Qi Y X, Li J W, *et al.* Effect of Zr content on mechanical properties of diamond/Cu - Zr composites produced by gas pressure infiltration[J]. *J. Mater. Eng. Perf.*, 2018, 27: 714.
- [19] Zeng C Z, Shen J, Zhang J B. High thermal conduc-

tivity in indium – based metal/diamond composites by good wettability of diamond with indium[J]. *Diam. Rel. Mater.*, 2021, 112: 230.

[20] Tan X, Zhang B C, Ren Y, *et al.* First – principle study of Er – doped diamond defects[J]. *J. Synt. Cryst.*, 2021, 50: 1023 (in Chinese)[谭心, 张博晨, 任元等. Er 掺杂金刚石缺陷的第一性原理研究[J]. 人工晶体学报, 2021, 50: 1023]

[21] Wu K P, Zhang L, Wang D B, *et al.* Stable configurations of diamond (001) surface covered by Cu with various coverages and their electronic properties[J]. *J. Synt. Cryst.*, 2021, 50: 1640 (in Chinese) [吴孔平, 张冷, 王丹蓓, 等. 金刚石(001)面在 Cu 多种覆盖度下的稳定构型与电子特性[J]. 人工晶体学报, 2021, 50: 1640]

[22] Zhang R Z, Lin Z, Xu J Y, *et al.* Study on gas – solid compatibility between eco – friendly insulation medium C₅F₁₀O and Cu(110) crystal surface[J]. *High Volt. Ap.*, 2021, 3: 77 (in Chinese) [张然植, 林莘, 徐建源, 等. 环保型绝缘介质 C₅F₁₀O 与 Cu(110)晶面的气固相容性研究[J]. 高压电器, 2021, 3: 77]