

УДК 539.216:519.876.5

АНОМАЛЬНАЯ ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФФУЗИИ В ОГРАНИЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

И.Г. Марченко, И.И. Марченко*

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина

E-mail: march@kipt.kharkov.ua

*НТУ «Харьковский политехнический институт»

Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина

Поступила в редакцию 2 ноября 2010 г.

В работе исследованы особенности транспорта частиц по кристаллической поверхности под воздействием внешней силы. Показано что особенности, возникающие в дисперсии потока атомов, могут приводить к изменению параметров диффузии в системах различного размера. Рассчитаны зависимости эффективных коэффициентов диффузии от температуры. Установлено, что появление режимов гипердиффузии, приводит к аномальной температурной зависимости дисперсии потока частиц в малых системах. Диффузия может усиливаться с понижением температуры. Такое необычное поведение исчезает с ростом размером системы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: диффузия, компьютерное моделирование, поверхность, наносистемы, гипердиффузия.

ANOMALOUS TEMPERATURE DEPENDENCE OF SURFACE DIFFUSION IN RESTRICTED SYSTEMS

I.G. Marchenko, I.I. Marchenko*

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

1, Akademicheskaya St., 61108 Kharkov, Ukraine

*NTU KharkovPolitechnical Institute

21, Frunze St., 61145 Kharkov, Ukraine

The paper presents the study on the singularities of particle transport in/through the crystalline surface under the external force exposure. It has been established that singularities arising in the atomic flux dispersion can cause the diffusion parameter change in the different-size systems. The temperature dependences of effective diffusion coefficients are calculated. It is shown that the hyperdiffusion mode occurrence leads to the anomalous temperature dependence of particle flux dispersion in the small systems. The effective diffusion coefficient can be increased with temperature decreasing. Such a unusual behavior vanishes as the size of the system increases

KEY WORDS: diffusion, computer simulation, surface, nanosystems, hyperdiffusion.

АНОМАЛЬНА ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ПОВЕРХНЕВОЇ ДИФУЗІЇ В ОБМежЕНИХ СИСТЕМАХ

І.Г. Марченко, І.І. Марченко*

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

бул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна

*НТУ «Харківський політехнічний інститут

бул. Фрунзе 21, м. Харків 61145, Україна

У роботі вивчено особливості транспорту частинок по кришталевій поверхні під впливом зовнішньої сили. Показано, що особливості, виникаючі у дисперсії потоку атомів можуть призводити до параметрів дифузії у системах різного розміру. Розраховані залежності коефіцієнтів ефективної дифузії температури. Встановлено, що поява режимів гіпердифузії призводить до аномальної температурної залежності дисперсії потоку атомів у малих системах. Дифузія може посилюватися із зниженням температури. Така незвичайна поведінка зникає із збільшенням розміру системи.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: дифузія, комп'ютерне моделювання, поверхня, наносистеми, гіпердифузія.

Развитие нанофизики, интенсивные исследования в области создания микросистем с заданными свойствами вызывает усиленный интерес к исследованию направленного движения частиц по поверхности твердого тела [1,2]. Транспортировка атомов и кластеров под воздействием внешней силы, вызванной воздействием магнитных и электрических полей, лазерного облучения, внешними напряжениями и т.д. требует изучения процессов диффузии в системах с периодическим потенциалом. Поверхностная диффузия, как правило, характеризуется малыми значениями активационных барьеров и низким коэффициентом трения [3,4]. Ранее в исследованиях различных авторов было показано, что в системах, характеризующихся низким уровнем диссипации потенциальной энергии, возможно возникновение особых режимов диффузии: так называемой субдиффузии и гипердиффузии [5,6].

Обычная диффузия характеризуется линейной зависимостью среднеквадратичного отклонения от времени

$$\langle x^2 \rangle \sim t. \quad (1)$$

В случае реализации особых режимов диффузии эта зависимость изменяется:

$$\langle x^2 \rangle \sim t^n. \quad (2)$$

При $n < 1$ говорят о субдиффузии, а при $n > 2$ - о гипердиффузии. Как было показано ранее, в системах с низким трением возникающие особые режимы носят переходной во времени характер [8] и, после установления стационарного состояния, дисперсия в распределении частиц описывается стандартным выражением (1). Однако ограничение размеров системы приводит так же к ограничению процессов транспорта во времени. Это в свою очередь приводит к тому, что движение частиц происходит в условиях сильной неравновесности, характеризующейся аномальными режимами диффузии.

Целью работы было исследование методами компьютерного моделирования особенностей поверхностной диффузии в ограниченных системах при транспорте частиц под воздействием внешней силы.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Движение частицы по поверхности описывалось уравнениями Ланжевена [7]

$$\begin{cases} m \ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x} U(x, y) - \gamma x + F_x + \xi_x(t); \\ m \ddot{y} = -\frac{\partial}{\partial y} U(x, y) - \gamma y + F_y + \xi_y(t); \end{cases} \quad (3)$$

где x и y – координаты частицы на плоскости, m – ее масса, F_x и F_y – компоненты постоянной силы, действующей на частицу, $U(x, y)$ – потенциальная энергия частицы на плоскости, γ – коэффициент трения. Члены $\xi_x(t)$, $\xi_y(t)$ описывают термические флуктуации. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Предполагается, что шум является белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение

$$\langle \xi_x(t) \xi_y(t') \rangle = 2m \gamma k T \delta(t - t') \delta_{xy}, \quad (4)$$

где k – постоянная Больцмана.

Под частицей в дальнейшем будем понимать адатом или кластер, состоящий из нескольких атомов, который может двигаться в периодическом потенциале. Потенциальная энергия частицы на кристаллической поверхности определяется симметрией поверхности и ее атомным составом. В простейшем случае одноатомного материала и простой прямоугольной решетки потенциальная энергия может быть записана следующим образом [9]:

$$U = -\frac{U_0}{2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{b}y\right) \right], \quad (5)$$

где a и b – постоянные решетки вдоль осей x и y , а величина активационного барьера равна U_0 .

Как было показано ранее [10] в этом случае переменные x и y слабо связаны, а кинетика движения частиц определяется компонентой силы действующей вдоль данного направления. Соответственно для упрощения вычислений можно перейти к одномерному случаю движения частицы в периодическом поле $U(x)$:

$$\begin{aligned} m \ddot{x} &= -\frac{\partial}{\partial x} U(x) - \gamma x + F + \xi(t); \\ \langle \xi(t) \xi(t') \rangle &= 2m \gamma k T \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (6)$$

Потенциальная энергия частицы в этом случае описывается следующим выражением:

$$U = -\frac{U_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right), \quad (7)$$

где a – постоянная решетки.

Движение частиц по поверхности характеризовалось средней скоростью их движения [10,11]:

$$V_i = \frac{\partial \langle x_i \rangle}{\partial t} \quad (8)$$

и эффективным коэффициентом диффузии

$$D_{ef}(t) = \frac{\langle (x_i - \langle x_i \rangle)^2 \rangle}{2t}. \quad (9)$$

При стремлении времени к бесконечности $D_{ef}(t)$ совпадает с традиционным определяемым коэффициентом диффузии:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D_{ef}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x_i - \langle x_i \rangle)^2 \rangle}{2t}. \quad (10)$$

Однако такое определение коэффициента диффузии требует как бесконечного времени наблюдения, так и соответственно бесконечных размеров системы и поэтому применимо только для очень больших (макроскопических) систем. Вследствие этого оно непригодно для нанообъектов, поскольку ограничения по размерам вызывает так же и ограничения по времени наблюдения, и измеряемой величиной становится D_{ef} .

На частицу действует периодическая в пространстве сила со стороны кристаллической решетки

$$F_{lat} = F_{cr} \sin\left(\frac{2\pi}{a}r\right). \quad (11)$$

Величину $F_{cr} = \frac{2\pi}{a}U_0$ в дальнейшем будем называть критической силой. Помимо F_{lat} , на частицу так же существует постоянная во времени сила F . В зависимости от ее величины реализуются различные режимы движения, которые представлены на рис.1.

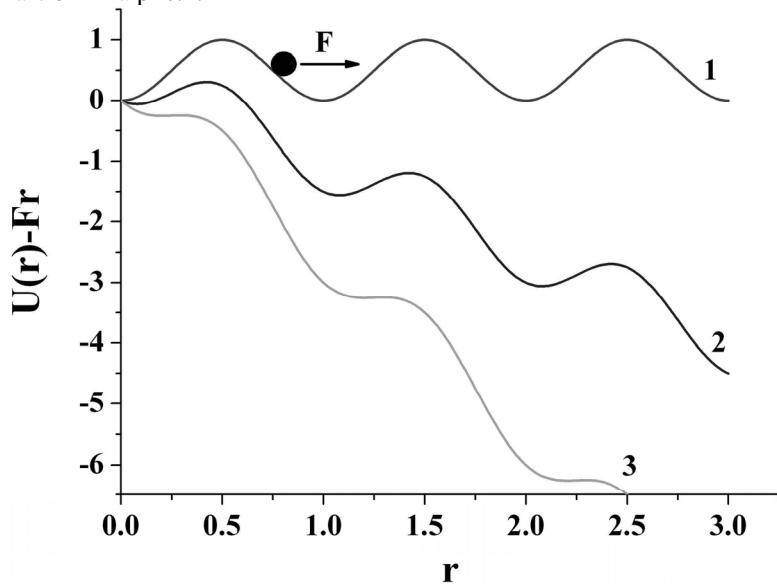


Рис. 1. Потенциальная энергия частицы в периодическом потенциала подложки, на которую действует постоянная сила F . 1 - $F = 0$, 2 - $F < F_{cr}$, 3 - $F \approx F_{cr}$.

Первый график отвечает случаю, когда внешняя сила отсутствует ($F = 0$). При этом движение частицы происходит под действием термических флуктуаций и состоит из последовательностей преодоления активационных барьеров, вероятность которых описывается правилом Крамерса [12]. В случае, если внешняя сила достаточно велика ($F > F_{cr}$), воздействием кристаллического поля можно пренебречь и реализуется случай диффузии частицы в вязкой среде. В этих рассмотренных выше случаях наблюдается классическая диффузия, характеризуемая зависимостью линейной зависимостью среднеквадратичных смещений от времени:

$$\sigma^2 = \langle (r(t) - \langle r(t) \rangle)^2 \rangle \sim t . \quad (12)$$

Как было показано ранее [7] в интервале значений $F_{cr} > F > 0$ наблюдается значительно более разнообразная картина движения частиц, которая может сопровождаться, как и баллистической диффузией, так и полным ее отсутствием.

В качестве мигрирующей частицы был выбран атом водорода. Величина активационного барьера составляла 8 мэВ – величину характерную для диффузии по плотноупакованным поверхностям металлов. Постоянная решетки a бала равна 2А. Коэффициент трения $\gamma = 0,02$ эВ/А.

Уравнения движения решались численно с шагом по времени $\Delta t \approx 1$ фмтс. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю частиц с количеством $N = 4 \cdot 10^4$. Начальные условия задавались следующим образом. Частица помещалась в начале координат с минимальной потенциальной энергией. Ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. После чего проводилась термализация системы в течение 10^4 шагов. Затем частицу с установленной на данный момент скоростью перемещали в первую элементарную ячейку одномерной решетки.

При анализе результатов моделирования удобно перейти к безразмерным величинам времени τ , расстояния x' и температуры T' :

$$\tau = t \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}; \quad x' = \frac{x}{a}; \quad T' = \frac{kT}{U_0}. \quad (13)$$

Тогда безразмерный коэффициент трения будет равен

$$\gamma' = \frac{\gamma a}{(m U_0)^{1/2}}. \quad (14)$$

На рис. 2 приведены временные зависимости коэффициентов диффузии $D_{ef}(t)$ для Pt, C, H и соответствующие безразмерные коэффициенты диффузии $D(\tau)$ для температуры $T' = 0,5$.

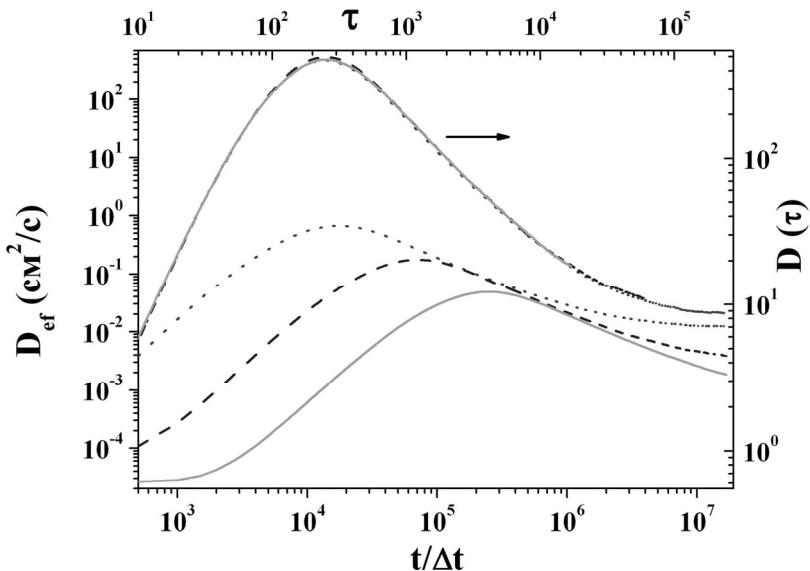


Рис. 2. Зависимость коэффициент диффузии $D_{ef}(t)$ для Pt, C, H от времени t и масштабированные зависимости $D(\tau)$ от безразмерного времени τ . H – пунктирная линия, C – штриховая линия, Pt - сплошная линия. $T' = 0,13$, $\gamma' = 0,2$, $F = 0,15F_{cr}$.

Как видно из рисунка, после соответствующих масштабных преобразований коэффициенты диффузии $D_{ef}(t)$ ложатся на одну кривую диффузии $D(\tau)$. Таким образом, для исследования процессов транспорта частиц под действием внешней силы достаточно получить решение для частицы только одного типа. Зависимости $D_{ef}(t)$ для частиц другой массы могут быть получены путем масштабных преобразований.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 приведены зависимости среднеквадратичного смещения частиц от времени для различных величин внешней силы F при температуре 120 К ($T' \approx 0,13$). Как видно из рисунка, в отсутствии внешней силы, наблюдается обычная диффузия, которая описывается выражением (1). Увеличение силы до значения $F' = 0,05$ (кривая 2) приводит к появлению короткого участка баллистической диффузии, характеризуемого зависимостью $\sigma^2 \sim t^2$. Этот переходной режим диффузии наблюдается только на малых временах ($t/\Delta t < 5 \cdot 10^3$) и в дальнейшем диффузия по-прежнему описывается выражением (1).

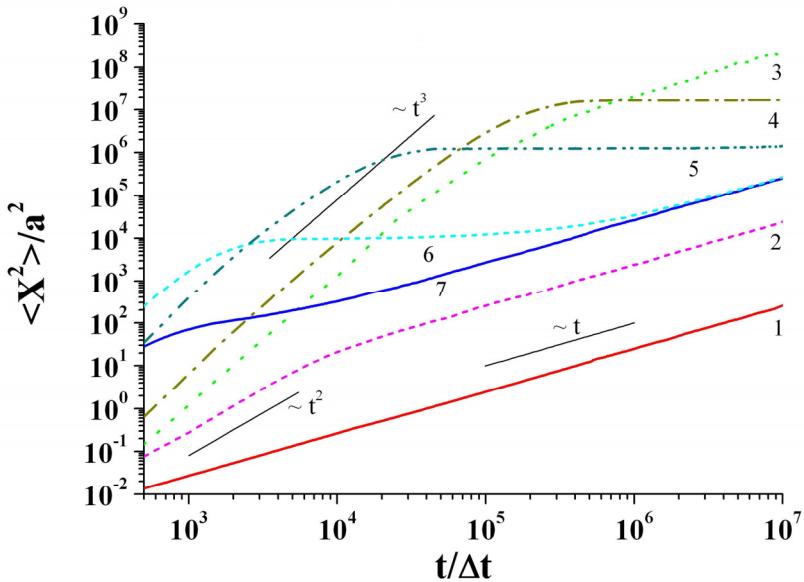


Рис. 3. Зависимость среднеквадратичного смещения частицы от времени для различных величин постоянно действующей силы F . Температура $T=120$ К ($T' \approx 0,13$). Кривая 1 - $F' = 0$, 2 - $F' = 0,05$, 3 - $F' = 0,09$, 4 - $F' = 0,15$, 5 - $F' = 0,4$, 6 - $F' = 0,8$, 7 - $F' = 1,0$. Отрезками сплошной линии нанесены зависимости $\sim t$, и $\sim t^2$, и $\sim t^3$.

При дальнейшем росте силы (кривая 3) возникает участок гипердиффузии, характеризуемый кубической зависимостью дисперсии от времени. На больших временах ($t/\Delta t > 10^6$) дисперсия зависит от времени линейно. Последующее увеличение внешней силы до значения $F' = 0,15$ приводит к появлению нового типа движения частиц, характеризующегося отсутствием зависимости σ^2 от времени. Этот режим, как видно из графика, наступает после фазы гипердиффузии. Дальнейшее возрастание F (кривая 5) расширяет область бездиффузионного транспорта. При этом фаза гипердиффузии сокращается ($t/\Delta t < 2 \cdot 10^4$). При увеличении внешней силы до значения $F = 0,8$ область гипердиффузии сокращается на порядок ($t/\Delta t < 2 \cdot 10^3$), а интервал бездиффузионного транспорта уменьшается. На больших временах ($t/\Delta t > 10^6$) на графике виден переход к режиму обычной диффузии. Когда внешняя сила достигает критического значения (кривая 7), переходные режимы диффузии практически исчезают. Как видно из графиков, кривая 7 на временах $t/\Delta t > 5 \cdot 10^3$ параллельна кривой 1, однако сдвинута относительно нее более чем на два порядка величины по оси ординат. Последующее увеличение величины F приводит к восстановлению режима обычной диффузии во всем рассматриваемом интервале времени.

Приведенные выше результаты качественно совпадают с полученными ранее в работах [5,8]. Количественные отличия определяются используемыми величинами параметра γ . Авторами этих работ установлены основные особенности переходных режимов диффузии в системах с малым тернием. В то же время существование аномальных режимов диффузии в ограниченном интервале времени может приводить к важным физическим следствиям, в частности к зависимости диффузионных свойств системы от ее размеров. Интенсивные исследования в области нанофизики показывают, что при уменьшении размеров исследуемых объектов их термодинамические, прочностные, электрические, магнитные и др. свойства начинают зависеть от линейных размеров структурных элементов системы [13-18]. Изменение функциональной зависимости σ^2 в различных интервалах времени (см. рис. 1) так же приводит и к изменению эффективного коэффициента диффузии $D_{ef}(t)$. Именно эта величина реально измеряется в экспериментах с использованием различных методик, начиная от туннельной микроскопии и заканчивая различными ядерно-физическими методиками. При экспериментальном измерении интенсивности диффузионных процессов в системах с низким значением γ' коэффициент диффузии

в неограниченных системах зависел бы от времени наблюдения. Если же исследуемый объект имеет ограниченный размер, характеризуемый величиной L (размер блока, зерна и т.д.), то время наблюдения будет ограничено. Поэтому измеряемый коэффициент диффузии в этих системах будет зависеть от их размера.

Если система ограничена, то $\langle x(t) \rangle$ не может превышать L . Это сразу же накладывает условия на характерные времена изменения диффузии и приводит к тому, что измеряемый коэффициент диффузии в этих системах будет зависеть от их размера.

На рис. 4 приведены графики зависимости коэффициента диффузии транспортируемых частиц $D_{ef}(t)$ от $\langle x(t) \rangle$. Правая ось соответствует безразмерному коэффициенту диффузии. Из рисунка видно, что при температуре $T' \approx 1,03$ кривая выходит на насыщение при размерах системы превышающем 10 нм. Для больших систем диффузия частиц описывается выражением (1) с постоянным коэффициентом диффузии. Уменьшение температуры до $T' \approx 0,52$ приводит к тому, что выход на постоянный коэффициент диффузии происходит для систем крупнее чем 1000 нм. А при температурах $T' \approx 0,26$ выход на фазу стационарного коэффициента диффузии наступает для систем с $L > 10^5$ нм. При меньших температурах этот интервал сдвигается еще дальше – за пределы исследуемого времени моделирования.

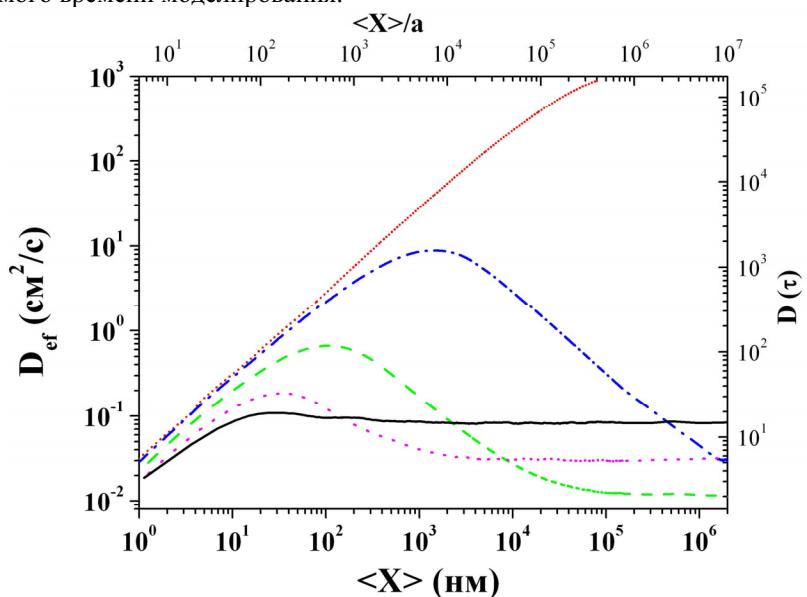


Рис.4. Зависимость измеренного коэффициента диффузии от среднего размера системы для различных температур. Постоянная сила $F' = 0,15$. Сплошная линия - $T=960$ К ($T' \approx 1,03$), пунктирная - $T=480$ К ($T' \approx 0,52$), штриховая - $T=240$ К ($T' \approx 0,26$), штрихпунктирная - $T=120$ К ($T' \approx 0,13$), мелкий пунктир - $T=65$ К ($T' \approx 0,07$).

Как следует из анализа приведенных на рис. 4 графиков, нелинейный характер их поведения приводит к тому, что измеренные коэффициенты диффузии для более низких температур будут превышать коэффициенты диффузии более высокотемпературной области в некотором интервале значений размеров системы. На рис. 5 приведены рассчитанные зависимости коэффициентов диффузии D_{ef} от обратной температуры для систем различного среднего размера. Коэффициенты диффузии представлены в логарифмическом масштабе. Заполненными маркерами представлен график коэффициента диффузии в отсутствии внешней силы. При $F' = 0$ диффузия не зависит от размеров системы. Открытыми маркерами на том же рисунке приведены температурные зависимости D_{ef} для систем различного среднего размера при воздействии на частицы постоянной силы $F' = 0,15$.

Из рисунка видно, что в отсутствии внешней силы график представляет собой прямую, убывающую с ростом обратной температуры. Наклон кривой определяет величину постоянного коэффициента диффузии. В случае если на частицы действует постоянная внешняя сила, поведение температурных зависимостей D_{ef} изменяется. Так для системы с характерным средним размером 10 нм измеренный коэффициент диффузии возрастает с уменьшением температуры. Увеличение размера системы до 100 нм приводит к еще более яркому проявлению этой тенденции. Такое поведение диффузии является крайне неожиданным.

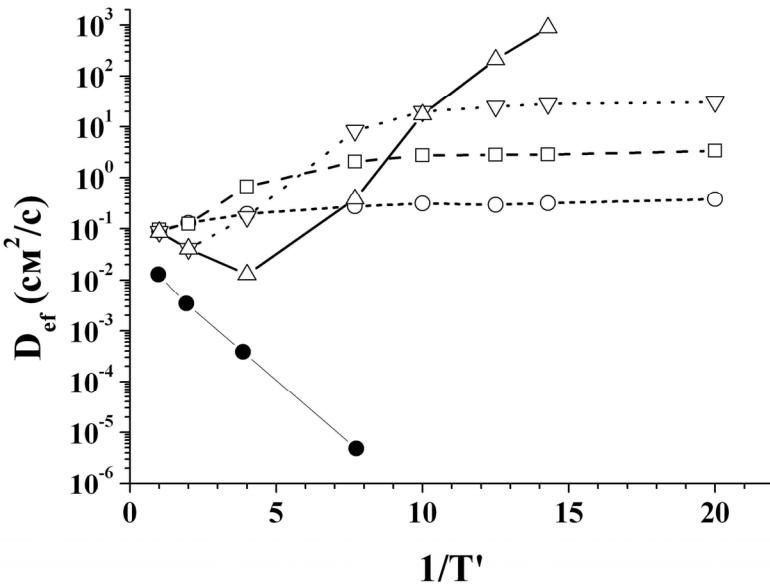


Рис.5. Зависимость измеренного коэффициента диффузии от обратной температуры для систем различного среднего размера. Постоянная сила $F' = 0,15$. Кружки - $L=10$ нм, квадраты - $L=100$ нм, перевернутые треугольники - $L=1000$ нм, треугольники - $L=10000$ нм.

Дальнейшее возрастание размеров системы ($L=1000$ нм) приводит к появлению участка соответствующего обычной термоактивированной диффузии при $1/T' < 1,95$. Последующее увеличение размеров системы расширяет эту область обычной диффузии ($1/T' < 3,8$ или $T' > 0,26$). Однако вслед за этим наступает резкий рост коэффициента диффузии с уменьшением температуры.

На графиках можно проследить тенденцию к расширению температурной зоны обычной диффузии с увеличением размеров системы. Рост размеров приводит к смещению аномальной температурной зависимости диффузии в область низких температур.

Полученные результаты могут служить отправной точкой для постановки целенаправленных экспериментов по обнаружению аномальной температурной зависимости коэффициентов диффузии в микро- и наносистемах, характеризующихся низким коэффициентом диссипации энергии. К подобного рода системам может относиться поверхностная диффузия атомов и кластеров, движение дислокаций в поле Пайерлса под воздействием внешней нагрузки, миграция междуузельных атомов в нанокристаллических материалах и др. Однако при этом необходимо учитывать, что естественным ограничением корректности вышеприведенных расчетов является понижение абсолютной температуры для рассматриваемого материала T ниже температур Эйнштейна T_E (или Дебая T_D). При понижении безразмерной температуры ниже значения $T' = kT_E/U_0$ необходимо проводить расчеты с учетом квантовой статистики.

ВЫВОДЫ

В работе рассмотрены особенности диффузионных процессов, протекающих при транспорте частиц по кристаллической поверхности под воздействием внешней постоянной силы. Показано что в этом случае появление режимов гипердиффузии, приводит к аномальной температурной зависимости диффузии для малых систем. Диффузия усиливается с понижением температуры. Такое необычное поведение исчезает с ростом размеров системы. Полученные результаты могут быть использованы для целенаправленной постановки экспериментов по обнаружению аномальной температурной зависимости диффузии в микро- и наносистемах. Для адекватного описания поведения системы при температурах ниже Эйнштейновской необходимо дальнейшие исследования с учетом квантовой статистики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Prakash S., Karacor M.B., Banerjee S. Surface modification in microsystems and nanosystems // Surf. Sci. Rep.- 2009.- Vol. 64.- P. 233-254.
- Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys.- 2009. Vol. 81.- P. 337-442.
- Bruch L.W., Diehl R.D., Venables J.A. Progress in the measurement and modeling of physisorbed layers // Rev. Mod. Phys.- 2007.- Vol. 79.- P. 1381-1454.
- Antczak G., Ehrlich G. Jump processes in surface diffusion // Surf. Sci. Rep.- 2007.- Vol. 62.- P. 39-61.
- Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A. M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // Phys. Rev. Lett.-

- 2007.- Vol. 98.- P. 020602 (4 pp.).
- 6. Sancho J.M., Lacasta A.M. The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes // Eur. Phys. J. Special Topics.- 2010.- Vol. 187.- P. 49–62.
 - 7. Lindenberg K., Lacasta A.M. , Sancho J.M., Romero A.H. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces//New Journal of Physics.- 2005.- Vol. 7.- P. 29 (19 pp.).
 - 8. Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H., Sokolov I.M., Lindenberg K. From subdiffusion to superdiffusion of particles on solid surfaces // Phys. Rev. Vol. E70.- 2004.- P. 051104 (10 pp.).
 - 9. Chen L.Y., Baldan M.R., Ying S.C. Surface diffusion in the low-friction limit: Occurrence of long jumps // Phys. Rev.- 1996.- Vol. B54.- P. 8856–8861.
 - 10. Machura L., Kostur M., Talkner P., et. al. Brownian motors: Current fluctuations and rectification efficiency // Phys. Rev.- 2004.- Vol. E70.- P. 061105 (8 pp.).
 - 11. Speer D., Eichhorn R., Reimann P. Directing Brownian Motion on a Periodic Surface // Phys. Rev. Lett.- 2009.- Vol. 102.- P. 124101 (4 pp.).
 - 12. Hänggi P., Talkner P., Borkovec M. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers // Rev. Mod. Phys.- 1990.- Vol. 62.- P. 251–341.
 - 13. Tjong S.C., Chen H. Nanocrystalline materials and coatings //Mat.s Sci. and Eng.- 2004. - Vol. P. - 1–88.
 - 14. Shen Y.F., Lu L., Lu Q.H., et.al. Tensile properties of copper with nano-scale twins // Script. Mat.- 2005 . - Vol. 52 . - P. 989–994.
 - 15. Kara A., Rahman T.S. Vibrational dynamics and thermodynamics of surfaces and nanostructures// Surf. Sci. Rep.- 2005.- Vol. 56.- P. 159–187.
 - 16. Lima A.L., Zhang X., Misra A., et. al. Length scale effects on the electronic transport properties // Thin Solid Films.- 2007.- Vol. 515.- P. 3574–3579.
 - 17. Zhang X., Misra A., Wang H., et. al. Enhanced hardening in Cu/330 stainless steel multilayers // Act. Mat.- 2004.- Vol. 52.- P. 995–1002.
 - 18. Starace A. K., Cao B., Judd O. H., et.al. Melting of size-selected aluminum nanoclusters with 84–128 atoms // J. Chem. Phys.- 2010.- Vol.132.- P. 034302 (9 pp.)