Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою http://www.icmp.lviv.ua/

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (http://www.icmp.lviv.ua/)

Національна академія наук України



Грицьків Роман Ігорович

Моделювання осциляторів на основі вуглецевих нанотрубок методом молекулярної динаміки

Роботу отримано 15 травня 2009 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України © Усі права застережені ICMP-09-05U

Р.І.Грицьків*

МОДЕЛЮВАННЯ ОСЦИЛЯТОРІВ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

^{*}Львівський національний університет ім. І.Франка, факультет електроніки, Львів, вул. Тарнавського 107

Моделювання осциляторів на основі вуглецевих нанотрубок методом молекулярної динаміки

Р.І.Грицьків

Анотація. Методом класичної молекулярної динаміки проведено вивчення осцилятора, збудованого на основі двошарової карбонової нанотрубки (9,0)@(18,0) довжиною 21Å. Отримано залежності амплітуди та частоти коливань від часу у діапазоні температур від 10К до 225К, які вказують на зв'язок тертя з порушенням геометрії системи. Досліджено внутрішню динаміку та виявлено наведення поздовжніх коливань у нанотрубках, що складають осцилятор.

Simulation of oscillators based on carbon nanotubes

R.I.Hrytskiv

Abstract. Classical molecular dynamics simulations were used in a study of an oscillator, based on a (9,0)@(18,0) double-walled carbon nanotube of 21Å length. The obtained dependencies of amplitude and frequency on time in the range from 10K to 225K point out the distortions of system geometry as the main cause of friction. Internal system dynamics was studied, and an induction of longitudinal vibrations in nanotubes constituting the system were observed.

Подається в Журнал фізичних досліджень Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2009 Institute for Condensed Matter Physics 2009

1. Вступ

Ідея нанотехнології, з'явившись у 80-х роках минулого століття, продовжує втілюватись у дійсність. Сьогодні ця галузь уже розвинулась, стала однією із провідних та впроваджує нові ідеї у науку та техніку, змінюючи картину світу. Впродовж останніх років досягнуто визначних результатів, що наближають нас до нової ери [1], невід'ємна частина якої — наномеханіка.

Існує велика кількість проектів механічних систем у наномасштабі [2], багато пристроїв вже збудовано у лабораторіях. Карбон основна складова цих систем, вуглецеві структури — їх компоненти. Тому нанотрубки, після їх відкриття у 1991 [3], стали важливою складовою спочатку у проектах, а потім — у реалізаціях наномеханіки. Причина такого широкого застосування нанотрубок — виняткові механічні [4,5] та електричні [6,7] властивості.

Наномеханіка потребує пристроїв, які виконують функцію урухомлення її компонент, служать моторами, які перетворювали б певний вид енергії у рух компонент механічної системи. Таку деталь можна збудувати скомбінувавши наноосцилятор [2, 8–12] та наноактуатор [2]. Наноосцилятор — коливальний елемент на основі багатошарової нанотрубки — вагомий не лише у якості джерела руху наномеханіки: він використовується у інших проектах наносистем та важливий для дослідження процесів тертя у наноструктурах.

Дослідження наноосциляторів проводяться лише теоретично та шляхом комп'ютерного моделювання, оскільки ці пристрої ще не створені на практиці. Симуляції таких систем вже проводились раніше [8–12], але у висновках цих досліджень існують розбіжності, а деякі аспекти динаміки ще не вивчалися. У цій роботі продовжено вивчення осциляторів на нанотрубках.

2. Нанотрубки: геометрія, властивості, застосування

2.1. Геометрія нанотрубок

З метою висвітлити питання про структуру одношарової нанотрубки (HT) розглянемо шар, утворений атомами, котрі знаходяться у вузлах гексагональної решітки. Таку структуру називають графеном, і вона присутня у природі як шар кристалу графіту, утворений атомами карбону, що зв'язані ковалентною взаємодією. Загалом такі шари можуть утворюватись різними атомами (не лише атомами вуглецю),

1



2

Рис. 1. Шар кристалу графіту (графен). $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ — одиничні вектори, \mathbf{c} – вектор трансляції, \mathbf{b} – основний вектор HT, θ – кут хіральності.

які здатні поєднуватись ковалентним зв'язком з *sp*²-гібридизацією (наприклад, Al+N). Позиція кожного атома у такому шарі може бути задана двома цілими числами *n* і *m* [2, 13, 14]:

$$\mathbf{c} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2,\tag{2.1}$$

де c — вектор розташування атома, a_1 , a_2 — одиничні вектори графену (рис.b1). НТ, що описується парою індексів хіральності m і *n*, утворюється з площини графену, якщо згорнути її в циліндр так, щоб попередньо обраний вектор с перетворився у коло, яке є поперечним перерізом новоутвореної НТ. Пара індексів хіральності пов-



Рис. 2. НТ різної хіральності: зліва -(10,0), посередині -(5,5), справа -(8,5)

ністю описує HT: з них можуть бути розраховані будь-які інші її геометричні характеристики. Радіус НТ може бути розрахований з формули

$$R = \frac{|\mathbf{c}|}{2\pi} = \frac{a_0\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{2\pi},$$
(2.2)

де a_0 — довжина одиничного вектору графену. Кут хіральності, що визначається як кут між векторами \mathbf{a}_1 та \mathbf{c} , рівен

$$\theta = \arccos \frac{2n+m}{\sqrt{n^2+nm+m^2}}.$$
(2.3)

Очевидно, що HT — одновимірний кристал. Довжина його елементарної комірки

$$b = \frac{\sqrt{3}a_0\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\text{HC}\mathcal{I}(2m + n, 2n + m)}.$$
 (2.4)

Оскільки графен володіє віссю симетрії шостого порядку, унікальні лише ті HT, для яких θ лежить у межах від 0 до $\frac{\pi}{3}$. HT з індексами хіральності виду (n, n), НТ типу "крісло" ("armchair"), та (n, 0), типу "зигзаг" ("zigzag"), нехіральні, а всі решта — хіральні.

НТ можуть мати велику кількість шарів. Особливо важливі двошарові нанотрубки (ДШНТ). Одношарові НТ (ОШНТ) є одновимірними кристалами, а ДШНТ мають таку властивість лише, коли відношення довжин елементарних комірок зовнішньої та внутрішньої нанотрубок b_{in}/b_{out} — раціональне число.

2.2. Класифікація двошарових нанотрубок зі співмірними шарами

При переході від ОШНТ до розгляду ДШНТ кількість можливих класів HT сильно зростає, що приводить до проблем при спробах пов'язати їх з результатами досліджень та при виборі трубок для подальшого вивчення. З метою розв'язати схожі проблеми створено класифікацію ДШНТ зі співмірними шарами [13, 14]. Як видно зі співвідношень (2.3) та (2.4), всі шари НТ з індексами хіральності виду (kf, kq), де k — натуральне число, володіють однаковими довжинами елементарних комірок та кутами хіральності. Таку множину шарів, для якої f та q — взаємопрості, називатимемо класом еквівалентності, пару чисел f, q — індексами хіральності класу, а k індексом діаметру шару. Класи з індексами хіральності (f, q) і (q, f)вважатимемо різними. Різниця радіусів шарів $(k_1 f, k_1 g)$ та $(k_2 f, k_2 g)$

з індексами діаметру $k_2 > k_1$, що належать до одного класу еквівалентності

$$\Delta R = \frac{a_0 \Delta k}{2\pi} \sqrt{f^2 + fg + g^2} \tag{2.5}$$

залежить лише від різниці $\Delta k = k_2 - k_1$. На основі таких тверджень можна зробити висновок про існування для кожного класу еквівалентності сімейства НТ з однаковими відстанями між шарами, що відповідає різниці індексів діаметру.

Згідно з даними про синтез НТ, різниця радіусів шарів у ДШНТ лежить у межах $3.3\text{\AA} < \Delta R < 3.7\text{\AA}$, що відповідає енергетично вигідним конфігураціям. Якщо накласти такі умови, можна скласти таблицю класів ДШНТ, які її задовольняють (табл. 1). У списку приведені усі сімейства НТ, для яких така умова виконується, їх існує лише шість, при чому усі вони характеризуються малими індексами хіральності. Всі інші НТ, що не містяться у сімействах з таблиці, не відповідають накладеній умові. При цьому слід зазначити, що НТ з індексами (f, g) і (g, f) мають однакові розміри, тому до кожного табличного класу додається ще один "дзеркальний".

Далі класифікацію попирено на співмірні ДШНТ із шарами з різних класів еквівалентності [13,14]. Відстань між шарами співмірних трубок (f_1k_1, g_1k_1) та (f_2k_2, g_2k_2) можна записати

$$\Delta R = \frac{a_0}{2\pi} \sqrt{f_2^2 + f_2 g_2 + g_2^2} \left(k_2 - k_1 \frac{p}{q}\right), \qquad (2.6)$$

де $p/q = b_1/b_2$. Аналогічно можна говорити про сім'ї ДШНТ, які визначаються парою класів хіральності та різницею радіусів, в межах яких існують НТ з індексами діаметру

$$k_1^{(i)} = k_1^{(0)} + lq, \ k_2^{(i)} = k_2^{(0)} + lp, \tag{2.7}$$

(f,g)	Δk	$\Delta R, \mathrm{\AA}$	$b, \mathrm{\AA}$	θ°	
(1, 0)	9	3.5	4.23	0.00	
(1, 1)	5	3.37	2.44	30.00	
(3, 2)	2	3.39	18.44	23.41	
(4, 1)	2	3.56	6.46	10.89	
(7,3)	1	3.45	37.60	17.00	
(8, 1)	1	3.32	36.14	5.82	

Табл. 1. Сімейства ДШНТ з міжшаровим проміжком у межах 3.3
Å $< \Delta R < 3.7 {\rm \AA}.$

де $k_1^{(0)}$, $k_2^{(0)}$ — індекси діаметру для будь-якої ДШНТ, що належить до сім'ї, а l — ціле число. Отже, сім'я ДШНТ може бути означена за допомогою шести чисел — $(f_1, g_1, k_1^{(0)}, f_2, g_2, k_2^{(0)})$.

2.3. Механічні властивості нанотрубок

Дослідження механічних властивостей НТ проводяться в основному для ОШНТ, які наближено можна описати як циліндричні оболонки [4]. Основними параметрами, що характеризують таку оболонку, є модуль Юнга E та коефіцієнт Пуасона ν , решта характеристик, таких як жорсткість до згину та інші, виражаються через них.

Найбільш вдалий розрахунок модуля Юнга для ОШНТ різної хіральності був проведений методом молекулярних орбіталей, його результати наведені у табл. 2.

Як видно з табличних даних, механічні параметри НТ слабо залежать від індексів хіральності. Значення модуля Юнга приблизно на два порядки перевищує його величину для сталі та міді, яка становить $10 - 30\Gamma\Pi a$. Це обумовлено ковалентними зв'язками у НТ та відсутністю дефектів у трубках. Експериментальні вимірювання модуля Юнга відповідають отриманим теоретично для усіх досліджуваних зразків крім НТ, вирощених методом CVD (chemical vapour deposition), які характеризуються високою концентрацією дефектів.

Досі йшлося про пружні параметри щодо поздовжніх деформацій. Експерименти та розрахунки показують, що при поперечних деформаціях НТ володіють значно меншою жорсткістю та схильні до сильної зміни форми поперечного перерізу навіть при відносно малих навантаженнях.

Важливою характеристикою НТ є міцність на розрив. Експерименти зі джгутами трубок показують, що вона рівна 45±7ГПа. Отримане значення у 20 разів перевищує відповідну величину для сталей підвищеної міцності. При сильних розтягах НТ, а особливо за високих температур, проявляється виняткова пластичність цих структур: величина розтягу при розриві може сягати сотень відсотків

(n, m)	(10, 0)	(6, 6)	(10, 5)	(10, 10)	(20, 0)	(15, 15)
$R, \mathrm{\AA}$	3.95	4.10	5.17	6.80	7.85	10.17
ν	0.275	0.247	0.265	0.256	0.270	0.256
$E, T\Pi a$	1.22	1.22	1.25	1.24	1.26	1.25

Табл. 2. Механічні параметри ОШНТ отримані методом молекулярних орбіталей.

(при температурі ≈ 2000 K).

Беручи до уваги низьку масу HT, стає очевидною перспективність цих структур при розробці нових матеріалів та механічних систем. Якщо до зазначених вище властивостей додати виняткову форму та правильність структури HT, вони стають ідеальними елементами для побудови наномеханічних пристроїв.

2.4. Взаємодія між шарами двошарових нанотрубок

Механіка наноосциляторів визначається взаємодією між шарами HT, що його складає, тому важливо розглянути взаємодію шарів у багатошарових HT детальніше [2,13,15]. Для ДШНТ з індексами хіральності виду $(n, \operatorname{D} 0)@(m, \operatorname{D} 0)$ та $(n, \operatorname{D} n)@(m, \operatorname{D} m)$ розраховані розклад потенціалу взаємодії шарів у ряд Фур'є, що має наступний вигляд:

$$U(z,\phi) = \sum_{M,K(odd)=1}^{\infty} \alpha_K^M \cos\left(\frac{2\pi}{b}Kz\right) \cos\left(\frac{nm}{N}M\phi\right) \sin^2\left(\frac{\pi nm}{2N^2}\right) + \sum_{M,K(even)=0}^{\infty} \beta_K^M \cos\left(\frac{2\pi}{b}Kz\right) \cos\left(\frac{nm}{N}M\phi\right), \quad (2.8)$$

де z і ϕ — осьове зміщення та відносний кут повороту шарів ДШНТ, N — найбільший спільний дільник n та m, b — довжина елементарної комірки ДШНТ (розглядаються лише ДШНТ зі співмірними шарами). Описана функція, звичайно, періодична; у межах області одного періоду вона містить мінімум, максимум та два сідла. Величини коефіцієнтів розкладу α_K^M , β_K^M експоненціально спадають зі зростанням номеру гармоніки. Як наслідок швидкого спадання членів ряду, можна обмежитись лише першими двома членами:

$$U(z,\phi) = U_0 - \frac{\Delta U_\phi}{2} \cos\left(\frac{2nm}{N}\phi\right) - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{4\pi}{b}z\right), \qquad (2.9)$$

де U_0 — середня енергія взаємодії шарів, ΔU_{ϕ} та ΔU_z — енергетичні бар'єри щодо осьового зсуву та обертання шарів.

У більшості нехіральних ДШНТ існують несумісні обертові симетрії, внаслідок чого величина обертального бар'єру ΔU_{ϕ} мала. У таких випадках енергія практично не залежить від кута повороту та може бути записана:

$$U(z,\phi) = U_0 - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{4\pi}{b}z\right). \tag{2.10}$$



Рис. 3. Енергетичні рельєфи взаємодії шарів ДШНТ для малого (зліва) та високого (справа) значень ΔU_{ϕ}

Існують лише дві пари ДШНТ зі значними обертальними бар'єрами: (5,5)@(10,10) та (9,0)@(18,0). Енергетичні рель'єфи взаємодії шарів ДШНТ у випадках малого та великого значень ΔU_{ϕ} зображені на Рис. 3.

2.5. Осцилятори на основі двошарових нанотрубок

На основі НТ можлива побудова осциляційних систем різних типів у залежності від конфігурації елементів системи. Найпростішою та найбільш перспективною з точки зору застосування є осциляційна система, складена з концентричних НТ. Функціональність таких осциляторів доводться експериментом Камінгса та Зетла (Cummings and Zettl) [16].

На досліді розглядалася багатошарова НТ, зовнішні шари якої зрізалися з одного кінця (рис. 4), а інший кінець закріплювався. Внутрішні шари витягувалися назовні за допомогою маніпулятора; далі маніпулятор відводили, і, як наслідок, спостерігалося швидке повернення системи у початковий стан, очевидно, під дією нескомпенсованих сил Ван-дер-Ваальса. Теоретичні оцінки показали, що подібний рух повинен характеризуватися надзвичайно низьким тертям. На основі цих спостережень була запропонована конструкція телескопічного наноосцилятора з низьким коефіцієнтом затухання, що рухатиметься під дією ван-дер-ваальсівських сил.





Рис. 4. (а) Схема досліду Камінгса та Зетла: А — початкове положення, В — етап витягування внутрішніх шарів, С — повернення осердя у стартову позицію. (b) осциляційна система, збудована на принципі, виявленому у експерименті — наноосцилятор.

3. Деталі моделювання, результати, висновки

3.1. Методика симуляцій

Моделювання осциляторів проводилось методом класичної молекулярної динаміки [17–19] з використанням пакету DL_POLY [20].

Дослідження проводились із двошаровою нанотрубкою, яка репрезентує найпростіший випадок, що, проте, зберігає всі риси системи. Таким чином більшість результатів нашого дослідження справедливі і для багатошарових наноосциляторів, оскільки їх динаміка обумовлюється взаємодією лише сусідніх шарів.

Як було описано у (2.2), на практиці зустрічаються лише ті ДШНТ різниця радіусів яких знаходиться у діапазоні 3.3Å < $\Delta R < 3.7$ Å. У роботі [8] показано, що коливання у системах з надто великою різницею радіусів проходять зі значним тертям та швидко затухають; з іншого боку ДШНТ з різницею ≈ 3.3 Å зустрічаються відносно рідко через високу енергію таких систем. Ставлячи собі за мету

дослідити стабільні коливання ДШНТ, які у майбутньому можуть бути порівняні з експериментом, необхідно обрати наноосцилятор з $\Delta R \approx 3.5 {\rm \AA}$. На підставі таких міркувань для дослідження було вибрано пару ахіральних нанотрубок (9,0)@(18,0). Довжина обох HT $-21 {\rm \AA}.$

У початковий момент симуляції система нерухома, трубки відхилені від положення рівноваги на відстань ≈ 10 Å (рис. 5). Зовнішня НТ не закріплювалась з метою збереження чистоти експерименту: будь-яка фіксація атомів привела б до порушення механізму тертя, що пов'язаний з їх коливаннями, а отже спотворила б динаміку коливань системи загалом. Періодичні умови у системі відсутні, оскільки вона скінченна. Моделювання відбувалося у мікроканонічному ансамблі, що дало змогу прослідкувати процес перетворення енергії поступального руху НТ у енергію теплових коливань атомів.



Рис. 5. Наноосцилятор у початковій позиції перед симуляцією.

Система приходила до рівноважного стану протягом перших 400 кроків; у цей час проводилось перемасштабування швидкостей для досягнення бажаної початкової температури. Далі проводилися необхідні спостереження та виміри. Крок інтегрування по часу взято типовим для схожих систем — 1фс, тривалість симуляції – 1нс. Різниця між максимальним та мінімальним значеннями енергії системи впродовж симуляції склала $5 \cdot 10^{-3}$ %.

Для опису ковалентних зв'язків між атомами карбону в межах НТ використано потенціал Терсофа [21–23], придатність якого перевірено багатьма схожими дослідженнями, серед яких [2, 8, 9]. Вандер-ваальсівську взаємодія між шарами ДШНТ описано за допомогою потенціалу Ленарда-Джонса з константами $\epsilon = 51.2$ K, $\sigma = 3.35$ Å

[17].

Координати та швидкості НТ розраховувалися як відповідні характеристики їх центрів мас. Виходячи із залежностей координат від часу проводився розрахунок частоти та амплітуди коливань. Також обчислювалася довжина внутрішньої НТ, яка бралася як відстань між центрами гексагонів на протилежних кінцях трубки.

3.2. Результати та висновки

У проведених симуляціях спостерігалися стабільні коливання осцилятора (рис. 6): нанотрубки залишались співвсіними, що відповідає результатам [8]; НТ не оберталися, відповідно до відсутності хіральності.



Рис. 6. Залежність зміщення між шарами ДШНТ від часу.

На рис. 7 наведено залежності амплітуди коливань осцилятора від часу при різних температурах. Рух осцилятора відбувається з повільним загасанням, що характерно для цих систем та виявлено експериментально [16] і під час моделювання [8–12]. Загасання стає сильнішим при підвищенні температури системи, що дозволяє висунути гіпотезу про природу механізму розсіяння енергії під час коливань: втрата енергії коливань системи як цілого відбувається через порушення геометрії НТ при теплових коливаннях атомів, що у свою чергу приводить до порушення енергетичних поверхонь взаємодії шарів та викликає подальше посилення теплового руху окремих атомів. Пара НТ (9, 0)@(18, 0) співмірна, тому сила тертя між ними значна навіть при відсутності теплових коливань [13]; очевидно, це також робить внесок у силу тертя між трубками, який, проте, відчутний лише при низьких температурах.



Рис. 7. Залежності амплітуди коливань наноосцилятора від часу для різних значень початкової температури.

Частота коливань наноосцилятора зростає протягом симуляції (тривалістю 1 нс): від 115 ГГц на початку до 120 ГГц укінці для 10 К, від 115 ГГц до 140 ГГц для 50 К та від 115 ГГц до 175 ГГц для 225 К; цей ефект посилюється при зростанні температури. Вищеописаний результат повністю узгоджується з дослідженнями [8–11]. Зростання частоти можна пов'язати із загасанням коливань: зі зростанням швидкості загасання при вищих темепературах зміна частоти відбувається швидше. У роботах [24,25] отримано співвідношення для оцінки частоти, котре для даного випадку можна записати:

$$f = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\Pi}{2m_c L \Delta}},\tag{3.1}$$

де П — середня енергія взаємодії Ван-дер-Ваальса між атомом внутрішньої трубки та зовнішньою трубкою, m_c — маса атома вуглецю, L — довжина трубок, Δ — амплітуда коливання. Застосування такої формули до розглянутого осцилятора дає значення початкової

Проведені розрахунки залежності довжини внутрішньої НТ від часу показали наявність для неї поздовжніх коливань з частотою, що вдвічі перевищує частоту коливань осцилятора (рис. 8). Вібрації внутрішньої трубки можна пояснити як викликані коливаннями системи загалом: у крайніх точках коливального руху на внутрішній шар ДШНТ діятиме неоднорідна по осі НТ сила Ван-дер-Ваальса, яка спричинятиме деформацію внутрішньої НТ. Розтяг трубки відбувається двічі за період, а тому частота наведених у трубці коливань рівна подвійній частоті осцилятора. Аналогічне відбувається і для зовнішнього шару. Описане явище зумовлює періодичну поведінку амплітуди коливань системи як цілого.



Рис. 8. Довжина внутрішньої НТ у залежності від часу.

Література

- 1. K.E. Drexler, Engines of Creation (Anchor Books, 1986).
- 2. Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, УФН , 786 (2007).
- 3. S. Iijima, Letters to Nature. **354**, 56 (1991).
- 4. А.В. Елецкий, УФН **177**, 233 (2007).
- 5. H. Rafii-Tabar, Phys. Rep. **390**, 235 (2004).
- J.-C. Charlier, X. Blase, S. Roche, Reviews of Modern Physics 79, 677 (2007).

- E.B. Barros, A. Jorio, G.G. Samsonidze, R.B. Capaz, A.G.S. Filho, J.M. Filho, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, Phys. Rep. 431, 261 (2006).
- S.B. Legoas, V.R. Coluci, S.F. Braga, P.Z. Coura, S.O. Dantas, D.S. Galvão, Phys. Rev. Lett. **90**, 055504 (2003).
- W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, W. Zhong, Phys. Rev. Lett. 91, 125501 (2003).
- Y. Zhao, Ch.-Ch. Ma, G. Chen, Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. 91, 175504 (2003).
- J.L. Rivera, C. McCabe, P.T. Cummings, Nano-Letters 3, 1001 (2003).
- P. Tangney, S.G. Louie, M.L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 93, 065503 (2004).
- A.V. Belikov, Yu.I. Lozovik, A.G. Nikolaev, A.M. Popov, Chem. Phys. Lett. 385, 72 (2004).
- 14. Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, А.В. Беликов, ФТТ 45, 1333 (2003).
- E. Bichoutskaia, A.M. Popov, A. El-Barbary, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik, Phys. Rev. B 71, 113403 (2005).
- 16. J. Cummings, A. Zettl, Science 289, 602 (2000).
- M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids (Oxford University Press, 1987).
- D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation (Academic Press, 1996).
- D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation (Cambridge University Press, 1995).
- 20. www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/
- 21. J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. 56, 632 (1986).
- 22. J. Tersoff, Phys. Rev. B **37**, 6991 (1988).
- 23. J. Tersoff, Phys. Rev. B **39**, 5566 (1989).
- 24. Q. Zheng, Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. 88, 045503 (2002).
- 25. Q. Zheng, J.Z. Liu, Q. Jiang, Phys. Rev. B 65, 245409 (2002).