

01
Моделирование поверхностных свойств нанокристаллического диоксида урана методом молекулярной динамики

© Р.Ю. Махмуд-Ахунов, М.Ю. Тихончев, В.В. Светухин

Ульяновский государственный университет,
 432017 Ульяновск, Россия
 e-mail: rusmru@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 9 октября 2012 г.)

Методом молекулярной динамики проводится моделирование наноразмерных кристаллов UO_2 . Рассчитаны температуры фазовых переходов для наноразмерных кристаллов диоксида урана. Установлено, что температуры плавления и перехода в суперионное состояние (плавление анионной подрешетки) нанокристаллов понижается с уменьшением их размера. Например, для кубического нанокристалла размером 3.3 nm температура плавления $T_m \sim 2300$ K, т.е. почти на 1000 K ниже температуры плавления макрокристалла. Рассчитанные значения поверхностной энергии согласуются с экспериментальными данными. Получена зависимость поверхностной энергии от размера нанокристаллов UO_2 . Исследовано влияние температуры нанокристаллов на величину поверхностной энергии. Рассматривая модели гетерогенного плавления, получена зависимость толщины расплавленного слоя от температуры. Полученные параметры и зависимости могут быть использованы для проведения дальнейшего анализа при рассмотрении свойств и параметров микроструктуры ядерного топлива в процессе его эксплуатации.

Введение

Диоксид урана является сегодня наиболее распространенным ядерным топливом. Из таблеток диоксида урана формируются топливные сердечники тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) большинства энергетических реакторов. Во время эксплуатации таблетки подвергаются воздействию высоких температур и давления, облучению, механическим нагрузкам. При номинальной мощности реактора температура на оси ТВЭЛА может превышать 2000 K, а давление газообразных продуктов деления урана внутри герметичного ТВЭЛА может достигать 80–100 atm [1]. Микроструктура таблеток, представляющая собой зернистую структуру, состоящую из микро- и наноразмерных кристаллитов, в таких условиях изменяется [2,3].

Известно, что поверхностные свойства материала во многом определяют его поведение в процессах, связанных с образованием трещин, набуханием, спеканием, плавлением и другими явлениями. Зачастую исследование данных процессов недоступно инструментально. Особенно это касается вопросов исследования высокотемпературных процессов с участием наноразмерных кристаллитов и их поверхностных свойств. Одним из путей получения информации от этих процессов является их математическое моделирование. Широко распространенным на сегодняшний день является метод молекулярной динамики, который позволяет получать информацию об энергетических термодинамических и структурных свойствах различных материалов. В настоящей работе с помощью этого метода проведено исследование наноразмерных кристаллитов диоксида урана и рассчитаны их характеристики, в частности поверхностная энергия.

Метод расчета

Моделирование проводилось с использованием программного комплекса DL_POLY [4]. Транслируемая ячейка была выбрана в виде кубического кристалла со структурой флюорита. Кубические нанокристаллиты строились путем трансляции элементарной ячейки по трем направлениям. При расчете использовались нулевые граничные условия (свободный кристалл в вакууме). В табл. 1 приведены размеры моделируемых кристаллитов и соответствующее число атомов в них.

Для всех расчетов шаг численного интегрирования был выбран равным 5 fs, радиус обрезания потенциала задавался таким образом, чтобы область действия потенциала охватывала все частицы системы, и варьировался в пределах от 55 до 105 Å в зависимости от размера кристаллита. В зависимости от задачи расчеты велись либо в микроканоническом ансамбле NVE, либо в каноническом ансамбле NVT. Потенциал межатомного взаимодействия был выбран в форме потенциала Борна–Майера, что обеспечивало минимальный набор параметров, некоторые из которых взяты в виде кусочно-линейных медленноменяющихся функций температуры:

$$U_{\text{eff}}(r_{ij}, T) = \frac{z_i(T)z_j(T)e^2}{r_{ij}} + f(T)(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6}, \quad (1)$$

где первое слагаемое соответствует кулоновскому взаимодействию, а второе и третье — потенциалу Борна–Майера [5]. Значения независимых от температуры параметров потенциалов были взяты из работы [6].

Для восстановления параметров потенциала $z_i(T)$ и $f(T)$ были использованы экспериментальные данные

Таблица 1. Моделируемые кристаллы

Размер, unit cells	4 × 4 × 4	5 × 5 × 5	6 × 6 × 6	7 × 7 × 7	8 × 8 × 8	10 × 10 × 10
Размер, Å	21.88	27.35	32.82	38.29	43.76	54.70
Количество атомов	768	1500	2592	4116	6114	12 000

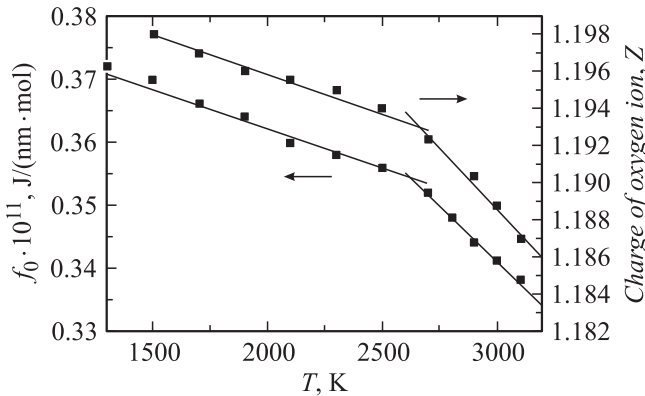


Рис. 1. Зависимость параметра f и дробного заряда иона кислорода от температуры и кусочно-линейная аппроксимация с переходом вблизи точки 2670 К.

по тепловому расширению решетки UO_2 и изменению энтальпии [7]. Были получены зависимости дробного заряда иона кислорода и параметра f от температуры в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} z(T) = z_0 \left[1 + \alpha \frac{T - T_0}{T_0} \right], \\ \text{где } \alpha = \begin{cases} 9.61 \cdot 10^{-3}, & T < T_0 \\ -2.93 \cdot 10^{-2}, & T > T_0 \end{cases}, \\ z_0 = 1.193, \quad T_0 = 2666 \text{ К}, \\ f(T) = f_0 \left[1 + \beta \frac{T - T'_0}{T'_0} \right], \\ \text{где } \beta = \begin{cases} 9.3 \cdot 10^{-2}, & T < T'_0 \\ -2.6 \cdot 10^{-1}, & T > T'_0 \end{cases}, \\ f_0 = 0.354, \quad T'_0 = 2627 \text{ К}. \end{array} \right. \quad (2)$$

На рис. 1 можно видеть, что найденные по этой методике значения параметров дробного заряда и $f(T)$ имеют две характерные линейные области с переходом при температуре вблизи 2670 К — температуре перехода в суперионное состояние [6]. Более подробно вопросы обоснования температурной зависимости указанных параметров рассмотрены в наших предыдущих работах [8,9].

Обсуждения и результаты

1. Поверхностная энергия нанокристаллов

Развитая поверхность наноразмерных систем сильно влияет на их свойства. С уменьшением размера вклад

поверхности $F_\Sigma = \int \sigma(\mathbf{n})dS$ в свободную энергию увеличивается $F = F_\Sigma + F_V$. Это приводит к тому, что при малых размерах могут существовать устойчивые фазы, которые не возможны для массивных систем этого вещества [10]. Также это может сказаться на условиях фазовых превращений.

Поскольку в равновесии система обладает минимально возможной свободной энергией, а поверхностная энергия становится более заметной величиной по сравнению с объемной, то будет происходить либо трансформация кристалла, либо изменение кристаллической структуры вещества. Если в массивных образцах при некоторой температуре устойчива фаза 1, т.е. $F_V^{(1)} < F_V^{(2)}$, то при уменьшении размера может оказаться, что

$$F_V^{(2)} + F_\Sigma^{(2)} < F_V^{(1)} + F_\Sigma^{(1)}, \quad (3)$$

и при достаточно малых размерах частицы устойчивой будет фаза 2. Поэтому наноразмерные кристаллы могут обладать структурой, которая несвойственна массивным системам этого вещества. Что касается трансформации, в работе [11] показано, что после длительной релаксации кубический кристалл диоксида урана трансформируется, стремясь принять форму восьмигранника.

В отсутствие химических реакций изменение свободной энергии системы из N молекул UO_2 при давлении P в процессе варьирования температуры T , объема V , числа молекул N и площади поверхности Σ равно [12]:

$$dF(T, V, N, \Sigma) = -SdT - PdV + \mu dN + \sigma d\Sigma, \quad (4)$$

где S , μ и σ — энтропия, химический потенциал и удельная (на единицу площади) свободная поверхностная энергия. Для жидкой фазы функцию σ отождествляют с поверхностным натяжением. Согласно 4, функцию $\sigma(T, V, N)$ определяется выражением

$$\sigma(T, V, N) = (dN/d\Sigma)_{T,V,N}. \quad (5)$$

Таким образом, для расчета поверхностной энергии необходимо получить зависимость свободной энергии от площади поверхности. Поскольку реально параметры Σ , V , N нельзя считать независимыми при заданной форме поверхности системы, то функцию (5) сложно определить. Однако если сконструировать две системы, обладающие одинаковым объемом и числом частиц при фиксированных температуре и давлении и перейти от бесконечно малых приращений в (5) к конечным, то

$$\sigma(T, V, N) = \Delta F / \Delta \Sigma = F_2 - F_1 / \Sigma_2 - \Sigma_1. \quad (6)$$

Таблица 2. Поверхностная энергия σ_{100} бесконечного кристалла

T, K	$\sigma_{100}, J/m^2$	
	расчет	эксперимент
300 (кристаллическое состояние)	1.94 ± 0.16	$2.56 \pm 0.3^*$ [13,14]
2700 (суперионное состояние)	2.29 ± 0.31	—
3500 (жидкое состояние)	4.48 ± 0.29	—

* Оценка получена по экспериментальному значению $\gamma = \sigma_{100}/\sigma_{111}$, взятому из работы [13], и значению σ_{111} из работы [14].

Для протяженных границ больших кристаллов можно взять такие системы: модель кристалла с периодическими граничными условиями по трем направлениям (бесконечный кристалл) и с периодическими условиями только по двум (бесконечный слой). Тогда разница энергий второй и первой систем определяет энергию протяженной границы. Для трех разных состояний были рассчитаны значения энергии поверхности $\{100\}$. Результаты расчетов представлены в табл. 2.

Для нанокристаллов применялся аналогичный метод расчета поверхностной энергии. Если рассчитать энергию сублимации для бесконечного кристалла (периодические граничные условия)

$$E_S = E_{\text{ном}}(T)/N, \quad (7)$$

где $E_{\text{ном}}(T)$ — потенциальная энергия системы при температуре, а N — число молекул, затем рассчитать потенциальную энергию кристалла в вакууме при той же температуре, когда удельная поверхностная энергия может быть найдена как

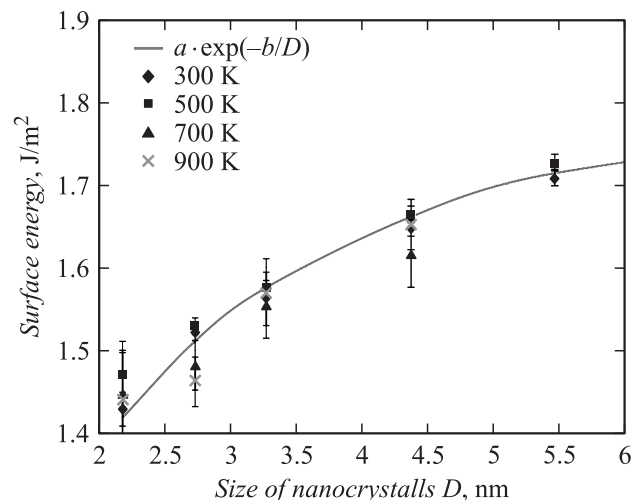
$$\sigma = (E_{\text{ном}}^*(T) - E_S(T)N^*)/\Sigma, \quad (8)$$

где $E_{\text{ном}}^*(T)$ — потенциальная энергия нанокристалла с площадью поверхности Σ , состоящего из N^* молекул.

В табл. 3 и на рис. 2 представлены полученные оценки удельной поверхностной энергии, рассчитанные по формуле (8) для кубических нанокристаллов, ограниченных плоскостями $\{100\}$.

Таблица 3. Поверхностная энергия σ_{100} кубических нанокристаллов

Длина грани куба, nm	$\sigma_{100}, J/m^2$			
	$T = 300 K$	$T = 500 K$	$T = 700 K$	$T = 900 K$
2.19	1.43 ± 0.02	1.47 ± 0.04	1.45 ± 0.05	1.44 ± 0.06
2.74	1.52 ± 0.01	1.53 ± 0.01	1.485 ± 0.03	1.46 ± 0.03
3.28	1.57 ± 0.01	1.58 ± 0.01	1.56 ± 0.04	1.57 ± 0.04
4.38	1.65 ± 0.01	1.67 ± 0.01	1.62 ± 0.04	1.65 ± 0.03
5.47	1.71 ± 0.01	1.73 ± 0.01	—	—

**Рис. 2.** Зависимость поверхностной энергии от размера нанокристалла при различных температурах.

На рис. 2 хорошо видно, что удельная поверхностная энергия возрастает с увеличением размера кристалла. В то же время не выявлено существенного влияния температуры нанокристалла (в диапазоне 300–900 К) на его поверхностную энергию. Небольшие изменения поверхностной энергии при варьировании температуры находятся в пределах погрешности расчетов.

В работе [15] рассмотрена термодинамическая модель, описывающая зависимость поверхностной энергии от размера частицы. В случае нанокристаллов поверхностная энергия может быть найдена как сумма двух слагаемых

$$\sigma = \sigma^{\text{str}} + \sigma^{\text{chem}}, \quad (9)$$

где σ^{str} — слагаемое, соответствующее поверхностной энергии деформации, зависящее от эластичных свойств, σ^{chem} — поверхностная энергия химической связи. Это выражение отражает тот факт, что поверхностная энергия может быть изменена двумя способами: за счет „раскола“ кристалла или за счет „растяжения“ уже существующей поверхности. Авторами [15] получено выражение $\sigma \sim \exp(-C/D)$ (где D — линейный размер наночастицы). Такой характер зависимости поверхностной энергии от размера находится в согласии с нашими расчетными данными для нанокристаллов UO_2 . Учитывая тот факт, что зависимость от размера существенна в случае рассмотрения кристаллов размером порядка 1 nm и меньше, а при больших размерах поверхностная энергия не сильно отличается от значений для массивных кристаллов [9], была проведена аппроксимация с использованием функции вида

$$\sigma = a \exp(-b/D), \quad (10)$$

где $a = 1.94 \pm 0.01 J/m^2$, $b = 0.69 \pm 0.02 nm$. Полученная аппроксимационная кривая представлена на рис. 2 сплошной линией.

2. Плавление нанокристаллов

В современной литературе нет экспериментальных данных о температуре плавления наноразмерных кристаллов UO_2 . Однако для металлов известно, что с уменьшением размера кристалла до десятков нанометров его температура плавления резко уменьшается [16].

Для идентификации точки плавления в молекулярной динамике существует несколько методов. Первый основан на анализе вида радиальной функции распределения (РФР). Вид этой функции является графическим представлением упорядоченности расположения частиц в кристаллической решетке [17]. Математически РФР описывает вероятность нахождения частиц на расстоянии r от заданной точки [18]. Вид РФР позволяет качественно оценить, находится ли материал в расплавленном или кристаллическом состоянии. Для упорядоченного состояния кристалла РФР представляет собой последовательность резких четких пиков, положение которых соответствует закономерности расположения атомов. На рис. 3 для примера показаны РФР ионов урана нанокристалла $5 \times 5 \times 5$ при различных температурах. Следует отметить, что первый пик присутствует всегда в любом фазовом состоянии. Тогда как второй и последующие пики при высоких температурах становятся более пологими и исчезают вовсе, когда кристалл переходит в расплавленное состояние. Так, на рис. 3 хорошо видно, что при температуре 1500 К второй пик становится едва различим, а при 1800 К совсем исчезает, так как кристалл находится в жидком состоянии.

Однако с помощью РФР трудно определить точку начала плавления. Поэтому часто применяются другие методы. Первый из них основан на анализе динамики изменения структурного фактора. С этой целью вычисляется нормированный квадрат модуля структурного фактора отдельно для подрешеток урана и кислорода в направлениях (001), (010) и (100) в соответствии с

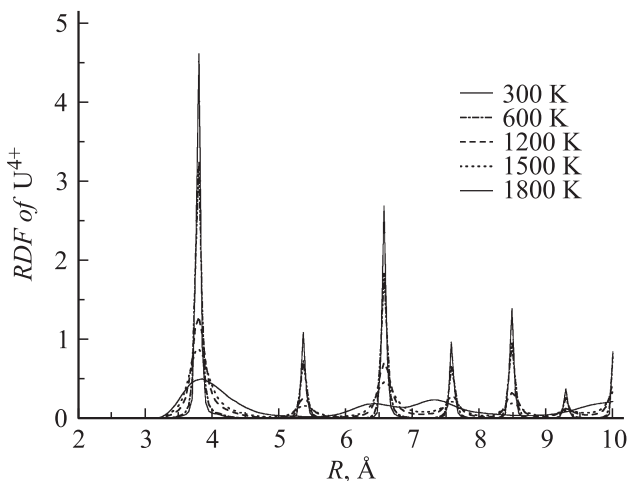


Рис. 3. Радиальная функция распределения ионов урана для нанокристалла $5 \times 5 \times 5$ при различных температурах.

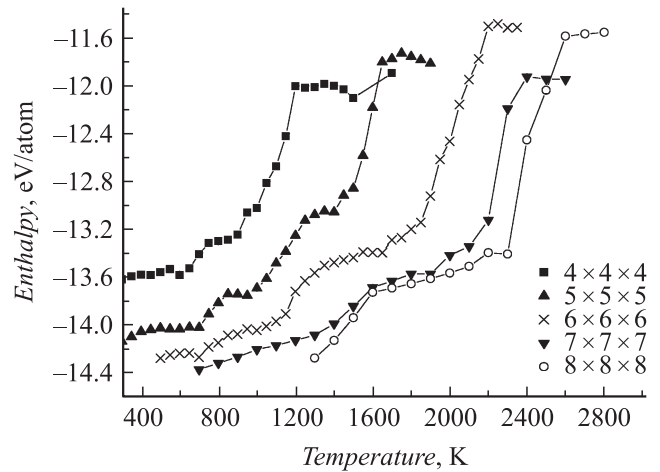


Рис. 4. Зависимость приведенной на атом энthalпии от температуры для кубических нанокристаллов различных размеров. Размеры указаны в элементарных ячейках.

формулой

$$|S_{\alpha}(\mathbf{k})|^2 = \frac{1}{f_{\alpha}^2 N^2} \times \left[\left(\sum_{n=1}^N f_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \right)^2 + \left(\sum_{n=1}^N f_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \right)^2 \right], \quad (11)$$

где индекс α соответствует атомам урана или кислорода, N — количество атомов в системе, f_{α} — атомный фактор рассеяния, \mathbf{k} — вектор обратной связи, \mathbf{r}_n — вектор выбранного направления.

При 0 К кристалл представляет собой идеальную структуру, структурный фактор которой равен единице. Напротив, при высоких температурах для расплавленного состояния квадрат модуля структурного фактора стремится к нулю, а его численные оценки колеблются в диапазоне 0.01–0.04. Таким образом, можно найти точку начала плавления. Полученное нами этим методом значение температуры плавления бесконечного кристалла 3262 ± 280 К совпадает в пределах погрешности с экспериментальным значением 3120 К [6].

Второй метод основан на анализе зависимости энthalпии системы от температуры. На рис. 4 представлены зависимости приведенной энthalпии для различных нанокристаллов. Качественно эти зависимости имеют одинаковый характер для кристаллов различных размеров: в начале происходит плавный рост, затем наблюдаются два скачка энthalпии. Первый скачок на величину примерно 0.5 eV/atom связан с переходом кристалла в суперионное состояние, второй более резкий на величину примерно 1.5 eV/atom — с плавлением кристалла. Поскольку повышение температуры проводилось ступенчатым образом, а время моделирования на каждой температурной точке было ограничено, то в качестве критических выбирались точки, которые лежат на середине отрезка резкого роста энthalпии.

Таблица 4. Моделируемые кристаллы

Размер, unit cells	T плавления решетки кислорода, К	T плавления решетки урана, К
$4 \times 4 \times 4$	700 ± 25	1100 ± 25
$5 \times 5 \times 5$	1125 ± 25	1525 ± 25
$6 \times 6 \times 6$	1200 ± 25	2025 ± 25
$7 \times 7 \times 7$	1450 ± 50	2300 ± 50
$8 \times 8 \times 8$	1500 ± 50	2400 ± 50

Рассчитанные таким образом температуры приведены в табл. 4. Согласно полученным результатам обе эти температуры существенно снижаются с уменьшением размера кристалла. Так, температура плавления наименьшего из рассмотренных кристаллов (размером 2.2 nm) оказывается почти вдвое ниже температуры плавления макрокристалла диоксида урана. С увеличением размера обе температуры быстро возрастают.

3. Гетерогенное плавление

Дефекты кристаллов могут существенно влиять на характер плавления. Для трехмерных систем основным дефектом является поверхность. Поскольку на поверхности атомы имеют меньше связей, колебательный спектр атомов на поверхности отличается от объемного [19], прежде всего амплитуда колебаний значительно больше, чем у объемных атомов. Кроме того, затруднен обмен колебательной энергией. Вследствие этого температура Дебая поверхностного слоя составляет примерно половину величины, характерной для объемной фазы. Поэтому плавление всегда начинается с поверхности, затем фронт расплава движется внутрь кристалла. Таким образом, проявляется гетерогенный характер плавления.

Для описания гетерогенного плавления можно использовать зависимость температуры плавления тонкой пленки от ее толщины [20]

$$T = T_{\infty} \left(\frac{\Delta H(T)}{\Delta H(T_{\infty})} + \frac{\sigma_L \Sigma_L - \sigma_{Sol} \Sigma_{Sol}}{V \Delta H(T_{\infty})} \right), \quad (12)$$

которая получается из условия равновесия жидкой и твердой фаз. Здесь T_{∞} — справочная температура плавления материала, σ — поверхностная энергия, Σ — площадь поверхности, $\Delta H(T)$ — изменение энтальпии системы при переходе из твердого в жидкое состояние при соответствующей температуре, V — объем пленки.

С учетом $V = \Sigma h$ и допущения, что при фазовом переходе $\Sigma_L = \Sigma_{Sol}$, $\Delta H(T) = \Delta H(T_{\infty})$ возникает известное выражение, описывающее понижение температуры плавления тонкой пленки в зависимости от ее толщины h ,

$$T \approx T_{\infty} \left(1 + \frac{\Delta \sigma}{\Delta H(T_{\infty} h)} \right), \quad (13)$$

где $\Delta \sigma$ — изменение поверхностной энергии в результате перехода из кристаллического в жидкое состояние. Из

равенства (12) можно получить выражение для приближенной оценки равновесной толщины расплавленного поверхностного слоя в зависимости от температуры

$$h = \frac{T_{\infty} \Delta \sigma}{(T - T_{\infty}) \Delta H(T_{\infty})}. \quad (14)$$

Далее, используя соотношение (13), где $T_{\infty} = 3120$ К — справочная температура плавления диоксида урана, а значения $\Delta H(T_{\infty}) = 65.3$ eV/mol, $\Delta \sigma = 0.16$ eV/Å² взяты из предыдущих расчетов, построена зависимость толщины расплавленного слоя от температуры. Полученная зависимость показана на рис. 5.

Как и ожидалось, образование расплавленного слоя начинается при температурах существенно ниже температуры плавления. Расплавленный слой толщиной порядка 1–3 nm на начальном участке следует рассматривать не как самостоятельную фазу, а как некий разупорядоченный поверхностный слой вещества, снижающий поверхностную энергию кристаллической фазы. В области температур 2500–2900 К происходит резкое увеличение расплавленного слоя. Эта область характеризуется сосуществованием кристаллической и полноценной расплавленной фазы толщиной 15–20 nm. При температурах выше 3000 К толщина слоя возрастает до бесконечности, т.е. весь кристалл переходит в расплавленное состояние. На этом же графике точками показаны значения соответствующие расчету температуры плавления для нанокристаллов различных размеров. В целом можно говорить о хорошем согласии двух расчетов, что подтверждает применимость нашей модели для описания свойств наноразмерного диоксида урана.

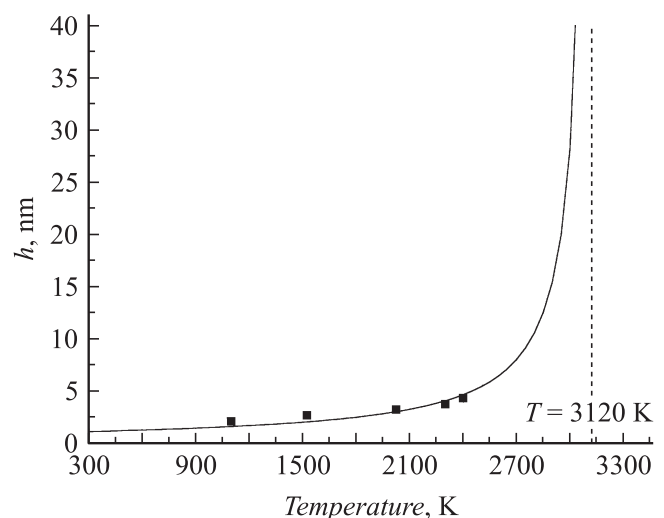


Рис. 5. Зависимость толщины расплавленного слоя от температуры при гетерогенном плавлении UO_2 (точки — расчеты температуры плавления из табл. 4).

Заключение

В настоящей работе путем молекулярно-динамического моделирования исследованы наноразмерные кристаллы UO_2 кубической фазы. Получены следующие результаты.

Получена зависимость удельной энергии поверхности $\{100\}$ для кристаллов размером от 2.2 до 5.5 nm в диапазоне температуры от 300 до 900 K. Установлено, что поверхностная энергия возрастает с увеличением размера кристалла. Не выявлено влияния температуры нанокристалла в рассматриваемом диапазоне на величину его поверхностной энергии. Полученные оценки хорошо аппроксимируются экспоненциальной зависимостью $\sigma = a \exp(-b/D)$, где $a = 1.94 \pm 0.01 \text{ J/m}^2$, $b = 0.69 \pm 0.02 \text{ nm}$, D — линейный размер кристалла в nm.

Рассчитаны температуры плавления и фазового перехода для нанокристаллов линейного размера от 2.2 до 4.4 nm. Согласно полученным результатам, обе эти температуры существенно снижаются с уменьшением размера кристалла. Так, температура плавления наименьшего из рассмотренных кристаллов (размером 2.2 nm) оказалась почти втрое ниже температуры плавления макрокристалла диоксида урана.

На основе модели гетерогенного плавления построена зависимость толщины расплавленного приграничного слоя макрокристалла диоксида урана от температуры. Эта зависимость хорошо согласуется с соответствующими оценками температуры плавления нанокристаллов. Построенная зависимость, в частности, может быть использована для оценки степени оплавления находящихся в твэлах таблеток диоксида урана.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012–2013 гг., федеральной целевой программы „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.“ и „Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 гг.“, а также при частичной поддержке гранта РФФИ, проект № 12-08-97076-р_поволжье_a.

Список литературы

- [1] Емельянов И.Я., Михан Н., Солонин В.И. Конструирование ядерных реакторов: Учеб. пособие для вузов. М.: Энергоиздат, 1982. 400 с.
- [2] Рисованный Д.В., Жиганов А.Н., Купряжский А.Я. и др. Моделирование высокотемпературной диффузии ионов урана в нанокристаллах диоксида урана / Сборник статей. Моделирование поведения под облучением реакторных материалов / Под ред. В.В. Светухина. Ульяновск: УлГУ, 2007. С. 182–192.
- [3] Yamasaki S., Arima T., Idemitsu K. et al. // Int. J. Thermophys. 2007. Vol. 28. N 2. P. 661–673.

- [4] The DL POLY 4 User Manual Web: ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/DL_POLY/DL_POLY_4/DOCUMENTS/USRMAN4.03.pdf
- [5] Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
- [6] Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors. IAEA (2006). Web: http://www.pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/te_1496_web.pdf
- [7] Поташиников С.И., Боярченко А.С., Некрасов К.А., Купряжский А.Я. // Альтернативная энергетика и экология. 2007. № 8 (52). С. 43–52.
- [8] Нагорнов Ю.С., Махмуд-Ахунов Р.Ю., Тихоночев Ю.М. и др. // Изв. вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2010. № 3. С. 156–164.
- [9] Нагорнов Ю.С., Махмуд-Ахунов Р.Ю., Светухин В.В. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Серия математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 10. С. 27–34.
- [10] Гусев А.И. Нанокристаллические материалы: получение и свойства. Екатеринбург: УрО РАН, 1998. 198 с.
- [11] Boyarchenkov A.S., Potashnikov S.I., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya. // J. Nucl. Mater. 2012. Vol. 421. N 1–3. P. 1–8.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. 1. 584 с.
- [13] Castell M.R. // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 235 411
- [14] Matzke H., Inoue T., Warren R. // J. Nucl. Mater. 1980. Vol. 91. N 1. P. 205–220.
- [15] Gang O., Xin T., Guowei Y. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. P. 195–408.
- [16] Сергеев Г.Б. Нанохимия. М.: Изд-во МГУ, 2007. 337 с.
- [17] MD simulations of melting in 2D LJ systems. Web: <http://fliiby.com/file/65867/j9jh9eokml.html>
- [18] Radial distribution function — Wikipedia http://en.wikipedia.org/wiki/Radial_distribution_function
- [19] Киселев В.Ф., Козлов С.Н., Зотеев А.В. Основы физики поверхности твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 1999. 287 с.
- [20] Грамов Д.Г., Гаврилов С.А. // ФТТ. 2009. Т. 51. Вып. 10. С. 2012–2021.