

Лазерная абляция золота: эксперимент и атомистическое моделирование

С. В. Стариков^{+*1)}, В. В. Стегайлов^{+*}, Г. Э. Норман^{+*}, В. Е. Фортгов^{+*}, М. Ишино[△], М. Танака[△], Н. Хасегава[△], М. Нишикино[△], Т. Охба[△], Т. Каихори[△], Е. Очи[△], Т. Имазоно[△], Т. Кавачи[△], С. Тамотсу[▽], Т. А. Пикуз⁺, И. Ю. Скобелев⁺, А. Я. Фаенов⁺

⁺Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

^{*}Московский физико-технический институт, 141700 Дологопрудный, Московская обл., Россия

[△]Канзайский институт фотонных исследований, Японское агентство по атомной энергии, 619-0215 Киото, Япония

[▽]Высшая школа гуманитарных и естественных наук, Женский университет Нары, 630-8506 Нара, Япония

Поступила в редакцию 11 марта 2011 г.

После переработки 18 апреля 2011 г.

Проведены теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия излучения пикосекундного рентгеновского ($\lambda = 13.9$ нм) лазера с мишенями из толстой золотой фольги. Экспериментально показано, что при воздействии одиночных рентгеновских лазерных импульсов с флюенсом $F \approx 21$ мДж/см² происходит наноструктурирование поверхности золота. Предложена атомистическая модель абляции с явным учетом электронной подсистемы, которая позволяет адекватно описать экспериментальные результаты. При атомистическом моделировании используется межзонный потенциал, зависящий от электронной температуры T_e . Использование такого потенциала позволяет учесть рост давления в системе при увеличении T_e и выявить два механизма лазерной абляции.

Механизм лазерной абляции металлов остается не до конца ясным. На это указывают как противоречия в экспериментальных данных, так и отсутствие согласия между экспериментами и предсказаниями теории. Одним из наиболее изучаемых металлов является золото. Данный элемент характеризуется большим, чем остальные металлы, временем релаксации электронной подсистемы к температуре ионов [1, 2]. Поэтому золото является удобным металлом для исследования эффекта двухтемпературности и построения общей модели лазерной абляции.

Наиболее интересными характеристиками абляции при единичном импульсе являются минимальная пороговая величина поглощенного флюенса F_{abs}^{abl} , необходимая для начала абляции, и соответствующая глубина кратера d . В работе [3] значения F_{abs}^{abl} и d для золота были найдены равными приблизительно 10 мДж/см² и 10 нм, соответственно (глубина d оценена как среднее по серии импульсов). В работе [4] величина F_{abs}^{abl} для золота была измерена равной приблизительно 20 мДж/см². В то же время, в работе [5] абляция золота имела характеристики $F_{abs}^{abl} \approx 150$ мДж/см² (с учетом рассчитанного в [6] коэффициента поглощения) и $d \approx 50$ нм при пороговом энерговыкладе. В указанных работах использо-

вались различные методы диагностики поверхности: электронная и атомно-силовая микроскопия в [3, 4] и оптические методы диагностики в [5]. Кроме того, в работе [4] использовались импульсы рентгеновского излучения, тогда как в [3, 5] использовались оптические импульсы. В этих работах золото облучалось импульсами субпикосекундной длительности.

При абляции проникновение импульсного лазерного излучения (как правило, оптического диапазона или мягкого рентгена) в вещество приводит к сильному нагреву электронной подсистемы. Таким образом, процесс лазерной абляции происходит в крайне неравновесном состоянии двухтемпературного нагретого плотного вещества (warm dense matter), теория которого только начинает развиваться. Нагретая лазерным излучением электронная подсистема начинает обмениваться энергией с ионной подсистемой, что в результате приводит к уносу вещества с поверхности. Одной из основных трудностей при теоретическом описании и построении атомистической модели является тот факт, что характерное время установления равновесия между электронами и ионами соизмеримо со временем самой абляции и временами сопутствующих процессов (теплоперенос, фазовые переходы, возникновение ударных волн и др.)

Части трудностей при моделировании можно избежать, если вместо атомистической модели исполь-

¹⁾ e-mail: starikov@ihed.ras.ru

зовать приближение сплошной среды и двухтемпературное уравнение состояния [7–9]. Однако такой подход не позволяет учитывать явления на атомистическом уровне, существенные для описания метастабильных состояний, разрушения и др., и может предсказывать результаты только при энерговкладах в несколько раз больших, чем F_{abs}^{abl} .

Атомистическая модель двухтемпературной системы, предложенная в работе [10], заключалась в том, что электронная подсистема моделировалась сплошной средой. Эволюция ионной подсистемы изучалась с помощью метода молекулярной динамики. Передача энергии от электронной к ионной подсистеме выполнялась путем введения термостата в молекулярно-динамическую модель. Такой подход позволяет объяснить многие особенности лазерной абляции [10, 11], но дает существенное завышение d , по крайней мере, для двух металлов – для Cu [12, 13] и для Au [11]. В этих работах абляция связана с формированием и распространением ударной волны и волны разгрузки в глубь металла. Указанное противоречие показывает, что механизм абляции более сложен при энерговкладах вблизи F_{abs}^{abl} .

Одним из недостатков указанной двухтемпературной модели является невозможность учесть влияние электронного возбуждения на силы, действующие между ионами. В такой модели не учитывается увеличение давления при нагреве электронной подсистемы (будем называть этот эффект возникновением “электронного давления”). В то же время, в работе [8] отмечается, что влияние электронного давления на динамику ионов может быть ответственно за особый механизм лазерной абляции.

В работе [14] атомистическая двухтемпературная модель была дополнена силой увлечения идеально-го электронного газа. Такой электронный газ может оказывать слабое влияние на ионную подсистему, в силу изотропии и только при наличии градиента электронной температуры [15]. Однако в работах [16, 17] показано, что высокая электронная температура даже при отсутствии градиента может существенно изменить фоновый спектр и температуру плавления ионной подсистемы. Это несоответствие объясняется тем, что гипотеза об электронной подсистеме как об идеальном газе является весьма грубой и не может применяться в моделировании.

В данной работе был проведен эксперимент по изучению абляции толстых золотых фольг при облучении образца лазерным рентгеновским импульсом ($\lambda = 13.9$ нм). Для описания процесса абляции вблизи порогового энерговклада была предложена атомистическая двухтемпературная модель с потенциа-

лом межионного взаимодействия, зависящим от электронной температуры (ETD-потенциал от electronic temperature dependent). Использование такого потенциала позволило учесть влияние электронного давления на поведение ионов и дать интерпретацию полученных экспериментальных данных.

Эксперименты были выполнены на плазменном рентгеновском лазере в Канзайском Институте фотоники (Kansai Photon Science Institute, JAEA, Japan). Рентгеновский лазер создавался в режиме последовательного возбуждения двух разнесенных в пространстве на 20 см серебряных мишеней (рис. 1), выполненных в виде фольг толщиной 50 мкм [18,

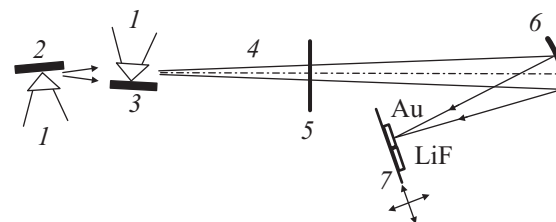


Рис. 1. Схема эксперимента по взаимодействию рентгеновского лазерного импульса с толстой золотой фольгой: 1 – излучение лазера накачки, 2 – излучатель рентгеновских импульсов, 3 – усилитель, 4 – рентгеновский импульс, 5 – поглотитель, 6 – сферическое зеркало, 7 – образец Au и пластинка из LiF

19]. Фольги облучались импульсами двух лазеров на Nd:стекле, работавших с частотой повторения 0.1 Гц [20, 21]. Активной средой рентгеновского лазера являлась плазма, содержащая Ni-подобные ионы Ag. Рентгеновский импульс с длиной волны 13.9 нм генерировался в первой плазменной среде и усиливался при прохождении через вторую. На выходе получалось лазерное излучение с монохроматичностью 10^{-4} при длительности импульса порядка 7 пс и энергии 200 нДж. Расходимости лазерного пучка в горизонтальной и вертикальной плоскостях были равны 0.35 мрад и 1.3 мрад соответственно [21].

Лазерное рентгеновское излучение фокусировалось сферическим Mo/Si многослойным зеркалом на поверхности золотой фольги толщиной 50 мкм (рис. 1). Зеркало с радиусом кривизны 1000 мм было установлено на расстоянии 2637 мм от мишени под углом падения 2° . Отражающая способность зеркала при $\lambda = 13.9$ нм была равна $\sim 50\%$. Для устранения влияния прямого инфракрасного, видимого и ультрафиолетового излучений лазерных плазм, образующихся на первой и второй мишенях, между Au мишенью и зеркалом устанавливался Zr фильтр толщиной 0.2 мк (пропускание $\sim 48\%$). В результате на

мишень в единичной вспышке лазера падала энергия 48 нДж. На данной длине волны практически вся падающая энергия поглощается.

Для контроля распределения лазерной энергии в пятне фокусировки лазерное рентгеновское излучение поочередно фокусировалось тем же самым сферическим Mo/Si многослойным зеркалом на поверхность рентгеновского детектора (кристалл LiF) или на поверхность золотой мишени [22]. Обе поверхности были с высокой точностью синхронизированы. После облучения мишеней кристалл LiF анализировался с помощью конфокального люминесцентного микроскопа. Широкий динамический диапазон кристалла LiF как детектора мягкого рентгеновского излучения позволил зарегистрировать и количественно оценить распределение интенсивности лазерного излучения в пятне фокусировки. Измерения показали, что около 40% всей энергии лазерного пучка сконцентрировано в центральной яркой части пятна.

Обе мишени от вспышки к вспышке сдвигались как по фокусу, то есть вдоль оси лазерного излучения, так и перпендикулярно к ней, обеспечивая использование чистой мишени в каждом новом эксперименте. После облучения поверхность золота исследовалась с помощью видимого микроскопа (BX60, OLYMPUS Corp.). В случае наличия изменений на поверхности детальное исследование наступивших модификаций производилось с использованием электронного сканирующего микроскопа (JSM-6380LVN, JEOL Ltd.). Сечение образовавшихся на поверхности структур также исследовалось с помощью атомно-силового микроскопа (Explorer, TopoMetrix Corp.)

Результаты, полученные при облучении золотой мишени с флюенсом $F = 21$ мДж/см², представлены на рис. 2. Изображения на рис. 2а получены с использованием электронного сканирующего микроскопа (ЭСМ). На рис. 2б приведены профили поверхности вдоль 2 отмеченных на рис. 2а направлений. Стоит отметить, что для рентгеновского излучения поглощенный флюенс F_{abs} практически полностью равен падающему флюенсу F .

Из всех полученных результатов однозначно ясно, что уже при низких флюенсах рентгеновского лазерного излучения 21 ± 5 мДж/см² происходит существенная модификация поверхности золота. Эта модификация затрагивает вещество, лежащее на глубинах, в среднем составляющих 15 ± 7 нм. Существенно, что при меньшем флюенсе $F = 15 \pm 5$ мДж/см² никакой модификации поверхности не происходило. Похожие пороговые значения флюенсов F_{abs}^{abl} для абляции золота получены в работах [3, 4].

Для моделирования процесса абляции была применена атомистическая двухтемпературная модель, дополненная ETD-потенциалом. ETD-потенциал задавался как набор многочастичных потенциалов “погруженного атома”, созданных для разных значений T_e : 0.1, 1.55, 3.0, 4.5 и 6.0 эВ. Для каждого значения T_e межйонный потенциал был разработан с помощью процедуры “согласования по силе” [23] с использованием программных пакетов VASP [24] и PotFit [25]. Данная процедура заключается в расчете сил, действующих на ионы, в различных структурах с помощью *ab initio* расчетов и последующем поиске эффективного межйонного потенциала, наилучшим образом воспроизводящего эти силы. При создании потенциала использовалось 18 репрезентативных структур, соответствующих жидкости и кристаллу (с учетом тепловых смещений) при различных плотностях, с 108 ионами в каждой из них.

Разработанный ETD-потенциал при $T_e = 0.1$ эВ хорошо воспроизводит термодинамические и механические свойства золота, известные из эксперимента (уравнение состояния, кривую плавления, упругие константы и др.) Кроме того, ETD-потенциал воспроизводит эффект увеличения температуры плавления T_m ионной подсистемы при росте T_e [16, 17]. При увеличении T_e с 0.1 до 6 эВ значение T_m повышается при постоянной плотности с 1220 К (T_m для ETD-потенциала при нулевом давлении) до 4250 К. Давление при этом возрастает до 105 ГПа, что в два раза меньше, чем аналогичное значение давления, приведенное в работе [16]. Выполненные в данной работе квантовые расчеты с помощью кода VASP дают при $T_e = 6.0$ эВ давление около 180 ГПа, то есть гораздо ближе к значению из работы [16]. Причина этого в том, что при расчете сил, действующих на ионы, не учитываются компоненты свободной энергии, которые не зависят от координат ионов, а определяются только объемом системы и вносят дополнительный вклад в электронное давление [24, 26, 27].

При моделировании электронная подсистема описывалась как сплошная среда с температурой T_e [10, 28]. Эволюция T_e определялась следующими кинетическими коэффициентами: электронной теплоемкостью $C_e = \gamma \times T_e$ с γ , равной $70 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-2}$; электронной теплопроводностью $k_e = 500 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$; константой электрон-ионного взаимодействия $G = 2.1 \times 10^{16} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-1}$. В более сложных моделях данные величины могут зависеть от T_e [1, 10]. В данной работе значения этих коэффициентов были выбраны как средние в изучаемом диапазоне T_e . Варьирование указанных характеристик качественно не меняло полученные результаты, но могло из-

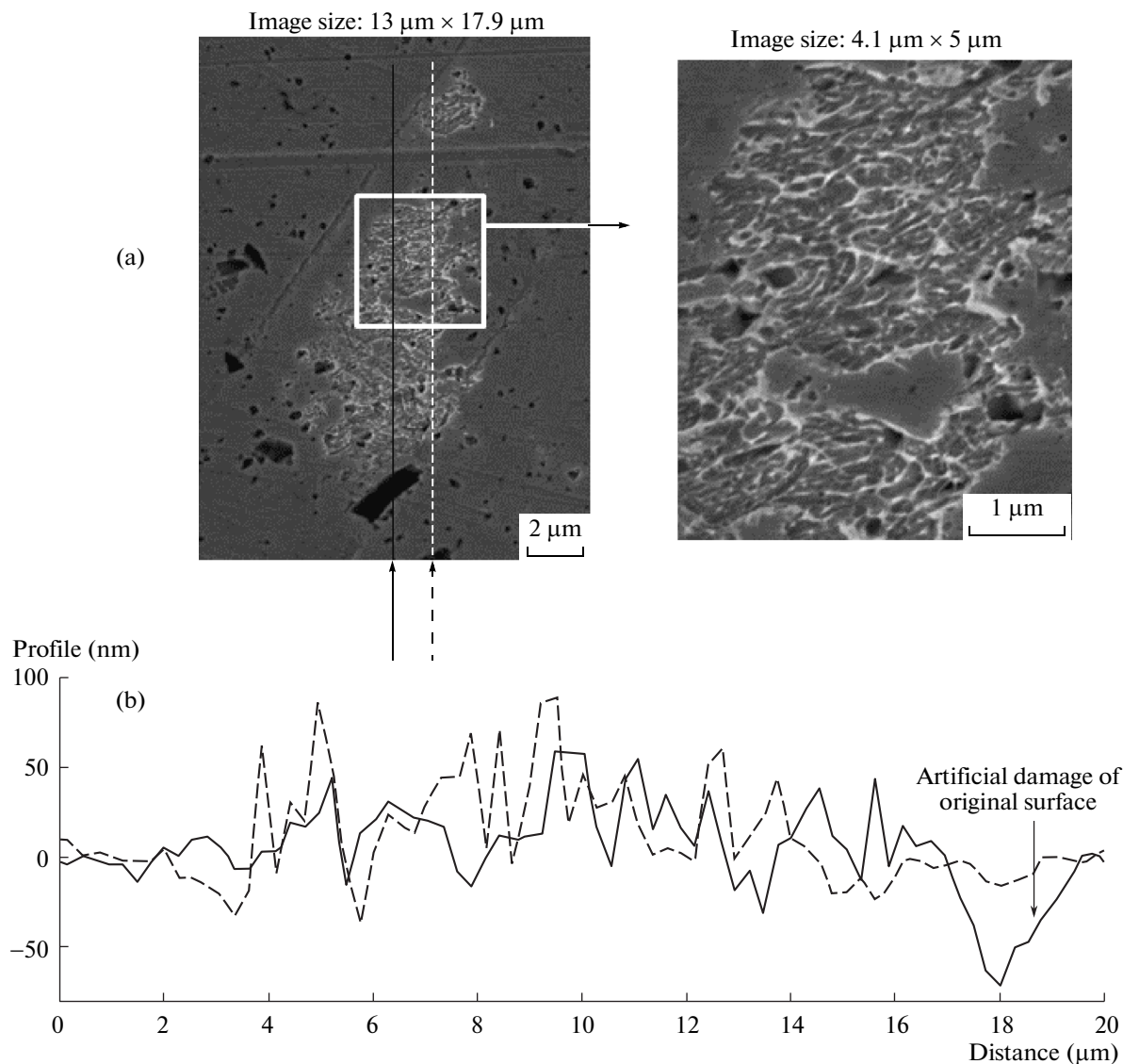


Рис. 2. Модифицированная поверхность Au после воздействия одиночного импульса рентгеновского лазера с флюенсом 21 ± 5 мДж/см². (а) Изображение электронного сканирующего микроскопа и его увеличенный фрагмент. Стрелками отмечены направления, вдоль которых строились профили поверхности. (б) Два профиля поверхности, полученные с помощью атомно-силового микроскопа

менить их количественно. Например, увеличение k_e в полтора раза приводит к росту d и F_{abs}^{abl} на 20–50%.

Ионная подсистема описывалась как молекулярно-динамическая модель с ланжевеновским термостатом, обеспечивающим нагрев за счет электронной релаксации [10, 28], и ETD-потенциалом. При таком описании расчетная ячейка делилась на области со своим межйонным потенциалом, зависящим от локального значения T_e . При изменении T_e также менялся и межйонный потенциал в данной области.

Атомистическая двухтемпературная модель использовалась на протяжении первых 30 пс расчета. В

течение этого времени происходила практически полная термическая релаксация двух подсистем. Дальнейший расчет проводился с ETD-потенциалом при значении $T_e = 0.1$ эВ. При таком низком значении T_e можно считать, что $T_e = T_i$, и не учитывать электронную подсистему. Для моделирования использовался код LAMMPS [29].

Расчетная ячейка имела размеры 2100 нм в направлении x и 4.1 нм в направлениях y и z . В данной работе использовались периодические граничные условия вдоль направлений y и z . Атомы золота на начальной стадии моделирования формирова-

ли г.д.к. решетку в половине расчетной ячейки (при $1050 < x < 2100$ нм). Для моделирования было использовано 1 030 400 атома. Открытые поверхности кристалла были перпендикулярны оси x .

Значение T_e зависело только от координаты x . После приведения системы в равновесное состояние ($P = 0, T_i = T_e = 300$ К) был задан начальный профиль распределения T_e вдоль оси x . Распределение соответствовало поглощенному энерговкладу лазерного импульса F_{abs} . Значение T_e на передней поверхности было максимально и экспоненциально спадало при удалении от нее. Ширина профиля δ (задающая уменьшение T_e в e раз) в различных расчетах равнялась 9 или 18 нм. Величина δ определяла глубину, на которой поглощается излучение. Значение $\delta = 18$ нм соответствовало длине волны импульса, используемого в экспериментальной части работы.

В результате моделирования было обнаружено, что абляция золота при малых энерговкладах связана с релаксацией электронного давления. Такой процесс назван “короткой” абляцией, в противоположность “длинной” абляции, которая обычно возникает при больших энерговкладах и связана с формированием ударной волны и волны разгрузки [5, 11]. “Короткая” абляция протекает быстрее и на меньших пространственных и временных масштабах, чем “длинная” абляция.

Быстрое достижение области отрицательных давлений при “короткой” абляции происходит в первую очередь из-за первоначального быстрого темпа расширения металла вблизи поверхности. Это вызвано тем, что в начальный момент времени в приповерхностном слое существует высокое давление, обусловленное высокой электронной температурой [8, 30]. Образование области с отрицательным давлением и унос вещества происходят в результате суммарного действия двух процессов, снижающих давление. Первый из этих процессов – механическое расширение, происходящее с большой скоростью, когда электронное давление еще велико. Второй процесс, ответственный за образование отрицательного давления – снижение T_e вследствие релаксационных процессов и соответствующее изменение межионного потенциала. Схематично процесс изменения состояния вблизи поверхности при “короткой” абляции проиллюстрирован на рис. 3. При $F_{abs} > 45$ мДж/см² абляция проходит в расплавленном металле.

“Короткая” абляция формирует кратер на поверхности с глубиной $d \sim 20$ нм. На рис. 4 приведены результаты расчета d и различные экспериментальные данные. Представленная модель дает $F_{abs}^{abl} = 30$ мДж/см². Моделирование показало, что d сла-

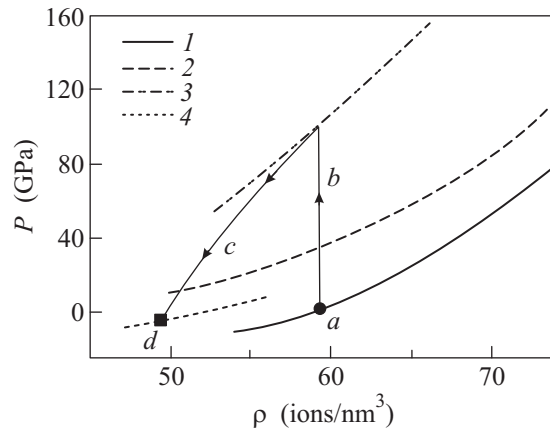


Рис. 3. Изотермы кристаллического золота при $T_i = 0.025$ эВ и различных T_e (1–0.1 эВ, 2–3 эВ, 3–6 эВ) и жидкого золота ($4 - T_e = 0.1$ эВ и $T_i = 0.15$ эВ), полученные в моделировании с ETD-потенциалом. Стрелкой схематично показана эволюция состояния вблизи поверхности при “короткой” абляции (при энерговкладе примерно 80 мДж/см²): a – состояние, соответствующее нормальным условиям; b – быстрое нагревание электронной подсистемы лазерным импульсом; c – релаксация вследствие расширения системы и уменьшения T_e ; d – конечное состояние, соответствующее $P \approx -5$ ГПа

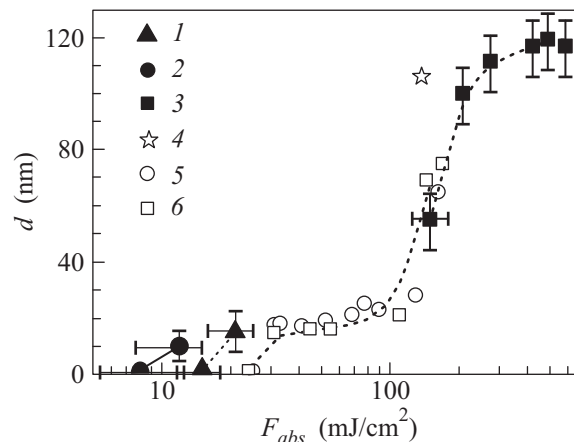


Рис. 4. Зависимость глубины образующегося кратера d при абляции золота от поглощенного флюенса F_{abs} : 1 – эксперимент в данной работе; 2 и 3 – экспериментальные значения из [3] и [5] (с учетом работы [6]) соответственно; 4 – результат расчета из [11]; 5 и 6 – результаты моделирования в данной работе для $\delta = 9$ нм и 18 нм, соответственно

бо увеличивается при росте энерговклада. Существенной зависимости от δ обнаружено не было. В диапазоне поглощенного потока энергии $F_{abs} = 30$ –140 мДж/см² d принимает значения от 15 до 30 нм.

При достижении энерговклада 140 мДж/см^2 вместе с механизмом “короткой” абляции начинает реализовываться механизм “длинной” абляции. Детально этот механизм рассмотрен в работах [5, 11]. Данный тип абляции происходит на более поздних временах и связан с формированием и распространением ударной волны в глубь вещества. Кратер, который образуется при данном механизме абляции, имеет глубину, в несколько раз большую, чем при “короткой” абляции. Механизм абляции, связанный с процессом кипения, в данной работе не рассматривался (для золота пороговый энерговклад этого процесса больше, чем рассмотренные энерговклады).

Процесс модификации поверхности золота при “короткой” абляции в целом похож на наноструктурирование металла при “длинной” абляции [31]. Основное различие заключается в том, что при “короткой” абляции средняя глубина структур на поверхности в несколько раз меньше, чем при “длинной” абляции.

Нужно отметить, что полученные характеристики “длинной” абляции соответствуют работе [5]. Эксперимент в [5] опирался на оптическую диагностику поверхности. По-видимому, глубина кратера в 20 нм оказалась ниже разрешающей способности, и авторы не приводят результаты при энерговкладах $F_{abs} < 100 \text{ Дж/см}^2$. В то же время, пороговый энерговклад F_{abs}^{abl} и глубина кратера d для золота, полученные экспериментально в данной работе и в работах [3, 4], ближе к характеристикам “короткой” абляции. Некоторые расхождения пороговых характеристик, вероятно, обусловлены различием в длине волны и длительности лазерных импульсов.

В данной работе показано, что “короткая” абляция приводит к формированию кратеров на поверхности металла с глубиной порядка двадцати нанометров и требует меньшего энерговклада, чем другие типы абляции. Данный механизм абляции связан с формированием области отрицательного давления вследствие суммарного действия двух релаксационных процессов: механического расширения и уменьшения T_e . Гипотеза об этом механизме позволяет согласовать экспериментальные результаты по абляции. Результаты моделирования соответствуют экспериментальным данным для золота.

Расчеты проведены в МСЦ РАН и на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ(ГУ). Работа выполнена при финансовой поддержке Программ фундаментальных исследований президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов” и “Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий

и физика сильно сжатого вещества” (разделы 1 и 2), Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 10-08-00824 и # 09-08-01116), контракта с SNL по программе ASC (US DOE/NNSA) и гранта Президента РФ для молодых ученых (В.В.С.)

1. Z. Lin, L. Zhigilei, and V. Celli, *Phys. Rev. B* **77**, 075133 (2008).
2. R. Ernstorfer, M. Hard, C. Hebeisen et al., *Science* **323**, 1033 (2009).
3. A. Vorobyev and C. Guo, *Phys. Rev. B* **72**, 195422 (2005).
4. J. Krzywinski, R. Sobierajski, M. Jurek et al., *J. Appl. Phys.* **101**, 043107 (2007).
5. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., *ЖЭТФ* **134**, 5 (2008).
6. N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovskii, S. I. Ashitkov et al., *Applied Surface Science* **225**, 9712 (2009).
7. J. P. Colombier, P. Combis, F. Bonneau et al., *Phys. Rev. B* **71**, 165406 (2005).
8. B. Chimier, V. Tikhonchuk, and L. Hallo, *Appl. Phys. A* **92**, 843 (2008).
9. M. Povarnitsyn, T. Itina, K. Khishchenko, and P. Levashov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 195002 (2009).
10. D. Ivanov and L. Zhigilei, *Phys. Rev. B* **68**, 064114 (2003).
11. B. Demaske, V. Zhakhovsky, N. Inogamov, and I. Oleynik, *Phys. Rev. B* **82**(6), 064113 (2010).
12. C. Schafer and H. Urbassek, *Phys. Rev. B* **66**, 115404 (2002).
13. W. Hu, Y. C. Shin, and G. King, *Phys. Rev. B* **82**, 094111 (2010).
14. Y. Gan and J. K. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 201116 (2009).
15. J. K. Chen, D. Y. Tzou, and J. E. Beraun, *Intern. J. of Heat and Mass Transfer* **49**, 307 (2006).
16. V. Recoules, J. Clerouin, G. Zerah et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 055503 (2006).
17. R. Ernstorfer, M. Harb, C. T. Hebeisen et al., *Science* **323**, 1033 (2009).
18. M. Tanaka, M. Nishikino, T. Kawachi et al., *Opt. Lett.* **28**, 1680 (2003).
19. M. Nishikino, N. Hasegawa, T. Kawachi et al., *Appl. Opt.* **47**, 1129 (2008).
20. Y. Ochi, N. Hasegawa, T. Kawachi, and K. Nagashima, *Appl. Opt.* **46**, 1500 (2007).
21. Y. Ochi, T. Kawachi, N. Hasegawa et al., *J. Appl. Phys.* **48**, 120212 (2009).
22. A. Y. Faenov, Y. Kato, M. Tanaka et al., *Opt. Lett.* **34**, 941 (2009).
23. F. Ercolessi and J. Adams, *Europhys. Lett.* **26**, 583 (1994).

24. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
25. P. Brommer and F. Gahler, Model. Sim. Mater. Sci. Eng. **15**, 295 (2007).
26. S. Goedecker and K. Maschke, Phys. Rev. B **45**, 1597 (1992).
27. F. Bottin and G. Zerah, Phys. Rev. B **75**, 174114 (2007).
28. D. Duffy and A. Rutherford, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 016207 (2007).
29. S.J. Plimpton, J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
30. S. Khakshouri, D. Alfe, and D. Duffy, Phys. Rev. B **78**, 224304 (2008).
31. В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов и К. Nishihara, Письма в ЖЭТФ **87**, 491 (2008).