

Композитная модель пластического течения аморфных ковалентных материалов

© М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gutkin@def.ipme.ru, ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 13 мая 2009 г.)

На основе литературных данных по компьютерному моделированию аморфного кремния предложена теоретическая модель, описывающая особенности пластического течения аморфных ковалентных материалов. В качестве механизма пластической деформации выступает гомогенное зарождение и развитие включений жидкоподобной фазы под действием приложенного сдвигового напряжения. Такие включения испытывают пластический сдвиг, который моделируется дислокационными петлями скольжения. Рассчитаны изменения энергии, связанные с зарождением этих включений при комнатной и повышенной температурах. Найдены критические напряжения, при которых становится возможным безбарьерное зарождение включений. Показано, что чем выше температура, тем ниже это напряжение. Из расчетов следует, что при относительно низких температурах следует ожидать гетерогенного пластического течения аморфного материала, а при относительно высоких — его гомогенного течения. При напряжении, превышающем критическое, гомогенное течение постепенно сменяется гетерогенным.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 08-01-00225-а и 08-02-00304-а), Федерального агентства по науке и инновациям и Программы Президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“.

1. Введение

Уникальные механические свойства нанокристаллических керамик, такие как очень высокие показатели прочности, твердости и износостойкости, делают эти материалы чрезвычайно перспективными для практического использования [1–8]. Как следует из экспериментов [6–8] и компьютерного моделирования [9,10], эти свойства во многом определяются состоянием и поведением межкристаллитных границ. Обычно эти границы представляют собой прослойки аморфного материала с ковалентной межатомной связью. При наноскопических размерах кристаллитов такие границы занимают значительный объем керамического образца.

В последние годы наблюдается заметный рост интереса к деформационному поведению межкристаллитных границ в нанокерамиках. Поскольку экспериментальные наблюдения в данном случае чрезвычайно сложны и трудоемки, значительная роль отводится компьютерному моделированию [9–14] и разработке теоретических моделей [15–17]. При этом результаты компьютерного моделирования служат основой для построения теоретических моделей. В свою очередь компьютерное моделирование на атомном уровне предполагает выбор конкретного модельного материала.

Например, Демкович и Аргон [11–13] в качестве типичного аморфного ковалентного материала выбрали кремний и показали, что его атомная структура содержит области жидкоподобного и твердоподобного материала. В зависимости от режима получения материала (скорости охлаждения жидкого кремния) объемные доли этих составляющих изменяются, что влечет за собой изменение в режимах пластического течения исследуемых образцов. В частности, чем выше объемная доля

жидкоподобного материала, тем однороднее пластическое течение аморфного кремния. Более того, в процессе механического нагружения содержание жидкоподобной фазы увеличивается. В целом, авторы [11–13] пришли к выводу, что области жидкоподобной фазы являются носителями пластической деформации в аморфном кремнии. Поскольку последний представляет собой типичный пример аморфного ковалентного материала, в работе [12] было высказано предположение, что эти особенности присущи и другим аморфным твердотельным системам с ковалентной связью, в частности, аморфным зернограничным прослойкам Si_3N_4 , окружающим нанокристаллиты TiN в нанокompозитных керамиках $nc\text{-TiN}/a\text{-Si}_3\text{N}_4$. Недавно Демкович с соавторами [14] наблюдали формирование и развитие областей жидкоподобной фазы по границам зерен при компьютерном моделировании пластической деформации нанокристаллического кремния.

Взяв за основу результаты компьютерного моделирования [11–14], можно построить теоретическую модель пластической деформации аморфного ковалентного материала, имея в виду ее последующее использование для описания механического поведения аморфных межкристаллических прослоек в нанокерамиках. Цель настоящей работы — построение и анализ такой теоретической модели.

2. Модель

Основываясь на представлениях о жидкоподобной и твердоподобной фазах, образующих структуру аморфного кремния [11–14], рассмотрим композитную модель

на рис. 1. Предположим, что в образце аморфного ковалентного материала, в котором до нагружения присутствовала только обычная твердоподобная фаза, под действием внешнего растягивающего напряжения σ образуются зародыши жидкоподобной фазы. Эти зародыши имеют форму сплющенного эллипсоида, ориентированного вдоль максимального скалывающего напряжения $\tau = \sigma/2$ (рис. 1). Каждый зародыш содержит в себе прямоугольную дислокационную петлю скольжения с вектором Бюргерса s . Предполагается, что в процессе нагружения размеры зародыша жидкоподобной фазы и содержащейся в нем петли растут, причем этот рост происходит синхронно. Растет также и мощность петли s (модуль ее вектора Бюргерса s). Другими словами, под действием внешнего напряжения τ в материале гомогенно зарождаются и расширяются дислокационные петли переменной мощности, окруженные эллипсоидальными областями жидкоподобной фазы.

Заметим, что предложенный сценарий зарождения и развития локального пластического сдвига аналогичен начальной стадии гомогенного пластического течения в металлических стеклах [18]. Согласно теоретическим моделям [19–22], схожим образом происходит зарождение и расширение нановозмущений — скользящих петель „некристаллографических“ частичных дислокаций с очень малым (меньшим по модулю, чем межатомное расстояние) вектором Бюргерса, ограничивающих обобщенный дефект упаковки в кристалле. Зарождение таких нановозмущений и их превращение в обычные „кристаллографические“ частичные дислокации недавно наблю-

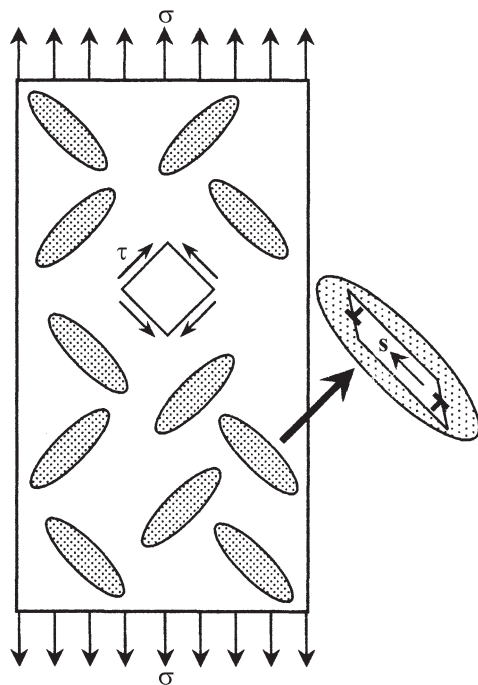


Рис. 1. Модель зарождения пластического течения в аморфных ковалентных материалах. Области локального пластического сдвига представляют собой включения жидкоподобной фазы в форме сплюснутых эллипсоидов, которые содержат дислокационные петли скольжения с векторами Бюргерса s .

далось *in situ* при пластической деформации специального многокомпонентного β -титанового сплава [23].

Рассмотрим изменение полной энергии системы ΔW , которое сопровождается зарождением дислокационной петли переменной мощности, окруженной эллипсоидальной областью жидкоподобной фазы. В рамках принятой модели его можно записать в виде

$$\Delta W = W_L + HV - \tau s S, \quad (1)$$

где W_L — упругая энергия прямоугольной дислокационной петли скольжения, H — избыточная энтальпия жидкоподобной фазы по сравнению с твердоподобной, V — объем зародыша жидкоподобной фазы, окружающего петлю, S — площадь петли. Записывая формулу (1), мы пренебрегли упругим взаимодействием данной петли со всеми остальными такими петлями. Это справедливо, поскольку в рамках данной модели размеры петель всегда меньше или равны расстоянию между их центрами. В такой ситуации энергия взаимодействия даже соседних петель пренебрежимо мала по сравнению с собственной энергией петли. Будем считать, что прямоугольная петля имеет размер $p \times q$, причем вектор Бюргерса петли направлен вдоль сторон длиной p . Тогда упругая энергия петли W_L определяется формулой [24]

$$W_L = \frac{Gs^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ (2-\nu)(r-p-q) + q \left(1 + \ln \frac{2pq}{r_c(r+q)} \right) + p(1-\nu) \left(1 + \ln \frac{2pq}{r_c(r+p)} \right) \right\}, \quad (2)$$

где G — эффективный модуль сдвига композита, составленного из твердоподобной фазы (матрицы) и жидкоподобной фазы (эллипсоидальных включений), ν — эффективный коэффициент Пуассона такого композита, $r = \sqrt{p^2 + q^2}$, $r_c \approx s$ — радиус обрезания упругого поля петли на ее линии. Формула (2) справедлива при $p, q > r_c$.

Эффективные модули композита оценим следующим образом. Положим, что включения с упругими свойствами, отличными от упругих свойств матрицы, распределены в ней хаотично, однако каждое включение содержится в кубической ячейке матрицы со стороны куба d , и при этом ячейки заполняют сплошь весь материал без пустот или наложений. Поскольку по условию модели включения ориентированы вдоль четырех направлений действия максимальных сдвиговых напряжений, будем считать их ориентацию также хаотичной. Тогда для расчета модуля сдвига композита с заданной формой упругих включений в виде сплюснутых эллипсоида воспользуемся известной формулой [25]

$$G = G_m - c \frac{(G_m + \eta G_i)(G_m - G_i)}{G_i(1 + \eta)}, \quad (3)$$

где G_m — модуль сдвига матрицы, G_i — модуль сдвига включения, $c \ll 1$ — объемная доля включений,

$\eta = 0.5(7 - 5v_i)/(4 - 5v_i)$, v_i — коэффициент Пуассона включения. Чтобы приближенно оценить объемную долю включений, будем считать, что объем включения V приближенно равен площади дислокационной петли $S = pq$, умноженной на некоторую толщину включения t : $V \approx pqt$. Тогда объемная доля включений оценивается как $c = V/d^3 \approx pqt/d^3$. Принимая, что $p \leq d$, $q \leq d$ и $t \ll d$, убеждаемся, что $c \ll 1$. Для оценки коэффициента Пуассона композита воспользуемся простейшим правилом смеси: $\nu = cv_i + (1 - c)v_m$, где v_m — коэффициент Пуассона матрицы.

Таким образом, определены все параметры, входящие в выражение (1). Рассмотрим, что зависит изменение энергии ΔW от размера и мощности дислокационной петли при относительно низких и относительно высоких температурах.

3. Результаты

В качестве модельного аморфного ковалентного материала возьмем аморфный кремний с характеристиками, рассчитанными в компьютерных экспериментах [12,26,27] при комнатной ($T = 300$ К) и повышенной ($T = 1000$ К) температурах. Так, при комнатной температуре авторами [12] были установлены следующие значения упругих модулей для твердоподобной (матрица) и жидкоподобной (включения) фаз: $G_m \approx 34$ ГПа, $\nu_m \approx 0.36$ и $G_i \approx 30$ ГПа, $\nu_i \approx 0.44$. Избыточная энтальпия жидкоподобной фазы по сравнению с твердоподобной определяется разностью $H = \Delta H_i - \Delta H_m$, где ΔH_i и ΔH_m — избыточные энтальпии соответственно жидкоподобной и твердоподобной фаз аморфного состояния кремния по сравнению с кристаллическим. По данным компьютерного моделирования [12] последние можно оценить при $T = 300$ К как $\Delta H_i \approx 0.30$ eV/at и $\Delta H_m \approx 0.18$ eV/at, что для их разности дает $H \approx 0.12$ eV/at.

Для $T = 1000$ К используем те же значения упругих моделей, что и для $T = 300$ К, поскольку в таком небольшом интервале температур они меняются незначительно. Оценку для избыточной энтальпии H получим на основе результатов более ранней компьютерной модели [26], приведенных также в обзоре [27]. Авторы [26] получили температурные зависимости избыточной энтальпии аморфного кремния по сравнению с кристаллическим для двух различных аморфных состояний: релаксированного и нерелаксированного. Предполагая, что нерелаксированное и релаксированное аморфные состояния кремния в компьютерной модели [26] соответствуют жидкоподобной и твердоподобной фазам аморфного кремния в компьютерной модели [12], для $T = 1000$ К получаем оценки: $\Delta H_i \approx 0.140$ eV/at и $\Delta H_m \approx 0.095$ eV/at, откуда $H \approx 0.045$ eV/at.

Для определенности рассмотрим случай квадратной петли ($p = q$), причем будем считать, что толщина связанного с ней зародыша жидкоподобной фазы (включения) увеличивается с ростом петли по формуле

$t = b(0.7 + \sqrt[3]{p/b})$, где $b \approx 0.27$ nm — среднее межатомное расстояние. В этом случае в начальный момент зарождения петли (при $p \approx 2b$) толщина включения также составит $t \approx 2b$, а по мере расширения петли будет слабо расти. Выбирая в качестве размера ячейки матрицы $d = 20b$, для наибольшего размера петли $p = 20b$ получим толщину включения $t \approx 3.4b$. Таким образом, максимально возможная объемная доля включений в данной модели составит $c \approx p^2 t / d^3 \Big|_{p=d} = t/d \approx 0.17$, что подтверждает корректность использования формулы (3) для расчета эффективного модуля сдвига композита.

Результаты численных расчетов для температур 300 и 1000 К представлены соответственно на рис. 2 и 3 в виде карт изменения энергии ΔW , построенных в координатах s/b и p/b для разных значений приложенного напряжения τ . Из этих карт видно, что при малых τ область отрицательных значений ΔW , соответствующих выигрышу в энергии при зарождении петли и включения, отделена от начала координат ($s = 0, p = 0$) и от их малых значений областью положительных значений ΔW , описывающей конфигурацию энергетического барьера для зарождения петли в координатах s/b и p/b . В такой ситуации наименьшей величины энергетический барьер достигает в седловой точке (см., например, рис. 2, *b* и 3, *a*). Для $T = 300$ К и $\tau = 7$ ГПа эта величина составляет примерно 1.35 eV (рис. 2, *b*), для $T = 1000$ К и $\tau = 4$ ГПа — примерно 2.19 eV (рис. 3, *a*). Учитывая, что седловая точка в первом случае имеет приблизительно координаты (0.72, 4.3), а во втором — (0.47, 8.4), можно заключить, что для преодоления энергетического барьера в первом случае петля должна дорасти до критического размера $p \approx 4b$ и критической мощности $s \approx 3b/4$, а во втором — до критического размера $p \approx 8b$ и критической мощности $s \approx b/2$. Оценим вероятность появления таких включений с петлями при заданных температурах и напряжениях. Из их критических размеров следует, что в процессе формирования таких комплексов должны принимать участие порядка $V/b^3 \approx p^2 t / b^3$ атомов. В первом случае получаем примерно 37, а во втором примерно 200 атомов. Распределяя величину энергетического барьера равномерно между этими атомами, имеем в первом случае примерно 0.038 eV, а во втором примерно 0.011 eV. Средняя тепловая энергия kT (k — постоянная Больцмана), приходящаяся на один атом, составляет ≈ 0.026 eV при $T = 300$ К и ≈ 0.087 eV при $T = 1000$ К. Тогда в первом случае ($T = 300$ К, $\tau = 7$ ГПа) получаем вероятность зарождения ≈ 0.233 на один атом и $\approx 3.9 \cdot 10^{-24}$ на все 37 атомов, а во втором ($T = 1000$ К, $\tau = 4$ ГПа) имеем ≈ 0.881 на один атом и $\approx 9.9 \cdot 10^{-12}$ на 200 атомов. Таким образом, зарождение включений с петлями термофлуктуационным путем при заданных условиях совершенно невероятно.

Поднимая уровень приложенного напряжения τ , можно добиться того, что в некоторой области начальных значений координат s/b и p/b энергетический барьер пропадет (рис. 2, *d, e* и 3 *b, c*). На карте изменения энергии переходу в такой режим отвечает касание линией

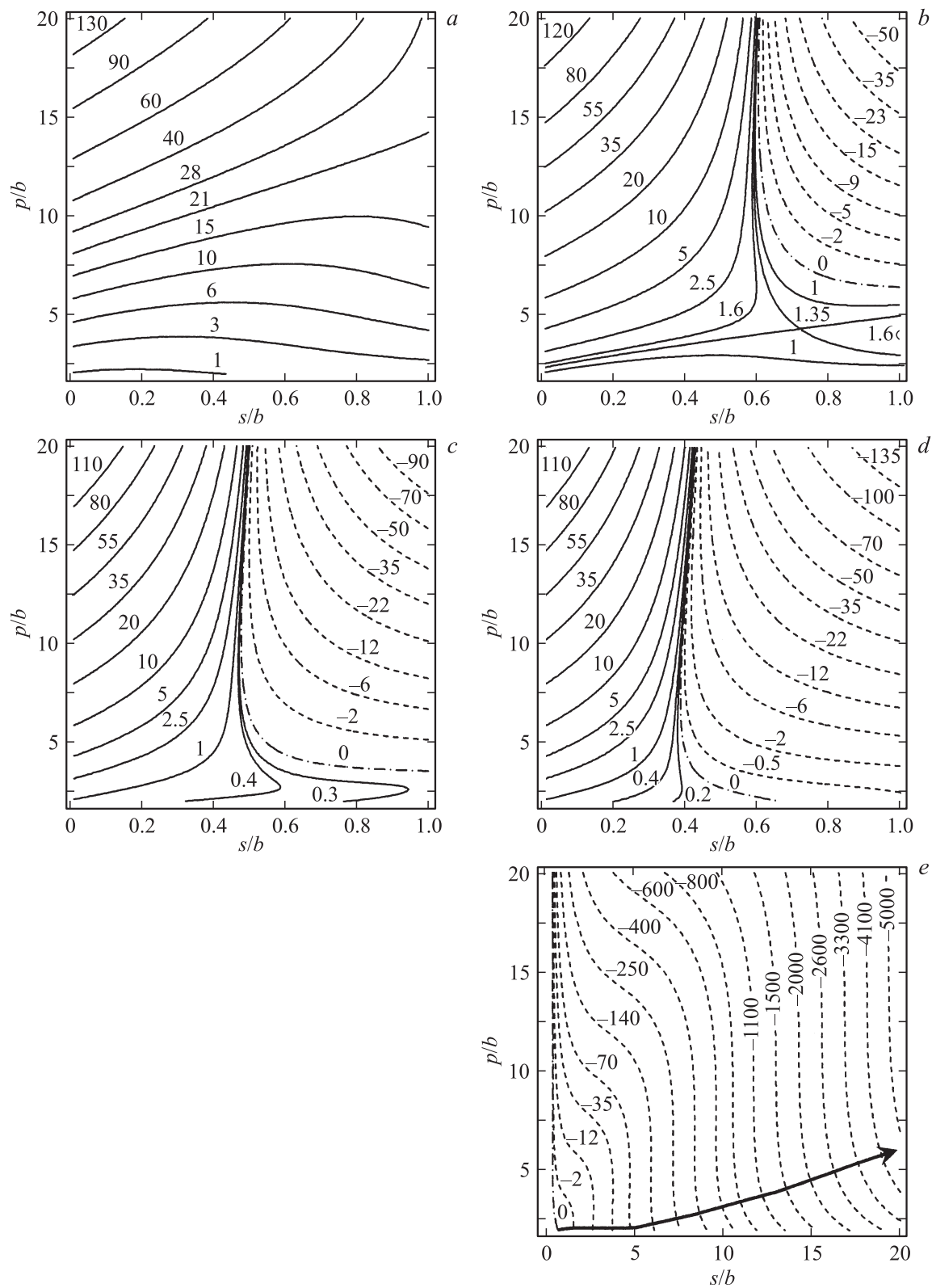


Рис. 2. Карты изменения энергии ΔW в пространстве приведенной мощности дислокационной петли s/b и ее приведенного размера p/b в аморфном кремнии при температуре $T = 300$ К и приложенном сдвиговом напряжении $\tau = 5$ (a), 7 (b), 8 (c) и 9 GPa (d, e). Значения энергии даны в eV.

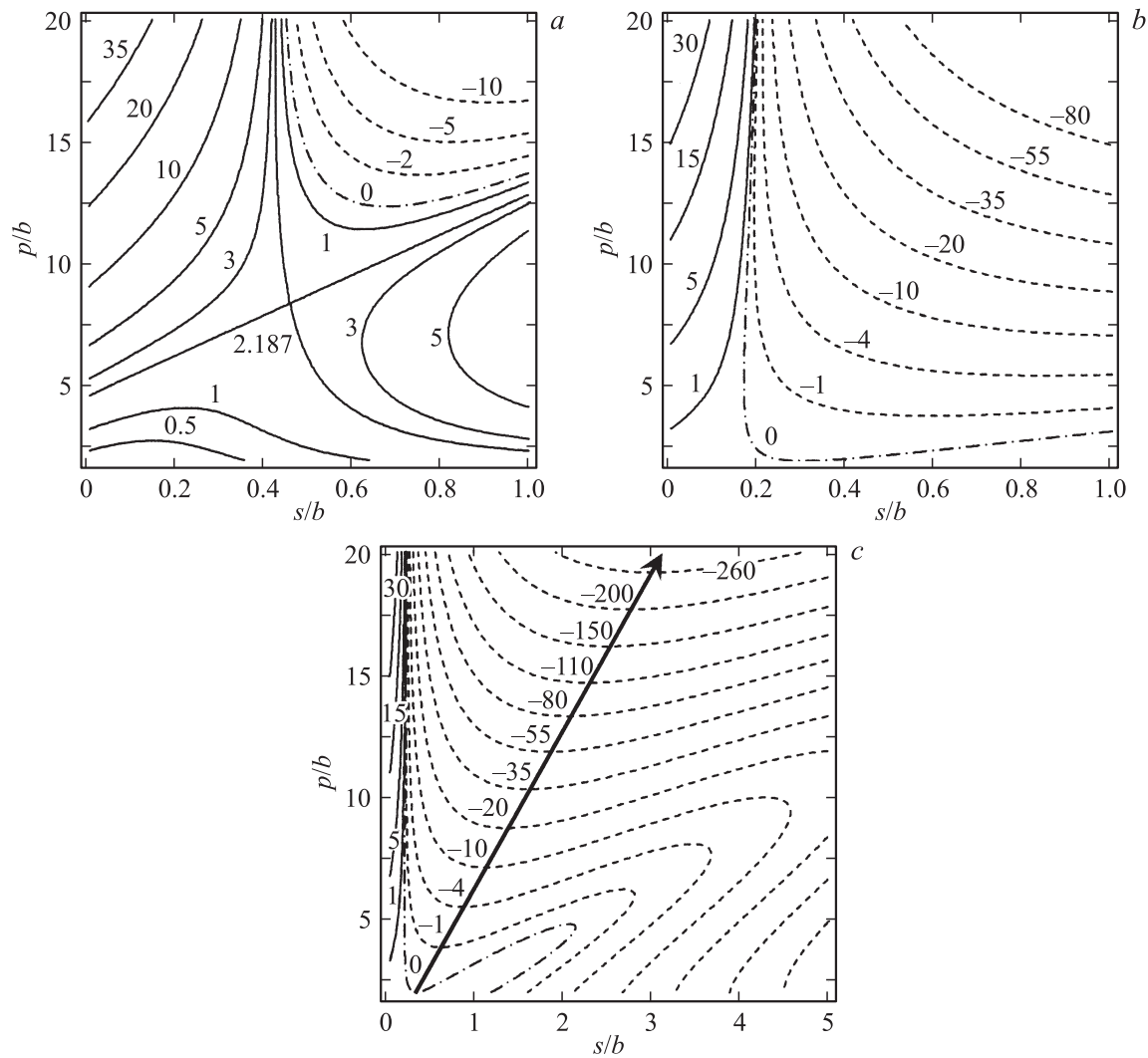


Рис. 3. Карты изменения энергии ΔW в пространстве приведенной мощности дислокационной петли s/b и ее приведенного размера p/b в аморфном кремнии при температуре $T = 1000$ К и приложенном сдвиговом напряжении $\tau = 4$ (а) и 6.8 GPa (b, c). Значения энергии даны в eV.

нулевого уровня ($\Delta W = 0$) прямой $p = 2b$, которая соответствует начальному размеру петли. Например, при $T = 300$ К это происходит, когда приложенное напряжение τ достигает уровня порядка 9 GPa (рис. 2, d, e), а при $T = 1000$ К — когда $\tau = 6.8$ GPa (рис. 3, b, c). Точка касания имеет в первом случае координаты примерно (0.6, 2), а во втором (0.3, 2). Таким образом, при $T = 300$ К и $\tau = 9$ GPa зародившееся безбарьерным путем включение с примерными размерами $2b \times 2b \times 2b$ должно содержать петлю мощностью $\approx 0.6b$, а при $T = 1000$ К и $\tau = 6.8$ GPa — петлю мощностью $\approx 0.3b$. Соответствующие уровни напряжения 9 и 6.8 GPa могут рассматриваться как критические для безбарьерного зарождения таких включений с петлями при указанных температурах.

Используя построенные карты изменения энергии, можно проследить наиболее вероятную эволюцию зародившегося включения с петлей под действием критического (или еще большего) напряжения. Стрелки

на рис. 2, e и 3, c, проведенные от точки зарождения приблизительно вдоль линии максимального градиента функции $\Delta W(s, p)$, показывают развитие включения и петли в пространстве (s, p) под действием критического напряжения. Как видно из рис. 2, e и 3, c, при заданных температурах и напряжениях включение с петлей расширяются, и одновременно растет мощность петли. При этом, однако, сценарии развития петли при комнатной и повышенной температурах совершенно различны.

К сожалению, при $T = 300$ К линия максимального градиента функции $\Delta W(s, p)$ проходит через область $s \geq p$, в которой формула (2) несправедлива. Это означает, что в случае комнатной температуры мы не можем проследить эволюцию системы. Однако можно заметить, что линия эволюции не может проходить выше, через область $p > s$, где формула (2) справедлива. Следовательно, хотя эту линию не удастся установить точно, тем не менее можно считать, что она проходит где-то в области $s \geq p$, а это означает, что мощность петли

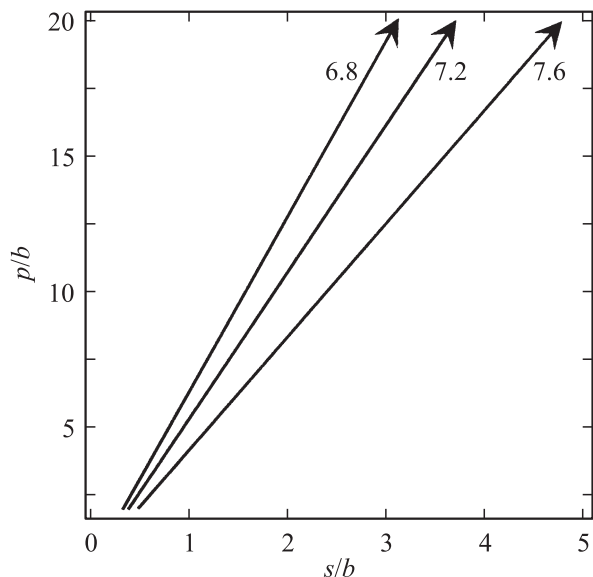


Рис. 4. Лучи эволюции системы в пространстве приведенной мощности дислокационной петли s/b и ее приведенного размера p/b в аморфном кремнии при температуре $T = 1000$ К и различных значениях приложенного сдвигового напряжения τ (указаны около лучей в ГПа.)

увеличивается быстрее, чем ее размер. Такую ситуацию можно рассматривать как гомогенное зарождение петли супердислокации (в пределах включения жидкоподобной фазы), развитие которой должно приводить к гетерогенному пластическому течению аморфного кремния, когда вся пластическая деформация концентрируется в узких полосах интенсивного пластического сдвига. Такой режим обычно наблюдается при относительно низких температурах и высоких приложенных напряжениях.

При $T = 1000$ К ситуацию анализировать значительно легче, поскольку зародившаяся петля значительно быстрее увеличивает свои размеры, чем мощность. Так, на рис. 3, *c* показана ситуация, когда мощность петли s увеличивается от $\approx 0.3b$ до $\approx 3b$ при одновременном увеличении ее размера p от $2b$ до $20b$. Как видно, линия эволюции системы представляет собой прямолинейный луч $p = 6.5s$. Таким образом, при относительно высокой температуре и соответствующем критическом напряжении возможно гомогенное зарождение маломощных дислокационных петель, которые развиваются за счет опережающего увеличения своего размера, а не мощности. В этом случае следует ожидать гомогенного пластического течения аморфного кремния за счет массового образования и расширения подобных петель равномерно по всему объему образца.

Гомогенное пластическое течение аморфных тел неустойчиво по отношению к росту приложенного напряжения. Например, как показывает атомное компьютерное моделирование наноиндентирования аморфного карбида кремния [28], увеличение уровня напряжений вызывает переход от гомогенного течения к гетерогенному. В рамках предложенной здесь модели такой

переход означает ускорение роста мощности дислокационной петли s . Действительно, при увеличении напряжения τ тангенс угла наклона эволюционного луча постепенно уменьшается от 6.5 при $\tau = 6.8$ ГПа до 4.2 при $\tau = 7.6$ ГПа (рис. 4).

4. Заключение

Предложенная теоретическая модель, основанная на результатах компьютерного моделирования пластического течения аморфного кремния [11–13], описывает следующие основные особенности пластической деформации аморфного ковалентного материала.

1) Механизмом пластической деформации служит гомогенное зарождение и развитие включений жидкоподобной фазы под действием приложенного сдвигового напряжения.

2) Такие включения испытывают пластический сдвиг, который моделируется дислокационными петлями скольжения, возникающими и развивающимися одновременно с включениями.

3) Образование подобных включений не требует преодоления энергетического барьера, если приложенное напряжение достигает некоторого критического уровня, зависящего от температуры; чем выше температура, тем ниже этот критический уровень.

4) В случае безбарьерного зарождения включения при относительно низких температурах мощность (модуль вектора Бюргерса) дислокационной петли, моделирующей пластический сдвиг внутри включения, растет быстрее, чем ее размер. В такой ситуации следует ожидать гетерогенного пластического течения аморфного материала за счет концентрации пластической деформации в узких полосах скольжения.

5) Если безбарьерное зарождение включения происходит при относительно высокой температуре, то увеличение размера дислокационной петли опережает рост ее мощности, и можно ожидать гомогенного пластического течения материала за счет массового зарождения и постепенного развития таких включений. Если же при этом приложенное напряжение превышает критический уровень безбарьерного зарождения включений, то возможен переход от гомогенного течения аморфного материала к гетерогенному.

Полученные результаты и выводы могут оказаться полезными для разработки моделей пластической деформации и разрушения в нанокристаллических керамиках с аморфными межкристаллитными границами.

Список литературы

- [1] S. Veprek, A.S. Argon. J. Vac. Sci. Technol. **20**, 650 (2002).
- [2] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, J. Wan, A.K. Mukherjee. Nature Mater. **2**, 38 (2003).
- [3] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, A.K. Mukherjee. MRS Bull. **29**, 22 (2004).

- [4] Y.T. Pei, D. Galvan, J.T.M. De Hosson. *Acta Mater.* **53**, 4505 (2005).
- [5] A. Swiderska-Sroda, G. Kalisz, B. Palosz, N. Herlin-Boime. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **18**, 422 (2008).
- [6] X. Xu, T. Nishimura, N. Hirotsaki, R.-J. Xie, Y. Yamamoto, H. Tanaka. *Acta Mater.* **54**, 255 (2006).
- [7] D.M. Hulbert, D. Jiang, J.D. Kuntz, Y. Kodera, A.K. Mukherjee. *Scripta Mater.* **56**, 1103 (2007).
- [8] C.C. Koch, I.A. Ovid'ko, S. Seal, S. Veprek. *Structural nanocrystalline materials: fundamentals and applications*. Cambridge University Press, Cambridge (2007). 378 p.
- [9] I. Szlufarska, A. Nakano, P. Vashista. *Science* **309**, 911 (2005).
- [10] Y. Mo, I. Szlufarska. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 181 926 (2007).
- [11] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 025 506 (2004).
- [12] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. B* **72**, 245 205 (2005).
- [13] M.J. Demkowicz, A.S. Argon. *Phys. Rev. B* **72**, 245 206 (2005).
- [14] M.J. Demkowicz, A.S. Argon, D. Farkas, M. Frary. *Phil. Mag.* **87**, 4253 (2007).
- [15] С.В. Бобылев, И.А. Овидько. *ФТТ* **50**, 617 (2008).
- [16] И.А. Овидько, Н.В. Скиба, А.Г. Шейнерман. *ФТТ* **50**, 1211 (2008).
- [17] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **50**, 1813 (2008).
- [18] A.S. Argon. *Acta Met.* **27**, 47 (1979).
- [19] M.Yu. Gutkin, T. Ishizaki, S. Kuramoto, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **54**, 2489 (2006).
- [20] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 211 901 (2006).
- [21] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **50**, 630 (2008).
- [22] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **56**, 1642 (2008).
- [23] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.L. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 045 503 (2009).
- [24] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, Yu.I. Meshcheryakov. *J. Phys. III France* **3**, 1563 (1993).
- [25] Р. Кристенсен. *Введение в механику композитов*. Мир, М. (1982). 336 с.
- [26] M.G. Grimaldi, P. Baeri, M.A. Malverazzi. *Phys. Rev. B* **44**, 1546 (1991).
- [27] C. Spinella, S. Lombardo, F. Priolo. *J. Appl. Phys.* **84**, 5383 (1998).
- [28] I. Szlufarska, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashista. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 021 915 (2005).