

Ag 粒子与 Ni 包覆 Ag 粒子熔化特性的价键分析 *

彭 平^{1,2)} 韩绍昌¹⁾ 郑采星¹⁾ 金朝晖²⁾ 胡壮麒²⁾

1) 湖南大学材料科学与工程学院, 长沙 410082

2) 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016

摘 要 采用非相对论第一原理分子轨道 DV- X_α 模型簇方法, 计算了 Ag 纳米粒子自由表面与 Ag-Ni 半共格界面的电子结构, 并从键重叠层数 Q_{AB} , 层内与层间原子的部分键合强度 (PBO) 以及界面原子的总键合强度 (TBO) 几个方面, 对 Ag 的 (111), (100) 与 (110) 自由表面和 Ag-Ni 半共格界面的价键结构进行了比较, 进而对其熔化特性进行了分析. 初步揭示了自由表面“预熔化”与共格界面“过热”的电子机制, 并从电子层次上考察了 (111), (100) 和 (110) 表面与界面的预熔化与过热程度及其熔化方式.

关键词 Ag 纳米粒子, 熔化, DV- X_α 法, 电子结构

中图分类号 TG111.5, O742.1, O551.3 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2003)07-0673-06

COVALENT BONDING ANALYSIS ON THE MELTING OF Ag PARTICLE AND Ag PARTICLE EMBEDDED IN Ni MATRIX

PENG Ping^{1,2)}, HAN Shaochang¹⁾, ZHENG Cairong¹⁾, JIN Zhaohui²⁾, HU Zhuangqi²⁾

1) College of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082

2) Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

Correspondent: PENG Ping, associate professor, Tel: (0731)8822663, Fax: (0731)8824525,

E-mail: ppeng@imr.ac.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.59801011) and National Key

Basic Research and Development Programme of China (No.G2000067105)

Manuscript received 2002-09-11, in revised form 2002-12-09

ABSTRACT By using the discrete variation X_α (DV- X_α) method, the electronic and bonding structures of Ag particles with (100), (110) and (111) free surfaces and Ag-Ni semi-coherent interfaces were calculated in the framework of the nonrelativistic first-principles theory. Several bonding parameters such as the bond overlap population, the partial bond order of intra-layer and inter-layer as well the local environmental total bond order have been applied to characterize and analyze the melting of Ag free-surface and Ag-Ni semi-covalent interface. This investigation preliminarily reveals the electronic mechanism of pre-melting of free-standing Ag particles and superheating of Ag particles embedded in Ni matrix. And the pre-melting and superheating degree as well melting modes of Ag particles with (100), (110) and (111) free surfaces and Ag-Ni semi-coherent interfaces are also discussed and predicted.

KEY WORDS Ag nano-particle, melting, DV- X_α method, electronic structure

固体的熔化一般被认为是一个热力学现象, 人们习惯从体系能量的角度来研究其熔化温度的高低与熔化潜热的大小, 以及熔体“形核”与“长大”的动力学规律. 为了

解释固体的熔化, 人们曾经建立了许多结构分析模型, 如 Lindemann 的晶格振动模型^[1] 和 Born 的模量稳定性模型^[2]. 为了探讨其熔化“过热”的上限, 更是发展了等容^[3]、等熵^[4]、模量失稳^[5]及均匀形核^[6]等多种热力学判据. 然而 Jin 等人^[7]最近的研究结果表明: 上述热力学判据只不过是几种不同的表述方式而已. 因此, 为了深化对固体熔化本质的认识, 有必要从电子层次上研究不同结构组态固体结构的电子作用机制及其结构稳定性.

关于纳米粒子(团簇结构)的熔化, 已有很多学者对

* 国家自然科学基金项目 59801011 和国家重点基础研究发展规划项目 G2000067105 资助

收到初稿日期: 2002-09-11, 收到修改稿日期: 2002-12-09

作者简介: 彭 平, 男, 1965 年生, 副教授, 博士

此进行过研究. 大量的实验研究与计算机模拟结果表明: 自由粒子的熔化温度 T_m 通常比块状晶体的平衡熔点 T_0 低 (即“预熔化”), 且熔化一般从表面开始, 逐渐向晶内深入 [8], 并呈现出各向异性 [9]. 如 Pb{110} 面在低于块体熔点 100 K 时就开始形成液态结构, 而 Pb{111} 面甚至在平衡熔点以上也没有观察到熔化现象的发生 [10]. 对于镶嵌粒子, 实验发现: 若粒子取向混乱, 与基体间错配程度高, 则粒子表现为预熔化; 若粒子与基体间具有一定的共格或半共格取向关系, 晶格错配度较小, 则粒子熔化过热 [11,12]. 对于这种自由与镶嵌粒子的预熔及过热特性, 一般采用 Lindemann 模型结合热力学公式 [13] 来分析. 由于目前实验上还没有测量出纳米粒子熔化时原子均方根位移的大小, 也缺乏粒子表面能 γ 的准确数据, 因此, 粒子熔化特性的理解还停留在合理推测的基础上. 近年来, Schmidt 等人 [14] 在研究 Na 粒子熔化温度的尺寸效应时发现, 自由粒子的熔点随粒子尺寸减小而降低的熔化行为 [15], 在很大程度上可归因于其团簇结构的几何壳层与电子壳层的改变. 因此, 通过对团簇自由表面与共格界面电子结构的研究, 也许会有新的收获.

作为一种具有潜在应用前景的耐高温高热的微电子器件导线材料——Ag 纳米粒子及其管线, 人们一直对其具有浓厚的研究兴趣. 最近的实验与模拟研究结果表明: 包覆 Ag 粒子也具有熔化过热特性, 如 Au 包覆的 Ag 粒子过热可以达到 25 K [16], 而 Ni 包覆的 Ag 粒子则过热可达 70 K [17]. 为此, 本文选择这种粒子的自由表面与共格界面进行第一原理模型簇计算, 主要考察自由 Ag 粒子与 Ni 包覆 Ag 纳米粒子 (团簇) 表面原子的电子结构与键合机制, 以期能加深对纳米粒子熔化本质的认识.

1 计算方法

本文采用的计算方法为非相对论第一原理分子轨道 DV- X_α 模型簇方法 [18]. 计算程序为 Ellis 原 DV- X_α 程序 [19] 的修改版 DVSCAT [20,21], 分子轨道 (MO) 波函数 ϕ_l 由原子轨道线形组合 (LCAO) 构成.

$$\phi_l(r_k) = \sum_i C_{ij} \chi_i(r_k) \quad (1)$$

式中, C_{ij} 为系数; r_k 是样品点的坐标; $\chi_i(r_k)$ 为原子轨道基函数, 可通过解一个给定团簇 (cluster) 里单个原子 Schrödinger 方程的径向部分得到, 在此采用数值轨道的方法表示. 在 Secular 方程 (HC=ESC) 中的积分单元 H_{ij} 和 S_{ij} 由下式通过 DV 数值积分来计算.

$$H_{ij} = \sum_k \omega(r_k) \chi_i(r_k) h(r_k) \chi_j(r_k) \quad (2)$$

$$S_{ij} = \sum_k \omega(r_k) \chi_i(r_k) \chi_j(r_k) \quad (3)$$

式中, $\omega(r_k)$ 是样品点的积分权重, 即在 r_k 处样品点密度的倒数; h 为单电子 Hamiltonian 算符. Hartree-

Fock 方程中的交换势 V_{xc} 采用一个仅与局域电子密度相关的 X_α 势来代替, 即

$$V_{xc} = -3\alpha[3\rho^\uparrow(r)/4\pi]^{1/3} \quad (4)$$

式中, $\rho^\uparrow(r)$ 为团簇的电荷密度, α 为一常数, 本文取为 0.7. 簇中原子间化学键的强度采用 Mulliken 聚居数分析的方法 [22] 来表征. 其中第 l 个分子轨道中 χ_i 与 χ_j 间的重叠聚居数被定义为

$$Q_{ij}^l = C_{il} C_{jl} \sum_k \omega(r_k) \chi_i(r_k) \chi_j(r_k) \quad (5)$$

对所有的分子轨道求和, 即得 χ_i 与 χ_j 间的净重叠聚居数 Q_{ij} 和 i 轨道的聚居数 Q_i .

$$Q_{ij} = \sum_l f_l C_{il} C_{jl} \sum_k \omega(r_k) \chi_i(r_k) \chi_j(r_k) \quad (6)$$

$$Q_i = \sum_l \sum_j f_l C_{il} C_{jl} \sum_k \omega(r_k) \chi_i(r_k) \chi_j(r_k) \quad (7)$$

式中, f_l 为第 l 个分子轨道的电子占有数. 由此可求得 A 和 B 原子间的键重叠聚居数 (bond overlap population) Q_{AB} 及每个原子上如 A 原子上的净电荷数 (net charge) ΔQ_A .

$$Q_{AB} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} Q_{ij} \quad (8)$$

$$\Delta Q_A = Z_A - \sum_{i \in A} Q_i \quad (9)$$

式中, Z_A 为 A 的电子数. Q_{AB} 的大小可用来表征 A 和 B 原子间共价键的强弱.

2 计算结果与分析

2.1 计算模型与参数

考虑到 Ag 的 fcc 晶体结构, 其 (111) 面为密排面, (100) 和 (110) 面为常见低指数面, 为此本文分别以其 (111), (100) 和 (110) 面上 1 个 Ag 原子为中心, 计及全部第 1 近邻 (12 个) 与第 2 近邻 (6 个) 原子, 构造了 3 个 Ag 晶体模型簇; 进一步去掉模型簇的上部或下部, 则可得到 3 个 Ag 粒子晶体表面模型簇. 当考虑 Ag 粒子的 Ni 包覆时, 同样以 Ag 晶体 (111), (100) 和 (110) 面上 1 个 Ag 原子为中心, 上部为 Ni, 下部为 Ag, 并按如下取向关系分别构造 Ag-Ni 相界面模型簇: $\{111\}_{\text{Ni}} \parallel \{111\}_{\text{Ag}}$, $\langle 101 \rangle_{\text{Ni}} \parallel \langle 101 \rangle_{\text{Ag}}$; $\{001\}_{\text{Ni}} \parallel \{001\}_{\text{Ag}}$, $\langle 100 \rangle_{\text{Ni}} \parallel \langle 100 \rangle_{\text{Ag}}$; $\{110\}_{\text{Ni}} \parallel \{110\}_{\text{Ag}}$, $\langle 1\bar{1}0 \rangle_{\text{Ni}} \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_{\text{Ag}}$. 各模型簇示意图如图 1 所示. 其中, Ag 晶体的晶格常数 $a_{\text{Ag}} = 0.40862$ nm, Ni 晶体的晶格常数 $a_{\text{Ni}} = 0.35238$ nm, 而 Ag-Ni 相界面间距则取 Ni 和 Ag 晶体相应层间距的平均值. 计算时, Ag 晶体, Ag 自由表

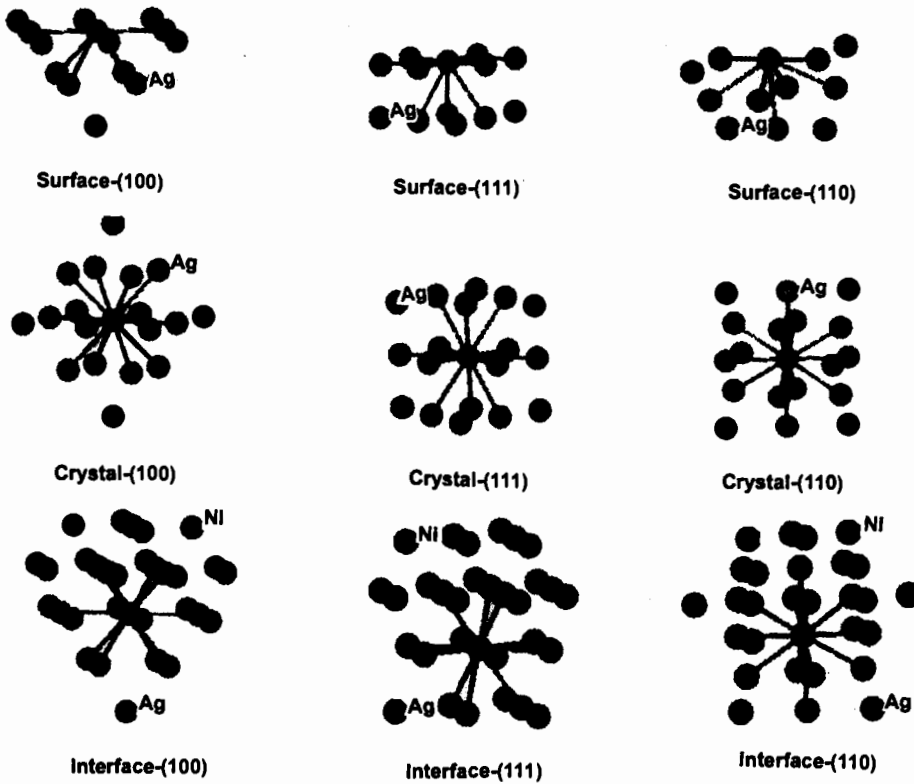


图 1 Ag 晶体和 Ag 自由表面与 Ag-Ni 界面的簇模型

Fig.1 Cluster model of Ag free surface and Ag crystal as well Ag-Ni interface

面及 Ag-Ni 界面模型簇中的原子分别按 (111), (100) 和 (110) 界面的最高对称性 C_{3v} , C_{4v} 和 C_{2v} 来区分其不等价原子, Hamiltonian 基元与重迭积分的计算采用三维 Diophantine 数值积分, 每个原子均取 500 个积分点, Ag 原子和 Ni 原子的数值基函数分别取 $1s-5p$ 和 $1s-4p$, 自洽迭代收敛至电荷数移动小于 10^{-4} .

2.2 键重叠聚居数 Q_{AB} 分析

对于上述 9 种不同的结构模型, 本文分别就其中心 Ag 原子 (对于 Ag 自由表面模型与 Ag-Ni 界面模型, 则为 Ag 表面与界面中心原子) 与其最近邻原子间的键合强度 (bond overlap population) 进行了分析, 其 Q_{AB} 分析结果如表 1 所示.

从表 1 可见, 对于 Ag 晶体, 不论是密排面 (111) 面还是以低指数 (100) 面构造的模型簇, Ag 层内与层间原子间单键的键合强度相差不多 (以 (110) 面构造的模型簇, 层内与层间 Ag 原子间键合强度差别较大, 主要是由于计算时对称性选择的缘故), $Q_{Ag-Ag} \approx 0.12-0.13$. 从原子体系的电子结构来看, 粒子的熔化即是固态原子体系中原子间价键的破坏 (熔断), 进而形成了液态原子体系新的原子价键电子结构, 由于液态原子体系原子价键键长通常比固态原子体系中的要长, 故液态体系中原子价键的键强因而减小, 而键强的减弱表明体系处于较高的能态结构, 因此熔化需要从外界吸收热量. 对于完整晶体, 由于最

邻近原子间价键键强相同, 晶体的熔化将是其 12 个 (110) 方向共价键因原子受热振动而熔断^[1]的共同行为, 因此其熔化方式只能是均匀熔化, 热力学上表现为熔体的均匀形核^[6].

对于 Ag 晶粒的自由表面, 由于表面原子与晶内原子周围环境不同, 表面原子层内与层间价键强度发生改变. 由表 1 可见, 层面内 Ag 原子间的 Q_{Ag-Ag} 比层面间的 Q_{Ag-Ag} 大, 说明表层 Ag 原子间结合较强, 原子间单键的熔断表层内将比表层间需要更大热应力.

表 1 Ag-Ag 与 Ag-Ni 单键重叠聚居数 Q_{AB}
Table 1 Bond overlap population Q_{AB} of Ag-Ag atoms and Ag-Ni atoms

Model cluster	Q_{Ag-Ag}		Q_{Ag-Ni} (at interface)	
	Intra-layer	Inter-layer		
Surface	(110)	0.24030	0.17527	
	(100)	0.18498	0.15036	
	(111)	0.18007	0.14499	
Crystal	(110)	0.16325	0.12536	
	(100)	0.12691	0.12371	
	(111)	0.12814	0.12702	
Interface	(110)	0.11238	0.12516	0.18622
	(100)	0.13609	0.14020	0.18171
	(111)	0.13270	0.13778	0.18241

对于 Ag-Ni 半共格界面, 比较可见界面层内 Ag 原子间的 Q_{Ag-Ag} 最小, 界面层间 Q_{Ag-Ag} 次之, 界面层 Ag-Ni 原子间 Q_{Ag-Ni} 最大, 这表明低熔点金属粒子 Ag 的熔化在 Ag-Ni 界面层受到了高熔点金属 Ni 的影响, 界面层内 Ag 原子间单键的熔断变得相对容易. 至于自由表面和共格界面的熔化方式, 除了涉及价键强度这一主要因素外, 还要受到其价键数目的影响, 以下将分别予以详细讨论.

2.3 Ag 自由表面的预熔化特性

既然团簇结构的结合强度不仅与原子间单键的键合强度有关, 还受到其价键数目的影响, 为此本文进一步计算了上述不同结构模型中 Ag 自由表面层内与层间的部分键合强度 (partial bond order, 分键级 PBO), 以及不同结构模型中 Ag 原子的总键合强度 (total bond order, 总键级 TBO), 见图 2.

根据图 2, 首先对不同结构模型进行比较, 可见层间原子 PBO 存在如下变化趋势: $(110) > (100) > (111)$, 说明 (110) 面层间解理断裂较难, (100) 面次之, (111) 面最弱. 对于层内原子的 PBO, 这 3 个表面的变化趋势却

正好相反; $(111) > (100) > (110)$, 表明 (111) 表面的内聚力最强, (100) 面次之, (110) 面最弱. 由此可见, (111) 自由表面的结构稳定性最好, (100) 面次之, (110) 面最差. 再与晶内结构相比较 (图 2b), 可见表面原子的总键合强度 TBO 由于价键数目少而明显低于晶内原子的 TBO, 这样自由表面原子将易于受热振动而偏离平衡位置甚至逸出, 因而熔化所需热驱动力相对较小, Ag 表面将先于晶内熔化, 热力学上呈现出预熔化现象. 若从总键合强度的相对比值 $(TBO_s - TBO_c) / TBO_c$ 来估算: (110), (100) 与 (111) 的预熔化程度分别为 16.2%, 10.4% 和 1.0%, 可见密排 (111) 面预熔程度较小, 几乎与晶内熔化温度相当.

进一步分析其原因, 从图 2a 可见, 由于不同自由表面模型中表面原子价键数目与层间原子价键数目不同 (见图 1), 不仅不同表面模型之间 Ag 原子的 PBO 出现了差异, 而且同一表面模型中 Ag 原子层内与层间 PBO 也相差较大. 对于密排 (111) 自由表面, 由于 (111) 面的价键数是层间价键数的 2 倍, 因而 Ag 原子间的 PBO 层内远大于层间; 对于低指数 (100) 自由表面, 虽然层内与层间价键数目相同, 但由于表面原子内聚力的作用, 因而其 PBO 层内仍比层间的大; 而对于 Ag 的 (110) 自由表面, 由于层内比层间价键数目差一半, 虽然层内 Ag 原子间的键合强度比层间大, 但其作用已不明显, 因而其 PBO 层内反比层间还小. 这样, 对于 fcc-Ag 自由粒子的奇异面 (111) 和 (100) 面, 由于层内原子的 PBO 大于层间原子的 PBO, 层间熔断所需克服原子间作用力相对较小, 因此自由表面的熔化将首先从层间开始分层脱落, 然后层内原子间价键逐个熔断, 熔化呈“分层熔化”. 而对于 (110) 自由表面, 由于层内原子的 PBO 小于层间原子的 PBO, 即层间熔断所需克服原子间作用力相对较大, 分层脱落不易, 表面的熔化将主要是层内原子间价键的逐个熔断, 熔化将为“台阶式”. 台阶式熔化由于始于表层单个原子的熔化行为, 相对较易, 因而熔点较低; 而分层熔化的起始因涉及层面原子的集体行为, 相对较难, 因而熔点较高. 所以, (111) 面有时被称为“不熔面”或“过热面”, 而 (100) 面与 (110) 面则被称为“不完全熔化面”与“预熔化面”^[9].

2.4 Ni 包覆 Ag 粒子共格界面的过热特性

对于 Ni 包覆 Ag 粒子的熔化情况, 由于包覆层 Ni 原子间价键强度 ($Q_{Ni-Ni} \approx 0.2$) 比包覆粒子 Ag 原子间价键强度大, 包覆层不会为包覆 Ag 粒子提供预熔化的热熔核, 包覆 Ag 粒子的熔化只可能始于晶内或相界, 为此以下主要针对 Ag-Ni 界面上 Ag 原子的分键合强度 PBO 和总键合强度 TBO 进行分析.

采用与 Ag 自由表面同样的分析方法, 本文也求出了上述不同结构模型中 Ag-Ni 半共格界面 Ag 界面层内与层间及 Ag-Ni 界面间的 PBO, 以及不同结构模型中界面

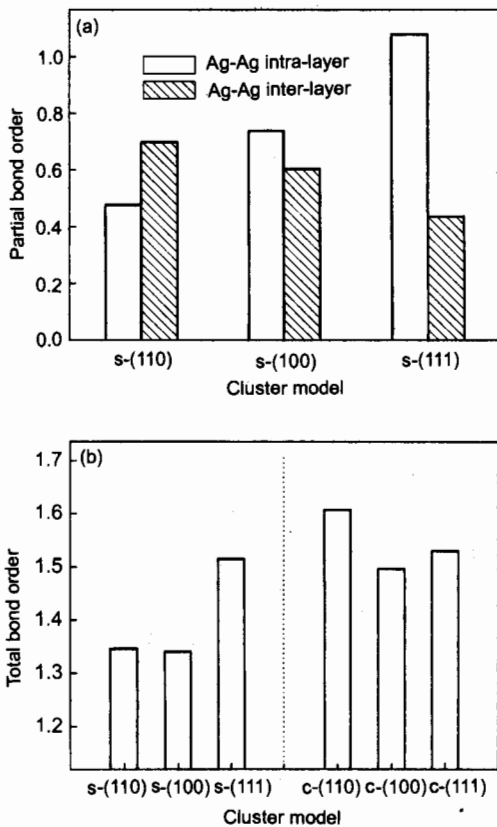


图 2 Ag 自由表面模型中原子层内和层间的部分键合强度以及 Ag 自由表面和晶体模型中原子的总键合强度

Fig.2 (a) Partial bond order (PBO) of intra-layer and inter-layer in Ag free surface cluster model
(b) Total bond order (TBO) in Ag free surface cluster model and Ag crystal cluster model (s—surface, c—crystal)

层内 Ag 原子的 TBO(见图 3). 由图 3a 可见, 不同界面模型的总键合强度 TBO 存在如下的变化趋势: (100) 大于 (111) 及 (110), 且 (111)≈(110). 表明 (100) 界面的结构稳定性较好, (111) 与 (110) 界面相对较差. 对比晶内结构的 TBO 发现: 由于受包覆层高强、高熔点 Ni 原子价态结构的影响, 界面原子的总键合强度均比晶内原子的高, 固态界面 Ag 原子结构组态的液化所需热驱动力相对较大, 包覆 Ag 粒子的熔化相界将滞后于晶内, 因此热力学上呈现出过热现象. 与自由表面一样, 若也按总键合强度的相对比值 $(TBO_i - TBO_c)/TBO_c$ 来估算 Ag-Ni 共格界面的过热程度, 则 (110), (100) 与 (111) 的过热程度分别为 9.1%, 22.3% 和 14.7%. 虽然本文计算所用簇模型未经结构弛豫, 绝对数值有一定误差, 但其相对大小应能反映不同界面过热的变化趋势, 即 (100) 界面的过热程度最高, (111) 界面次之, (110) 界面最小. 可见, 与 Ag 自由表面不同, Ag-Ni 界面过热程度最高的面并非密排 (111) 面, 而是另一低指数奇异面 (100) 面.

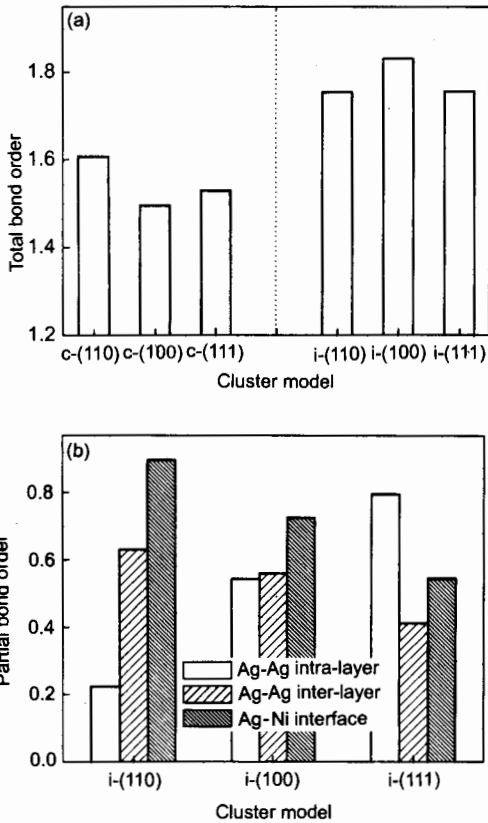


图 3 Ag-Ni 界面和 Ag 晶体模型中 Ag 原子的总键合强度以及 Ag-Ni 界面模型中原子层内和层间的部分键合强度

Fig.3 (a) Total bond order (TBO) in Ag-Ni interface model cluster and Ag crystal cluster model
(b) Partial bond order (PBO) of intra-layer and inter-layer in Ag-Ni interface cluster model
(c—crystal, i—interface)

进一步比较 Ag-Ni 相界 Ag 原子层内与层间及相间分键合强度的大小, 由图 3b 可见, 不同界面模型中层内 Ag 原子的 PBO 也存在和 Ag 自由表面一样的变化趋势, 即: (111)>(100)>(110), 这表明 Ag-Ni 半共格界面的表面内聚力仍然是: (111) 面最强, (100) 面次之, (110) 面最弱. 同时, Ag 原子层间与 Ag-Ni 界面层间 PBO 的变化趋势也与自由表面相同, 即: (111)<(100)<(110), 表明这 3 个面层间解理断裂的难易程度并未发生改变. 由此也可看出, Ag-Ni 共格界面的结构稳定性也是 (111) 面最好, (100) 面次之, (110) 面最差, 故通常看到镶嵌粒子的形状成截角八面体^[12,17]. 考虑到晶面解理所需消耗的能量即为表面能 γ , 这样从 Ag-Ni 界面层间 PBO 的变化趋势不难推测这 3 个面 γ_{Ag-Ni} 的大小顺序: $\gamma_{(111)} < \gamma_{(100)} < \gamma_{(110)}$. 可见, 仅从界面能的大小以及差值^[13]来推测镶嵌粒子的过热行为并不可靠.

通过对不同模型中 Ag 原子层内与层间 PBO 的进一步比较分析发现: 由于受包覆层高强、高熔点 Ni 原子价态结构的影响, 在 Ag-Ni 界面上, 不仅 Ag 原子层间 PBO 在 Ni 晶体一侧明显比 Ag 晶体一侧大, 而且不同模型中 Ag 粒子层内与层间 PBO 的相对大小也发生了变化. 界面层 Ag-Ni 原子间强的结合限制了包覆 Ag 粒子表面的预熔化, 因而包覆 Ag 粒子呈现过热现象, 而包覆 Ag 粒子层内与层间 PBO 的相对变化则使其熔化方式和过热程度发生改变. 对于 (111) 与 (110) 界面, 除了 Ag 原子层间 PBO 在 Ag 晶体一侧变得比 Ni 晶体一侧小外, 层内与层间 PBO 的相对大小与自由表面一样, 分别为: (111) 界面, 层内 PBO> 相间 PBO> 层间 PBO; (110) 界面, 相间 PBO> 层间 PBO 大于层内 PBO. 因此, (111) 界面 Ag 粒子的熔化方式仍然为“分层熔化”, 而 (110) 界面 Ag 粒子的熔化还是“台阶式熔化”. 而对于 (100) 界面, 由于相间 PBO 大于层间 PBO 及层内 PBO, 且层间 PBO 约等于层内 PBO, Ag 粒子层内与层间结合强度相同, 分层与台阶式熔化同时进行, 由于这种熔化方式涉及到较多的原子和原子价键数目, 致使其熔化温度相对较高.

3 结论

(1) 自由 Ag 粒子表面的“预熔化”行为源于表面原子“悬键”数目较多, 而镶嵌 Ag 粒子界面的“过热”则可归因于半共格界面 Ag-Ni 原子间强的键合作用.

(2) 不同晶面指数 Ag 粒子自由表面的预熔化程度为: (110)>(100)>(111), 且 (111) 表面的预熔化程度很小, 几乎与晶内熔化温度相当; 而镶嵌 Ag 粒子共格界面的过热程度则为: (100)>(111)>(110).

(3) 自由 Ag 粒子的预熔化方式分别是: (111) 和 (100) 表面“分层熔化”, (110) 表面“台阶式熔化”; 而

镶嵌 Ag 粒子共格界面的过热熔化方式为: (111) 界面“分层熔化”, (110) 界面“台阶式熔化”, (100) 界面则是分层和台阶式熔化同时进行。

参考文献

- [1] Lindemann F A. *Z Phys*, 1910; 11: 609
- [2] Born M. *J Chem Phys*, 1939; 7: 591
- [3] Tallon J L. *Nature*, 1989; 342: 658
- [4] Fecht H J, Johnson W L. *Nature*, 1989; 334: 50
- [5] Okamoto P R, Lam N Q, Rchn L E. *Solid State Phys*, 1999; 52: 1
- [6] Lu K, Li Y. *Phys Rev Lett*, 1998; 80: 4474
- [7] Jin Z H, Gumbsch P, Lu K, Ma E. *Phys Rev Lett*, 2001; 87: 055703
- [8] Kofman R, Cheyssac P, Aouaj A L, Lereah Y, Deutscher G, Ben-David T, Penisson J M, Bourret A. *Surf Sci*, 1994; 303: 231
- [9] Bilalbegović G. *Phys Rev*, 1997; 55B: 16450
- [10] Pluis B, Denier van der Gon A W, Frenken J W M, van der Veen J F. *Phys Rev Lett*, 1987; 59: 2678
- [11] Sheng H W, Ren G, Peng L M, Hu Z Q, Lu K. *Philos Mag Lett*, 1996; 73: 179
- [12] Sheng H W, Ren G, Peng L M, Hu Z Q, Lu K. *J Mater Res*, 1997; 12: 119
- [13] Conchmann P R, Jesser W A. *Nature*, 1977; 269: 481
- [14] Schmidt M, Kusche R, von Issendorff B, Haberland H. *Nature*, 1998; 393: 238
- [15] Schmidt M, Kusche R, Kronmueller W, von Issendorff B, Haberland H. *Phys Rev Lett*, 1997; 79: 99
- [16] Daeges J, Gleiter H, Perepezko J H. *Phys Lett*, 1986, 119A: 79
- [17] Zhong J, Zhang L H, Jin Z H, Sui M L, Lu K. *Acta Mater*, 2001; 49: 2897
- [18] Ellis D E, Painter G S. *Phys Rev*, 1970; 2B: 2887
- [19] Rosen A, Ellis D E, Adachi H, Averill F W. *J Chem Phys*, 1976; 65: 2639
- [20] Adachi H, Tsukada M, Satoko C. *J Phys Soc Jpn*, 1978; 45: 875
- [21] Tanaka I, Mizuno M, Nakajyo S, Adachi H. *Acta Mater*, 1998; 46: 6511
- [22] Mulliken R S. *J Chem Phys*, 1955; 23: 1833