MTA DOKTORA ÉRTEKEZÉS ÖSSZEFOGLALÁS (TÉZISFÜZET)

SZÉN NANOSZERKEZETEK MINT TRIVALENS POLIGONHÁLÓZATOK MODELLEZÉSE ÉS MECHANIKAI SZIMULÁCIÓI

Zsoldos Ibolya

Széchenyi István Egyetem Anyagismereti és Járműgyártási Tanszék

Győr, 2010

1. A KUTATÁSI TEVÉKENYSÉG RÖVID ÖSSZEFOGLALÁSA

Elméleti, modellező és szimulációs módszerek kidolgozásával és alkalmazásaival sikerült eredményeket elérni a következő területeken.

Síkbeli poligonrendszerek topológiai vizsgálatai (Zsoldos 2004a)

Síkbeli poligonrendszerek közül a trivalens poligonhálózatok topológiai vizsgálataival foglalkoztam, ahol az egy csomópontban találkozó élek száma mindig 3. Az Aboav-törvény tartalmi jelentését fogalmaztam meg.

Az Aboav-törvény adott poligon (sejt) oldalélszáma (n) és az első koordinációs szférájának az átlagos oldalélszáma (m(n)) között állapít meg összefüggést (Aboav 1983):

$$nm(n) = (\langle n \rangle - a)n + \langle n \rangle a + \mu_2$$

Az '*a*' paraméterre (az Aboav-paraméter), a rendszerre jellemző állandó, μ_2 az oldalélszám szórásnégyzete. A topológiai törvény megfelelő változata a háromdimenziós poliéderrendszerek esetében is ismert (Fortes 1995, Zsoldos 2001).

Az Aboav-törvény közelítő jelleggel érvényes, és megmutatták azt is, hogy egyes esetekben az eredeti formulától eltérő, módosított, több paraméteres összefüggésekkel jobb közelítésekhez lehet jutni (Réti 2005, Hilhorst 2006).

Vizsgálataim eredményeként arra a megállapításra jutottam, hogy Aboav eredeti formulájának egyértelműen megfogalmazható tartalmi jelentése van, amely alkalmas a poligonhálózatok topológiai jellemzésére, osztályozására aszerint, hogy milyen sejtkapcsolódások vannak jelen a rendszerben. Megmutattam, hogy az Aboav-paraméter az eredetileg talált 0,5 és 1,8 közötti értékkészlettel szemben jóval szélesebb skálán vehet fel értékeket, és ennek megfelelően szétválaszthatók a különböző jellemző sejtkapcsolódásokat tartalmazó poligonhálózatok fajtái. Az új tudományos eredmények közül az első két tézis vonatkozik erre a témakörre.

Szén nanocső elágazások modellezésének előzményei

A szilárd testekben előforduló legerősebb kémiai kötés a grafitrétegen belül a szénatomok közötti sp² kémiai kötés, ennél fogva a ma ismert legerősebb szilárd anyag a grafén. A grafénből való származtatás (grafén szalag feltekerése) miatt a szén nanocsövek azok az anyagok, amelyeknek a szilárdsága megközelíti a grafénre meghatározott elméleti maximumot (Demczyk 2002, Yu 2000a-b). Az extrém magas szilárdság szokatlanul nagymértékű rugalmassággal párosul.

Elektromos viselkedés szempontjából eltérő viselkedésű nanocsövek csatlakozásai között keresik intenzíven a félvezető eszközök új, nanoméretű családjának az alapelemeit. Viszonylag korán sikerült mérni, hogy egy cikkcakk és egy karosszék típusú ágból álló szén nanocső könyök egyenirányító diaódaként képes viselkedni (Yao 1999). Szén nanocső Y-elágazásokon is egyenirányító jelleget mértek (Papadopoulos 2000) és számoltak (Andriotis 2001c) az első próbálkozásokkal. Később a kvantumfizikai alapokon nyugvó Greenfüggvényes számításokkal megmutatták, hogy léteznek olyan Y-elágazások, ahol az áramfeszültség karakterisztika már aszimmetriát mutat (Andriotis 2002, Ponomareva 2003). Végül mérésekkel is igazolták az Y-elágazások esetében az aszimmetrikus áram-feszültség görbét (Bandaru 2005). Az aszimmetrikus áram-feszültség karakterisztikák megtalálásával bebizonyosodott, hogy a szén nanocső Y-elágazások alkalmasak nemcsak nanoméretű kapcsolók, hanem nanoméretű logikai áramkörök alapelemeinek a kialakítására is (Wei 2008). Az ipari méretekben is alkalmazható előállítási módszereket intenzíven keresik (Li 1999, Kónya 2002, Heyning 2005, AuBuchon 2006, Yao 2007, Fu 2009).

Mind a mechanikai, mind pedig az elektromos viselkedés tanulmányozása a szén nanoszerkezetek esetében nagymértékben támaszkodik elméleti kutatási eredményekre. A különböző számításoknak, analíziseknek és szimulációknak az alapja minden esetben a szerkezet néhányszor száz vagy ezer atomból álló modellje, amelynek az elkészítése nehézkes és hosszadalmas. A modellezés jelentőségét hangsúlyozza az is, hogy folyamatosan újabb szén nanoszerkezetek létezésére és előnyeire hívják fel a figyelmet, amelyek esetében a szerkezetet első alkalommal döntően modellek segítségével mutatják meg.

Nanocső elágazások származtatása síkbeli trivalens sejtrendszerekből (Zsoldos 2004b, 2005)

Síkbeli poligonmintázatokból definiált csempék használatán alapuló szerkesztési módszert dolgoztam ki, amely alkalmazható a legkülönbözőbb homogén és heterogén szén nanocső elágazások modelljének megszerkesztéséhez. Az A1 és B1 típusú alapcsempéket a legkisebb átmérőjű, félgömbszerű alakzattal lezárható karosszék és cikkcakk típusú szén nanocsövekhez definiáltam (1.ábra). Hogyha a csempék mintázatában a csomópontok helyére az sp²-es kémiai kötéssel definiált szénatomokat képzelünk, majd a kötési energiák minimalizálásával kiszámítjuk az egyensúlyi helyzetet (relaxáltatjuk a szerkezetet), akkor kiadódik a megfelelő karosszék és cikkcakk típusú szén nanocső csatlakozás.



1.ábra Az A1 és B1 típusú csempék és a relaxált szerkezetek. A hétszögek szürkék, a hatszögek fehérek, az ötszögek feketék.

Az A1 és B1 csempékkel és módosulataikkal különböző elágazások szerkesztéseit mutattam meg. Ezek közül az összefoglalásban a 2. ábrán mutatok példát heterogén tetraéderes elágazás szerkesztésére, amely három cikkcakk és egy karosszék típusú szén nanocsőből áll. A szerkesztés alapja az, hogy az A1 és B1 csempék külső hétszöges gyűrűinek módosításával különböző módosított csempék definiálhatók. A példa esetében az A1 és B1 csempéken 3 hétszöget hatszöggel helyettesítettem, ezekkel történik a szerkesztés a 2. ábra szerint. Hogyha a nyíllal jelzett éleket egymáshoz illesztjük, akkor a többi él illeszkedésével és a kiadódó rések kitöltésével, relaxáció után megkapjuk a jobb oldalon látható szerkezetet. A papírmodellen vastag vonallal a csempék kontúrvonalai láthatók. Mivel az ábrán látható csempék kontúrvonala megegyezik, ezért a szerkezetben bármelyik ág cserélhető ellentétes típusú nanocsővel.



2. ábra Három cikkcakk és egy karosszék típusú szén nanocső elágazás szerkesztése

A csempék módosulatainak definiálásához az A1 és B1 csempe hétszöges külső gyűrűinek módosítását engedtem meg, a hétszöges gyűrű módosításával ugyanis a hatszöges nanocső palást és a lezárásra szolgáló ötszöges félgömbszerű alakzat megmarad. Példát mutattam arra, hogy ha a csempék mintázataiba újabb hatszögeket illesztünk be, akkor a módszer alkalmas nagyobb átmérőjű nanocsövek elágazásainak szerkesztéséhez.

A csempés módszer bemutatásával a korábban ismert síkbeli nanocső elágazások (ahol a nanocsövek tengelyei egy síkban vannak) fajtáit rendszereztem, a térbeli elágazások (ahol a nanocsövek tengelyei nincsenek egy síkban) létezését első alkalommal, ezzel a módszerrel mutattam meg. A harmadik, negyedik és ötödik tézis vonatkozik erre a területre.

A jelen értekezésben bemutatott csempés szerkesztési módszer definiálása után Emre Tasci, az Ankarai Egyetem fizikusa volt az, aki a nagyobb átmérőjű csövek rendszeréhez kidolgozta a csempés szerkesztések algoritmusait (Tasci 2007a). Emellett mechanikai hajtások nanomodelljeit dolgozta ki ugyancsak a csempés módszer alkalmazásával (Tasci 2007b).

Tetszőleges kiralitású Y-elágazás modelljének létrehozásához általános módszert dolgoztak ki (László 2007), az alakra vonatkozó matematikai analízist alkalmaztak a szénatomok Descartes-koordinátáinak a meghatározására (Graovac 2008).

Nanocsövek csatlakoztatása szén nanostruktúrákhoz (Zsoldos 2007)

A csempés módszer alkalmazását megmutattam cikkcakk és karosszék típusú szén nanocsöveknek tetszőleges szén nanoszerkezethez való illesztésénél is. A csatlakozás helyénél ki kell jelölni azt az alakzatot, amelynek a kontúrvonala megegyezik valamelyik A1, B1 vagy módosított csempe kontúrvonalával. A csempének a kijelölt helyre való behelyettesítése után relaxációs algoritmus futtatásával megkapjuk a csatlakozás reális szerkezetét. A hatodik tézist fogalmaztam meg ebből a fejezetből.

Szén nanocső Y-elágazások hálózatai (Zsoldos 2010)

Ez az alapjában szintén modellező munka az első lépés annak bizonyításához, hogy tetszőleges síkbeli poligonmintázat megszerkeszthető szén nanocsövekből álló hálózatként. A síkbeli poligonrendszerek közül a trivalens rendszerek esetét vizsgáltam. Ha ezeket a rendszereket szén nanocsövek hálózatából akarjuk megszerkeszteni, akkor az élek helyére egyenes szén nanocsövek kerülnek, a csomópontokat pedig szén nanocső Y-elágazásokkal kell helyettesíteni. Ennek megfelelően az Y-elágazások alapvető kapcsolásait mutattam meg. Két-, három-, vagy többágú nanokörök halmazát definiáltam, ahol két, három vagy több Y-

elágazást kapcsolunk össze olyan módon, hogy egy adott Y-elágazásnak két-két ága csatlakozik a szomszédos Y-elágazás(ok) egy-egy ágához, a harmadik ág pedig szabadon van hagyva. Az alapkapcsolások halmazának definiálása – a szén nanocső elágazások rendkívül érdekes elektromos viselkedése miatt – motiválhat újabb elméleti és kísérleti kutatási témákat nanoáramkör tervezési célokkal.

Azt találtam, hogy az alapkapcsolásoknál a szén nanocső Y-elágazásokból és könyökökből szerkesztett nanokörökben a beépített elemek számára a szerkezetbe való beépítés geometriai kényszert jelent, és emiatt a nanokörökbe épített elemek stabilitása csökken a szabadon hagyott Y-elágazások és könyökökhöz képest. Optimálisan megválasztott elemekből, azaz helyesen megválasztott tengelyszögekkel rendelkező Y-elágazásokból és könyökökből szerkesztett nanokörök esetén a stabilitás csökkenése 1%-nál kisebb. A hetedik, nyolcadik és kilencedik tézisben fogalmaztam meg az eredményeket.

Atomi erők számítása a módosított Brenner-potenciál segítségével (Zsoldos 2009)

Az egyenes szén nanocsövek szakítószilárdságának elméleti úton történő meghatározásához molekuláris mechanikai módszereket használtak. Ezeknek az alapja az, hogy az atomok közötti kötőerőket a kémiai kötéseket leíró energetikai potenciálfüggvények deriváltjából lehet számítani. A legtöbb ilyen számításnál az empirikus Brenner-potenciált alkalmazták (Belytschko 2002, Mylvaganam 2004, Duan 2007, Fu 2008, Agrawal 2008).

A Brenner-formulákban adott atomtávolságnál egy töréspont van a potenciálfüggvényen, amely problémát jelent a vele járó hirtelen meredekség változással együtt a potenciálfüggvény deriváltján, az atomi erő függvényen. Itt ugyanis nem lehet fizikai jelenséggel megmagyarázni a hirtelen meredekségváltozást, de emellett az atomi erő maximális értékének a meredekségváltozás miatt a többszörösére való növekedését sem.

A töréspont és a hirtelen meredekségváltozás kikerülésére egy korrekciós függvényt vezettem be. A korrekciós függvényt a sok kényszerfeltétel miatt szabad paraméterekkel rendelkező polinomokkal adtam meg, amelynek az előnye részben az, hogy a polinomok könnyen deriválhatóak és könnyen kezelhetők számítógépes algoritmusokban, részben pedig, hogy a szabad paraméterek segítségével az atomi erő függvény illeszthető mérési eredményekhez. Megmutattam a korrekciós tényezővel módosított Brenner-potenciálfüggvénynek az atomi erők számításához szükséges helyes lefutását. Az egyenes szén nanocsöveken méréssel meghatározott szakítószilárdsághoz (Demczyk 2002, Yu 2000a, Yu 2000b) végeztem el az illesztést.

Az atomi erők számításához kialakított módosított Brenner-potenciálos módszerrel algoritmust készítettem szén nanoszerkezetek húzásszimulációjára. Az új algoritmust szén nanocső elágazások hálózatán futtattam, és ennek az eredményeivel megmutattam, hogy az egyenes szén nanocsövek egyetlen irányban (tengelyirányban) mutatott kimagasló szilárdsági tulajdonságai a nanocső hálózatok esetében egyidejűleg több orientációs irányban detektálhatók.

A különböző nanoszerkezetek esetében a különböző mechanikai terhelésvizsgálatok ma még vagy nagyon költségesen, de nem elég pontosan, vagy egyáltalán nem is végezhetők el. A húzásszimuláció algoritmusának a jelentősége tehát nagy, hiszen költséges, vagy nem kivitelezhető vizsgálatokat lehet velük kiváltani. A tízedik és a tizenegyedik tézis foglalja össze az eredményeket.

2. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

- **1. tézis:** Síkbeli trivalens poligonhálózatok esetében az Aboav-paraméter a korábban meghatározott intervallumnál szélesebb intervallumban vehet fel értékeket: $-\infty \le \alpha \le 4$.
- 2. tézis: Síkbeli trivalens poligonhálózatok esetében az Aboav-paraméter alkalmas a rendszer jellemzésére a domináló sejtkapcsolódások fajtái szerint:
 - Az Aboav-paraméter negatív értékei esetében az átlagosnál kisebb és az átlagosnál nagyobb oldalélszámú poligonok elkülönült csoportokban jelennek meg.
 - Az Aboav-paraméter pozitív értékei esetében a kis és a nagy oldalélszámú poligonok egymás mellett, váltakozva, láncokban vagy hálózatokban rendeződve jelennek meg.
- 3. tézis: Síkbeli trivalens poligonhálózatokból definiált A1 és B1 típusú csempék és módosulataik alkalmasak homogén és heterogén szén nanocső elágazások modelljeinek a szerkesztésére. Megfelelő A1, A2 típusú, vagy módosított csempék alkalmas illesztésével, a mintázat relaxáltatása után kapjuk meg adott nanocső elágazásnak a modelljét.
- **4. tézis:** Az A1 és B1 csempéknek az alábbi szabályok szerint kialakított módosulatai alkalmazhatók a csempés szerkesztési módszerben:

- A külső hétszöges gyűrűben bármely hétszög(ek) helyettesíthető(k) hatszö(ek)kel.
- A külső gyűrűből bármelyik poligon elhagyható.
- A mintázat közé újabb hatszögek illeszthetők, amellyel nagyobb átmérőjű nanocsövekből álló elágazások szerkesztése oldható meg.
- 4. tézis: Különböző új térbeli (ahol a nanocsövek tengelyei nincsenek egy síkban) homogén és heterogén szén nanocső elágazás szerkezeteket, például tetraéderes és oktaéderes szén nanocső elágazásokat definiáltam a csempés szerkesztés módszerével.
- **5. tézis:** Tetszőleges szén nanoszerkezet modellben az A1, B1 csempék vagy módosulataik kontúrvonalával azonos kontúrvonallal rendelkező alakzat helyére behelyettesíthető egy cikkcakk vagy karosszék típusú nanocső csatlakozás.
- 6. tézis: Szén nanocső Y-elágazások és könyökök elemeiből a síkbeli trivalens poligonhálózatok alapegységeinek megfelelő úgynevezett nanokörök szerkeszthetők. Két-, három és többágú nanokörök halmazát definiáltam Y-elágazások összekapcsolásából úgy, hogy minden elágazásban két ág kapcsolódik a szomszédos elágazás nanocsöveihez, a harmadik ág mindig szabad.
- 7. tézis: Szén nanocső Y-elágazások és könyökök számára a nanokörökbe való beépítés geometriai kényszert jelent, amelynek következtében a nanokörökbe épített elemek stabilitása gyengül a magára hagyott elemek stabilitásához képest. Optimálisan megválasztott elemekből, azaz helyesen megválasztott tengelyszögekkel rendelkező Y-elágazásokból és könyökökből szerkesztett nanokörök esetén a stabilitás mértékének, azaz az egy kémiai kötésre jutó átlagos kötési energiának a csökkenése 1%-nál kisebb.
- 8. tézis: Közel azonos átmérőjű egyenes szén nanocsövekből álló nanoköröknél a cikkcakk típusú nanocső ágak arányának növekedésével az egy kémiai kötésre jutó átlagos kötési energia értéke is növekszik.
- **10.tézis:** A kémiai kötések energiáját meghatározó Brenner-potenciálnak az atomi erők számítására való használatánál a levágó függvény (cut-off function) helyett az alább definiált f(r) korrekciós függvény alkalmazásával az eredeti potenciálfüggvényen jelenlévő nemkívánatos töréspont, valamint a derivált függvényen megjelenő nemkívánatos hirtelen meredekségváltozás kiküszöbölhető:

$$f(r) = \begin{cases} f_1(r), & R_1 \le r \le R_T \\ f_2(r), & R_T < r \le R_2 \end{cases}$$

ahol r az atomtávolság, R₁=1,45Å, R₂=2 Å. Az $f_1(r)=a_0+a_1r+a_2r^2+a_3r^3+a_4r^4$ és $f_2(r)=b_0+b_1r+b_2r^2+b_3r^3$ polinomokban szereplő paraméterek az alábbi rekurzív formulákkal számíthatók:

$$b_{3} = \frac{f_{T}}{2(R_{2} - R_{T})^{3}}$$

$$a_{4} = \frac{3f_{T} - 3 - d(R_{T} - R_{1}) + 6b_{3}(R_{2} - R_{T})^{2}(R_{T} - R_{1})}{(R_{T} - R_{1})^{4}}$$

$$a_{3} = \frac{4a_{3}[R_{T}^{3} - R_{1}^{3} - 3R_{T}^{2}(R_{T} - R_{1})] + 3b_{3}(R_{2} - R_{T})^{2} + d}{3(R_{T} - R_{1})^{2}}$$

$$b_{2} = -3b_{3}R_{T}$$

$$a_{2} = -3a_{3}R_{T} - 6a_{4}R_{T}^{2}$$

$$a_{1} = d - 2a_{2}R_{1} - 3a_{3}R_{1}^{2} - 4a_{4}R_{1}^{3}$$

$$b_{1} = d - 2b_{2}R_{2} - 3b_{3}R_{2}^{2}$$

$$a_{0} = 1 - a_{1}R_{1} - a_{2}R_{1}^{2} - a_{3}R_{1}^{3} - a_{4}R_{1}^{4}$$

$$b_{0} = -b_{1}R_{2} - b_{2}R_{2}^{2} - a_{3}R_{2}^{3}$$

A fenti formulákban R_T és f_T szabad paraméterek, amelyek mérési eredmények felhasználásával határozhatók meg.

11.tézis: A húzásszimulációs vizsgálatok arra engednek következtetni, hogy az egyenes szén nanocsövek egyetlen irányban (tengelyirányban) mutatott kimagasló szilárdsági tulajdonságai a nanocső hálózatok esetében egyidejűleg több orientációs irányban detektálhatók.

Hivatkozások

Aboav D.A., Metallography 16: 265-273, 1983.

Agrawal P.M., Sudalayandi B.S., Raff L.M., Komanduri R., Comput. Mater. Sci. 41:450-456, 2008.

- Andriotis A.N., Menon M., Srivastava D., Chernozatonskii L.A., Phys. Rev. Lett. 87(6):066802-1, 2001c.
- Andriotis A.N., Menon M., Srivastava D., Chernozatonskii L.A., Phys. Rev. B 65:165416, 2002.

AuBuchon J.F., Chen L.H., Daraio C, Jin S.H., Nanoletters 6:324-328, 2006.

Bandaru P.R., Daraio C., Jin S., Rao A.M., Nature Mater. 8:1-4, doi:10.1038/nmat1450, 2005.

Belytschko T, Xiao S.P., Schatz G.C., Ruoff R., Phys. Rev. B 65:235430-1-8, 2002.

- Demczyk B.G., Wang Y.M., Cumings J., Hetman M., Han W., Zettl A., Ritchie R.O., Mater. Sci. and Eng. A 334:173-178, 2002.
- Duan W.H., Wang Q., Liew K.M., He X.Q., Carbon 45:1769-1776, 2007.
- Fortes M.A., Journal of Physics A 28(4):1055, 1995.
- Fu C.X., Chen Y.F., Jiao J.W., Sci. in China E 50:7-17, 2008.
- Fu D., Zeng X., Zou J., Quian H., Li X., Xiong X., Materials Chemistry and Physics 118:501-505, 2009.
- Graovac A., Laszlo I., Pisanski T., Match-Communications in Mathematical and in Computer Chemistry 60:917-926, 2008.
- Heyning O.T., Bernier P., Glerup M., Chemical Physics Letters 409:43-47, 2005.
- Hilhorst H.J., Journal of Physics A Math. and General 39 (23):7227-7243, 2006.
- Kónya Z., Vesselényi I., Niesz K., Kukovecz A., Demortier A., Fonseca A., Delhalle J., Mekhalif Z., Nagy J.B., Koós A.A., Osváth Z., Kocsonya A., Biró L.P., Kiricsi I., Chemical Physics Letters 360(5-6):429-435, 2002.
- László I., Phys. Stat. Sol. B 244(11):4265-4268, 2007.
- Li J., Papadopoulos C., Xu J.M., Nature 402:253, 1999.
- Liu J., Rinzler A.G., Dai H., Hafner J.H., Bradley R.K., Boul P.J., Lu A., Iverson T., Shemilov K., Huffman C.B., Rodriguez-Macias F., Shon Y.S., Lee T.R., Colbert D.T., Smalley R.E., Science 280:1253, 1998.
- Mylvaganam K., Zhang L.C., Carbon 42:2025-2032, 2004.
- Papadopoulos C., Rakitin A., Li J., Vedeneev A.S., Xu J.M., Phys. Rev. Lett. 85(16):3476, 2000.
- Ponomareva I., Chernozatonskii L.A., Andriotis A.N., Menon M., New Journal of Physics 5:119.1–119.12, 2003.
- Réti T., Zsoldos I., Mater. Sci. Forum 473-474:389-398, 2005.
- Tasci E., Erkoc S., J. Nanosci. Nanotech. 7 (4-5): 1653-1661, 2007a.
- Tasci E., Ph.D. Thesis, The Graduate School of Natural and Applied Sciences of Middle East Technical University, Ankara, 2007b.
- Yao Z., Postma H.W.Ch., Balents L., Dekker C., Nature 402:273, 1999.
- Yao Z.Y., Zhu X., Li X.X., Xie Y., Carbon 45:1566-1570, 2007.
- Yu M.F., Lourie O., Dyer M.J., Moloni K., Kelly T.E., Ruoff R.S. Science, 287:637-640, 2000a.
- Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R., Phys. Rev. Lett., 84:5552-5555., 2000b.
- Wei D., Liu Y. Advanced Materials 20:2815-2841, 2008.
- Zsoldos I., Szendrő P., Watson J., Szász A., Computational Materials Science 20:28, 2001.
- Zsoldos I., Réti T., Szász A., Computational Materials Science 29:119-130, 2004a.
- Zsoldos I., Kakuk Gy., Réti T., Szász A., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 12:1-16, 2004b.
- Zsoldos I., Kakuk Gy., Janik J., Pék L., Diamond Rel. Mater., 14(3-7):763-765, 2005.
- Zsoldos I., Kakuk Gy., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng, Vol. 15 pp 739-747, 2007.
- Zsoldos I., László I., Carbon 4(7):1327-1334, 2009.
- Zsoldos I., J. of Geom. and Phys. ID: GEOPHY1761, DOI 10.1016/j.geomphys.2010.09.008, 2010.