

LAMMPS を用いた酸素欠陥型アルミナのレーザー堆積計算

Calculation of Laser Deposition of Oxygen-Deficient Alumina Using LAMMPS

中野 正勝¹⁾

Masakatsu Nakano¹⁾

Abstract: Reducing alumina in lunar and asteroid regolith would enable local procurement of aluminum and oxygen without transporting resources from Earth. Therefore, a method has been proposed to reduce alumina by ablating it with a laser and selectively depositing aluminum on an alumina plate from dissociated aluminum and oxygen gas. In the experiment, the alumina ratio in the deposited layer increased and the alumina reduction was partially successful, but the specific conditions under which the alumina ratio is most increased or to what extent the alumina ratio can be increased have not been clarified. In this study, the deposition of aluminum from laser ablation plume was analyzed by molecular dynamics simulation to clarify the conditions for increasing the aluminum ratio in the deposited layer. The simulation results showed that the Al/O ratio in the deposited layer increased by deposition, which was more effective at higher recovery plate surface temperatures. These results suggest that the Al/O ratio can be increased by repeatedly sublimating the deposited layer by laser ablation and depositing its ablation plume. Additionally, the upper limit of the Al/O ratio that can be enriched by this method was also estimated from molecular dynamics simulations and a simple analytical model.

Keywords : Alumina Reduction, Laser Deposition, Oxygen-Deficient Alumina, Molecular Dynamics Simulation

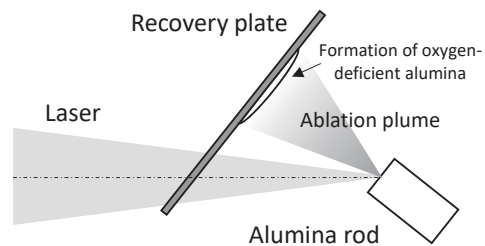
1. 緒言

アルミナは、月、惑星・小惑星の表面を覆う砂「レゴリス」に含まれている資源であり[1], 酸素を取り除いて還元することによって建築材料や輸送機械の製造に利用可能なアルミニウムを得ることができる。また、還元によって分離された酸素は生物の生命維持活動に活用可能な物質として利用することができる。

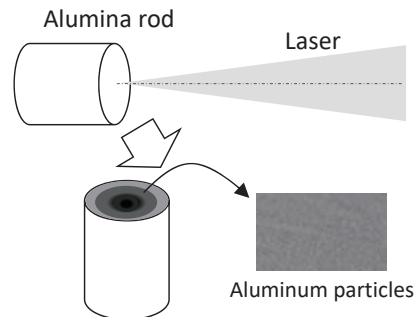
現在、商用的にアルミナを還元する方法にホール・エルー法があるが、炭素や氷晶石を別に必要とし、月面における基地開発など、地球からそれらの物資を輸送するコストが無視できない場合には、代替となるアルミナの還元法の確立が必要となる。このような中で考案されている手法が高出力レーザーを用いたアルミナの還元である[2-6]。具体的方法として、アルミナ表面にレーザーを照射することで高温のアブレーションプラズマを生成してアルミニウムと酸素を乖離させ、乖離状態のままアルミニウムの回収を行うものであり、その実現に向けた研究成果も出始めている。具体例としてレーザーを用いた2つのアルミナの還元実験について示す。

山田らの実験では、図 1(a)のようにレーザーでアルミナ Al_2O_3 をアブレーションさせて、温度 3850 K のアブレーションプラズマを生成し、常温のアルミナの回収板に堆積させた。堆積物の組成を調査したところ $\text{Al}_2\text{O}_{1.8-2.1}$ の酸素欠陥型アルミナが生成していることが確認された[4]。すなわち、レーザー照射によるアブレーション生成物の堆積（以下、

レーザー堆積と呼ぶ）によりアルミニウムの比率が向上したことになる。LAMMPS を用いた中野の分子動力学計算によれば、同様のアルミニウム比の向上が確認されている[5]。



(a) 酸素欠陥型アルミナの堆積[4]



(b) アルミニウムの析出[6]

図 1 レーザーを用いたアルミナ還元の実験。

1) 東京都立産業技術高等専門学校 ものづくり工学科 航空宇宙工学コース

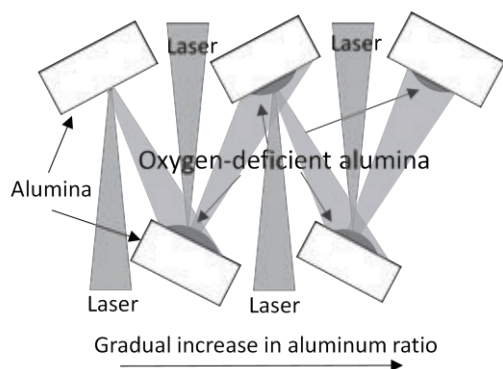


図 2 レーザー堆積の繰り返しによる酸素欠陥型アルミニウムのアルミニウム比率の向上.

田中らの実験では、図 1(b)のように、アルミナの棒の先端にレーザーを照射して酸素欠陥型アルミナを生成した後、照射を止めたところ、冷却速度が 600–800 K/s となった箇所、アルミニウムの微小な球体が多数生成することが確認された[6]。これは急速冷却時にアルミナ表面の格子構造を維持するために酸素欠陥型アルミナ中の余剰のアルミニウムが不純物として析出し、不均一核生成を起こしたと説明されている。これはすなわち、酸素欠陥型アルミナを 933–2300 K (アルミニウムの融解温度 933 K, アルミナの融解温度 2300 K) のアルミナ回収板に衝突させ、回収板を 600–800 K/s で急速冷却することでアルミニウムを析出させることが可能であることを示している。

以上の 2 つの方法を組み合わせ、最初にレーザー堆積の繰り返し (図 2) によって酸素欠陥型アルミナのアルミニウム比率を段階的に高め、その後、レーザー加熱と適切な冷却速度によってアルミニウムの不均一核生成を起こすことでアルミニウムの効率的な回収を実現することが可能と考えられる。この手法の効率化に貢献するのは、前半部のレーザー堆積時にどれだけアルミニウム比率を上げることができるかである。これまでの分子動力学シミュレーションから、 $Al/O = 0.67\text{--}2$ の範囲の酸素欠陥型アルミナのガスをアルミナ表面に衝突させた場合に、アルミニウムの比率が上がることが判明している[5]。一方で、このシミュレーション結果に基づいて実施した外挿計算から、レーザー堆積によるアルミニウム比率の向上には上限が予想されている。

本研究では、このモデルによる予想の確認を行い、酸素欠陥型アルミナのアルミニウム比率を回収版への堆積によってどこまで向上可能かについて分子動力学計算ソフトの LAMMPS によるシミュレーションによって調査した。

2. 実験の説明

2.1 分子動力学シミュレーション

アルミナの表面にアルミニウムと酸素原子が堆積する様子を原子レベルでシミュレーションする。解析には分子動力学シミュレーションソフト LAMMPS を使用し、シミュレーション結果の可視化には OVITO を用いた[7,8]。

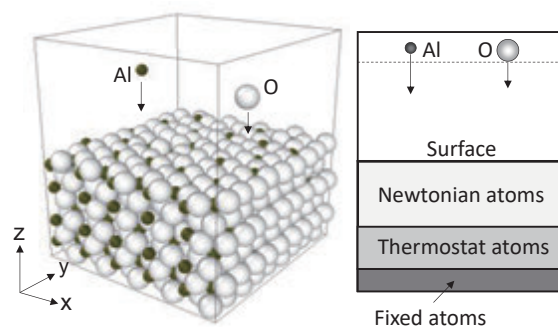


図 3 LAMMPS 使用時の計算領域と原子層配置.

アルミナを対象とした分子動力学計算は様々な目的のためにこれまでも行われてきた[9–13]。分子動力学計算を行うためには原子間のポテンシャルが必要で、2 体ポテンシャル、イオンポテンシャル、多体ポテンシャル、強束縛ポテンシャル等、用途に応じて種々のポテンシャルが使用されるが[14–19]、2 体ポテンシャルでは表面構造が急激に変化するような場所を扱うには不向きとされる。本研究では、アルミナのポテンシャルの比較研究の結果を参考とし、可変電荷ポテンシャルの一つで酸化金属用に開発された 2 次モーメント強束縛ポテンシャルを用いることとした[18, 19]。

シミュレーションでは、図 3 に示す解析領域を対象とする。解析領域 ($24 \text{ \AA} \times 25 \text{ \AA} \times 26 \text{ \AA}$) の上半分がアブレーションルームの存在する空間で下半分が回収板表面の原子層に相当する。回収板表面層を模擬するために Al/O 比が 2/3 になるようにアルミニウム原子 720 個、酸素原子 1080 個、合計 1900 個の原子を配置した。これらアルミニウムと酸素原子は 3 つの層に配置される。最下層には Fixed atoms (固定原子) を配置して原子層を固定する。固定原子層の上には Thermostat atoms (温度調節原子) を配置し、Langevin thermostat を用いた NVT アンサンブル (原子数 N , 体積 V , 温度 T を一定とした状態) により原子層の温度を保つ。実験では原子が入射してから次の原子が入射するまでの間に回収板表面層温度が回復すると考えられるが、古典分子動力学法を用いる LAMMPS が対象とするフェムト秒からピコ秒の時間スケールでこれを再現するのは困難であるため、Thermostat atoms 領域を設けて強制的に温度を制御した。また、温度制御層の上には Newtonian atoms (自由原子) を配置し、入射してくるアルミニウム原子と酸素原子との間で自由に相互作用をさせた。解析領域の x 方向と y 方向は周期境界条件を与えた。

シミュレーションにおいては、回収板表面層温度を常温を模擬する 300 K と入射粒子により加熱された状態を模擬する 2000 K の 2 つの場合についてシミュレーションを実施した。アブレーションルーム温度についてはアルミナが酸化する 3000 K から電離する 10000 K の範囲でシミュレーションを行った。なお、アブレーションルームの成分は Al, O, AlO, Al₂O, Al₂O₃ 等が挙げられ、Al/O 比、温度、圧力等により変化し、レーザー加熱を行う際には、レーザーのスポット径や照射部の余熱による影響も生じてくる[20]。しかしなが

ら、本研究では生成したアルミニウムと酸素原子をいかに分離回収するかに興味があることから、ここでは主たる成分をアルミニウムと酸素原子に限定してこの2種類のみを考慮する。アブレーションプラズマ中の原子の速度分布は、アブレーションプラズマの温度で定まる Maxwell-Boltzmann 分布で与えた。

アブレーションプラズマの Al/O 比については、Al/O 比が 2/3 (Al_2O_3) の場合と、酸素欠陥型アルミナをレーザーアブレーションした場合を想定して Al/O 比が 1, 2, 3, 4, 5, 6, 10 の 8 つの場合をシミュレーションしている。シミュレーションにおいては、解析領域の上部からアルミニウム原子を 1 ps に 1 個放出し、指定した Al/O 比になるような時間間隔で酸素原子を放出した。この放出間隔は Thermostat atoms 領域の温度を一定値に制御できる範囲の中で経験的に短い値を与えている。放出時のアルミニウム原子と酸素原子の x, y 座標はランダムに与え、その動きは NVE アンサンブル条件 (原子数 N , 体積 V , エネルギー E を一定とした条件) のもとで計算した。LAMMPS における原子の軌道追跡は、エネルギーを保存しつつ比較的 low 負荷な計算ができる特徴を持つ Velocity-Verlet 法で行われており、本解析ではタイムステップを 1 fs として計算を行った。

アルミニウム原子と酸素原子のうち、回収板表面層で反射され解析領域の上部境界にまで達したものは取り除いて回収板表面に堆積しなかったものとする。堆積層の Al/O 比は回収板表面層に堆積したアルミニウム原子と酸素原子の個数の比から算出する。堆積原子数と Al/O 比の収束の様子については結果と考察の節の冒頭に具体例を示す。

2.2 レーザー堆積における Al/O 比の簡易解析モデル

図2のようなレーザー堆積を分子動力学計算のみで行っていくには計算コストがかかる。特に Al/O 比が大きくなるにつれて、計算の精度を保つために比率の少ない O 原子を十分な数だけ放出しようとするとならば多数の Al 原子を放出することになるからである。具体的には、堆積層の Al/O 比の変動が $x\%$ となる堆積原子の総数は

$$N = \{1 + (\text{Al/O})_{SL}\} \frac{100-x}{x} \quad (1)$$

と見積もることができるため、Al/O 比の大きいシミュレーションでは堆積原子の総数も多くなることから計算コストが増加することが分かる。そこで、堆積層の Al/O 比を既に得られたシミュレーション結果から推算可能な外挿モデルを作成することができれば有用である。

ここで、アブレーションプラズマ中のアルミニウム原子と酸素原子が回収板上の同種の原子に衝突した場合に付着する確率 (付着率) をそれぞれ $p_{\text{Al-Al}}$ と $p_{\text{O-O}}$ とし、アルミニウム原子と酸素原子が衝突して付着する確率を $p_{\text{Al-O}}$ としてモデル化する。アルミニウムのイオン半径 r_{Al} (= 68 pm) と酸素のイオン半径 r_{O} (= 126 pm) を用いてそれぞれの衝突断面積を πr_{Al}^2 と πr_{O}^2 と概算し、アブレーションプラズマ中の原子が回収板上のアルミニウム原子と酸素原子に付着する確率を衝突断面積に比例するものとして求める

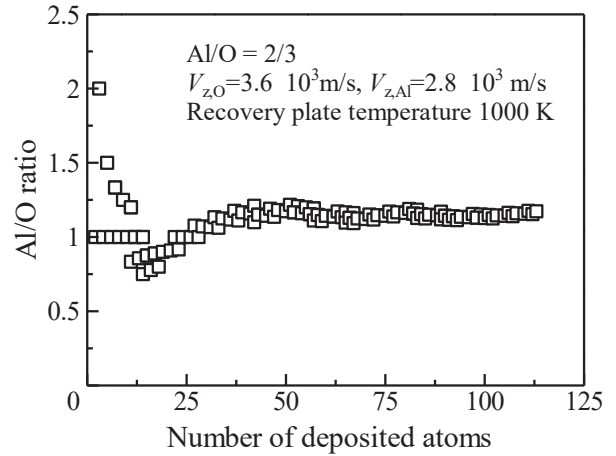


図4 堆積層の Al/O 比の変化。

と、アブレーションプラズマの Al/O 比を x とし、回収板表面層の Al/O 比を y とした場合について、

$$y: 1 = x \times (p_{\text{Al-Al}} \pi r_{\text{Al}}^2 + p_{\text{Al-O}} \pi r_{\text{O}}^2) : (p_{\text{Al-O}} \pi r_{\text{Al}}^2 + p_{\text{O-O}} \pi r_{\text{O}}^2) \quad (2)$$

が堆積層表面で成り立つ必要がある。ここで、式(2)の左辺は堆積層表面の Al/O 比を示し、右辺は堆積層表面に付着する原子の Al/O 比を示す。この式は y に関する 2 次方程式となるために解析的に x から y を決定することができる。

$$y = \frac{\frac{p_{\text{Al-Al}}}{p_{\text{Al-O}}} x - \frac{p_{\text{O-O}}}{p_{\text{Al-O}}} \left(\frac{r_{\text{O}}}{r_{\text{Al}}}\right)^2 + \sqrt{\left\{\frac{p_{\text{Al-Al}}}{p_{\text{Al-O}}} x - \frac{p_{\text{O-O}}}{p_{\text{Al-O}}} \left(\frac{r_{\text{O}}}{r_{\text{Al}}}\right)^2\right\}^2 + 4 \left(\frac{r_{\text{O}}}{r_{\text{Al}}}\right)^2 x}}{2} \quad (3)$$

すなわちアブレーションプラズマの Al/O 比から回収板上の堆積層の Al/O 比を容易に推定することが可能である。また、式(2)または(3)において $y=x$ と置くことで、堆積層の Al/O 比をアブレーションプラズマの Al/O 比よりも大きくすることのできる分岐点 (Break Even Point: BEP) を求めることができ、これは

$$(\text{Al/O})_{\text{BEP}} = \frac{1-p_{\text{O-O}}/p_{\text{Al-O}}}{1-p_{\text{Al-Al}}/p_{\text{Al-O}}} \left(\frac{r_{\text{O}}}{r_{\text{Al}}}\right)^2 \quad (4)$$

となる。なお、これらの式中の付着率はアブレーションプラズマの温度や回収板表面層温度などから決まるパラメータであり、LAMMPS を用いたシミュレーション結果から決定する必要がある。

3. 結果および考察

3.1 Al/O 比の収束性について

本論文では回収板表面層に堆積したアルミニウム原子と酸素原子の個数の比から Al/O 比を算出している。図4に堆積層の Al/O 比の収束の一例を示す。図中に示されたシミュレーション条件では、Al/O 比の変動は堆積層の原子が 50 個を超えた時点で有意に小さくなり、堆積原子の総数が 100 個程度になるとほぼ一定値になっている。この時点で式(1)から算出される Al/O 比の変動は 2% である。

本論文では計算時間の制約上、堆積原子の個数が 120-180 になった時点でシミュレーションを打ち切っている。打ち切り時点における堆積層の Al/O 比の最大変動は式(1)から評

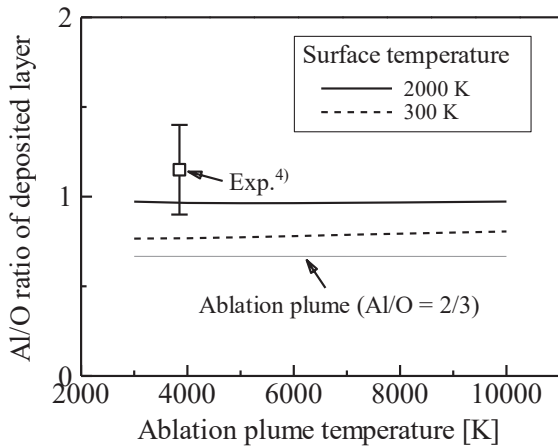


図5 Al/O 比 = 2/3 のアブレーションプラズマを堆積させた場合における堆積層の Al/O 比。

値できるので、その変動を堆積原子の個数の制約から発生する不確かさとして評価するものとした。具体的に、今回のシミュレーションにおける Al/O 比 = 2/3, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 10 における不確かさは、それぞれ 2.0%, 2.0%, 2.6%, 2.9%, 3.4%, 4.8%, 4.5%, 8.3% であった。

3.2 実験との比較によるモデルの妥当性確認

シミュレーションモデルの妥当性の確認のために、実験値との比較を行った。実験では、温度 3850 K のアルミナ (Al/O 比 2/3) を温度 300 K の回収板に堆積させた結果、堆積物の組成が $\text{Al}_2\text{O}_{1.8-2.1}$ となっている[4]。

実験条件を再現するために、アルミニウムと酸素原子を 2:3 の割合になるように解析領域の上部から放出し、アルミナの回収板表面層に堆積させるシミュレーションを行った。アブレーションプラズマの温度に対して得られた堆積層の Al/O 比の関係を図 5 に示す。アブレーションプラズマの温度が 3850 K の場合、回収板表面層温度 300 K と 2000 K において、それぞれの Al/O 比は 0.77 ($\text{Al}_2\text{O}_{2.6}$) と 0.96 ($\text{Al}_2\text{O}_{2.1}$) であった。回収板表面層の温度 2000 K のシミュレーション結果が、実験値のエラーバーの範囲で一致している一方で、表面層温度 300 K のシミュレーション結果は過小評価となっている。実験時の回収板表面層の温度はアブレーションプラズマの堆積によって高温になっていると推定され、仮にガスと回収板内部の中間温度の 2100 K 程度であると評価すればシミュレーション結果は妥当である。一方で、定量的で正確なシミュレーションを実施する上では、回収板表面層温度の高精度な推定が必要であり、その値の決定は今後の課題である。

3.3 回収板温度およびガス温度の影響

堆積層の Al/O 比が何から影響を受けるかについて、回収板表面層温度とアブレーションプラズマの温度を変えて調査する。図 5 は Al/O 比が 2/3 のアブレーションプラズマの結果であるが、アブレーションプラズマ中のアルミニウムと酸素が全て回収板表面に堆積すれば堆積層の Al/O 比は 2/3 (図中の灰色の細実線)を示すはずである。しかしながら、得

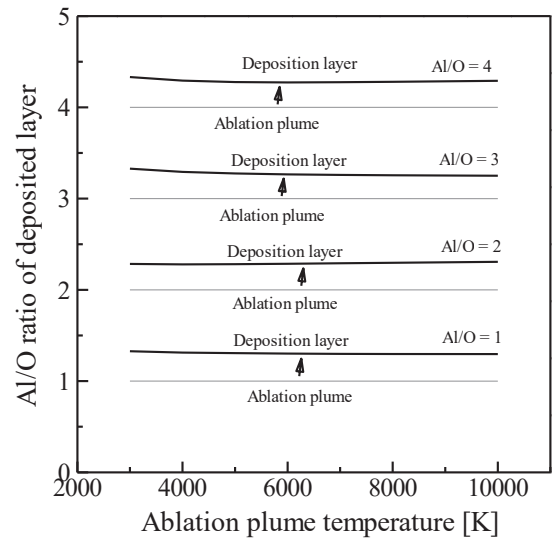


図6 Al/O 比 = 1-4 のアブレーションプラズマを堆積させた場合における堆積層の Al/O 比。

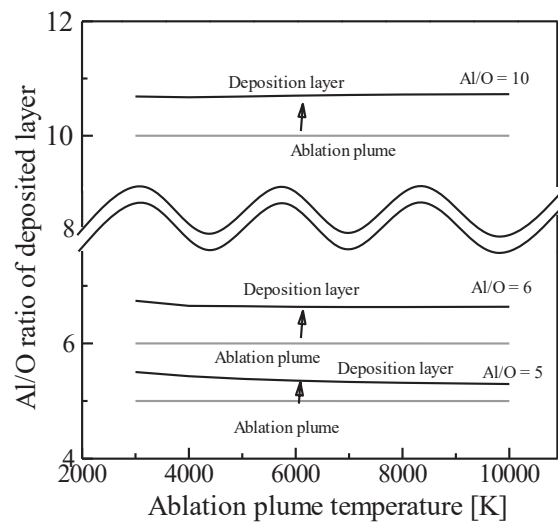


図7 Al/O 比 = 5-10 のアブレーションプラズマを堆積させた場合における堆積層の Al/O 比。

られた堆積層の Al/O 比は 2/3 を超えている。また、図 5 から回収板表面層の温度が高いものほど堆積層の Al/O 比は大きい一方で、アブレーションプラズマの温度変化に対する堆積層の組成変化はわずかである。仮にアブレーションプラズマの温度が 8000 K となっても、回収板表面層温度 300 K における Al/O 比は 0.79 ($\text{Al}_2\text{O}_{2.5}$)、回収板表面層温度 2000 K では 0.97 ($\text{Al}_2\text{O}_{2.1}$) とアブレーションプラズマ温度 4000 K の場合と比較してほとんど変化しない。

これらの結果から、堆積層における Al/O 比を上げるには回収板の表面層温度を高く保つことが重要であり、アブレーションプラズマの温度については、アルミニウム原子と酸素原子が十分に解離している温度にすればよいことが分かる。

3.4 Al/O 比の向上可能範囲

同様の解析を、酸素欠陥型アルミナのアブレーションプラズマ (Al/O 比 = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 10) に対して実施した結果を

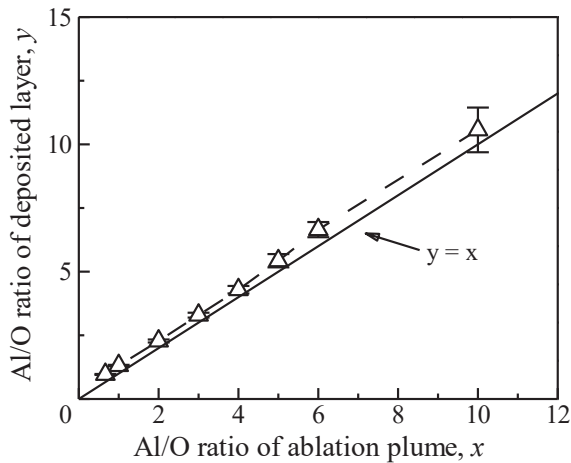


図8 Al/O比ごとのレーザー堆積効果.

図6,7に示す. 回収板表面層の温度については2000 Kとした. 図6,7から, Al/O比=1-10の範囲のアブレーションプラームに対して得られた傾向は, 堆積層において Al/O比が増加し, アブレーションプラーム温度の影響はほとんど見られないという共通したものとなった.

アブレーションプラーム温度に対する Al/O比の依存性がほとんど見られないことが分かったので, アブレーションプラーム温度を山田らの実験[4]と同様の4000 Kとした上で, 図6,7の結果をアブレーションプラームの Al/O比に対する堆積層の Al/O比として図示したものを図8に示す. シミュレーション結果には, 第3.1節で説明したように, シミュレーション打ち切り時点の堆積原子数から予測される Al/O比の変動をエラーバーとして記載している.

図8から, 全ての Al/O比のプロット点が $y > x$ となる領域に位置しており, 今回シミュレーションを実施した Al/O比=2/3-10の範囲においては, レーザー堆積で Al/O比が向上することを示す. この範囲において, 回収板表面層にレーザー堆積したものを再び無駄なくレーザーアブレーションを経て堆積させることができれば, 段階的に Al/O比を上げることが可能である.

なお, Al/O比=10の場合にはエラーバーの下限が $y < x$ の領域にあることから, 不確定さも含めてシミュレーション結果が $y > x$ となるにはより多くの放出原子を用いる必要がある. しかしながら, シミュレーションには Ryzen 7 5700G 10 スレッド使用時において約1か月を費やしており, Al/O比の向上限界を決定するために, より大きい Al/O比で LAMMPSによるシミュレーションを行うことは計算コストの観点から今回断念した. そのため, 第2.1節の外挿モデルを用いて図8のシミュレーション結果をフィッティングして各係数を定め, 式(4)からレーザー堆積法により濃縮可能な Al/O比の限界を概算したところ13.1となった. 先行研究で Al/O比=2/3-2のシミュレーション結果から概算した回収板表面層温度2000 Kにおける Al/O比の限界は3.5であったが[5], 今回の計算からレーザー堆積によってもたらされる Al/O比の上限がより高いところにあったことが判明した.

4. まとめ

月などの衛星や小惑星・惑星の砂「レゴリス」に含まれるアルミナをその場で還元することにより, 建築材料や輸送機械の製造に利用可能なアルミニウムと生物の生存に必要な酸素を獲得することができる. 地球上で商業上最も利用されているホール・エルー法も, 資源の限られる惑星や衛星上では有効ではなく, その場で利用可能な新しいアルミナの還元法が必要である. 中でも, レーザー堆積法とアルミニウムの不均一核生成の組み合わせによるアルミナの還元は一つの有望な手段である.

本研究では, アルミナをアブレーションさせ, そのガスを回収板に当てて堆積層を形成するレーザー堆積法によってどの程度まで Al/O比を向上させることができるかどうか, 分子動力学計算ソフト LAMMPS を用いてシミュレーションを実施した. シミュレーションには2次元モーメント強束縛ポテンシャルを用いた. シミュレーション結果から, 堆積層の温度は高いまま維持した方が Al/O比を向上させることが可能であり, アブレーションプラーム温度そのものは堆積層の Al/O比にはほとんど影響を与えないことが確認された. また, レーザー堆積を繰り返すことで, Al/O比で10までアルミニウムの比率を上げることが可能であることをシミュレーションにより確認した. 簡易的な外挿モデルから推定される Al/O比向上限界は13程度である.

参考文献

- [1] J. J. Papike, S. B. Simon & J. C. Laul : The Lunar Regolith: Chemistry, Mineralogy, and Petrology, *Rev Geophys*, 20, 1982, pp.761-826.
- [2] M. Matsui, N. Fukuji, M. Nakano et al. : Alumina Reduction by Laser Sustained Plasma for Aluminum-Based Renewable Energy Cycling, *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 5, 2013, 039101.
- [3] S. Tanaka, S. Yamada, R. Soga et al. : Alumina Reduction by Laser Ablation Using a Continuous-Wave CO₂ Laser toward Lunar Resource Utilization, *Vacuum*, 167, 2019, pp.495-499.
- [4] S. Yamada, S. Tanaka, K. Komurasaki et al. : Characterization of Reduction Products Generated by Laser Ablation of Alumina, *Journal of IAPS*, 26, 2018, pp.33-38 (in Japanese).
- [5] Masakatsu Nakano : Estimation of Composition of Deposited Products from Alumina Ablation Plume Using Molecular Dynamics Simulation, *Journal of Applied Plasma Science*, Vol.29 No.2 2021, pp.51-58 (in Japanese).
- [6] Seiya Tanaka, Naoki Tanaka, Kimiya Komurasaki et al. : Aluminum Particle Production on Alumina Rod Surface by Continuous-Wave Laser Ablation, *Materials Chemistry and Physics* 278 (2022) 125557
- [7] S. Plimpton : Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 117, 1995, pp.1-19.
- [8] A. Stukowski : Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Modelling*

- and Simulation in Materials Science and Engineering, 18, 2009, 015012.
- [9] J. Houska : Pathway for a Low-Temperature Deposition of α -Al₂O₃: a Molecular Dynamics Study, Surface and Coatings Technology, 235, 2013, pp.333–341.
- [10] P. Vashishta, R. K. Kalia, A. Nakano et al. : Interaction Potentials for Alumina and Molecular Dynamics Simulations of Amorphous and Liquid Alumina, Journal of Applied Physics, 103, 2008, 083504.
- [11] Y. Li, R. K. Kalia, A. Nakano et al: Size Effect on the Oxidation of Aluminum Nanoparticle: Multimillion-Atom Reactive Molecular Dynamics Simulations, Journal of Applied Physics, 114, 2013, 134312.
- [12] H. Mei, Q. Liu, L. Liu et al. : Molecular Dynamics Simulations of the Microstructure of the Aluminum/Alumina Interfacial Layer, Applied Surface Science, 324, 2015, pp.538–546.
- [13] V. S. Kortov, S. V. Zvonarev, A. N. Kiryakov et al. : Dosimetric Phosphor Based on Oxygen-Deficient Alumina Ceramics, Radiation Measurements, 90, 2016, pp.196–200.
- [14] J. Sun, T. Stimera, W. E. Hagstona et al. : A Simple Transferable Interatomic Potential Model for Binary Oxides Applied to Bulk and the (0 0 0 1) Surface, Journal of Crystal Growth, 290, 2006, pp.235–240.
- [15] T. Wu, Q. Wang, T. Yao et al. : Molecular Dynamics Simulations of the Structural Properties of Al₂O₃-Based Binary Systems, Journal of Non-Crystalline Solids, 435, 2016, pp.17–26.
- [16] K. Choudhary, T. Liang, A. Chernatynskiy et al. : Charge Optimized Many-Body (COMB) Potential for Al₂O₃ Materials, Interfaces, and Nanostructures, Journal of Physics: Condensed Matter, 27, 2015, 305004.
- [17] Devon Romine, Ridwan Sakidja : Modeling Atomic Layer Deposition of Alumina Using Reactive Force Field Molecular Dynamics, MRS Advances, 7, pp.185–189 (2022)
- [18] N. Salles, O. Politano, E. Amzallag et al. : Molecular Dynamics Study of High-Pressure Alumina Polymorphs with a Tight-Binding Variable-Charge Model, Computational Material Science, 111, 2016, pp.181–189.
- [19] Qinqin Xu, Nicolas Salles, Jérôme Chevalier et al. : Atomistic Simulation and Interatomic Potential Comparison in α -Al₂O₃ : Lattice, Surface and Extended-Defects Properties. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, IOP Publishing, 2022. fihal-03594921f
- [20] S. Tanaka, S. Yamada, K. Komurasaki et al. : Laser Spot Size and Preheating Effects on Alumina Reduction Using Laser Ablation, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 34, 2020, pp.733–740.