

УДК 533.924

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИОНОВ НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ

© 2019 г. А. А. Сычева^{1,2,*}, Е. Н. Воронина^{1,2}, Т. В. Рахимова²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет,
119991 Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына,
119991 Москва, Россия

*E-mail: sycheva.phys@gmail.com

Поступила в редакцию 26.07.2018 г.

После доработки 17.08.2018 г.

Принята к публикации 20.08.2018 г.

На примере кристаллического кремния рассмотрено влияние степени пористости и радиуса пор на особенности изменений в морфологии нанопористых материалов, возникающих в результате их физического распыления ионами низких энергий. Методом молекулярной динамики проведено моделирование процесса разрушения пористых структур с различными размерами пор и пористостью. На основании полученных зависимостей потенциальной энергии системы и удельной площади поверхности от температуры определены значения указанных параметров, при которых происходит процесс сжатия пор.

Ключевые слова: low-к материалы, пористость, физическое распыление, моделирование, молекулярная динамика.

DOI: 10.1134/S0207352819070151

ВВЕДЕНИЕ

Изучение физико-химических механизмов ионно-стимулированного травления нанопористых SiOCH-пленок, характеризующихся ультранизкой диэлектрической проницаемостью (low-к диэлектрики) и используемых в качестве межслойного изолятора в сверхбольших интегральных схемах, является одной из актуальных задач современной микро- и нанoeлектроники [1–3]. Современные low-к диэлектрики представляют собой нанопористый аморфный материал на основе SiO_x-матрицы, структура которого может претерпевать существенные изменения под действием ионов. Поэтому задача изучения механизмов физического распыления таких материалов ионами инертных газов низкой (до 200 эВ) энергии является весьма актуальной.

Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики (МД) бомбардировки ионами инертных газов поверхностей различных материалов рассматривается в настоящее время как достаточно надежный инструмент для изучения механизмов такого воздействия. SiOCH-пленки имеют сложную структуру и состав, однако их ключевой структурной особенностью, оказываю-

щей существенное влияние на процессы распыления, является наличие наноразмерных пор. Поэтому на начальном этапе исследование указанных процессов может производиться путем МД-моделирования воздействия ионов на структурные аналоги low-к диэлектриков, которые обладают менее сложным химическим составом. К настоящему времени получен большой объем экспериментальных и теоретических данных о физическом распылении кристаллического кремния ионами инертных газов в широком диапазоне энергий [4–11], поэтому в нашей предыдущей работе [12] в качестве базового материала для нанопористых моделей был выбран кремний. Выполненное в [12] МД-моделирование облучения ионами Ag моделей кремния с различной степенью пористости и радиусом пор показало, что коэффициент распыления нанопористого материала возрастает по сравнению со сплошным, причем указанный эффект проявляется сильнее в случае пор большого радиуса (несколько нанометров). В моделях с порами малого радиуса по мере возрастания дозы облучения происходят значительные структурные изменения, приводящие к схлопыванию расположенных вблизи по-

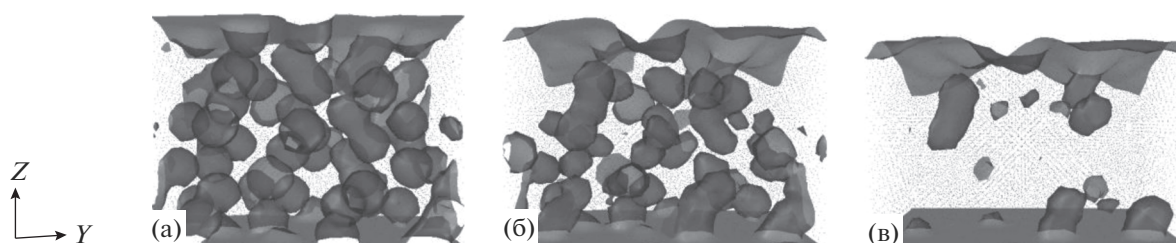


Рис. 1. Структура модели M22/08 при различном времени нагрева: а – до начала нагрева, б – 2500 пкс, в – 3000 пкс.

верхности пор и формированию сплошного аморфного слоя, наличие которого обуславливает снижение интенсивности распыления при большой дозе [12].

С целью изучения механизмов обнаруженных эффектов и анализа влияния параметров (в первую очередь, радиуса пор и степени пористости) рассматриваемых материалов на процессы схлопывания пор в настоящей работе выполнено МД-моделирование изменения структуры нанопористого кремния в результате постепенного нагрева.

МЕТОДОЛОГИЯ

Моделирование методом молекулярной динамики было выполнено с использованием моделей нанопористых структур с радиусом пор R_{pore} в диапазоне 0.8–2.8 нм, созданных на основе модели сплошной поверхности (001) кристаллического кремния размером $10.9 \times 10.9 \times 10.9$ нм, что соответствует $20 \times 20 \times 20$ элементарных ячеек кристаллической решетки Si. Исходная модель была построена таким образом, чтобы поверхность (001) располагалась перпендикулярно оси Z под вакуумным промежутком высотой в 5.4 нм. Вдоль осей X и Y применялись периодические граничные условия, а нижний слой атомов (толщиной в 2.7 нм) был зафиксирован в течение всего процесса моделирования. Для описания взаимодействия между атомами Si использовался трехчастичный потенциал Stillinger–Weber [13], использование которого в МД-моделировании позволяет получить наиболее близкие к экспериментальным значениям параметры кремния.

Для исследования особенностей изменений структуры нанопористых материалов с различными радиусами пор и пористостью в настоящей работе были созданы 7 дополнительных моделей. При построении указанных моделей из исходной модели сплошной поверхности были удалены сферические кластеры атомов, радиус которых был равен R_{pore} . Необходимое число пор, полученных описанным способом, определялось пористостью P . Координаты центров удаляемых структур выбирались случайным образом, исключая какую-либо упорядоченность в их

расположении. В нижних слоях моделей, в которых атомы были зафиксированы, поры не создавались.

На завершающем этапе построения моделей были последовательно проведены процедуры геометрической оптимизации с помощью метода сопряженных градиентов и релаксации с использованием термостата Нозе–Гувера [14] при температуре 300 К в течение 20 пкс. Полученные таким образом пористые структуры M22/08 и M44/28 представлены на рис. 1а и 2а соответственно. Параметры созданных моделей приведены в табл. 1, где использованы следующие обозначения: A – удельная площадь поверхности, ρ – плотность нанопористого материала, ϵ_{pot} – средняя потенциальная энергия системы, приходящаяся на один атом, ϵ_{ex} – избыточная поверхностная энергия, заключенная в объеме 1 нм^3 .

Моделирование нагрева пористой поверхности методом МД осуществлялось в интервале температур 300–4000 К в течение 10000 пкс, что соответствовало низкой скорости нагрева (0.37 К/пкс) и обеспечивало термодинамическое равновесие системы [15]. Время релаксации промежуточных значений температуры было равно 10 фс, а временной шаг интегрирования составил 1 фс. Изменение температуры материала в процессе моделирования имело ступенчатый характер и осуществлялось с помощью термостата Нозе–Гувера, при этом зависимость температуры модели от времени моделирования носила линейный характер.

Расчеты были выполнены с помощью свободного программного пакета LAMMPS для классической молекулярной динамики, разработанного для моделирования больших ансамблей атомов (до 10000000) [16] с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [17]. Визуализацию моделей и анализ структурных изменений были осуществлены с использованием пакета OVITO [18].

Таблица 1. Параметры моделей пористого кристаллического кремния

Модель	Структурный low-к аналог	P , %	R_{pore} , нм	Число пор	A , \AA^{-1}	ρ , г · см $^{-3}$	ϵ_{pot} , эВ/атом	ϵ_{ex} , эВ · нм $^{-3}$
M22/08	CVD 2.5	22	0.8	170	0.12	1.83	-3.98	1.73
M22/11	—	22	1.1	53	0.10	1.83	-4.12	1.03
M22/15	—	22	1.5	21	0.08	1.81	-4.17	0.78
M22/21	—	22	2.1	8	0.07	1.75	-4.19	0.69
M22/28	—	22	2.8	3	0.04	1.87	-4.24	0.49
M44/11	—	44	1.1	100	0.20	1.37	-3.90	1.57
M44/15	—	44	1.5	46	0.16	1.36	-4.00	1.22
M44/21	—	44	2.1	17	0.14	1.25	-4.03	1.02
M44/28	SOG 2.0	44	2.8	8	0.08	1.47	-4.12	0.85

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Ранее в работе [12] были представлены результаты моделирования МД-методом процесса физического распыления ионами Ag низких энергий (100, 200, 500 эВ) двух моделей пористого кристаллического кремния. Указанные модели являются морфологическими аналогами low-к-пленок CVD 2.5 (модель M22/08 в табл. 1) и SOG 2.0 (модель M44/28), применяемых в современном технологическом процессе. Полученные данные свидетельствовали о том, что облучение пористого материала ионами различной энергии может приводить не только к увеличению интенсивности его распыления по сравнению со сплошным материалом, но и к существенным изменениям в морфологии приповерхностных слоев. Однако характер данных изменений в моделях M22/08 и M44/28 значительно различался. Воздействие налетающих ионов в модели M22/08 вызвало существенные изменения структуры верхних слоев пористого материала и привело к образованию сплошного аморфного слоя, толщина которого зависела от энергии Ag. В случае модели M44/28 процесс аморфизации верхних слоев не приводил к уменьшению числа пор, но при этом наблюдалась их существенная деформация в результате физического распыления.

Возможным объяснением полученных результатов могут служить различия в величине заключенной в единице объема избыточной поверхностной энергии ϵ_{ex} , существование которой характерно для наноразмерных частиц и нанопористых материалов [19]. Оценка ϵ_{ex} для рассматриваемых моделей, приведенная в табл. 1, показывает, что для системы с порами малого радиуса и пористостью 22% характерно наличие значительной избыточной энергии, которая может высвобождаться при воздействии ионов Ag и вызывать эффекты схлопывания пор. В то же время для модели с радиусом пор 2.8 нм и пористостью 44% эта энергия примерно в два раза меньше, по-

этому в данном случае аналогичные эффекты не наблюдались. Однако, как можно видеть (табл. 1), параметры указанных структур существенно различаются, что затрудняет выявление связи между исходными значениями пористости модели и особенностями изменений в ее морфологии при физическом распылении. Поэтому в данной работе было выполнено исследование влияния обоих факторов (радиуса пор и пористости) на интенсивность процессов схлопывания пор в нанопористом материале с использованием описанных выше моделей.

В отличие от физического распыления, которое обусловлено в первую очередь столкновительными эффектами, процесс схлопывания пор, происходящий при воздействии ионов, связан с изменением термодинамического состояния системы. В результате указанных изменений из объема материала происходит высвобождение избыточной энергии, которое приводит к изменению его структуры. В настоящей работе для изучения данного эффекта изучался с помощью равномерного нагрева различных моделей пористого материала.

На рис. 1б и 1в, приведены состояния модели M22/08 пористого кремния через 2500 и 3000 пкс после начала моделирования соответственно. Можно видеть, что в течение всего времени нагрева возникают значительные изменения в структуре материала, связанные с изменением числа пор за счет их сжатия. Аналогичные процессы происходили при воздействии ионов Ag на данную модель [12]. Эффекты схлопывания пор наблюдаются при нагреве моделей M22/11, M44/11, M44/15, M44/21.

Результаты, полученные при нагреве остальных моделей (M22/15, M22/21, M22/28, M44/28), показывают, что структурные изменения в них происходят на более поздних этапах моделирования, т.е. при более высоких температурах. Из приведенного на рис. 2б, изображения модели

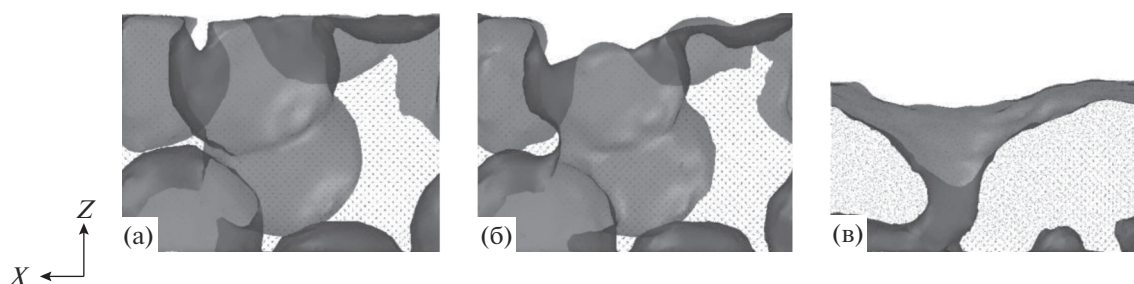


Рис. 2. Структура модели M44/28 при различном времени нагрева: а – до начала нагрева, б – 3000 пкс, в – 3750 пкс.

M44/28 через 3000 пкс после начала нагрева хорошо видно, что морфология поверхности материала близка к исходной, в то время как для M22/08 в тот же момент времени (рис. 1в) большинство пор уже исчезли. Последующий нагрев в течение ~250 пкс приводил к резкому изменению структуры модели M44/28, как видно из рис. 2в, и процесс разрушения пор завершался плавлением материала. Следует отметить, что при моделировании распыления данной модели схлопывания пор не происходило [12].

Количественная оценка изменения числа и размера пор в материале может быть сделана на основе удельной площади поверхности пористой структуры A , численно равной отношению полной поверхности с учетом пор S к объему V , занимаемому сплошным материалом. В табл. 1 представлены значения A для различных поверхностей кремния до применения термостата Нозе–Гувера. Видно, что при фиксированном значении пористости P данная величина растет с уменьшением

радиуса пор, так как их число при этом увеличивается.

Для более детального исследования механизма уменьшения количества пор в различных моделях важно рассмотреть зависимости величины A от температуры модели T . Указанные зависимости представлены на рис. 3 для трех моделей с пористостью 22% и радиусами 0.8 (M22/08), 1.5 (M22/15) и 2.8 нм (M22/28). Из графиков видно, что при нагреве поверхности процесс снижения объема пор происходит неравномерно. Кривые 2 и 3 соответствуют моделям M22/15 и M22/28, для которых описанный выше процесс сжатия пор не происходит (рис. 2). В диапазоне температур 1700–1800 К величина A для этих моделей резко снижается, что соответствует плавлению материала и его переходу в жидкое состояние. В результате структурные различия между M22/15 и M22/28 исчезают, и значения A для них становятся одинаковыми. В отличие от моделей с большими порами для модели M22/08 (кривая 1) поведение зависимости удельной площади поверхности от температуры имеет более сложный характер. При нагреве до 1250 К происходит плавное снижение величины A примерно на 25%, а далее наблюдается ее быстрое уменьшение до 0.04 (примерно на 80% относительно исходного значения). Первый этап соответствует постепенному сжатию пор и снижению их числа (рис. 1б), а второй – их значительно более интенсивному схлопыванию (рис. 1в). В диапазоне температур 1450–1650 К удельная площадь поверхности остается практически постоянной. Так же, как и в рассмотренных выше случаях, резкое уменьшение A при 1700–1800 К соответствует плавлению образовавшейся структуры. Таким образом, как следует из приведенных данных, при фиксированном значении пористости устойчивость структуры к тепловому воздействию определяется радиусом пор.

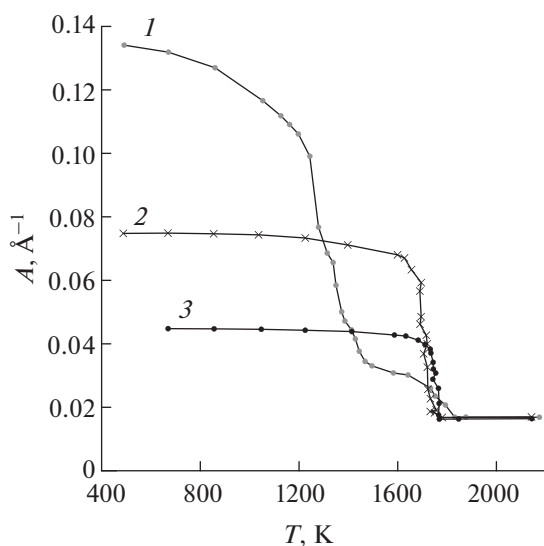


Рис. 3. Зависимость абсолютной величины удельной площади поверхности A моделей M22/08 (1), M22/15 (2), M22/28 (3) от текущего значения их температуры во время нагрева.

Для анализа влияния степени пористости P на изменение морфологии моделей при нагреве удобнее рассматривать относительное изменение удельной площади поверхности A/A_0 , поскольку абсолютные значения A для моделей с разной пористостью, как видно из табл. 1, существенно от-

личаются. Зависимости A/A_0 от температуры T для структур с различными значениями пористости P и радиусами пор R_{pore} представлены на рис. 4. Кривые на рис. 4а соответствуют моделям M22/11 (1) и M44/11 (2), в которых уменьшение числа пор при нагреве являлось результатом их постепенного сжатия. При увеличении температуры от 300 до 1600 К монотонное убывание кривой 2, соответствующей модели M44/11, свидетельствует о равномерном сжатии пор в течение нагрева. Поведение рассматриваемой зависимости для модели M22/11 (кривая 1) в указанном выше диапазоне температур характеризуется значительно менее существенным уменьшением A/A_0 на начальном этапе (до 1500–1550 К), однако далее при повышении температуры примерно на 50 К величина A резко снижается (на 30%), что свидетельствует о повышении интенсивности процесса схлопывания пор. При 1600–1700 К для обеих кривых наблюдается замедление снижения A/A_0 , которое указывает на то, что процесс схлопывания пор завершается, однако для плавления модели необходим ее дальнейший нагрев. Таким образом, для моделей с малым радиусом пор значение пористости P существенно влияет на скорость уменьшения их объема и числа с ростом температуры.

Рис. 4б соответствует моделям M22/28 (кривая 1) и M44/28 (кривая 2), уменьшение числа пор в которых связано с плавлением материала (рис. 2в). Можно видеть, что для рассматриваемых структур зависимости величины A/A_0 от температуры T имеют практически одинаковый вид. Заметное изменение A (на 50–60%) наблюдается на поздних этапах нагрева и происходит при относительно малом изменении температуры (на 50–200 К) в диапазоне, близком к температуре плавления моделей. При этом кривая 2, соответствующая пористости 44%, лежит ниже кривой 1, что указывает на возрастание интенсивности структурных изменений в модели M44/28 по сравнению с M22/28, однако данный эффект проявляется более заметно в случае нагрева моделей с меньшим радиусом пор.

Изменения в морфологии пористых поверхностей, произошедшие в результате их нагрева, отражаются на значении потенциальной энергии получаемой структуры. Однако в связи с тем, что число атомов в модели зависит от пористости P материала (табл. 1), удобнее рассматривать величину средней потенциальной энергии, приходящейся на один атом ϵ_{pot} , которая численно равна отношению потенциальной энергии структуры к числу образующих ее атомов. Эта величина растет с увеличением числа поверхностных атомов (как видно из табл. 1) и, следовательно, при фиксированном значении P возрастает с уменьшением радиуса пор.

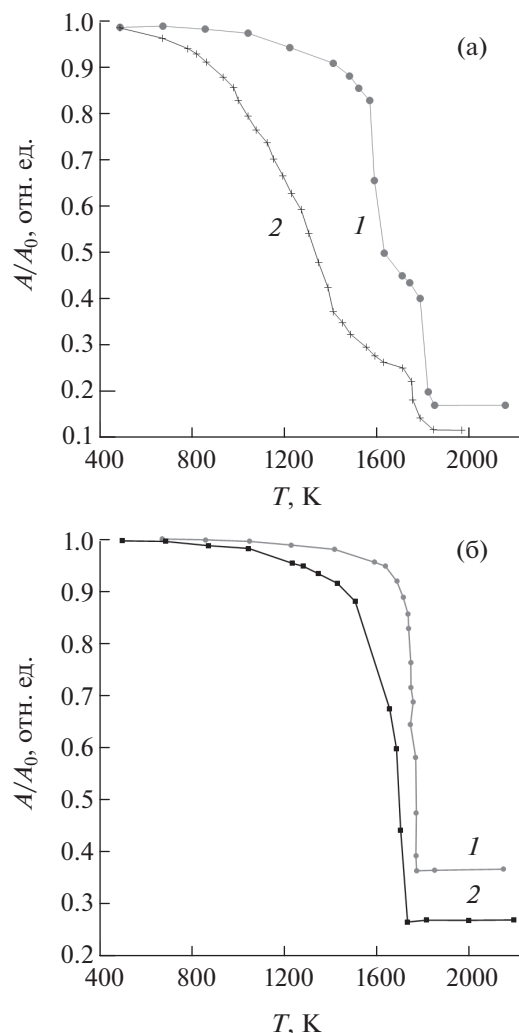


Рис. 4. Зависимость относительного изменения удельной площади поверхности A/A_0 различных моделей от текущего значения их температуры во время нагрева: а – модели M22/11 (1), M44/11 (2), б – модели M22/28 (1), M44/28 (2).

На рис. 5 приведены зависимости величины ϵ_{pot} от температуры для моделей с пористостью 22% (рис. 5а) и 44% (рис. 5б), а также для сплошного материала. Величина ϵ_{pot} для сплошного кремния равномерно растет в диапазоне температур 300–1800 К, далее происходит резкое увеличение наклона кривой, свидетельствующее о плавлении материала, а начиная с 1900 К возобновляется равномерный рост величины ϵ_{pot} , что соответствует нагреву жидкого кремния. Следует отметить, что температура плавления модели сплошного материала заметно превышает соответствующее экспериментальное значение (1685 К) [15], а также значение, которое получается при МД-моделировании плавления кристаллического кремния с помощью потенциала Stillinger–Weber [15]. Указанное завышение температуры плав-

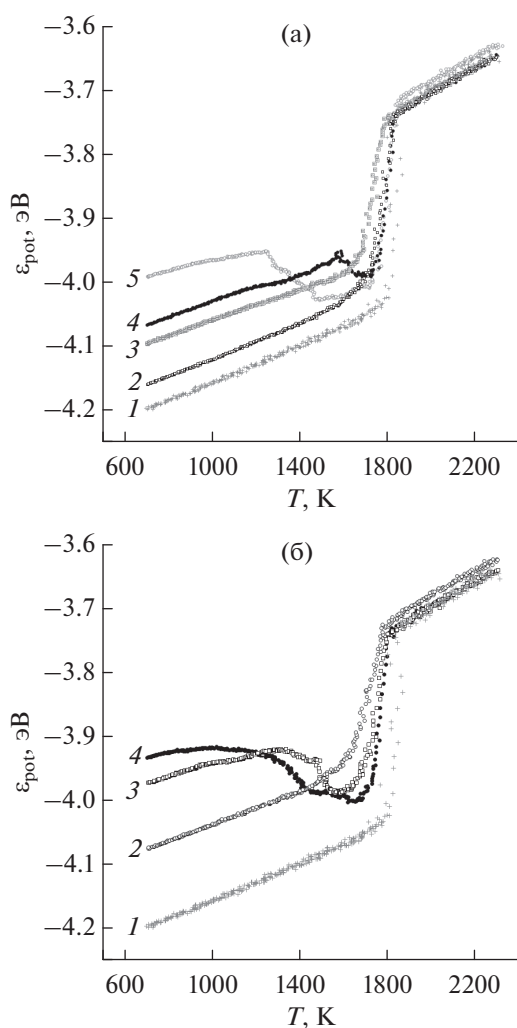


Рис. 5. Зависимость ϵ_{pot} от температуры при нагреве для моделей с различной пористостью (а – 22%, б – 44%) и радиусом пор R_{pore} [нм]: 1 – сплошной материал, 2 – 2.8, 3 – 1.5, 4 – 1.1, 5 – 0.8 нм.

ления связано с тем, что в настоящей работе моделирование производилось для поверхности без использования периодических граничных условий вдоль оси Z .

Зависимости ϵ_{pot} от температуры для моделей M22/15, M22/21, M22/28 (рис. 5а, кривые 3, 2, 1) и M44/28 (рис. 5б, кривая 2) имеют подобный характер, однако процесс плавления этих моделей происходит медленнее, а температурный диапазон, соответствующий плавлению, сдвигается влево (1600–1800 К).

Изменение величины средней потенциальной энергии на атом для моделей M22/08, M22/11 (рис. 5а, кривые 5, 4) и M44/11, M44/21 (рис. 5б, кривые 4, 3) носит более сложный характер. При нагреве модели M22/08 (рис. 5а, кривая 5) в начале наблюдается равномерное возрастание ϵ_{pot} (как и в случае сплошного материала) однако при $T =$

$= 1250$ К величина средней потенциальной энергии начинает уменьшаться с ростом температуры. Подобная зависимость свидетельствует о том, что в модели M22/08 происходят структурные изменения, связанные с уменьшением числа атомов, расположенных на поверхности пор. Таким образом, в рассмотренном диапазоне температур происходит постепенное уменьшение объема пор, которое завершается их схлопыванием при $T = 1450$ К, а далее возобновляется монотонное возрастание величины ϵ_{pot} с ростом температуры, за которым следует процесс плавления модели при $T = 1700\text{--}1800$ К.

Аналогичный характер имеет зависимость средней потенциальной энергии на атом от температуры в случае модели M22/11 (рис. 5а, кривая 4), хотя процесс уменьшения объема пор данной модели начинается при большем значении температуры (1550 К), а снижение ϵ_{pot} составляет 0.05 эВ, что в два раза меньше, чем для M22/08. В то же время для модели M44/11 с пористостью 44% и тем же радиусом пор (рис. 5б, кривая 4) плавное уменьшение ϵ_{pot} начинается на ранних этапах нагрева, т.е. процесс сжатия пор становится интенсивным при более низких температурах.

Различия в зависимостях $\epsilon_{pot}(T)$ для моделей M22/21 (рис. 5а, кривая 3) и M44/21 (рис. 5б, кривая 3), имеющих одинаковый размер пор и различную степень пористости, наглядно иллюстрируют влияние указанных параметров на исследуемые процессы. Анализ изменения ϵ_{pot} при нагреве модели M22/21 (рис. 5а, кривая 3) указывает на то, что данная пористая структура остается стабильной при температурах, близких к температуре плавления сплошного материала (~ 1700 К) и разрушается в результате фазового перехода в жидкое состояние при 1700–1800 К. В случае модели M44/21 (рис. 5б, кривая 3) уменьшение объема пор происходит при более низких температурах (1300–1500 К) и не связано с процессом плавления кремния. Таким образом, увеличение степени пористости при заданном радиусе пор снижает устойчивость нанопористого материала к тепловому воздействию и может оказывать сильное влияние на процесс схлопывания пор.

В [12] было показано, что существенное влияние на механизм изменения морфологии нанопористого материала при физическом распылении оказывает избыточная поверхностная энергия ϵ_{ex} , заключенная в единице объема (1 нм^3). Рассчитанные значения этой величины для всех рассмотренных моделей приведены в табл. 1, а ее зависимости от радиуса пор для различной степени пористости показаны на рис. 6. Хорошо видно, что ϵ_{ex} уменьшается с возрастанием радиуса пор, а для моделей с пористостью 22% (кривая 1) лежит ниже, чем в случае $P = 44\%$ (кривая 2). Этот результат свидетельствует о том, что высокая сте-

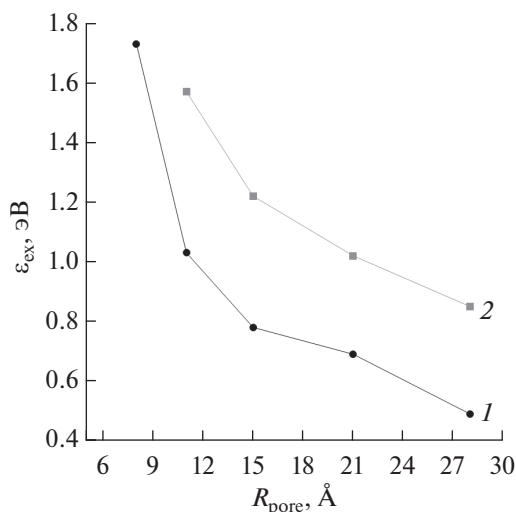


Рис. 6. Зависимость величины ϵ_{ex} от радиуса пор R_{pore} при различной пористости P : 1 – 22%, 2 – 44%.

пень пористости снижает устойчивость нанопористого материала к тепловому воздействию. При моделировании схлопывание пор наблюдалось для моделей M22/08, M22/11, M44/11, M44/15, M44/21, для которых величина ϵ_{ex} принимает значения $\sim 1.0 \text{ эВ} \cdot \text{нм}^{-3}$ и выше, в то время как для остальных моделей с $\epsilon_{ex} < 1.0 \text{ эВ} \cdot \text{нм}^{-3}$ разрушение пор происходило только при плавлении материала. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что избыточная поверхностная энергия в единице объема ϵ_{ex} является ключевым фактором, влияющим на интенсивность процесса схлопывания пор как при нагреве нанопористого материала, так и при его физическом распылении ионами низкой энергии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе на примере кристаллического кремния методом молекулярной динамики исследованы структурные изменения, возникающие в нанопористых материалах при их при нагреве и воздействии на них ионов низкой энергии. В обоих случаях расчеты продемонстрировали сходство структур, полученных при моделировании.

В моделях с пористостью 22% и радиусом пор 0.8 и 1.1 нм, а также в моделях с пористостью 44% и радиусом пор 1.1–2.1 нм с ростом температуры наблюдается постепенное уменьшение объема пор, приводящее к их схлопыванию. В случае моделей с пористостью 22% радиусом пор 1.5–2.8 нм и пористостью 44% и радиусом пор 2.8 нм разрушение исходной структуры наблюдается при плавлении материала.

Выполненный анализ показал, что характер изменений морфологии нанопористых материалов зависит от соотношения значений степени пористости и радиуса пор в исходных моделях. Было обнаружено, что для структуры с малым размером пор (0.8 и 1.1 нм) величина пористости существенно влияет на равномерность и скорость уменьшения их объема и числа с ростом температуры. В случае моделей с большим радиусом пор (> 1.5 нм) увеличение степени пористости снижает устойчивость материала к тепловому воздействию и может оказывать сильное влияние на процесс схлопывания пор. При фиксированном значении пористости устойчивость структуры к тепловому воздействию определяется радиусом пор.

Избыточная поверхностная энергия, заключенная в единице объема материала, является ключевым фактором, влияющим на интенсивность процесса схлопывания пор как при нагреве нанопористого материала, так и при его физическом распылении ионами низкой энергии.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-12-10361) и с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Baklanov M.R., de Marneffe J.-F., Shamiryan D. et al. // J. Appl. Phys. 2013. V. 113. № 4. P. 041101. doi 10.1063/1.4765297
2. Prskabo A.P., Schmauder S., Ziebert C. et al. // Comput. Mater. Sci. 2011. V. 50. № 4. P. 1320. doi 10.1016/j.commatsci.2010.08.006
3. Kubota N.A., Economou D.J., Plimpton S.J. // J. Appl. Phys. 1998. V. 83. № 8. P. 4055. doi 10.1063/1.367225
4. Zalm P.C. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. № 5. P. 2660. doi 10.1063/1.332340
5. Graves D.B., Brault P. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. № 19. P. 194011. doi 10.1088/0222-3727/42/19/194011
6. Hossain M.Z., Freund J.B., Johnson H.T. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 257. № 7. P. 1061. doi 10.1016/j.nimb.2009.01.137
7. Humbird D., Graves D.B. // Pure Appl. Chem. 2002. V. 74. № 3. P. 419. doi 10.1351/pac200274030419
8. Smith R. Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces: Theory, Simulation and Applications. New York: Cambridge University Press, 2005. 310 p.
9. Timonova M., Lee B.-J., Thijsse B.J. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2007. V. 225. № 1. P. 195. doi 10.1016/j.nimb.2006.11.023
10. Baskes M.I. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. № 5. P. 2727. doi 10.1103/PhysRevB.46.2727

11. Moore M.C., Kalyanasundaram N., Freund J.B., Johnson H.T. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2004. V. 225. № 3. P. 241. doi 10.1016/j.nimb.2004.04.175
12. Sycheva A.A., Voronina E.N., Rakhimova T.V. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2018. V. 12. № 6. P. 1270. doi 10.1134/S1027451019010191.
13. Stillinger F.H., Weber T.A. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. № 8. P. 5262. doi 10.1103/PhysRevB.31.5262
14. Nosé S. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. № 1. P. 511. doi 10.1063/1.447334
15. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Rudenko A.V. // *Mathematica Montisnigri*. 2014. V. 30. P. 56.
16. Plimpton S. // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1. doi 10.1006/jcph.1995.1039
17. Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin V.I., Opanasenko V.I. // *Contemporary High Performance Computing: From Petascale to Exascale* / Ed. Vetter J.S. Chapman and Hall/CRC, 2013. P. 283.
18. Stukovski A. // *Modelling Simul. Mater. Sci. Engin.* 2010. V. 18. № 1. P. 015012. doi 10.1088/0965-0393/18/1/015012
19. Kelsall R.W., Hamley I.W., Geoghegan M. *Nanoscale Science and Technology*. Chichester: John Wiley & Sons, 2005. 473 p.

Structural Changes of Nanoporous Silicon-Based Materials under Low-Energy Ion Impact

A. A. Sycheva, E. N. Voronina, T. V. Rakhimova

Role of porosity and pore size in morphological changes of nanoporous materials during low-energy ion irradiation was studied in terms of crystalline silicon models. Molecular dynamic simulations were implemented to study the destruction of porous structures with different values of porosity and pore size. Obtained dependencies of potential energy and specific surface area on system temperature were used to determine material parameters, which define the process of pore compressing.

Keywords: low- κ , porosity, sputtering, molecular dynamics simulations.