

УДК 539.21:539.1

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ КРЕМНИЯ ИОНАМИ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> С ЭНЕРГИЯМИ 2–8 кэВ

© 2023 г. К. П. Карасев<sup>а, \*</sup>, Д. А. Стрижкин<sup>б</sup>, А. И. Титов<sup>б</sup>, П. А. Карасев<sup>б, \*\*</sup>

<sup>а</sup>Академический университет им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург, 195251 Россия

<sup>б</sup>Политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, 195251 Россия

\*e-mail: kir.karasyov2017@yandex.ru

\*\*e-mail: platon.karaseov@spbstu.ru

Поступила в редакцию 26.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 15.07.2022 г.

Методом молекулярно-динамического моделирования с помощью кода LAMMPS проведено исследование процессов, происходящих при падении молекулярных ионов C<sub>60</sub> с энергиями от 2 до 8 кэВ на поверхность Si(100) при температурах от 0 до 700 К. Используются потенциалы взаимодействия Tersoff-ZBL и Airebo, а также учтены потери энергии быстрых частиц на электронные процессы. Показано, что температура мишени не влияет на развитие каскада смещений, но оказывает влияние на ход процесса его термализации и формирование кратера на поверхности. С ростом энергии растет глубина проникновения углерода в мишень, величина формируемого кратера и размер бруствера вокруг него. Повышение температуры до 700 К приводит к заметно более эффективному формированию кратера и увеличению размера бруствера, по сравнению с обнаруженными при 0 и 300 К. Предложен механизм этого явления.

**Ключевые слова:** фуллерен, моделирование методом молекулярной динамики, ионная бомбардировка, радиационные дефекты, поверхностные явления, кремний, температура.

**DOI:** 10.31857/S1028096023010107, **EDN:** BLCQCB

### ВВЕДЕНИЕ

С начала XX века научное сообщество изучает различные типы структур, формируемых атомами углерода. Наиболее известны из них алмаз (чрезвычайно тверд, но слабо электропроводен) и графит (мягкий, электропроводящий). Однако, кроме них, во второй половине XX века было открыто множество других аллотропных форм (описание которых можно найти в обзоре [1]), в частности, молекулы фуллерена C<sub>60</sub> [2] и аморфный алмазоподобный углерод [3], который содержит, как характерные для алмаза тетраэдрические sp<sup>3</sup>-связи, так и собственные графиту sp<sup>2</sup>-связи. Изменение относительных концентраций этих связей позволяет управлять свойствами материала, в частности, его твердостью и электропроводностью. Одним из возможных способов получения углеродных покрытий является бомбардировка поверхности образца ускоренными ионами C<sub>60</sub><sup>+</sup> [4]. Таким путем на различных поверхностях удается получать покрытия из алмазоподобного углерода, обладающие рядом полезных свойств: низким коэффициентом трения, биологической

совместимостью и многими другими [5, 6]. В этих работах показано, что параметры осаждения, такие как энергия ионов C<sub>60</sub>, плотность ионного тока и температура мишени, имеют определяющее влияние на свойства получаемого покрытия. В то же время установлена только часть физических механизмов, определяющих формирование внутренней структуры этих покрытий.

Явления, происходящие на поверхности мишени при торможении ускоренных кластерных ионов, представляют большой интерес, как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. Ранее надежно установлено [7], что при попадании ускоренного иона в твердую мишень происходит передача его энергии в ходе столкновений с электронами и атомами мишени, в результате чего на поверхности формируется каскад смещений. Затем часть этих дефектов рекомбинирует (этот процесс называется динамическим отжигом), а часть формирует различные комплексы, появление которых и приводит к изменению свойств мишени. Время, в течение которого образуется максимальное количество точечных дефектов (максимальное развитие каскада сме-

шений), составляет около 0.5 пс. Традиционными экспериментальными методами исследовать происходящие при развитии каскада смещений и термализации процессы невозможно, поскольку не существует приборов с достаточным временным и пространственным разрешением. Вот почему важную роль в настоящее время играют методы компьютерного моделирования, в частности, молекулярной динамики (МД).

Данный метод широко используют при исследовании ионной бомбардировки различных мишеней. Ранее методом МД-моделирования было установлено, что при падении молекулы  $C_{60}$  с энергией 15 кэВ на монокристалл Ag(111) при температуре 0 К на поверхности образуется полусферический кратер с бруствером вокруг него, а также распыляются одиночные атомы и кластеры серебра и углерода [8]. Также исследовали взаимодействие иона  $C_{60}$  с мишенями, составленными из длинных полимерных молекул, для дальнейшего анализа матрично-активированной лазерной ионизацией. Мишени распыляли фуллеренами с энергией 5 кэВ. Часть смещенных полимерных цепей десорбировалась обратно пропорционально их длине, а остальные формировали бруствер кратера [9].

Моделирование падения ионов  $C_{60}$  на монокристалл кремния при 0 К, проведенное в [10], показало, что количество атомов, распыленных с поверхности, растет с увеличением начальной энергии фуллерена от 1 до 20 кэВ, а атомы углерода проникают в кристалл и распределяются внутри практически не распыляясь. В этом случае может происходить образование прочных ковалентных связей между атомами С и Si, в результате чего почти все атомы углерода остаются внедренными в поверхность после бомбардировки [11, 12]. В результате МД-симуляции последовательных падений нескольких молекул фуллерена на поверхность кремния установлены рост шероховатости мишени [12] и возможность формирования карбида кремния SiC [10]. Как видно, в большинстве опубликованных работ в основном анализировали распыление мишени с целью оптимизации использования ионов  $C_{60}$  во вторичной ионной масс-спектрометрии. Влияние температуры мишени при этом практически не рассматривали. В то же время экспериментально показано, что при бомбардировке кремния температура оказывает влияние на происходящие процессы [13, 14]. Например, при облучении поверхности кремния ионами  $C_{60}$  с энергией 5 кэВ формируется углеродная пленка при температурах в диапазоне от комнатной до 400°C, а при облучении ионами с энергией 8 кэВ при низких (до 200°C) температурах превалирует распыление, меняющееся на осаждение углеродного покрытия при 300 и 400°C. Структура покрытия из алмазоподобного

углерода также зависит от температуры подложки [4, 13–15]. Целью настоящей работы является изучение поверхностных эффектов, возникающих при облучении ионами  $C_{60}$  с энергиями от 2 до 8 кэВ поверхности Si(100) при температурах от 0 до 700 К, и анализ происходящих процессов.

## МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для исследования поверхностных явлений при падении ускоренного иона  $C_{60}$  на подложку был использован метод МД-моделирования. Вычисления проводили с использованием программы LAMMPS [16], разработанной для проведения МД-симуляций. Межатомные взаимодействия для пар атомов (C–C) определяли потенциалом AIREBO [17], поскольку он хорошо описывает свойства углеродных структур, например, фуллеренов. Для оставшихся пар (C–Si, Si–Si) был использован потенциал Терсоффа (Terstoff) [18] в комбинации с потенциалом Зиглера–Бирзака–Литтмарка (ZBL) [19] при высоких энергиях частиц. Потенциал Терсоффа позволяет описать столкновения частиц с энергией меньше 1 эВ, Зиглера–Бирзака–Литтмарка – с энергией больше 1 эВ. Исходная мишень – монокристалл кремния размером  $24 \times 24 \times 31$  элементарных ячеек, ориентированный плоскостью (100) к источнику бомбардирующих частиц – была составлена из 144000 атомов. К боковым сторонам расчетной ячейки моделирования применяли периодические граничные условия Борна–Кормана. Положение нижних 3 слоев атомов кремния было зафиксировано чтобы избежать возможного дрейфа мишени в процессе моделирования. Для диссипации лишней энергии в системе использовали “ванну” – термостат Берендсена [20], составленную из граничных слоев кремния шириной в 1 элементарную ячейку. Над открытой поверхностью Si на некоторой высоте размещали молекулу фуллерена. В начальный момент времени всем ее атомам была придана одинаковая скорость, направленная в сторону поверхности Si(100) по нормали. Начальная энергия молекулы фуллерена изменялась от 2 до 8 кэВ, температура – 0–700 К. Рассматривали взаимодействие в течение первых 5 пс, после чего атомы углерода удаляли, структуру кремния восстанавливали, новую молекулу фуллерена смещали параллельно поверхности на некоторое случайное расстояние в пределах  $2 \times 2$  центральных ячеек и расчет повторяли. Для уменьшения статистического разброса для каждого значения энергии иона  $C_{60}$  и температуры мишени исследовали 25 независимых случаев.

Для получения модели кристалла кремния с температурой 300 и 700 К пробовали задать атомам кристаллической решетки скорости так,

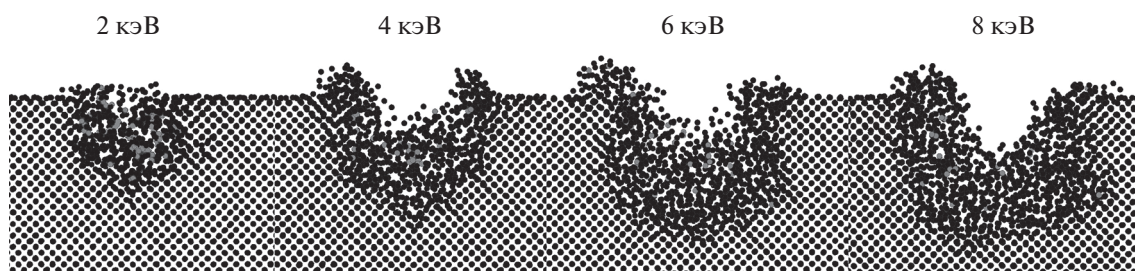


Рис. 1. Поперечный срез кристалла кремния толщиной  $10 \text{ \AA}$  после падения на его поверхность молекулы  $C_{60}$  с различными энергиями. Атомы Si изображены черным, атомы С – серым.

чтобы их суммарная кинетическая энергия соответствовала требуемой температуре. Но в этом случае при термализации модели возникли колебания поверхности с амплитудой более  $1 \text{ \AA}$ . Для устранения этой проблемы применяли медленный (длительностью до 1 нс) нагрев кристалла размером  $8 \times 8 \times 16$  ячеек от 0 К до требуемой температуры. Для создания модели кристалла больших размеров полученную структуру размножали повторением в пространстве. В результате подобных манипуляций нам удалось получить кристалл размером  $24 \times 24 \times 31$  элементарных ячеек с амплитудой колебаний поверхности не более  $0.12 \text{ \AA}$ . Выбранное пороговое значение амплитуды колебаний поверхности сравнимо с величиной амплитуды собственных тепловых колебаний отдельных атомов кремния в структуре. Подробнее о данном способе получения нагретого кристалла будет рассказано в отдельной публикации.

Анализ дефектов в кристалле проводили методом Вороного–Дирихле [21]. Для этого в начальный момент времени строили ячейки Вигнера–Зейтца по всему объему кристалла. С их помощью далее оценивали количество точечных дефектов, возникающих при бомбардировке. Каждую ячейку анализировали на количество содержащихся в ней атомов кремния. Если в ячейке атомы отсутствовали, она была идентифицирована как вакансия, если же в ячейке было больше одного атома – как междоузельный атом.

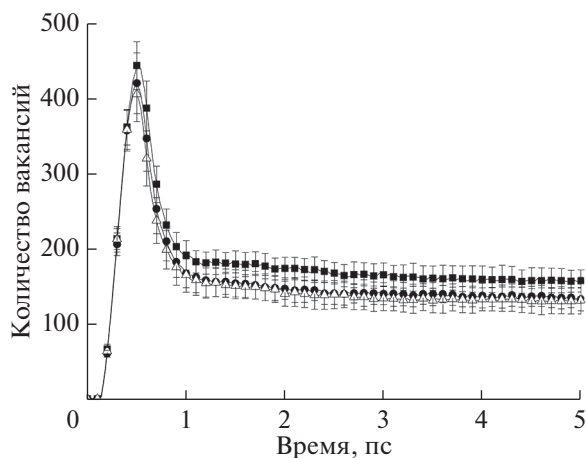
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате моделирования установлено, что во всем диапазоне энергий от 2 до 8 кэВ при падении молекулы  $C_{60}$  на поверхность мишени Si(100) исходная структура фуллерена полностью разрушается. Атомы углерода частично проникают вглубь мишени, а частично отражаются и улетают в обратном направлении. Атомы кремния смещаются из равновесных положений, и кристаллическая структура частично разрушается. На рис. 1 показаны заключительные кадры моделирования, демонстрирующие состояние поперечного среза мишени толщиной  $10 \text{ \AA}$  после попадания

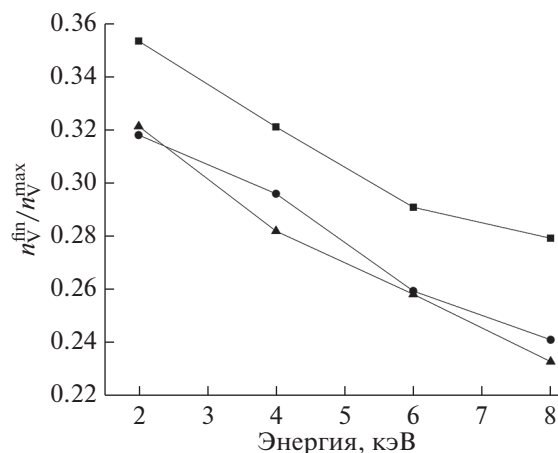
ионов  $C_{60}$  с разными исходными энергиями в мишень. Видно, что на поверхности кристалла образуется кратер, размеры которого растут с увеличением начальной энергии фуллерена. По краю кратера формируется бруствер, состоящий из атомов кремния и углерода. Размеры области, разрушенной при торможении иона  $C_{60}$ , также растут с ростом энергии.

На рис. 2 показаны зависимости от времени полного количества вакансий в мишенях при разных температурах, усредненные по 25 случаям облучения ионами фуллерена с энергией 2 кэВ. Подобные зависимости получены и для всех остальных энергий бомбардирующих ионов. Из рис. 2 видно, что сначала, когда атомы углерода начинают проникать в мишень, количество смещенных атомов кремния растет и достигает максимума, а затем уменьшается и выходит на некоторое установившееся значение. Одновременно с уменьшением количества дефектов наблюдается термализация возмущенной области кристалла с уходом тепла в объем. Максимальное количество вакансий (максимальное развитие каскада смещений) достигается через  $\sim 0.5$  пс после касания фуллереном поверхности мишени. Приблизительно такое же время развития каскада было установлено при торможении молекулы  $PF_4$  в кристаллическом GaN [22]. Из рис. 2 видно, что количество дефектов в момент максимального развития каскада от температуры практически не зависит, а количество вакансий, “выживших” после термализации каскада, несколько увеличивается с ростом температуры. Расчеты, проведенные при более высоких энергиях фуллерена, показали, что максимальное количество вакансий не зависит от температуры мишени во всех исследованных случаях; как максимальное, так и финальное количество вакансий растет с увеличением энергии.

На рис. 3 приведены зависимости доли “выживших” после термализации каскада вакансий от энергии молекулы  $C_{60}$  при разных значениях температуры мишени. С ростом энергии фуллерена финальное и максимальное значения вакансий отличаются все больше, то есть эффективность динамического отжига несколько возраста-



**Рис. 2.** Количество вакансий в мишени в зависимости от времени при энергии фуллерена 2 кэВ, при температурах 0 (треугольник); 300 (круг); 700 К (квадрат). Для наглядности на графике показана только одна из каждых пяти полученных точек.



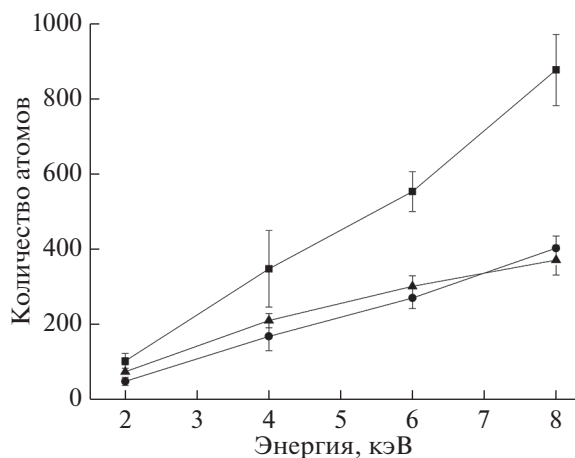
**Рис. 3** Доля созданных при развитии каскада вакансий  $n_V^{\text{fin}} / n_V^{\text{max}}$ , которые “выжили” к моменту окончания расчета  $n_V^{\text{fin}}$  при температурах мишени 0 (треугольник); 300 (круг); 700 К (квадрат).

ет. Это можно объяснить тем, что с повышением энергии иона область кристалла в области падения иона нагревается до несколько более высокой температуры и за время ее термализации больше атомов кремния успевают занять регулярные позиции в решетке. Кроме того, из рис. 3 видно, что изменение температуры мишени от 0 до 300 К не влияет на процесс рекомбинации вакансий, а с увеличением температуры от 300 до 700 К доля “выживших” после термализации вакансий заметно вырастает. Для того, чтобы объяснить этот факт, необходимо принять во внимание, показанное на рис. 1 формирование кратера и появление бруствера вокруг него. Рассмотрение визуализаций процесса торможения фуллерена показывает, что на начальном этапе под коллективным действием атомов еще не разрушенной молекулы фуллерена атомы кремния смещаются из своих положений равновесия в элементарной ячейке в междоузельные позиции. Молекула  $C_{60}$  раздвигает атомы кремния под собой и происходит локальное увеличение плотности мишени вокруг места падения. Температура в этой области существенно вырастает. Затем сжатая область начинает частично восстанавливаться и частицы получают импульс в направлениях от поверхности мишени. Далее некоторые атомы улетают в пространство, а часть из двигавшихся из глубины к поверхности атомов, которым не хватило энергии для отрыва от поверхности, формируют бруствер.

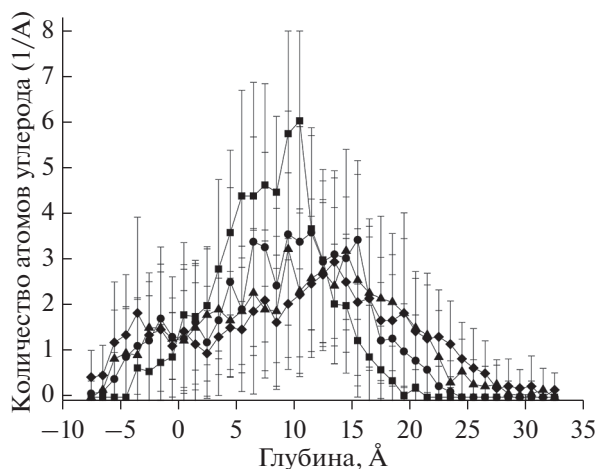
Для анализа его параметров вычисляли количество атомов обоих типов (C и Si), находящихся выше  $0.4 \text{ \AA}$  над поверхностью. Граничная высота выбрана так, чтобы на количество атомов не влияли тепловые колебания атомов поверхности. Рис. 4 показывает, что с увеличением энергии

фуллерена количество атомов в бруствере растет. Изменение температуры мишени от 0 до 300 К почти не изменяет его размеров. При росте температуры до 700 К количество атомов увеличивается, причем тем больше, чем выше энергия молекулы  $C_{60}$ . Таким образом, увеличение доли сохранившихся после термализации вакансий связано с увеличением эффективности формирования бруствера при 700 К, которое вызвано тем, что начинает играть роль локальное повышение температуры в рассматриваемой области мишени, уже имеющей достаточно высокую температуру. Оно приводит к более эффективному перемещению атомов из перегретой области, сформированной в процессе торможения фуллерена. Размеры кратера становятся больше при 700 К, что проявляется при анализе количества вакансий методом Вороного–Дирихле. Этот метод не разделяет индивидуальные вакансии в пределах кратера. Соответственно и рассчитываемое с его помощью количество “выживших” после термализации дефектов становится больше.

Помимо атомов мишени, большой интерес представляет и распределение атомов углерода. Из рис. 1 видно, что углерод проникает в мишень и распределяется внутри кристалла до некоторой глубины. Распределение конечных положений атомов углерода показано на рис. 5. Отрицательные значения глубины соответствуют атомам, находящимся в бруствере. Температура кристалла практически не влияет на проникновение атомов углерода вглубь мишени (эти зависимости не приведены). Средняя глубина проникновения атомов углерода в мишень увеличивается с ростом начальной энергии фуллерена, как  $E^{1/3}$ . Сходная зависимость была получена ранее [23]



**Рис. 4.** Количество атомов выше уровня  $0.4 \text{ \AA}$  над поверхностью кристалла при температурах 0 (треугольник); 300 (круг); 700 К (квадрат).



**Рис. 5.** Усредненное по 25 случаям моделирования количество атомов углерода, приходящееся на параллельный поверхности мишени слой толщиной  $1 \text{ \AA}$ , в зависимости от глубины расположения слоя. Расчеты проведены при температуре мишени 700 К, при начальной энергии фуллера 2 (квадрат); 4 (круг); 6 (треугольник); 8 кэВ (ромб).

для проникновения атомов молекулы фуллера в кремний в рассматриваемом диапазоне энергий. Форма распределения атомов углерода по глубине зависит от начальной энергии фуллера. Можно увидеть, что при энергии фуллера 2 кэВ распределение имеет четко выраженный максимум на глубине  $\sim 10 \text{ \AA}$ . Максимальная глубина проникновения не превышает  $25 \text{ \AA}$ . С увеличением энергии фуллера форма распределения сглаживается, а глубина проникновения атомов углерода, как и следовало ожидать, становится больше (до  $33 \text{ \AA}$  при 8 кэВ). Кроме того, можно заметить, что распределение углерода при энер-

гии фуллера 6 и 8 кэВ становится бимодальным. Формируется второй пик над поверхностью мишени, то есть, атомы углерода все более эффективно начинают участвовать в формировании бруствера.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено МД-моделирование результатов облучения поверхности Si(100) при температурах от 0 до 700 К ионами фуллера  $C_{60}$  с начальной энергией 2–8 кэВ. Проанализированы такие характеристики процессов при развитии и термализации каскадов смещений, как образование вакансий и их рекомбинация, распределение атомов углерода по глубине, формирование бруствера кратера. Обнаружено, что количество вакансий в момент максимального развития каскада смещений практически не зависит от температуры и растет с увеличением энергии бомбардирующих ионов  $C_{60}$ . С ростом температуры мишени растет рассчитанное конечное количество вакансий за счет более эффективного формирования кратера и увеличения количества атомов в бруствере кратера. Это явление может быть объяснено возможным влиянием локального повышения температуры мишени, приводящим к более эффективному перемещению атомов из перегретой области, сформированной в процессе торможения фуллера.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была выполнена при поддержке РФФ, грант 22-19-00166.

**Конфликт интересов:** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang J., Terrones M., Park C.R., Mukherjee R, Monthieux M., Koratkar N., Kim Y. S., Hurt R., Frackowiak E., Enoki T., Chen Y., Chen Y., Bianco A. // Carbon Science in 2016: Status, Challenges and Perspectives Carbon. 2016. V. 98. P. 708. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.11.060>
2. Бочвар Д.А., Гальперн Э.Г. // Доклады Академии Наук СССР. 1973. Т. 209. С. 610.
3. Robertson J. // Mater. Sci. Eng. Res. 2002. V. 37. P. 129. [https://doi.org/10.1016/S0927-796X\(02\)00005-0](https://doi.org/10.1016/S0927-796X(02)00005-0)
4. Khadem M., Pukha V.E., Penkov O.V. et al. // Surf. Coat. Technol. 2021. V. 424. P. 127670. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.127670>
5. Pukha V.E., Pugachov A.T., Churakova N.P., Zubarev E.N., Vinogradov V.E., Nam S.C. // J. Nanosci. Nanotechnol. 2012. V. 12. № 6. P. 4762. <https://doi.org/10.1166/jnn.2012.4925>
6. Penkov O.V., Pukha V.E., Starikova S.L., Khadem M., Starikov V.V., Maleev M.V., Kim D.E. // Biomaterials.



2016. V. 102. P. 130.  
<https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2016.06.029>
7. *Аброян И.А., Андронов А.Н., Титов А.И.* Физические основы электронной и ионной технологии. М.: Высшая школа, 1984. 135 с.
  8. *Postawa Z., Czerwinski B., Szewczyk M., Smiley E.J., Winograd N., Garrison B.J.* // *Anal. Chem.* 2003. V. 75. P. 4402.  
<https://doi.org/10.1021/ac034387a>
  9. *Delcorte A., Garrison B.J.* // *J. Phys. Chem.* 2007. V. 111. P. 15312.  
<https://doi.org/10.1021/jp074536j>
  10. *Krantzman K.D., Kingsbury D.B., Garrison B.J.* // *Appl. Surf. Sci.* 2006. V. 252. P. 6463.  
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2006.02.276>
  11. *Krantzman K.D., Garrison B.J.* // *Surf. Interface Anal.* 2011. V. 43. P. 123.  
<https://doi.org/10.1002/sia.3438>
  12. *Krantzman K.D., Wucher A.* // *J. Phys. Chem. C.* 2010. V. 114. № 12. P. 5480.  
<https://doi.org/10.1021/jp906050f>
  13. *Малеев М.В., Зубарев Е.Н., Пуха В.Е., Дроздов А.Н., Вус А.С., Девизенко А.Ю.* // *ФИП.* 2015. Т. 13. С. 91.  
<https://doi.org/10.15407/mfint.37.06.0775>
  14. *Pukha V., Popova J., Khadem M., Dae-Eun Kim, Khodos I., Shakhmin A., Mishin M., Krainov K., Titov A., Karaseov P.* // Formation of Functional Conductive Carbon Coating on Si by C<sub>60</sub> Ion Beam. In: International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. Springer Proceedings in Physics. 2020. V. 255 / Ed. Velichko E. et al., Springer, Cham.  
[https://doi.org/10.1007/978-3-030-58868-7\\_15](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58868-7_15)
  15. *Pukha V., Belmesov A., Glukhov A., Khodos I., Khadem M., Kim D.-E., Krainov K., Shakhmin A., Karaseov P.* // Features of the Conductive Carbon Coatings Formation on Titanium Electrodes Using C<sub>60</sub> Ion Beams. In: International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. Springer Proceedings in Physics. 2022. V. 268 / Ed. Velichko E., Kapralova V., Karaseov P., et al., Springer, Cham.  
[https://doi.org/10.1007/978-3-030-81119-8\\_41](https://doi.org/10.1007/978-3-030-81119-8_41)
  16. *Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R. et al.* // *Comp. Phys. Comm.* 2022. V. 271. P. 10817.  
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
  17. *Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A.* // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 6472.  
<https://doi.org/10.1063/1.481208>
  18. *Tersoff J.* // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. P. 6991.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6991>
  19. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* // The Stopping and Range of Ions in Matter. In: Treatise on Heavy-Ion Science / Ed. Bromley D.A. Springer, Boston, MA, 1985
  20. *Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 3684.  
<https://doi.org/10.1063/1.448118>
  21. *Aurenhammer F.* // *ACM Computing Surveys.* 1991. V. 23. № 3. P. 345.  
<https://doi.org/10.1145/116873.116880>
  22. *Ullah M.W., Kuronen A., Nordlund K., Djurabekova F., Karaseov P.A., Titov A.I.* // *J. Appl. Phys.* 2012. V. 112. P. 043517.  
<https://doi.org/10.1063/1.4747917>
  23. *Aoki T.* // *J. Comput. Electron.* 2014. V. 13. P. 108.  
<https://doi.org/10.1007/s10825-013-0504-5>

## Molecular Dynamic Simulation of Silicon Irradiation with 2–8 keV Buckminsterfullerene C<sub>60</sub> Ions

K. P. Karasev<sup>1, \*</sup>, D. A. Strizhkin<sup>2</sup>, A. I. Titov<sup>2</sup>, P. A. Karaseov<sup>2, \*\*</sup>

<sup>1</sup>Academic university named after Alferov, Saint-Petersburg, 195251 Russia

<sup>2</sup>Polytechnic university named after Peter the Great, Saint-Petersburg, 195251 Russia

\*e-mail: kir.karasyov2017@yandex.ru

\*\*e-mail: platon.karaseov@spbstu.ru

The processes taking place on the (100)Si surface irradiated by 2–8 keV buckminsterfullerene C<sub>60</sub> ions at temperatures ranging from 0 to 700 K are examined using molecular dynamics computer simulations. Tersoff-ZBL and Airebo potentials are used to describe pairwise interactions, inelastic energy loss is taken into account for fast atoms. The results show that crystal temperature has no influence on the collision cascade development, but affect its thermalisation and crater formation on the surface. With the C<sub>60</sub> ion energy increase, carbon atoms penetrate deeper into the target, both crater volume and size of the rim around it enlarges. Temperature increase to 700 K leads to more effective crater and rim formation comparing to 0 and 300 K cases. We propose possible explanation of the revealed phenomenon.

**Keywords:** Buckminsterfullerene, MD simulations, ion bombardment, radiation damage, surface effects, silicon, temperature.