МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАДЕНИЯ ИОНА С60 НА ПОВЕРХНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛА КРЕМНИЯ

К.П.Карасев1\*), Д.А.Стрижкин2), А.И.Титов2), П.А.Карасев2)

1) Академический ун-т им. Ж.И.Алферова, СПб, Россия

2) Политехнический ун-т Петра Великого, СПб, Россия

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

Явления, происходящие на поверхности мишени при бомбардировке монокристалла кремния ускоренными ионами С60+ представляют большой интерес. На них влияет множество параметров, в частности, энергия фуллерена, плотность тока, материал и температура поверхности и др. Было проведено компьютерное исследование падения молекул С60 на (100) поверхность кремния методом молекулярной динамики с использованием потенциалов взаимодействия Tersoff-ZBL и Airebo. Электронные потери – один из факторов, которые необходимо учитывать. Из рис. 1 видно, что при их введении в расчет количество образующихся смещений в максимуме уменьшилось почти на 100, а в насыщении на 50. Также заметно изменяется количество распыленных атомов и другие результаты взаимодействия.



Рис.1 Количество вакансий, формируемых в кремнии ионом C60 c энергией 2 кэВ в зависимости от времени.

В докладе будет выполнен анализ результатов моделирования для энергий падающих ионов С60 от 100 эВ до 5 кэВ, температуре системы от 0 до 700 К, углах падения от 0 до 80о.