

Моделирование падения иона C₆₀ на поверхность монокристалла кремния



51-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами Москва, 24-26 мая 2022

К.П. Карасев*¹⁾, Д.А. Стрижкин²⁾, А.И. Титов²⁾, П.А. Карасев²⁾

¹⁾Санкт-Петербургский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия

²⁾Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

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

Явления, происходящие на поверхности мишени при бомбардировке монокристалла кремния ускоренными ионами C₆₀⁺ представляют большой интерес. На них влияет множество параметров, в частности, энергия фуллера, плотность тока, материал и температура поверхности и др. Но исследование процессов, происходящих при столкновении иона с мишенью не возможно, так как развитие каскада смещений происходит за ~0.5 пс, а приборов с достаточным временным и пространственным разрешением не существует. Поэтому для получения полезной для экспериментов информации мы обратились к методу молекулярно-динамического (МД) моделирования.

Описание модели

Моделирование проводилось кодом LAMMPS [1].

Потенциалы взаимодействия C-C - **AIREBO**, Si-Si и C-Si **Terstoff-ZBL**.

При энергии частиц > 10 эВ учитывались электронные потери

Исходная мишень - монокристалл кремния с открытой поверхностью (100), размером 24x24x31 элементарных ячеек. По боковым сторонам расчетной ячейки применялись периодические граничные условия Борна-Кормана. Нижний слой атомов жестко закреплен.

Термостат Берендсена толщиной в 1 элементарную ячейку кремния по боковым и нижней граням.

Начальная энергия молекулы C₆₀ от 2 до 8 кэВ.

5 независимых событий для каждого случая.

Время одного события 5 пс.

1. Thompson A. P., Aktulga H. M., Berger R. et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Comp. Phys. Comm. - 2022. - Vol. 271. - P. 10817.

Образование дефектов

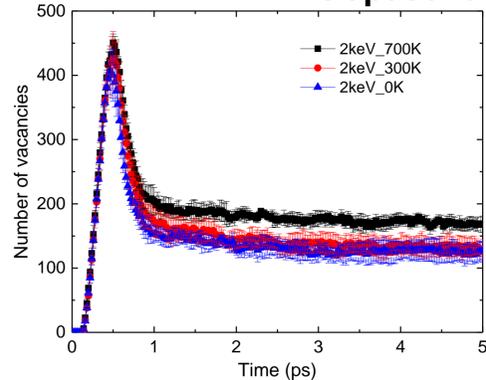


Рис. 3. Количество вакансий от времени для разных температур при энергии падения фуллера 2кэВ.

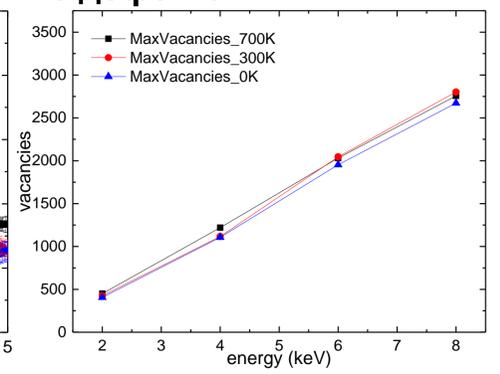


Рис. 4. Максимум вакансий от энергии падения фуллера при различных температурах.

Рис. 3 иллюстрирует развитие каскада смещений. Образуются вакансии, количество которых, достигает максимума n_{v_max} , затем спадает и выходит на установившееся значение n_{v_fin} . При увеличении температуры мишени n_{v_max} практически не меняется, а n_{v_fin} растет (рис. 4 и 5).

Результаты расчетов

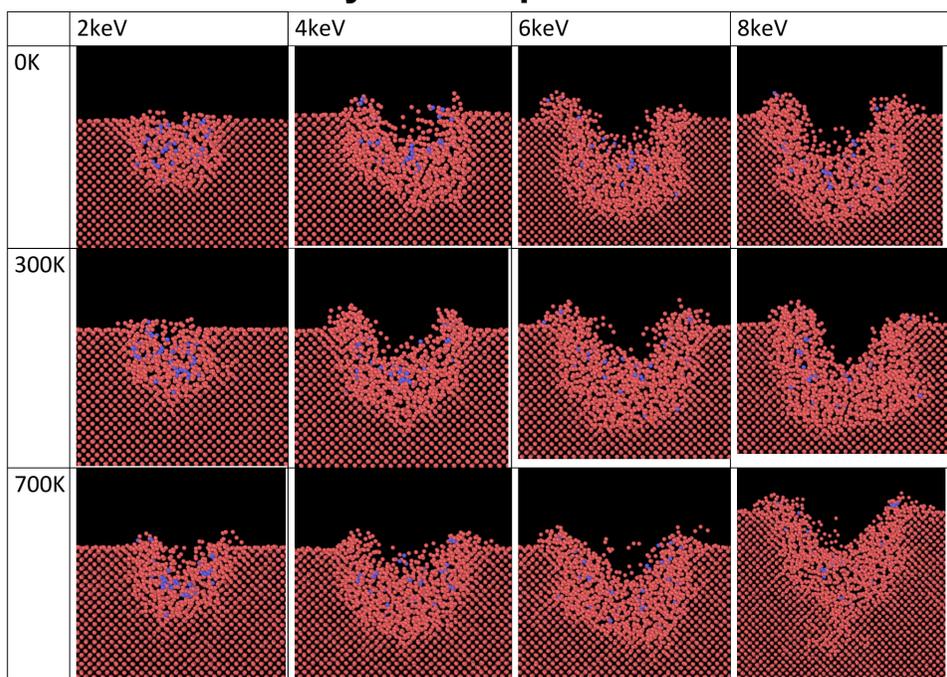


Рис. 1. Кристалл кремния после падения на его поверхность молекулы C₆₀ при различных значениях энергии падения и температуры мишени

На рис. 1 видно, что с увеличением энергии падения фуллера, размер кратера увеличивается. Атомы углерода проникают в кристалл и распределяются внутри. Образуется аморфная область.

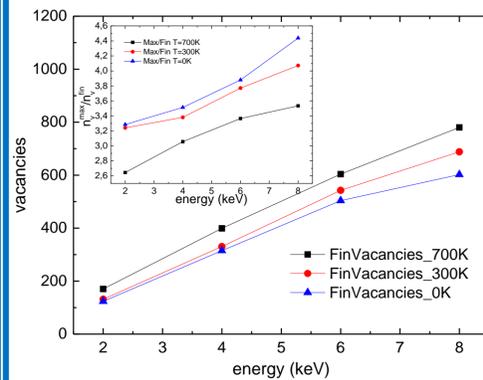


Рис. 5. Количество вакансий после термализации от энергии падения фуллера при различных температурах.

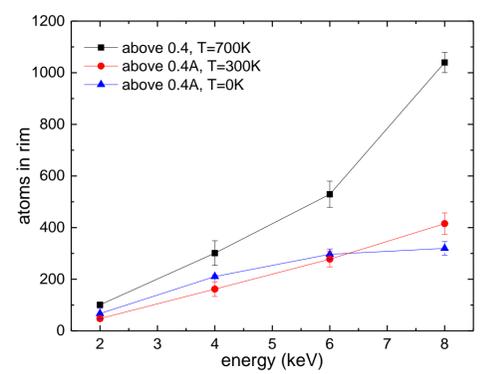


Рис. 6. Количество атомов выше 0.4А над поверхностью кристалла от энергии падения фуллера при различных температурах.

На рис. 6 видно, что с ростом энергии C₆₀ и температуры (от 300 до 700 K) количество атомов в бруствере кратера растет.

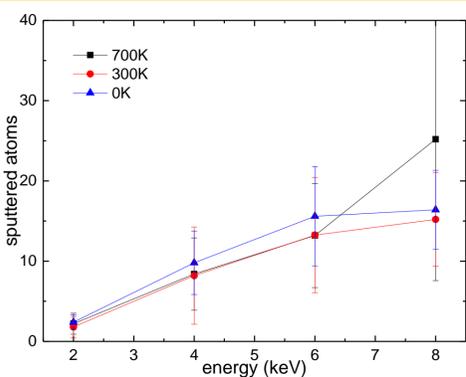


Рис. 2. Распыление от энергии падения фуллера при различных температурах

Распыление

С увеличением энергии падения молекулы C₆₀ количество распыленных атомов растет, а от температуры кристалла распыление практически не зависит.

Распределение атомов углерода

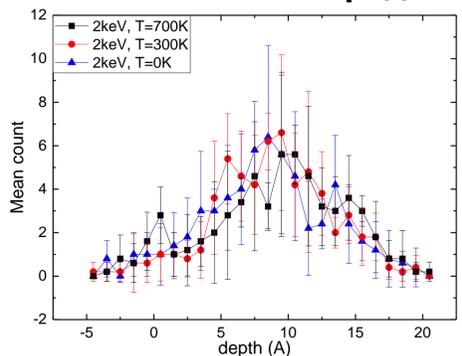


Рис.7. Распределение атомов углерода по глубине при энергии падения фуллера 2кэВ и различных температурах.

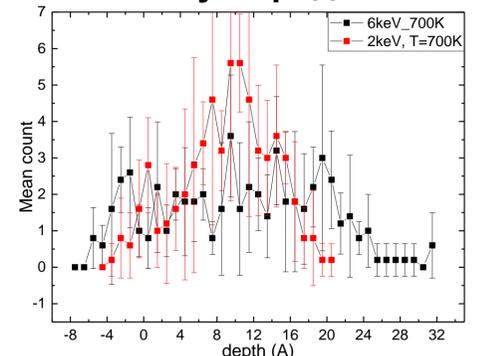


Рис.8. Распределение атомов углерода по глубине при энергии падения фуллера 2 и 6 кэВ и температуре 700K.

Рис. 7 показывает, что распределение углерода по глубине не зависит от температуры кристалла кремния, а из рис. 8 видно, что с увеличением энергии падения молекулы C₆₀ углерод более равномерно распределяется по глубине мишени.

Выводы

- Проведено МД моделирование падения молекулы C₆₀ на поверхность монокристалла Si при разных температурах и энергиях.
- Температура мишени практически не влияет на распыление поверхности и максимальное число вакансий в каскаде смещений.
- С ростом температуры растет конечное количество вакансий и количество атомов в бруствера кратера.
- Распределение углерода по глубине с увеличением энергии молекулы C₆₀ становится равномернее и глубже и не зависит от температуры.