ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА РЕЗУЛЬТАТ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПАДЕНИЯ ИОНА С60 НА ПОВЕРХНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛА КРЕМНИЯ

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

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

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

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

Экспериментально установлено, что при бомбардировке твердотельных мишеней ускоренными ионами С60+ с энергиями порядка 10 кэВ может наблюдаться как рост углеродных пленок, так и распыление. Превалирование того, или иного процесса определяется свойствами вещества мишени, температурой, дозой ионов и составом остаточных газов в рабочей камере. Механизмы происходящих при этом процессов до сих пор остаются невыясненными. Существенную роль должны играть развитие и термализация каскадов столкновений, формируемых при падении иона на поверхность. Одним из широко распространенных методов анализа быстрых (время развития и термализации обычно не превышает 20 пс) каскадных процессов является метод Молекулярно-Динамического (МД) моделирования. Важным вопросом при этом является выбор межатомного потенциала, который бы корректно описывал свойства исследуемой системы. Для описания взаимодействия атомов кремния и углерода, был разработан широко признанный потенциал Терсофа. Взаимодействие между атомами углерода и свойства углеродных структур лучше воспроизводятся потенциалом Airebo.

В докладе будет выполнено сравнение результатов моделирования падения одиночных молекул С60 на (100) поверхность Si, полученных с использованием приведенных потенциалов для энергий падающих ионов в диапазоне от 2 до 14 кэВ, температуре системы от 0 до 1000 К. Показано, что описание каскадных процессов, в основном, совпадают.

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).