

УДК 539.21:539.1

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ КРЕМНИЯ ИОНАМИ C_{60} И РОЛЬ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

© 2024 г. К. П. Карасев^{a, b, *}, Д. А. Стрижкин^b, А. И. Титов^b, П. А. Карасев^{b, **}

^aАкадемический университет им. Ж.И. Алферова, Санкт-Петербург, 195251 Россия

^bПолитехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, 195251 Россия

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

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

Поступила в редакцию 31.08.2023 г.

После доработки 25.10.2023 г.

Принята к публикации 25.10.2023 г.

Методом молекулярно-динамического моделирования проведено исследование процессов при падении молекулярных ионов C_{60} с энергией от 2 до 14 кэВ на поверхность Si(100) при температурах от 0 до 1000 К. Использованы потенциалы взаимодействия Tersoff–ZBL и Airebo, а также учтены электронные потери энергии быстрых частиц. Показано, что при моделировании одиночных событий температура мишени не влияет на развитие каскада смещений, но оказывает влияние на ход процесса его термализации и формирование кратера на поверхности. С повышением энергии увеличивается глубина проникновения углерода в мишень, размеры формируемого кратера и бруствера вокруг него. Коэффициент распыления атомов кремния в этом случае линейно растет с энергией, а в случае атомов углерода выходит на установившееся значение при 10 кэВ. Использование потенциала Tersoff дает при одиночных падениях большее количество распыленных атомов углерода по сравнению с Airebo. При последовательном падении на начальном этапе наблюдается формирование лунки травления, а затем рост углеродной пленки. В отличие от одиночных событий использование потенциала Airebo в случае кумулятивного накопления ионов дает более высокий коэффициент распыления, чем потенциал Tersoff. Образование карбидных связей в кристалле и увеличение их концентрации с ростом флуенса ионов несколько уменьшает количество распыляемых частиц. Поэтому для корректного сравнения результатов моделирования с экспериментом недостаточно использовать результаты анализа одиночных падений, необходимо проведение моделирования кумулятивного накопления флуенса.

Ключевые слова: фуллерен, молекулярно-динамическое моделирование, ионная бомбардировка, C_{60} , поверхностные явления, кремний, кумулятивное падение, дозовые эффекты, потенциалы взаимодействия.

DOI: 10.31857/S1028096024040099, **EDN:** GITLCO

ВВЕДЕНИЕ

Различные методы модификации и исследования поверхностных свойств с использованием бомбардировки ускоренными ионами к настоящему времени заслужили широкое признание. В частности, ионная имплантация используется для селективного внедрения легирующих примесей в технологиях производства полупроводниковых приборов [1], ионно-плазменная обработка поверхности является важным этапом обработки

функциональных покрытий [2]. Помимо атомарных ионов зачастую удобно применять молекулярные и кластерные (состоящие из большого числа атомов) ионы. Известно, что при облучении мишени газовыми кластерами можно как создавать регулярный рельеф нанометрового масштаба, так и выполнять сверхгладкую полировку поверхности [3–5]. Также использование кластерных ионов для распыления анализируемого вещества в методе вторичной ионной масс-спектропии повышает эффективность десорбции больших

молекул и их удельный выход [6–8]. В частности, рассматривается возможность использования для этой цели молекул фуллерена C_{60} с энергией ~ 20 кэВ [8]. Кроме того, облучая поверхность ионами C_{60} , можно получать различные углеродные покрытия, обладающие, например, высокой износостойкостью и низким коэффициентом трения [9], биологической активностью [10], высокой коррозионной стойкостью и низким сопротивлением [11]. И во всех случаях взаимодействие кластеров с поверхностью происходит по сценариям, существенно отличающимся от сценариев при атомарном облучении. Экспериментально установлено [12, 13], что при падении ионов фуллерена на поверхность кремния формируется тонкий слой карбида кремния, и температура мишени T_s играет существенную роль в протекании взаимодействия. Например, облучение ионами C_{60} с энергией 8 кэВ приводит к распылению подложки при $T_s \leq 200^\circ\text{C}$, а при более высоких температурах на ней появляется углеродная пленка. Причины, вызывающие данные эффекты, пока не установлены. Таким образом, помимо практического интереса в применении кластерной бомбардировки есть и фундаментальные вопросы, поскольку процессы, протекающие при взаимодействии ускоренного иона C_{60} с поверхностью мишени, до сих пор не вполне понятны.

В исследовании взаимодействия ускоренных частиц с веществом чрезвычайно полезными оказываются методы компьютерного моделирования, в частности, молекулярной динамики (МД). Для описания взаимодействия атомов в МД-моделировании широко применяют эмпирические потенциалы, которые подбирают и параметризуют для наилучшего воспроизведения свойств рассматриваемой системы. Выбор того или иного вида потенциала будет сказываться на получаемых результатах. Для взаимодействия атомов кремния и углерода можно использовать модифицированный потенциал Tersoff [14], однако он не позволяет корректно описывать формирование сложных углеродных структур. Для этой цели был разработан потенциал Airebo [15]. Два упомянутых потенциала применяли для моделирования падения ионов C_{60} на монокристалл кремния. Так, расчеты, проведенные в [16], показали, что при температуре 0 К количество атомов, распыленных с поверхности, растет с увеличением начальной энергии ионов фуллерена от 1 до 20 кэВ, а атомы углерода проникают в кристалл и распределяются внутри, практически не распыляясь. Между атомами С и Si образуются прочные ковалентные связи, в результате почти все атомы углерода остаются внедренными в поверхность после бом-

бардировки [17, 18]. В результате МД-симуляции последовательных падений нескольких молекул фуллерена на поверхность кремния установлен рост шероховатости мишени [18] и подтверждено формирование карбида кремния SiC [16]. Однако эти результаты получены при поддержании T_s кристалла около 0 К, а для падения одиночных ионов C_{60} – без анализа статистически значимого количества случаев. В [16–18] использован потенциал Tersoff. Также было выполнено МД-моделирование явлений при падении одиночных ионов фуллерена на открытую поверхность монокристалла кремния при температурах от 0 до 700 К и начальной энергии ионов фуллерена 2–8 кэВ [19]. Обнаружено, что температура мишени не влияет на развитие каскада смещений, возникающего при передаче энергии от атомов фуллерена атомам кремния, но оказывает влияние на ход процесса его термализации и формирование кратера на поверхности. Показано, что повышение температуры до 700 К приводит к более эффективному формированию кратера и увеличению размера бруствера по сравнению с 0 и 300 К. В [19] для описания взаимодействия между атомами углерода применяли Airebo, а для атомов кремния – Tersoff. В настоящей работе расширены температурный и энергетический диапазоны. Кроме того, проанализировано влияние выбранного потенциала на результат моделирования как при одиночных падениях, так и при кумулятивном накоплении флуенса ионов C_{60} .

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Исследование явлений, возникающих при облучении поверхности кремния ускоренными ионами C_{60} , проводили методом МД-моделирования с применением свободно распространяемого пакета Lammmps [20]. Для описания взаимодействия между атомами различных типов использованы известные эмпирические потенциалы: для пар С–Si и Si–Si потенциал Tersoff [14], совмещенный с ZBL [21], для описания взаимодействия частиц с высокой энергией. Для пары С–С были рассмотрены два вида потенциалов: вышеупомянутый Tersoff и Airebo [15], который хорошо описывает свойства углеродных структур, в том числе фуллеренов. Потери энергии на возбуждение и ионизацию электронной подсистемы учитывали в виде силы квазитрения для частиц с энергией выше 10 эВ. Исходная система состояла из монокристалла Si с открытой поверхностью (100) и молекулы фуллерена, размещенной на некоторой высоте над мишенью. В латеральных направле-

ниях расчетной ячейки задавали периодические граничные условия. Размер кристалла $24 \times 24 \times 31$ элементарных ячеек ($13 \times 13 \times 16.8$ нм, 144000 атомов) для одиночных падений и $39 \times 39 \times 31$ ($21.1 \times 21.1 \times 16.8$ нм, 403200 атомов) для кумулятивного облучения. Кристалл кремния был предварительно термализован до необходимых температур (0, 300, 700 и 1000 К) [22]. Для диссипации лишней энергии, возникающей при падении иона, вдоль боковых и нижней сторон кристалла применяли термостат Берендсена [23] толщиной в одну элементарную ячейку. Нижние три слоя атомов были зафиксированы.

В начальный момент времени для всех атомов фуллерена задавали одинаковую скорость в направлении поверхности мишени, так чтобы общая кинетическая энергия молекулы соответствовала задаваемому значению (от 2 до 14 кэВ). В конце симуляции проводили анализ расплывшихся частиц и сформировавшихся на поверхности кристалла структур, в частности, глубины и площади кратера, высоты и среднего радиуса бруствера, среднего разброса и распределения по глубине углерода. После этого в случае одиночных падений систему приводили в исходное состояние, молекулу фуллерена перемещали на малое случайное расстояние в пределах 2×2 элементарных ячеек вокруг центральной точки в плоскости, параллельной поверхности мишени, и рассчитывали новую траекторию. Для уменьшения статистического разброса было проведено 50 независимых исследований при каждой температуре мишени и энергии ионов фуллерена. В случае кумулятивного расчета моделировали последовательное падение ионов C_{60} . Для этого над поврежденной структурой добавляли новую молекулу фуллерена, сдвинутую на случайное расстояние в пределах области 5×5 нм в центре мишени, и начинался новый расчет. Также в конце расчета очередной траектории иона C_{60} проводили термостатирование кристалла по всему объему до начальной температуры. Это необходимо, чтобы приблизить результат моделирования к эксперименту. Действительно, достичь плотностей тока, при которых ионы будут падать на выбранную площадь через 5–10 пс, технически невозможно. При использованных, например, в [12, 13] плотностях тока за время между последовательными приходами молекул кристалл будет успевать остыть практически до начальной температуры за счет теплоотвода в объем мишени. Применение термостата на весь объем моделируемого кристалла позволяет избежать перегрева облучаемой области. Время одного события в обоих случаях

варьировалось от 5 до 15 пс и зависело от энергии падения иона C_{60} и температуры мишени. Чтобы избежать попадания ионов в термостат, облучение проводили только в средней области кристалла размером 10×10 элементарных ячеек (5.43×5.43 нм). При этом 100 упавших ионов эквиваленты одному монослою молекул фуллерена и флуенсу облучения $3.4 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Как и в более ранних работах [8, 18, 19], при взаимодействии иона фуллерена с поверхностью мишени происходит локальное разрушение исходной кристаллической структуры мишени и упавшей молекулы. Часть атомов углерода проникает вглубь подложки и формирует связи с кремнием. Возникающие при этом смещения атомов вблизи поверхности приводят к формированию кратера. Часть атомов “выплескивается” над поверхностью мишени, формируя бруствер. Подробнее эти явления рассмотрены, например, в [19]. На рис. 1 показаны зависимости глубины формируемого кратера и высоты бруствера для всех рассмотренных случаев. Видно, что средняя глубина кратера увеличивается с ростом энергии падающего иона C_{60} , средняя высота бруствера также растет с увеличением начальной энергии ионов фуллерена, причем практически линейно. Проникая в кристалл, углерод распределяется по глубине. С увеличением энергии иона C_{60} распределение становится более равномерным, а глубина проникновения атомов углерода увеличивается. Их средний радиальный разброс после падения зависит от энергии сублинейно (рис. 2). Влияние потенциала взаимодействия на формируемые на поверхности структуры оказывается незначительным. Действительно, кривые, полученные при использовании в расчетах как потенциала Терсофа, так и Airebo, при одинаковых параметрах совпадают в пределах статистической ошибки (рис. 1, 2).

Если атомы получают достаточную кинетическую энергию, то они могут оторваться от поверхности и улететь в виде одиночных частиц или связанных групп – кластеров. Основную долю расплывления составляют одиночные атомы кремния и углерода. В составе расплываемых частиц наблюдается большое количество двух- и трехатомных кластеров, например Si_2 , Si_3 , SiC , Si_2C и SiC_2 . Реже встречаются димеры C_2 , а также более крупные структуры. На рис. 3 показаны зависимости количества расплываемых атомов

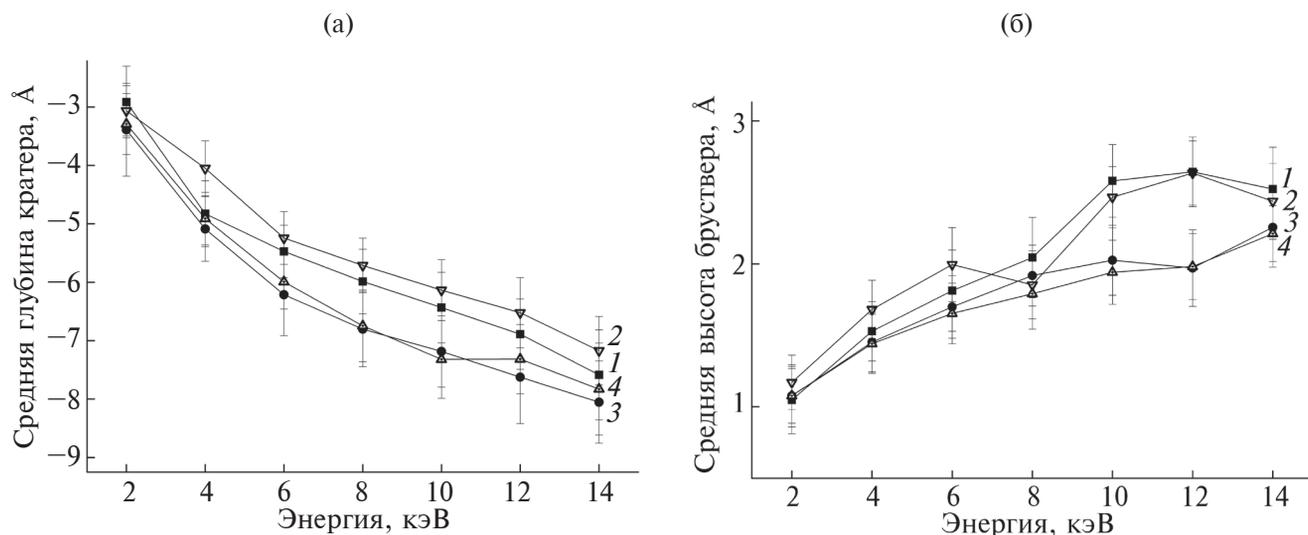


Рис. 1. Средняя глубина кратера (а) и высота брусвера (б) на поверхности кристалла кремния в зависимости от начальной энергии иона C_{60} при температурах 0 (1, 2) и 1000 К (3, 4). Сравнение для потенциалов взаимодействия Airebo (1, 3) и Tersoff (2, 4).

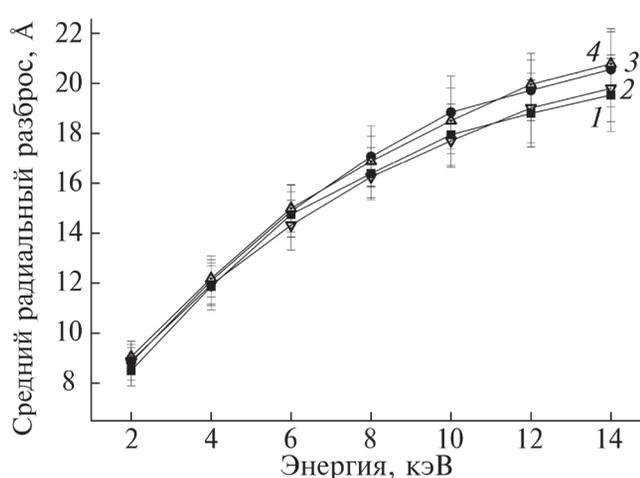


Рис. 2. Среднее значение радиальной координаты атомов углерода в зависимости от начальной энергии иона C_{60} при температурах 0 (1, 2) и 1000 К (3, 4) и потенциалах взаимодействия Airebo (1, 3) и Tersoff (2, 4).

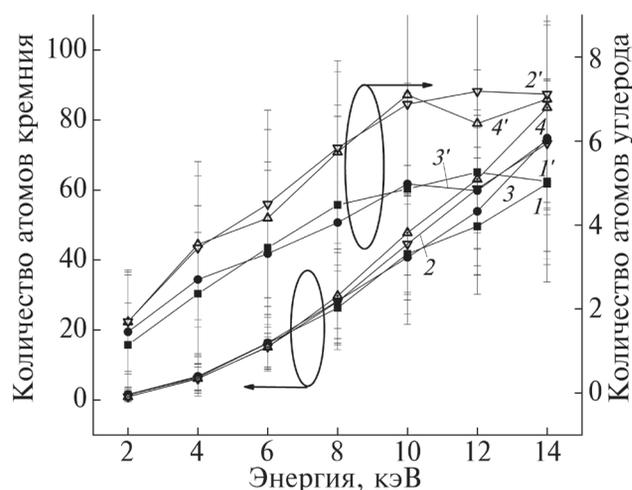


Рис. 3. Среднее количество расплывших атомов кремния (1–4) и углерода (1'–4') при температурах 0 (1, 1', 2, 2') и 1000 К (3, 3', 4, 4') и потенциалах взаимодействия Airebo (1, 1', 3, 3') и Tersoff (2, 2', 4, 4').

кремния и углерода от энергии ионов фуллера при температуре подложки 0 и 1000 К. Из него видно, что количество атомов кремния, выбиваемых из кристалла, сублинейно растет с увеличением исходной энергии иона C_{60} . При энергии от 2 до 8 кэВ коэффициент распыления кремния практически не зависит от вида использованного потенциала. При более высоких энергиях использование потенциала Tersoff дает несколько больше вылетевших атомов кремния на один упавший ион. Их количество, например при $E_{C_{60}} = 10$ кэВ, близко к полученному ранее в [24], где также использован потенциал Tersoff. Отражение атомов углерода с ростом энергии также возрастает,

но при 10 кэВ выходит на установившееся значение. Кроме того, на рис. 3 видно, что при использовании для пары С–С потенциала Tersoff, количество распыляемых атомов углерода оказывается больше по сравнению со случаем Airebo. Во всех рассмотренных случаях температурные зависимости в пределах статистической ошибки не наблюдаются.

В ходе экспериментальных исследований распыления заметного поверхностного эффекта можно достичь при достаточно больших флуенсах. Состав поверхности при этом неизбежно насыщается атомами, составлявшими падающий

кластер, что приводит к изменению ее свойств и, в частности, может влиять на коэффициент распыления. Для того чтобы проанализировать роль этого эффекта, было проведено кумулятивное моделирование накопления флуенса ионов C_{60} .

При последовательном падении ионов C_{60} на начальном этапе на поверхности кристалла наблюдается формирование лунки. Большая часть атомов, смещенных из своих мест, удаляется в качестве распыленных, а остальные формируют брусстер. С увеличением количества упавших ионов приповерхностный слой постепенно насыщается углеродом с формированием карбидных связей. Сходный результат был получен авторами [24], которые проводили моделирование взаимодействия с кремнием молекул фуллерена и модельных кластеров “неона” с массой 12 а.е.м. Во втором случае, когда связи между атомами кластера и мишени не возникали, распыление оказывалось существенно выше. Дно лунки обладает существенной шероховатостью. На рис. 4 показаны изображения поперечных срезов мишени толщиной 2 нм после моделирования 30 последовательных падений молекул фуллерена с энергией 2, 8 и 14 кэВ с использованием потенциала Tersoff. Во всех случаях можно заметить образование переходного слоя. При малой энергии уже наблюдается формирование углеродной пленки на поверхности мишени. С ростом начальной энергии ионов фуллерена толщина переходного слоя увеличивается, отражая более глубокое проникновение атомов углерода вглубь кремния. Формирование лунки наблюдается до существенно большего суммарного количества упавших молекул. Например, при энергии 8 кэВ в глубине кристалла видны области с высокой концентрацией атомов углерода, однако их количество недостаточно для начала роста пленки. Атомная плотность карбида кремния ($9.641 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$) выше, чем атомная плотность кремния ($4.976 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$). Поэтому, несмотря на то, что коэффициент распыления во всех рассмотренных случаях оказывается менее 30 атомов на один ион C_{60} , при энергии 8 и 14 кэВ наблюдается формирование лунки.

Анализ распыления показал, что оно нели-

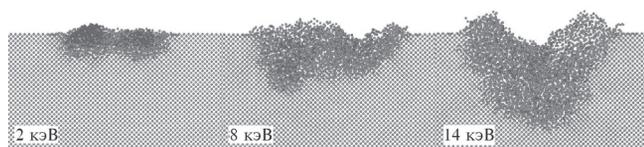


Рис. 4. Поперечный срез кристалла кремния толщиной 20 Å после последовательного падения на его поверхность 30 молекул C_{60} с энергией 2, 8 и 14 кэВ. Атомы Si светлые, атомы C темные.

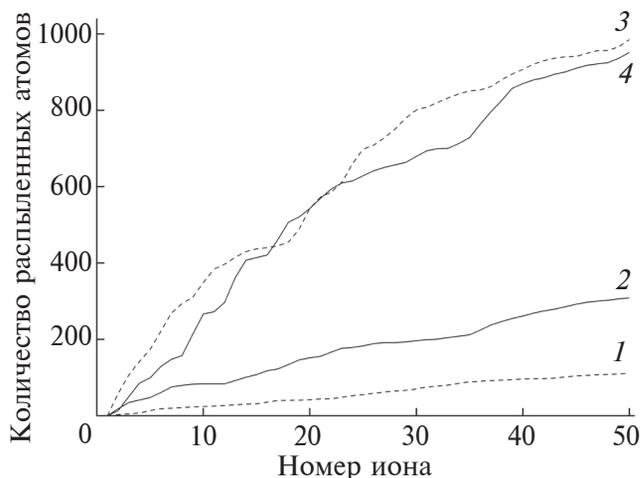


Рис. 5. Общее количество распыленных атомов при последовательном падении ионов C_{60} на поверхность кристалла кремния для энергии 8 (1, 2) и 14 кэВ (3, 4) и потенциалов Tersoff (1, 3) и Airebo (2, 4). Каждые 10 упавших ионов эквиваленты флуенсу $3.4 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

нейно зависит от начальной энергии иона. Интегральное количество распыленных частиц при 0 К в зависимости от номера упавшего иона для энергии 8 и 14 кэВ показано на рис. 5. На начальном этапе наблюдается значительное распыление облучаемой области. Однако по мере насыщения поверхности углеродом количество распыляемых после каждого падения частиц постепенно уменьшается. Этот эффект можно объяснить более низким значением коэффициента распыления карбида кремния по сравнению с кремнием [25]. В составе распыляемых структур при кумулятивном моделировании в основном наблюдаются одиночные атомы кремния и углерода, как это было и в случае одиночных падений. Также видно, что при кумулятивном облучении выбор потенциала взаимодействия влияет на коэффициент распыления. При энергии иона C_{60} , равной 8 кэВ, количество частиц, вылетевших к тридцатому случаю при использовании потенциала Airebo, значительно больше, чем при использовании Tersoff. При энергии 14 кэВ разница не так заметна, однако коэффициент распыления оказывается больше при использовании потенциала Tersoff.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было проведено МД-моделирование результатов облучения поверхности Si(100) ионами фуллерена при температурах от 0 до 1000 К и начальной энергии 2–14 кэВ. Были рассмотрены случаи одиночного падения ионов C_{60} и кумулятивного облучения для изучения влияния дозовых эффектов.

Анализ поверхностных явлений при одиночных событиях показал, что глубина кратера и высота бруствера возрастают с увеличением энергии ионов фуллерена. Средний радиальный разброс атомов кремния растет сублинейно. Влияние выбора потенциала взаимодействия и температурных эффектов не наблюдается во всех рассмотренных случаях. Коэффициент распыления кремния также растет с увеличением энергии, а атомов углерода при 10 кэВ выходит на установившееся значение. В составе вылетающих частиц наблюдаются в основном одиночные атомы кремния и углерода. Использование потенциала Tersoff дает в результатах большее количество распыленных атомов углерода по сравнению с Airebo.

При последовательном падении на начальном этапе наблюдается формирование лунки травления, а затем рост углеродной пленки. В отличие от одиночных событий потенциал Airebo в случае кумулятивного накопления ионов дает более высокий коэффициент распыления. Также обнаружено постепенное уменьшение распыления с ростом флуенса ионов, вызванное формированием карбидных связей в кристалле. Таким образом, оценки распыления кремния и скорости роста пленки по результатам анализа одиночных событий недостаточны. Для корректного сравнения результатов моделирования с экспериментом необходимо моделирование кумулятивного накопления флуенса.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

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

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Аброян И.А., Андронов А.Н., Тутов А.И.* Физические основы электронной и ионной технологии. М.: Высшая школа, 1984. 135 с.
2. *Zhang L.D.J., Zhang X., Wang H., Li H., Li Y., Bu D.* // J. Phys. D. 2021. V. 54. P. 333001.
3. *Redinger A., Hansen H., Linke U., Rosandi Y., Urbassek H., Michely T.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. P. 106103.
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.106103>
4. *Ieshkin A., Kireev D., Ozerova K., Senatulin B.* // Mat. Lett. 2020. V. 272. P. 127829.
<https://www.doi.org/10.1016/j.matlet.2020.127829>
5. *Insepov Z., Hassanein A., Norem J., Swenson D.R.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2007. V. 261. P. 664.
<https://www.doi.org/10.1016/j.nimb.2007.04.134>
6. *Kozole J., Winograd N.* // Surface Analysis and Techniques in Biology / Ed. Smentkowski V.S., Springer Switzerland, 2014. P. 71.
https://www.doi.org/10.1007/978-3-319-01360-2_4
7. *Mahoney C.M.* Cluster Secondary Ion Mass Spectrometry: Principles and Applications. John Wiley & Sons, 2013.
8. *Delcorte A., Garrison B.J.* // J. Phys. Chem. C. 2007. V. 111. P. 15312.
<https://www.doi.org/10.1021/jp074536j>
9. *Khadem M., Pukha V.E., Penkov O.V., Khodos I.I., Belmesov A.A., Nechaev G.V., Kabachkov E.N., Karasev P.A., Kim D.-E.* // Surf. Coat. Technol. 2021. V. 424. P. 127670.
<https://www.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.127670>
10. *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://www.doi.org/10.1016/j.biomaterials.2016.06.029>
11. *Pukha V.E., Glukhov A.A., Belmesov A.A., Kabachkov E.N., Khodos I.I., Khadem M., Kim D.-E., Karasev P.A.* // Vacuum. 2023. V. 218. P. 112643.
<https://www.doi.org/10.1016/j.vacuum.2023.112643>
12. *Pukha V., Popova J., Khadem M., Dae-Eun Kim, Khodos I., Shakhmin A., Mishin M., Krainov K., Titov A., Karasev P.* // International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. Springer Proceedings in Physics / Ed. Velichko E. et al. Cham: Springer, 2021. V. 255. P. 131.
https://www.doi.org/10.1007/978-3-030-58868-7_15
13. *Maleyev M.V., Zubarev E.N., Pukha V.E., Drozdov A.N., Vus A.S., Devizenko A.Yu.* // Metallofiz. Noveishie Tekhnol. 2015. V. 37. P. 91.
<https://www.doi.org/10.15407/mfint.37.06.0775>
14. *Tersoff J.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6991.
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6991>
15. *Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A.* // J. Chem. Phys. 2000. V. 112. P. 6472.
<https://www.doi.org/10.1063/1.481208>
16. *Krantzman K.D., Kingsbury D.B., Garrison B.J.* // Appl. Surf. Sci. 2006. V. 252. P. 6463.
<https://www.doi.org/10.1016/j.apsusc.2006.02.276>
17. *Krantzman K.D., Garrison B.J.* // Surf. Interface Anal. 2011. V. 43. P. 123.
<https://www.doi.org/10.1002/sia.3438>
18. *Krantzman K.D., Wucher A.* // J. Phys. Chem. C. 2010. V. 114. P. 5480.
<https://www.doi.org/10.1021/jp906050f>
19. *Карасев К.П., Стрижжкин Д.А., Тутов А.И., Карасев П.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2023. № 1. P. 74.
20. *Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., Crozier P.S., in't Veld P.J., Kohlmeyer A., Moore S.G., Nguyen T.D., Shan R., Stevens M.J., Tranchida J., Trott C., Plimpton S.J.* // Comp. Phys. Commun. 2022. V. 271. P. 10817.
<https://www.doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
21. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* The Stopping and Range of Ions in Matter // Treatise on Heavy-Ion Science / Ed. Bromley D.A. Boston: Springer, 1985. P. 93.
https://www.doi.org/10.1007/978-1-4615-8103-1_3

22. Karasev K., Strizhkin D., Karaseov P. // IEEE Xplore Proceed. of the 2022 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics, EExPolytech 2022. P. 242. <https://www.doi.org/10.1109/EExPolytech56308.2022.9950888>
23. 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://www.doi.org/10.1063/1.448118>
24. Krantzman K.D., Garrison B.J. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 652. <https://www.doi.org/10.1016/j.nimb.2008.11.055>
25. Бериш П. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. М.: Мир, 1984. 336 с.

Modeling of Silicon Irradiation with C_{60} Ions and the Role of the Interaction Potential

K. P. Karasev^{1,2,*}, D. A. Strizhkin², A. I. Titov², P. A. Karaseov^{2,**}

¹Alferov University, Saint-Petersburg, 195251 Russia

²Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic university, Saint-Petersburg, 195251 Russia

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

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

Molecular dynamic simulation was used to study the processes of impact of 2–14 keV C_{60} molecular ions on the Si(100) surface at temperatures of 0–1000 K. Tersoff–ZBL and Airebo interaction potentials were used and the electronic energy loss of fast particles was taken into account. It is shown that when simulating single impact events, the target temperature does not affect the development of the displacement cascade, but affects its thermalization and the formation of the crater on the surface. As the energy increases, the carbon penetration depth, the size of the formed crater and the rim increase. The sputtering coefficient of silicon atoms in this case increases linearly with energy, and in the case of carbon atoms it reaches a steady-state value at 10 keV. Using the Tersoff potential gives a larger number of atomized carbon atoms for single impact events compared to Airebo potential. During cumulative events, the formation of an etch pit is observed at the initial stage, followed by the carbon film growth. In contrast to single events, the use of the Airebo potential in the case of cumulative ion accumulation gives a higher sputtering coefficient than the Tersoff potential. The formation of carbide bonds in the crystal and an increase in their concentration with ion fluence slightly reduces the number of sputtered particles. Therefore, for correct comparison of simulation results with experiment, it is not enough to use the results of the analysis of single impact event. It is necessary to perform the simulation of the cumulative fluence accumulation.

Keywords: fullerene, molecular dynamics simulations, ion bombardment, C_{60} , surface phenomena, silicon, cumulative impacts, dose effects, interaction potential.