

Научная статья

УДК 539.21

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16407>

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПАДЕНИЯ ИОНА ФУЛЛЕРЕНА НА ПОВЕРХНОСТЬ КРЕМНИЯ

К. П. Карасев^{1, 2} ✉, Д. А. Стрижкин¹, П. А. Карасев¹, А. И. Титов¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

² Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия
✉ kir.karasyov2017@yandex.ru

Аннотация. В работе выполнено моделирование взаимодействия ускоренных ионов фуллерена C_{60} с монокристаллом кремния. Исследовано влияние размеров модельного монокристалла на получаемые параметры кратера, образующегося в мишени при ударе, и распыление веществ мишени и фуллерена. Предлагаются причины возникновения вычислительных артефактов: это возврат энергии ударной волны через периодическую границу и не вполне корректное описание распределения принесенной энергии между атомами мишени. Установлено, что для получения достоверных (без размерных эффектов) результатов моделирования акта падения на монокристалл ионов C_{60} , обладающих энергиями 8 – 14 кэВ, необходимо использовать монокристаллы с размерами поверхности не менее 11×11 нм.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, ион фуллерена C_{60} , кремний, размерный эффект, кристалл, распыление

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

Для цитирования: Карасев К. П., Стрижкин Д. А., Карасев П. А., Титов А. И. Размерные эффекты при молекулярно-динамическом моделировании падения иона фуллерена на поверхность кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 76–85. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16407>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16407>

SIZE EFFECTS IN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF A FULLERENE ION IMPACT ON THE SILICON SURFACE

K. P. Karasev^{1, 2} ✉, D. A. Strizhkin¹, P. A. Karasev¹, A. I. Titov¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia

✉ kir.karasyov2017@yandex.ru

Abstract. In the paper, the interaction of an accelerated C_{60} fullerene ion with silicon monocrystal surface has been studied using molecular dynamics simulation. The dependence of a resulting crater size and sputtering yield on the initial size of the target was obtained. We proposed that computational artifacts revealed in simulations appeared due to two main reasons: shock waves raised by impinging the C_{60} ion, came back through the periodic boundary

increasing the temperature around the impact point; dissipation of the energy, brought to the surface by the fullerene molecule, between small amount of atoms in the small cell might also affect the simulated results. It was established that 11×11 nm is the least size of lateral crystal dimensions required for the valid results of the simulation of the 8 – 14 keV C_{60} ion impact.

Keywords: molecular dynamics simulation, C_{60} fullerene ion, silicon, size effect, crystal, sputtering

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Karasev K. P., Strizhkin D. A., Karaseov P. A., Titov A. I., Size effects in molecular dynamics simulations of a fullerene ion impact on the silicon surface, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 76–85. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16407>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Метод молекулярно-динамического (МД) моделирования широко используется в современной науке для изучения различных явлений на микроуровне. Он заключается в моделировании эволюции системы объектов (атомов) во времени, которая рассчитывается с помощью численного интегрирования уравнений движения. В приближении классической механики, движение ансамбля частиц может быть однозначно задано гамильтонианом, который определяется совокупностью обобщенных координат и импульсов. Этот гамильтониан характеризует полную энергию системы и полностью описывает ее динамическую природу. С помощью метода МД можно исследовать как простые кристаллические структуры, так и сложные биологические молекулы [1]. Метод МД также часто используют для исследования эффектов, возникающих при облучении различных мишеней ускоренными ионами. С помощью МД-моделирования были изучены механизмы формирования дефектов структуры [2] и рельефа поверхности мишени [3] при ионной бомбардировке. В частности, определены зависимости функции массопереноса и формы рельефа, получающегося на поверхности, от начального угла бомбардировки [3]. Кроме того, во многих работах изучали распыление ионов, падающих на поверхность: количество и состав вылетающих частиц, их угловое распределение по значениям начальной энергии бомбардирующих ионов [4].

Расчеты обычно направлены на определение сил, с которыми частицы взаимодействуют друг с другом, поскольку их значения нужны, чтобы затем рассчитывать координаты и импульсы атомов в последующие моменты времени. Результирующая сила обусловлена потенциалом взаимодействия и пространственной конфигурацией частиц и вычисляется для каждого момента времени.

Известно множество функций, разработанных для описания взаимодействия между частицами, например, парный потенциал Леннарда-Джонса [5], который позволяет вычислять силу взаимодействия двух атомов в зависимости от расстояния между ними. Его часто используют для моделирования двумерных структур, таких как графен или дихалькогениды переходных металлов. Однако парные потенциалы не учитывают зависимостей силы связи от направлений и положений соседних частиц в пространстве, что сужает сферу их применимости. Поэтому были разработаны многочастичные потенциалы, в частности, потенциал Терсоффа [6] и Стиллинджера – Вебера [7]. При определенных значениях параметров они хорошо описывают свойства монокристалла кремния, поэтому часто используются при вычислениях.

Важной особенностью, которую необходимо учитывать при проведении МД-симуляций, является ограниченность размеров рассматриваемой системы. Моделировать поведение макроскопических объектов с их помощью практически невозможно. Например, в экспериментах по бомбардировке поверхности ионами фуллерена [8] диаметр пучка

может составлять от 0,1 до 5 мм, тогда как размеры облучаемых образцов – еще больше. Время облучения составляет от десятков секунд до нескольких часов. Однако моделирование движения такого количества атомов требует слишком большой вычислительной мощности, поэтому приходится использовать модели, включающие всего несколько десятков или сотен тысяч атомов. По сторонам мишени задаются периодические граничные условия, а для соответствия модели реальному образцу, на движение крайних слоев атомов кристалла дополнительно накладываются термостатирующие условия, позволяющие регулировать потоки тепла и тем самым дополнительно сокращать время расчета.

Из проведенных ранее исследований [9] известно, что в области вокруг точки падения кластерного иона появляется кратер, а по его краю формируется небольшое скопление атомов выше поверхности – бруствер. Кроме того, для ионов C_{60} установлено, что если их начальная энергия превышает 1 кэВ, то при падении на поверхность монокристалла кремния структура кластера полностью разрушается [10]. Атомы углерода проникают вглубь мишени и распределяются определенным образом, при этом часть частиц улетает с поверхности. Такие частицы называются распыленными и могут состоять как из одиночных атомов, так и из их конгломератов – кластеров.

При падении ускоренного иона на поверхность, его энергия передается атомам мишени, а часть ее (особенно при падении молекул или кластеров, состоящих их десятков и более атомов) может распространяться вглубь кристалла в виде ударной волны. Как уже отмечалось выше, размер применяемой при расчетах ячейки значительно влияет на вычислительные мощности и затрачиваемое расчетное время. С другой стороны, распространение ударной волны по модели кристалла малого размера и процесс диссипации энергии, принесенной ионом в этой модели, могут существенно отличаться от таковых в реальной мишени. Соответственно, моделирование будет давать некорректные величины получаемых в результате расчета эффектов, таких как распыление, образование кратера и т. п.

В настоящей работе проведено сравнение результатов моделирования одиночных случаев падения иона фуллерена C_{60} с энергиями 8 и 14 кэВ на поверхность монокристалла кремния, обладающего разными размерами, и проанализировано влияние этих размеров на получаемые результаты.

На основе полученных данных даются рекомендации по выбору оптимального размера расчетной ячейки для моделирования взаимодействия ускоренных молекул фуллерена с монокристаллом кремния.

Описание модели

Для проведения расчетов методом МД-моделирования использовался свободно распространяемый пакет LAMMPS [11]. Парное взаимодействие всех типов атомов описывалось с помощью потенциала Терсоффа [6]. Для описания взаимодействия частиц, обладающих высокой энергией, он был дополнен гладкошпигитым потенциалом ZBL [12]. Исходная система состояла из кристалла кремния с открытой поверхностью (100), над которой на некоторой высоте была расположена молекула фуллерена C_{60} .

В латеральных направлениях применялись периодические граничные условия; три нижних слоя атомов были зафиксированы. По боковым и нижней сторонам кристалла применялся термостат Берендсена [13], состоящий из слоя атомов кремния толщиной в одну элементарную ячейку.

Температура мишени составляла примерно 0 К. Потери энергии быстрых частиц на взаимодействие с электронами мишени (электронные потери) учитывались как сила квазитрения, применяемая для частиц с энергией более 10 эВ. Рассматривалось несколько вариантов поперечных размеров мишени (в нм):

$$5,4 \times 5,4; 8,0 \times 8,0; 11,0 \times 11,0; 22 \times 22; 33 \times 33; 44 \times 44,$$

что соответствует значениям (в длинах элементарных ячеек)

$$10 \times 10, 15 \times 15, 20 \times 20, 40 \times 40, 60 \times 60 \text{ и } 80 \times 80.$$

Значения толщины мишени брались равными 11, 17 и 34 нм, т. е. в длинах ребра элементарной ячейки – 20, 31 и 63; длина ребра элементарной ячейки кремния равна 0,357 нм.

В начальный момент времени всем атомам молекулы C_{60} задавалась одинаковая скорость в нормальном направлении к поверхности мишени. Энергия падения фуллерена при этом принимала значения 8 и 14 кэВ, а исходная температура кристалла кремния равнялась 0 К. При расчетах использовался переменный временной шаг для увеличения точности вычислений на начальном этапе, а также для ускорения вычислений после того, как энергия частиц достаточно уменьшится.

Наибольшее значение временного шага составляло 1 фс. Выбор общего времени моделирования зависел от начальной энергии фуллерена, а именно – составлял 5 и 10 пс для значений 8 и 14 кэВ соответственно. После завершения моделирования проводился анализ структур, образованных на поверхности, и параметров распыленных частиц по методикам, описанным в работе [14]. Далее система приводилась в исходное состояние: молекулу фуллерена перемещали на малое случайное расстояние в латеральных направлениях (в пределах 2×2 элементарных ячейки) и начинался расчет новой траектории. Для каждой комбинации «размер кристалла – энергия иона C_{60} » рассчитывалось 50 независимых траекторий с целью уменьшить статистический разброс результатов.

Результаты и их обсуждение

Как было сказано во введении, при проведении МД-моделирования вычисления производятся для кристаллов с малыми размерами и периодическими граничными условиями. Добавление термостата вдоль граничных слоев обеспечивает диссипацию избытков энергии, принесенных в мишень ускоренным ионом. В то же время, при слишком малых размерах кристалла могут возникать различные вычислительные артефакты (т. е. результаты, не отображающие действительные процессы), поэтому необходимо по возможности избегать подобных явлений. Была проведена серия расчетов падений молекулы с энергиями 8 и 14 кэВ на кристаллы кремния различных размеров.

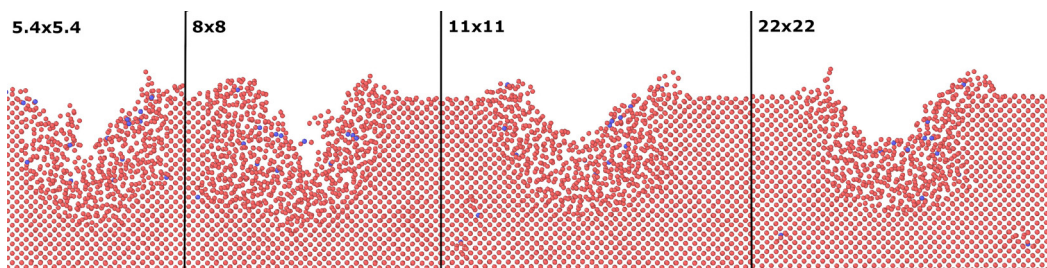


Рис. 1. Поперечные срезы области кремниевой мишени толщиной 10 Å после падения иона фуллерена C_{60} с энергией 8 кэВ (4 варианта поперечных размеров мишени (в нм))

На рис. 1 показано, как меняется вид поперечного среза толщиной 1 нм в области падения фуллерена с энергией 8 кэВ по мере увеличения поперечного размера мишени. Здесь глубина модельного кристалла во всех случаях равна 17 нм (31 длина элементарной ячейки кремния). Видно, что с увеличением размера в латеральных направлениях форма кратера изменяется: он становится шире и более сферическим. Кроме того, с высокой вероятностью несколько изменяется объем аморфизованной области мишени.

Рассмотрим изменение формы кратера более подробно, используя методики определения его объема, глубины и площади открытия, предложенные в работе [14]. На рис. 2,а показаны зависимости объема образующегося кратера от поперечных размеров модельного кристалла при постоянном значении толщины 17 нм. Нетрудно заметить, что при обоих значениях энергии объем кратера увеличился примерно в 2 раза с увеличением размера модели от 5,43 до 21,70 нм (от 10 до 40 элементарных ячеек). Этот эффект оказывается еще более выраженным, если увеличивать площадь открытия кратера, которую мы определяем на уровне первоначальной поверхности мишени [14]. В случае бомбардировки фуллереном с энергией 8 кэВ она изменяется от 3,0 до 5,5 нм², а с энергией 14 кэВ – от 3,5 до 8,0 нм². Увеличение же поперечных размеров модели до 20×20 нм и более практически не влияет на формирование кратера (см. рис. 2). Отметим (см. рис. 2,с), что максимальная глубина кратера практически не зависит от используемых поперечных размеров мишени.

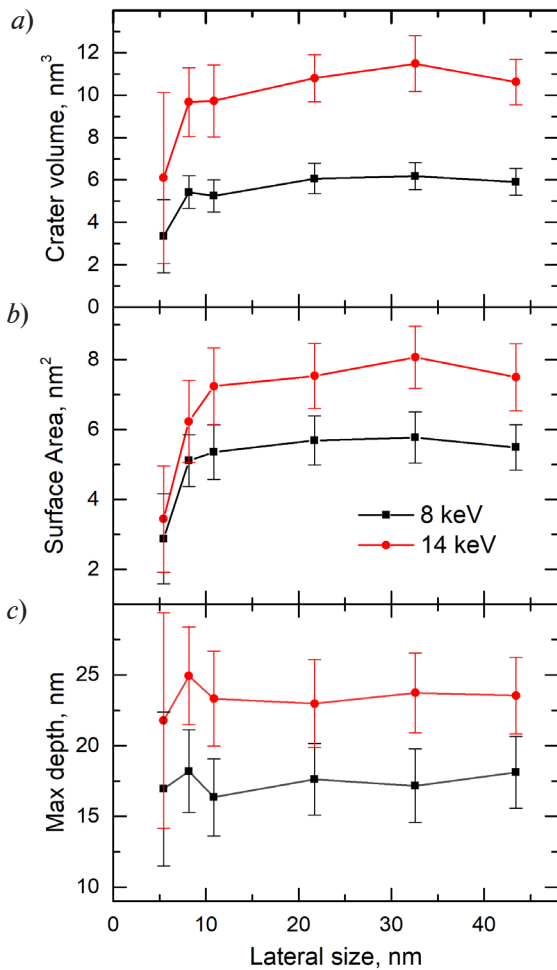


Рис. 2. Полученные зависимости объема (a), площади поверхности (b) и максимальной глубины (c) кратера, образующегося в кремниевой мишени глубиной 17 нм, от ее поперечных размеров. Приведены результаты для значений энергии иона C_{60} 8 и 14 кэВ

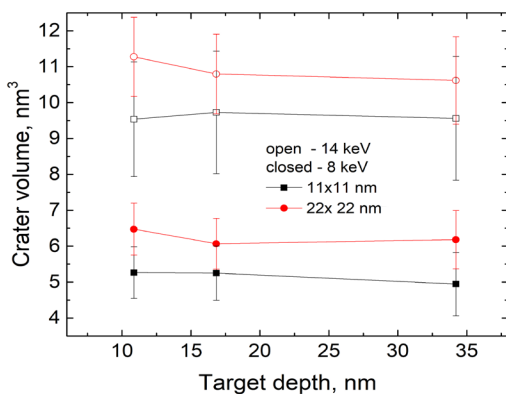


Рис. 3. Расчетные зависимости среднего объема кратера, образующегося при падении иона фуллерена с энергиями 8 и 14 кэВ, от глубины модельной мишени при поперечных размерах кристалла, равных 11×11 и 22×22 нм

Помимо поперечных размеров, существенную роль может играть и толщина рассматриваемого слоя мишени. Для выяснения этого вопроса была проведена серия расчетов с разными значениями глубины модели при поперечных размерах кристалла равных 11×11 и 22×22 нм. Полученные значения объема кратера показаны на рис. 3. Видно, что уменьшение глубины от 17 до 11 нм приводит к некоторым изменениям в значениях получаемых объемов, в то время как ее увеличение до 34 нм никак не сказывается на результатах. Площадь раскрытия кратера и его глубина также практически не зависят от толщины расчетной модели в рассмотренном диапазоне. Таким образом, при моделировании падения фуллеренов с энергиями 8 – 14 кэВ поперечные размеры модели играют более существенную роль в формировании возможных вычислительных артефактов, чем ее толщина, если последняя превышает 10 – 15 нм.

Как уже было упомянуто, при падении иона фуллерена часть атомов кремния получает кинетическую энергию, достаточную для преодоления сил межатомного притяжения, и вылетает с поверхности в виде распыленных частиц. Очевидно, что размеры расчетной модели могут сильно влиять на характеристики распыления, получаемого в результате моделируемого воздействия.

На рис. 4,а показаны полученные зависимости полного количества распыленных атомов и количества отраженных атомов углерода от поперечных размеров мишени. Видно, что при их увеличении в латеральных направлениях от 5×5 до 11×11 нм общее количество вылетающих частиц снижается приблизительно в 2 раза. Еще более заметно изменяется количество отраженных атомов углерода. Действительно, расчет с самой маленькой ячейкой дает 12 – 13 распыленных атомов углерода и зависит от энергии падающего фуллерена. При переходе к ячейке размером 11×11 нм оно уменьшается до 6 – 7. Дальнейшее увеличение поперечных размеров кристалла не влияет на получаемое распыление.

Сходная картина наблюдается и при анализе угловых распределений распыленных частиц (рис. 4,б). Видно, что для кристалла с малой площадью поверхности распределение имеет выраженный максимум в направлении 25° от нормали. С ростом размера распределение становится более симметричным, а максимум смещается к

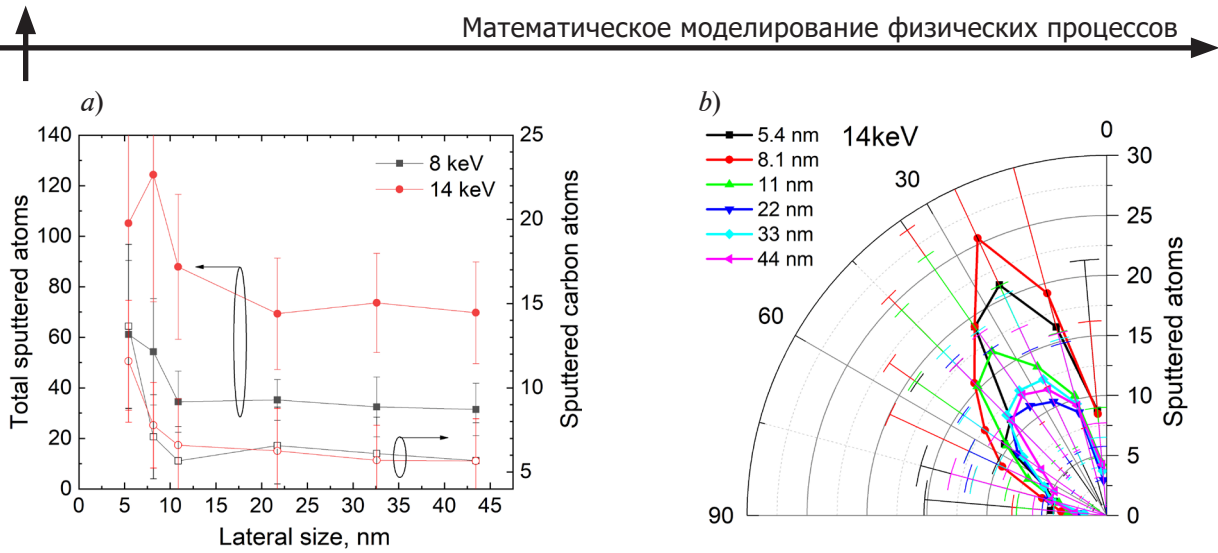


Рис. 4. Зависимости полного количества распыленных частиц и отраженных атомов углерода от поперечных размеров мишени (а), а также угловые распределения распыленных атомов для разных поперечных размеров кристалла глубиной 17 нм.

Показаны случаи падения иона фуллерена C_{60} с энергиями 8 и 14 кэВ (а), а также 14 кэВ (б)

направлению $35 - 40^\circ$. Дальнейшее увеличение ячейки в диапазоне $22 - 44$ нм не приводит к изменению получаемого распределения.

Отметим, что величина статистического разброса получаемых значений как полного, так и дифференциального распыления, ощутимо снижается при использовании мишени размером 22×22 нм и больших. Варьирование глубины модельного кристалла практически не сказывается ни на абсолютном количестве распыленных частиц, ни на их распределениях.

Для того чтобы разобраться в причинах, приводящих к появлению обнаруженных вычислительных артефактов, было проанализировано распространение ударных волн, возникающих в мишени. На рис. 5 показаны характерные картины, полученные путем МД-моделирования, которые могут возникать в ходе взаимодействия в моделях глубиной 17 нм при разных поперечных размерах. Цвета атомов (мелкие кружки) отражают разные значения их кинетической энергии.

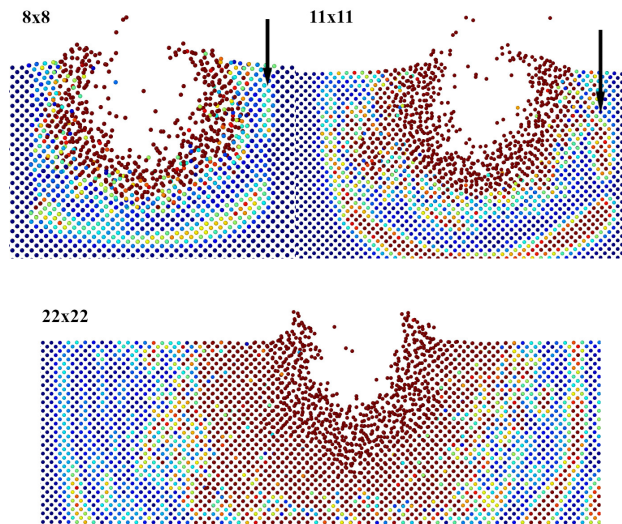


Рис. 5. Характерные виды поперечного среза (толщина 10 \AA) модели глубиной 17 нм, возникающие в ходе взаимодействия иона фуллерена с мишенью при трех разных поперечных размерах мишени (в нм).

Цвета атомов (мелкие кружки) отражают разные значения их кинетической энергии (см. таблицу); стрелками указаны участки волн, прошедшие сквозь периодическую границу и распространяющиеся к области образования кратера

Таблица

Параметры отображения атомов мишени (см. рис. 5)

Поперечный размер мишени, нм	Кинетическая энергия атомов кремния, эВ	Промежуток времени, пс
8 × 8 × 17	0 – 0,20	0,4
11 × 11 × 17	0 – 0,05	0,5
22 × 22 × 17	0 – 0,01	1,1

Примечания. 1. Представлены промежутки времени между моментами касания поверхности ионом C_{60} и фиксациями паттернов, приведенных на рис. 5.

2. Ион C_{60} обладал энергией 8 кэВ.

На двух верхних паттернах (см. рис. 5, модели размером 8 × 8 и 11 × 11 нм) стрелками показаны участки волн, прошедшие сквозь периодическую границу и распространяющиеся в направлении не от области образования кратера, а к ней. В случае же моделирования на ячейке 22 × 22 нм подобного явления обнаружить не удалось: все видимые волны распространялись от точки падения и угасали в области термостата.

В таблице приведены моменты времени, в которые сделаны снимки, и диапазоны энергий, использованные для удобства отображения волновых процессов в разных случаях. Отметим, что значения энергии атомов кремния достигают 0,20 и 0,05 эВ в ячейках размерами 8 × 8 и 11 × 11 нм соответственно, т. е. рассчитываемые значения температуры вблизи кратера превышают 900 К. В ячейке размером 22 × 22 нм все атомы имеют энергию менее 0,01 эВ. Таким образом, энергия, принесенная ионом фуллерена, не успевает рассеяться в объем мишени при малых размерах ячейки и возвращается в область падения через периодические границы; это приводит к усиленной релаксации возникших дефектов и уменьшению размеров кратера за счет поддержания повышенной температуры в течение более длительного времени, чем в случае модельных кристаллов большего размера. С эффектом возвратной ударной волны может быть связано и усиление распыления, в том числе и в направлениях, расположенных ближе к нормали. В случае больших ячеек рассеяние и распределение принесенной энергии между атомами происходят более равномерно и лучше соответствуют картине, которая реализуется в экспериментальных условиях.

Заключение

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия иона фуллерена C_{60} , обладающего энергиями 8 и 14 кэВ, с поверхностью монокристалла кремния. В частности, исследовано влияние размеров этого монокристалла на получаемые результаты.

Обнаружено, что при энергии 8 кэВ и поперечных размерах менее 11 × 11 нм возникают различные вычислительные артефакты как в формировании кратера в мишени, так и в распылении частиц, вызванном ее бомбардировкой. Вариация глубины модельного кристалла в диапазоне от 11 до 33 нм практически не оказывала влияния на получаемые результаты. При энергии падающего иона фуллерена 14 кэВ, размеров ячейки 11 × 11 нм оказывалось недостаточно, поскольку при них были обнаружены несколько завышенные величины коэффициента распыления, хотя в формировании кратера артефактов не наблюдалось.

Как установлено, причинами возникновения артефактов являлись, во-первых, возврат энергии, принесенной фуллереном через периодические границы в область формирования кратера, и во-вторых, не совсем корректное расчетное распределение принесенной энергии между атомами мишени в случае малых моделей.

Анализ полученных результатов позволил сделать вывод, что моделирование взаимодействия с мишенью иона C_{60} , обладающего кинетической энергией менее 8 кэВ, целесообразно проводить на модели размерами 11 × 11 нм, а для случая энергии 14 кэВ рекомендуется использовать ячейки больших размеров в латеральных направлениях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Arnittali M., Rissanou A. N., Amprazi M., Kokkinidis M., Harmandaris V.** Structure and thermal stability of wtRop and RM6 proteins through all-atom molecular dynamics simulations and experiments // *International Journal of Molecular Sciences*. 2021. Vol. 22. No. 11. P. 5931.
2. **Ullah M. W., Kuronen A., Nordlund K., Djurabekova F., Karaseov P. A., Titov A. I.** Atomistic simulation of damage production by atomic and molecular ion irradiation in GaN // *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 112. No. 4. P. 043517.
3. **Maciążek D., Kański M., Postawa Z.** Intuitive model of surface modification induced by cluster ion beams // *Analytical Chemistry*. 2020. Vol. 92. No. 10. Pp. 7349–7353.
4. **Aoki T., Matsuo J.** Molecular dynamics study of surface modification with a glancing angle gas cluster ion beam // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. 2007. Vol. 255. No. 1. Pp. 265–268.
5. **Lennard-Jones J. E.** On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas // *Proceedings of the Royal Society A, London*. 1924. Vol. 106. No. 738. Pp. 463–477.
6. **Tersoff J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // *Physical Review B*. 1988. Vol. 37. No. 12. Pp. 6991–7000.
7. **Stillinger F. H., Weber T. A.** Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Physical Review B*. 1985. Vol. 31. No. 8. Pp. 5262–5271.
8. **Khadem M., Pukha V., Penkov O., Khodos I., Belmesov A., Nechaev G., Kabachkov E., Karaseov P., Kim D.-E.** Formation of wear-resistant graphite/diamond-like carbon nanocomposite coatings on Ti using accelerated C₆₀-ions // *Surface and Coatings Technology*. 2021. Vol. 424. 25 October. P. 127670.
9. **Aoki T., Seki T., Matsuo J.** Molecular dynamics simulations for gas cluster ion beam processes // *Vacuum*. 2010. Vol. 84. No. 8. Pp. 994–998.
10. **Скрипов И. Н., Карасев К. П., Стрижкин Д. А., Карасев П. А.** Исследование поверхностных явлений при падении ускоренного иона C₆₀ на монокристалл кремния // *Неделя науки ИЭиТ (Институт электроники и телекоммуникаций). Материалы Всероссийской конференции*. СПб., СПбПУ. 15–19 ноября 2021. С. 55–57.
11. **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 // *Computer Physics Communications*. 2022. Vol. 271. February. P. 108171.
12. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.** The stopping and range of ions in matter (Book series: Stopping and range of ions in matter. Vol. 1). New York: Pergamon, 1985. 321 p.
13. **Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., van Gunsteren W. F., DiNola A., Haak J. R.** Molecular dynamics with coupling to an external bath // *The Journal of Chemical Physics*. 1984. Vol. 81. No. 8. Pp. 3684–3690.
14. **Karasev K., Strizhkin D., Karaseov P.** The way to analyze MD simulation results of cluster ion bombardment // *IEEE Xplore Proceedings of the 2023 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech-2023)*. St. Petersburg, SPbPU, October 19–20, 2023. Pp. 282–284.

REFERENCES

1. **Arnittali M., Rissanou A. N., Amprazi M., et al.**, Structure and thermal stability of wtRop and RM6 proteins through all-atom molecular dynamics simulations and experiments, *Int. J. Mol. Sci.* 22 (11) (2021) 5931.
2. **Ullah M. W., Kuronen A., Nordlund K., et al.**, Atomistic simulation of damage production by atomic and molecular ion irradiation in GaN, *J. Appl. Phys.* 112 (4) (2012) 043517.
3. **Maciążek D., Kański M., Postawa Z.**, Intuitive model of surface modification induced by cluster ion beams, *Anal. Chem.* 92 (10) (2020) 7349–7353.
4. **Aoki T., Matsuo J.**, Molecular dynamics study of surface modification with a glancing angle gas cluster ion beam, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B.* 255 (1) (2007) 265–268.
5. **Lennard-Jones J. E.**, On the determination of molecular fields. – II. From the equation of state of a gas, *Proc. R. Soc. Lond.* 106 (738) (1924) 463–477.

6. Tersoff J., New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, Phys. Rev. B. 37 (12) (1988) 6991–7000.
7. Stillinger F. H., Weber T. A., Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, Phys. Rev. B. 31 (8) (1985) 5262–5271.
8. Khadem M., Pukha V., Penkov O., et al., Formation of wear-resistant graphite/diamond-like carbon nanocomposite coatings on Ti using accelerated C_{60} -ions, Surf. Coat. Technol. 424 (25 Oct) (2021) 127670.
9. Aoki T., Seki T., Matsuo J., Molecular dynamics simulations for gas cluster ion beam processes, Vacuum. 84 (8) (2010) 994–998.
10. Skripov I. N., Karasev K. P., Strizhkin D. A., Karasev P. A., Issledovaniye poverkhnostnykh yavleniy pri padenii uskorennoy iony C_{60} na monokristall kremniya [Study of surface phenomena in the impact of an accelerated C_{60} ion on a Si monocrystal], In book of abstracts: Proceedings of All-Russian Conference “Scientific week at Institute of Electronics and Telecommunications of St. Petersburg Polytechnical University”, Nov. 15–19 2021, SPb. (2021) 55–57 (in Russian).
11. 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. Commun. 271 (Febr) (2022) 108171.
12. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U., The stopping and range of ions in matter (Book series: Stopping and range of ions in matter. Vol. 1), Pergamon, New York, 1985.
13. Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., van Gunsteren W. F., et al., Molecular dynamics with coupling to an external bath, J. Chem. Phys. 81 (8) (1984) 3684–3690.
14. Karasev K., Strizhkin D., Karasev P., The way to analyze MD simulation results of cluster ion bombardment, IEEE Xplore Proc. 2023 Int. Conf. Electric. Eng. Photon. (EEXPolytech-2023), Oct. 19–20 2023, St. Petersburg, SPbPU, (2023) 282–284.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАРАСЕВ Кирилл Платонович – инженер-исследователь Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, студент Академического университета им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

kir.karasyov2017@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-0969-0162

СТРИЖКИН Денис Александрович – лаборант-исследователь Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

strdenis02@gmail.com

ORCID: 0009-0003-1062-8360

КАРАСЕВ Платон Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

platon.karaseov@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-2511-0188

ТИТОВ Андрей Иванович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

andrei.titov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-4933-9534

THE AUTHORS

KARASEV Kirill P.

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Alferov University of RAS*
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kir.karasyov2017@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-0969-0162

STRIZHKIN Denis A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
strdenis02@gmail.com
ORCID: 0009-0003-1062-8360

KARASEOV Platon A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
platon.karaseov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2511-0188

TITOV Andrei I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
andrei.titov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

*Статья поступила в редакцию 01.12.2023. Одобрена после рецензирования 04.12.2023.
Принята 04.12.2023.
Received 01.12.2023. Approved after reviewing 04.12.2023. Accepted 04.12.2023.*