

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННОГО ОСАЖДЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Арсланов К.П.<sup>1</sup>, Бунтов Е.А.<sup>1</sup>, Зацепин А.Ф.<sup>1</sup>, Вагапов А.Ш.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, России

E-mail: [arslanov.kirill@mail.ru](mailto:arslanov.kirill@mail.ru)

## MODELING OF PLASMA DEPOSITION OF CARBON COATINGS BY MOLECULAR DYNAMICS

Arslanov K.P.<sup>1</sup>, Buntov E.A.<sup>1</sup>, Zatsepin. A.F.<sup>1</sup>, Vagapov A.Sh.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The process of deposition from a low-temperature carbon plasma on a silicon substrate with stimulation by an ion beam was simulated in the LAMMPS program. The conditions for the formation of carbon structures with sp-hybridization were studied.

Низкоразмерные, в частности одномерные модификации углерода (изолированные цепи атомов, карбин, графин, графидин и др.) привлекают внимание исследователей благодаря уникальным физическим свойствам. Их электронные свойства определяются распределением типов ковалентной связи и видом гибридизации орбиталей атомов углерода. Одним из успешных методов синтеза подобных структур является осаждение из низкотемпературной углеродной плазмы, которое может сопровождаться стимуляцией дополнительным ионным пучком [1]. Однако в настоящее время до сих пор отсутствует полное понимание процессов, происходящих при осаждении, и неизвестны условия для формирования углеродных структур с заданным типом гибридизации и свойствами. В связи с этим в этой работе проводится моделирование осаждения из низкотемпературной углеродной плазмы на кремниевую подложку с целью сформировать углерод с sp-гибридизацией и в частности линейный-цепочечный углерод. Задача решается с помощью пакета LAMMPS для молекулярной динамики, который работает с классическими уравнениями Ньютона, используя для проведения вычислений набор межатомных потенциалов ReaxFF.

Осаждение из низкотемпературной углеродной плазмы происходит на кремниевую подложку, которая представляет собой структуру, состоящую из трех слоев. Нижний слой фиксируется для поддержки кристаллической структуры подложки. Средний слой термостатируется для удержания постоянной температуры. Верхний слой остается полностью свободным при моделировании, как и в статье [2]. Процесс осаждения сопровождается бомбардировкой ионов, в частности Ag<sup>+</sup> с энергией достаточной для того чтобы разрушить углеродные связи в sp<sup>2</sup> и sp<sup>3</sup> гибридизации, но недостаточной для разрушения связей с sp-гибридизацией.

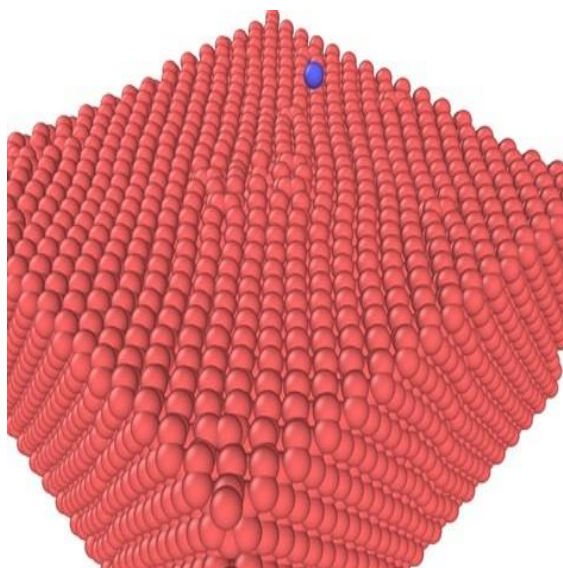


Рис. 1. Пример структуры подложки для осаждения под пучком ионов аргона (фиолетовый)

На получаемую в результате осаждения структуру и её свойства влияет множество условий: энергия и ориентация плазменных и ионных пучков, время между бомбардировкой ионами и т.д. Моделирование позволит изучить процессы, происходящие при осаждении из низкотемпературной углеродной плазмы, выявить эти условия для формирования углеродных структур с sp-гибридизацией, в частности линейного-цепочечного углерода.

1. E.C. Neyts, P. Brault, J. Plasma Process. Polym., 14, Iss. 1-2, 1600145 (2017)
2. X. Li, A. Wang, K.R. Lee, J. Comput. Mater. Sci., 151, 246-254 (2018)

## **PROBING OPTICAL PROPERTIES OF CORRELATED CARBON DEFECTS IN HEXAGONAL-BN BY QUANTUM EMBEDDING APPROACH**

Badrtdinov D.I.<sup>1</sup>, Hampel A.<sup>2</sup>, Rösner M.<sup>3</sup>, Dreyer C.E.<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, New York, USA

<sup>3</sup>Radboud University, Nijmegen, Netherlands

<sup>4</sup>Stony Brook University, New York, USA

E-mail: [reason2205@yandex.ru](mailto:reason2205@yandex.ru)

In this work we study the optical properties of carbon dimer in bulk hexagonal boron nitride (BN). The utilization of density functional theory and many-body extended Hubbard models revealed the complex spectra, represented by bonding and anti-bonding states involved in optical transitions.