Суворов С.В., Вахрушев А.В. Осаждение фуллеритов $C_{60}$ на подложку твердого тела с образованием пленки // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – № 1. С. 125–133. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.1.12

Suvorov S.V., Vakhrushev A.V. Deposition of fullerites $C_{60}$ on a solid substrate to form a film. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2023, no. 1, pp. 125-133. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.1.12

пермский политех

**ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА**
**№ 1, 2023**
**PNRPU MECHANICS BULLETIN**
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2023.1.12
УДК 519.622.2 : 539.231

# ОСАЖДЕНИЕ ФУЛЛЕРИТОВ $C_{60}$ НА ПОДЛОЖКУ ТВЕРДОГО ТЕЛА С ОБРАЗОВАНИЕМ ПЛЕНКИ

**С.В. Суворов, А.В. Вахрушев**

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 30 ноября 2022 г.
Одобрена: 14 марта 2023 г.
Принята к публикации:
05 апреля 2023 г.

*Ключевые слова:*

фуллерит, фуллерен, твердое тело, подложка, железо, молекулярная динамика, температура, скорость, плёнка, потенциальная энергия.

АННОТАЦИЯ

Использование фуллеритов $C_{60}$ для создания пленок на поверхности подложки твердого тела может применяться не только для создания покрытий, но и для модификации поверхностного слоя подложки, что с практической точки зрения может быть востребовано в таких отраслях экономики, как машино- и приборостроение.

Для анализа процесса формирования фуллеритовых пленок на поверхности подложки проведен компьютерный эксперимент, но моделировалось поведение не одиночного фуллерита или фуллерена, как это было реализовано в предыдущих работах авторов, а значительного числа фуллеритов $C_{60}$, депонируемых в область моделирования за определенный интервал времени и образующих «поток». Подложкой твердого тела являлся кристалл железа Fe(100). Температура подложки в рамках исследования поддерживалась постоянной при следующих значениях – 300 K, 700 K, 1150 K. Начальные параметры каждого отдельного фуллерита определялись стохастическим образом в заданных пределах. Программным комплексом, использовавшимся для проведения описанного компьютерного эксперимента, являлся LAMMPS. Взаимодействие атомов системы между собой, в процессе моделирования, определялось многочастичным потенциалом (MEAM – модифицированный метод погруженного атома).

Главным результатом проведенного компьютерного эксперимента является то, что удалось смоделировать осаждение фуллеритов $C_{60}$ с формированием пленки на подложке твердого тела. Были выявлены основные закономерности взаимодействия фуллерита в целом и фуллеренов, его образующих, как с подложкой, так и с другими фуллеритами, образующими пленку. А анализ изменения температуры и потенциальной энергии системы, как в процессе осаждения фуллеритов, так и после его окончания, позволяет говорить об устойчивости полученной системы фуллериты – подложка.

© ПНИПУ

© **Суворов Степан Валентинович** – к.ф.-м.н., с.н.с., e-mail: ssv.82@mail.ru, ID: 0000-0003-3051-7732.
**Вахрушев Александр Васильевич** – д.ф.-м.н., проф., e-mail vakhrushev-a@yandex.ru, ID: 0000-0001-7901-8745.

**Stepan V. Suvorov** – CSc of Physics and Mathematics, Senior Scientist, e-mail: ssv.82@mail.ru, ID: 0000-0003-3051-7732.
**Alexander V. Vakhrushev** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail vakhrushev-a@yandex.ru, ID: 0000-0001-7901-8745.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

# DEPOSITION OF FULLERITES $C_{60}$ ON A SOLID SUBSTRATE TO FORM A FILM

**S.V. Suvorov, A.V. Vakhrushev**

UdmFRC UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 30 November 2022
Approved: 14 March 2023
Accepted for publication:
05 April 2023

*Keywords:*

fullerite, fullerene, solid, substrate, iron, molecular dynamics, temperature, velocity, film, potential energy.

ABSTRACT

The use of $C_{60}$ fullerites to create films on the surface of a solid substrate can be used not only to create coatings, but also to modify the surface layer of the substrate, which from a practical point of view can be in demand in such sectors of the economy as machine and instrument engineering.

To analyze the process of formation of fullerite films on the substrate surface, a computer experiment was carried out, but the behavior of not a single fullerite or fullerene, as it was implemented in previous works of the authors, but a significant number of $C_{60}$ fullerites deposited in the modeling area over a certain time interval and forming a "flow" was modeled. The substrate of the solid was an iron crystal Fe(100). The substrate temperature in the study was kept constant at the following values – 300 K, 700 K, 1150 K. The initial parameters of each individual fullerite were determined stochastically within the specified limits. The software package used to conduct the described computer experiment was – LAMMPS. The interaction of the atoms of the system with each other, during the simulation, was determined by the multiparticle potential (MEAM is a modified submerged atom method).

The main result of the conducted computer experiment is that it was possible to simulate the deposition of $C_{60}$ fullerites with the formation of a film on a solid substrate. The main regularities of the interaction of fullerite as a whole and fullerenes forming it, both with the substrate and with other fullerites forming the film, were revealed. And the analysis of changes in temperature and potential energy of the system, both during the deposition of fullerites and after its completion, allows us to talk about the stability of the resulting fullerite – substrate system.

© PNRPU

## Введение

Работы [1–14] отражают тот факт, что все шире в практике различных отраслей экономики используются как отдельные фуллерены и соединения, так и фуллериты.

Натурные эксперименты и на данный момент остаются главными объективными способами исследования тех или иных физических явлений, эффектов и свойств, в том числе и у таких объектов, как фуллерены и фуллериты, однако развитие компьютерной техники и аппарата вычислительной математики позволяет проводить компьютерное моделирование поведения фуллеренов и фуллеритов в различных условиях. Ввиду наноразмеров фуллеренов и фуллеритов моделирование их поведения ведется с использованием методов молекулярной динамики [15–17].

В работах [18; 19] последовательно моделировалось осаждение единичного фуллерита $C_{60}$ с подложкой железа при различных условиях – температура подложки, скорость движения фуллерита, ориентация фуллерита относительно подложки и угла «встречи». Ориентация фуллерита относительно подложки имела три варианта: вершина, ребро и грань [18]. В статье [19] также рассматривались три варианта угла «встречи» фуллерита с подложкой – 15, 45, 75°.

Исследования, приведенные в статьях [18; 19], позволили выявить основные закономерности процесса осаждения единичного фуллерита на подложку железа Fe(100). Однако эти результаты не позволяют сделать выводы о том, как будет осаждаться скопление фуллеритов, образующих «поток».

Исследовался процесс осаждения на подложку «потока» фуллеритов, в котором параметры отдельного фуллерита $C_{60}$ определялись стохастическим образом.

## 1. Постановка задачи

Параметры подложки и фуллеритов $C_{60}$ аналогичны тем, что были реализованы при моделировании процессов, описанных в статьях [18; 19]:

– подложкой твердого тела является кристалл железа Fe(100) с постоянной решетки 2,87 Å [20], тип его кристаллической решетки – кубическая объемно-центрированная;

– контактная поверхность подложки параллельна плоскости *xOy*, а ось *Oz* ориентирована по нормали к контактной поверхности подложки;

– тип кристаллической решетки фуллерита $C_{60}$ – гранецентрированная кубическая (ГЦК) [14];

– постоянная кристаллической решетки фуллерита принята равной 1,4154 нм [14];

– при моделировании термостат обеспечивал постоянство температуры подложки на следующих значениях – 300 K, 700 K, 1150 K;

– после соприкосновения фуллерена $C_{60}$ с подложкой скорость всех атомов системы определяется значением температуры системы.

Отличия рассматриваемой задачи от описанных в работах [18; 19]:

1) осаждается не отдельный фуллерит, а «поток»;

2) место появления фуллерита в области моделирования, а также вектор его скорости определялся стохастическим образом в заданных пределах;

3) ориентация фуллерита относительно подложки может быть любой.

«Поток» фуллеритов представлял собой 45 фуллеритов, каждый из которых последовательно появлялся в области моделирования вслед за предыдущим с шагом по времени – 1,2 пс, таким образом, общее время осаждения фуллеритов составляло 54 пс, а минимальное расстояние от вновь появившегося фуллерена до ближайшего уже находящегося в области моделирования – 2,5 нм.

Скорость каждого из фуллеритов задавалась как проекции скорости соответствующего фуллерита на координатные оси *Ox*, *Oy*, *Oz*. Диапазоны проекций скоростей фуллерита, в рамках которых стохастическим образом задавалось конкретное значение, были следующими:

– на ось *Ox* диапазон $v_x$ составлял от -0,004 Å/фс до 0,004 Å/фс;

– на ось *Oy* диапазон $v_y$ составлял от -0,004 Å/фс до 0,004 Å/фс;

– на ось *Oz* диапазон $v_z$ составлял от 0,005 Å/фс до 0,02 Å/фс.

Моделирование процесса осаждения фуллеритов на подложку делилось на три этапа:

– на первом этапе проводилось релаксирование подложки в течение 5 пс при одном из значений температуры – 300 K, 700 K, 1150 K;

– на втором этапе происходило осаждение 45 фуллеритов на подложку в течение 70 пс;

– на третьем этапе в течение 45 пс исследовалось поведение фуллеритов, осевших на подложку.

Шагом моделирования по времени составлял $\Delta t = 1$ фс.

Моделирование процесса осаждения фуллеритов $C_{60}$ на подложку железа Fe(100) велось методом молекулярной динамики [21–26] в программном комплексе LAMMPS [27–34] с применением многочастичного потенциала называемого MEAM (модифицированный метод погруженного атома) [35].

## 2. Результаты расчетов

Визуализация результатов моделирования осаждения фуллеритов $C_{60}$ на подложку твердого тела представлена на рис. 1.

В каждом из трех температурных режимов осаждения фуллеритов наблюдалась их агломерация с преимущественным образованием:

– цепочки, при температуре подложки 300 K;

– единого острова, при температуре подложки 700 K;

– группы островов, при температуре подложки 1150 K.

Во всех трех экспериментах наблюдалась агломерация фуллеритов $C_{60}$ в два, а местами и в три слоя. При этом кристаллическая гранецентрированная кубическая структура самих фуллеритов не нарушалась, а структура образовавшихся агломератов фуллеритов носит аморфный характер, что показано на рис. 2 в виде сечений по плоскости *xOz*.

Следует отметить, что при температурах 300 K и 1150 K наблюдалось не осаждение на подложку одного и двух фуллеритов, что носит скорее всего случайный характер.

Также следует заметить, что при взаимодействии фуллеритов с подложкой железа имеет место разрушение фуллеренов $C_{60}$, входящих в состав фуллерита, непосредственно контактирующих с подложкой. Те фуллерены $C_{60}$, что в процессе осаждения взаимодействуют только с фуллеренами других фуллеритов, имеют минимальные разрушения и в основном подвергаются деформированию со стороны соседних фуллеренов. Всё это показано на рис. 3.

Анализируя результаты моделирования, в том числе приведенные на рис. 3, *a*–*c*, можно сделать вывод, что степень разрушения фуллеренов $C_{60,}$ контактирующих с подложкой железа, почти не зависит от температуры подложки, а в основном определяется: скоростью фуллерита, углом «встречи» «фуллерит – подложка» и ориентацией фуллерита $C_{60}$ относительно подложки в момент контакта фуллерита с подложкой. Атомы углерода из разрушенного фуллерена $C_{60}$ могут, сохраняя химические связи с другими атомами углерода фуллерена, образовывать новые химические связи с атомами железа подложки, тем самым обеспечивая адгезию между фуллереновой пленкой и подложкой. Однако вопрос о том, какие химические связи сохраняются при частичном разрушении фуллерена $C_{60}$ и какие химические связи возникают между атомами фуллерена (углерода – C) и атомами подложки (железа – Fe), требует отдельного исследования.

В процессе моделирования температура подложки поддерживалась постоянной, но в момент осаждения фуллеритов $C_{60}$ температура системы в целом изменялась и выравнивалась с температурой подложки только после окончания процесса осаждения, что показано на рис. 4.

Как следует из графиков на рис. 4, для каждого из трех моделируемых случаев момент выравнивания температуры системы наступает на 78 пс.

Для оценки устойчивости сформированной системы «фуллериты – подложка» воспользуемся принципом минимума общей потенциальной энергии. На рис. 5 показано изменение потенциальной энергии системы «фуллериты – подложка» в зависимости от времени.

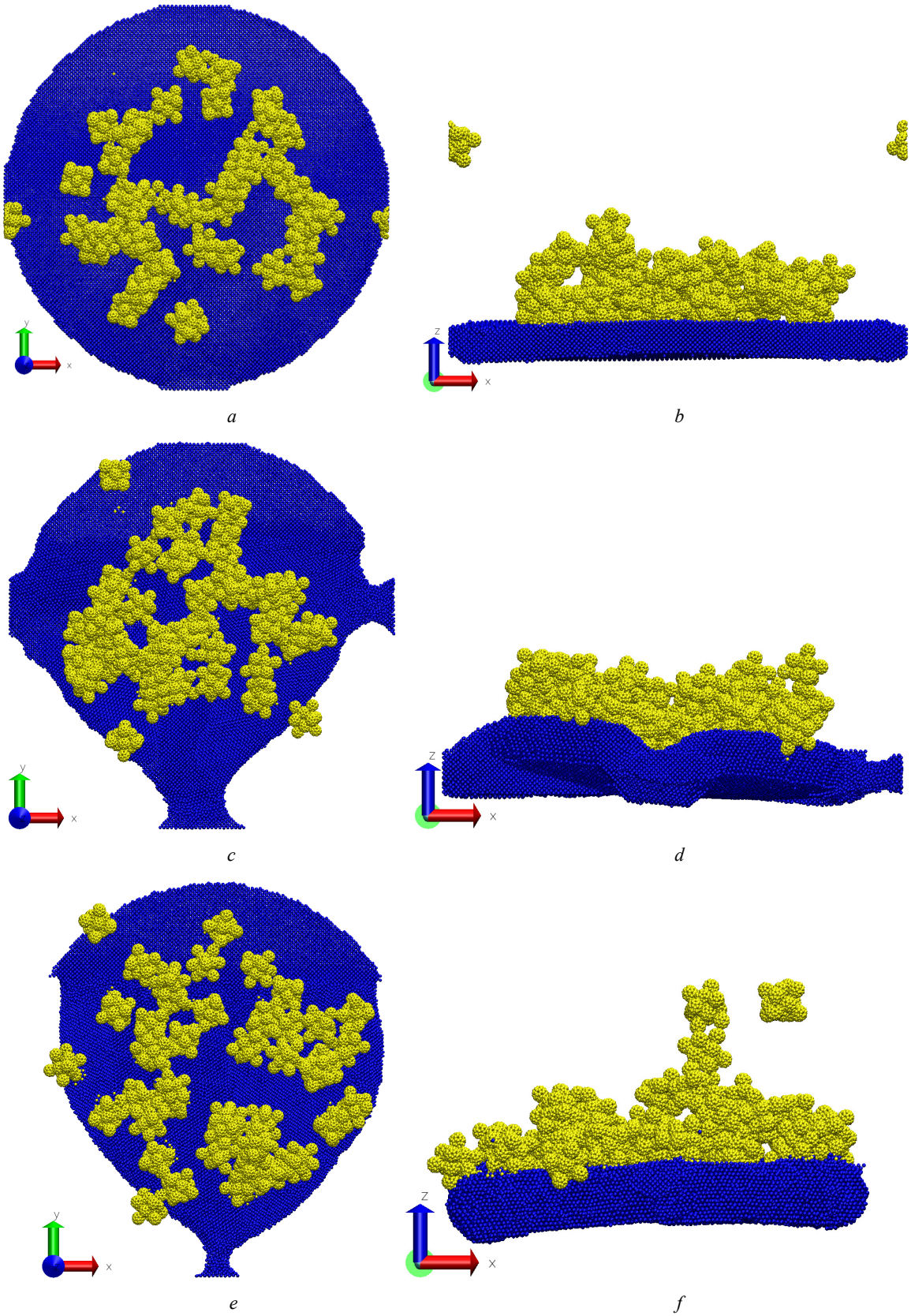
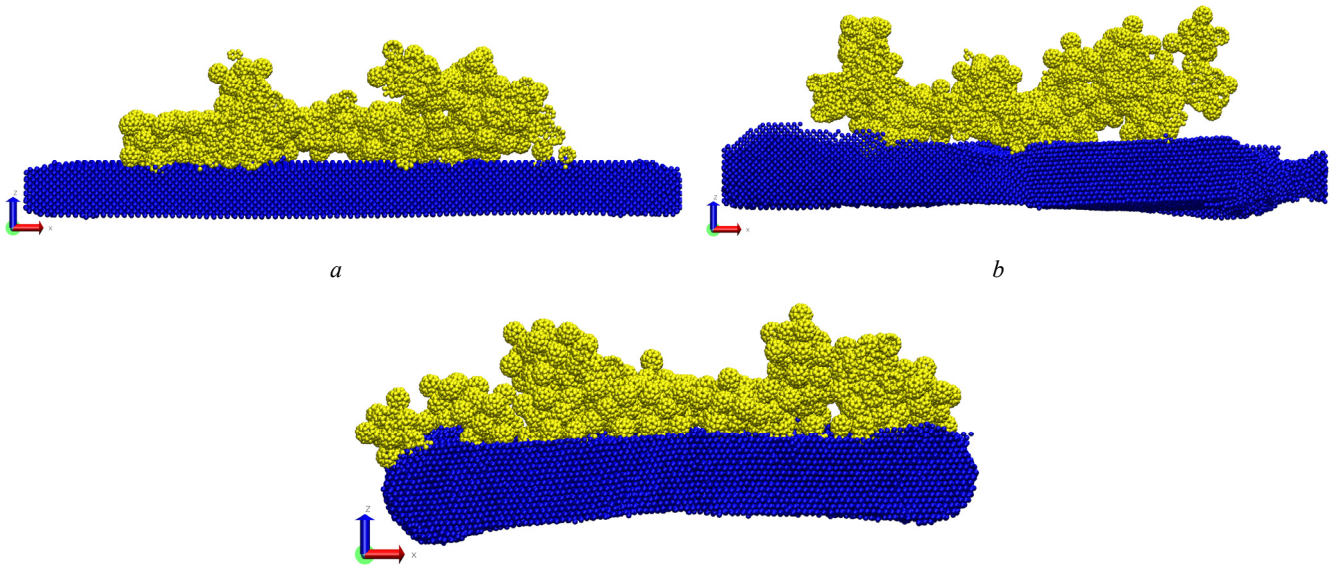



Рис. 1. Фуллериты $C_{60}$ после осаждения на подложку железа: *a* – вид сверху T = 300 K; *b* – вид сбоку T = 300 K; *c* – вид сверху T = 700 K; *d* – вид сбоку T = 700 K; *e* – вид сверху T = 1150 K; *f* – вид сбоку T = 1150 K

Fig. 1. End. Fullerites $C_{60}$ after deposition on an iron substrate: *a* – top view T = 300 K; *b* – side view T = 300 K; *c* – top view T = 700 K; *d* – side view T = 700 K; *e* – top view T = 1150 K; *f* – side view T = 1150 K

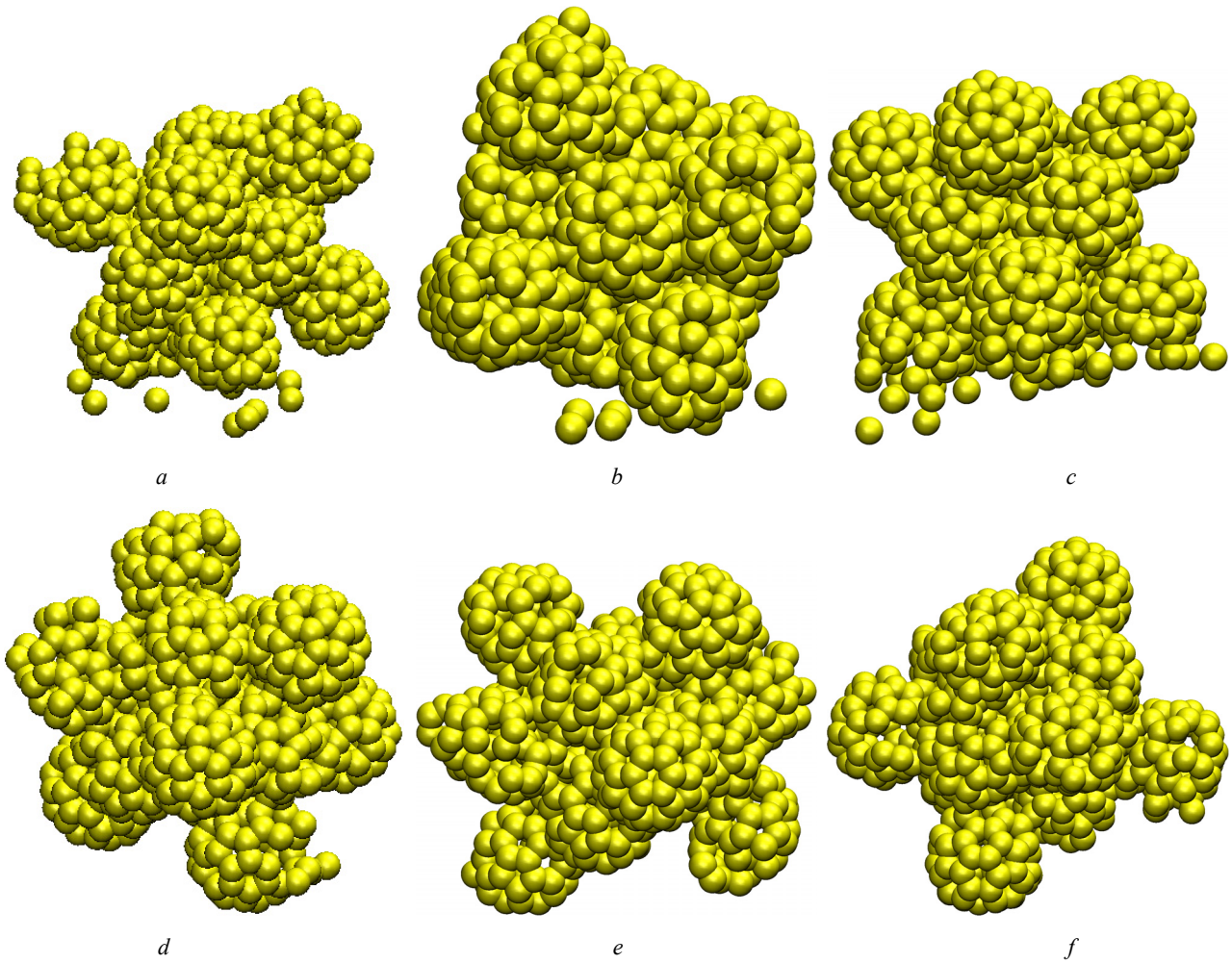


*a* *b*

*c*

Рис. 2. Сечение фуллеритов $C_{60}$ и подложки железа по оси *Oy*: *a* – T = 300 K; *b* – T = 700 K; *c* – T = 1150 K

Fig. 2. Cross section of fullerites $C_{60}$ and iron substrate along the *Oy* axis: *a* – T = 300 K; *b* – T = 700 K; *c* – T = 1150 K



*a* *b* *c*

*d* *e* *f*

Рис. 3. Результаты взаимодействия фуллеритов $C_{60}$: с подложкой: *a* – T = 300 K; *b* – T = 700 K; *c* – T = 1150 K; с другими фуллеритами: *d* – T = 300 K; *e* – T = 700 K; *f* – T = 1150 K

Fig. 3. Results of interaction of fullerites $C_{60}$: with a substrate: *a* – T = 300 K; *b* – T = 700 K; *c* – T = 1150 K; with other fullerites: *d* – T = 300 K; *e* – T = 700 K; *f* – T = 1150 K

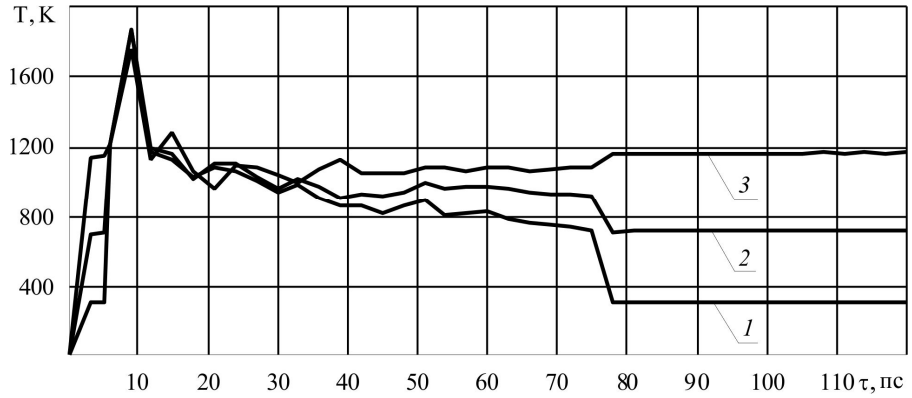



Рис. 4. Температура системы фуллериты – подложка в процессе моделирования. Температура подложки: *1* – T = 300 K; *2* – T = 700 K; *3* – T = 1150 K

Fig. 4. Temperature of the fullerite-substrate system during simulation. Substrate temperature: *1* – T = 300 K; *2* – T = 700 K; *3* – T = 1150 K

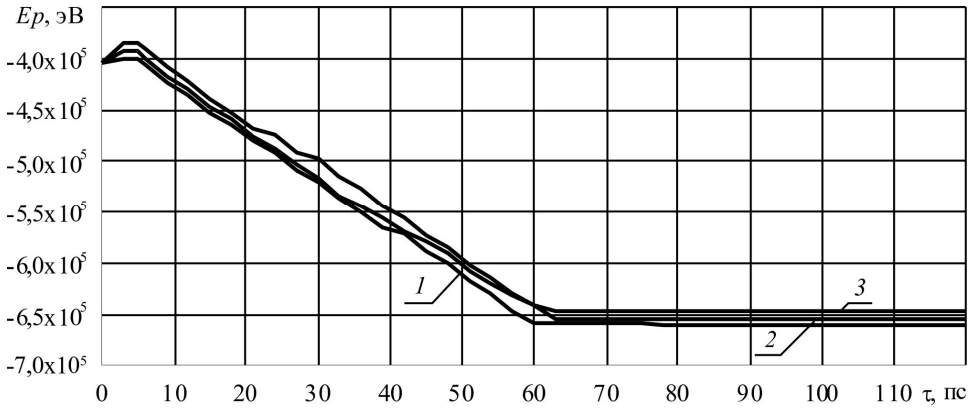



Рис. 5. Потенциальная энергия системы фуллериты – подложка в процессе осаждения. Температура подложки: *1* – T = 300 K; *2* – T = 700 K; *3* – T = 1150 K

Fig. 5. Potential energy of the fullerite- substrate system during deposition. Substrate temperature: *1* – T = 300 K; *2* – T = 700 K; *3* – T = 1150 K

Начиная с 5 пс, по мере осаждения фуллеритов на подложку, потенциальная энергия системы падает, и для случая, когда температура подложки поддерживалась на значении 300 K, квазистационарный режим потенциальной энергии системы наступает на 60 пс. Для случаев, когда температура подложки поддерживалась на значениях соответственно 700 и 1150 K, квазистационарный режим потенциальной энергии системы наступает на 63 пс.

Наиболее близкий натурный эксперимент по отношению к описанному в данной работе компьютерному эксперименту приведен в работе [36]. В статье [36] изучался процесс осаждения на различные типы подложек, в том числе и металлические (Al, Ni), фуллеренов $C_{60}$, которыми насыщался импульсный сверхзвуковой молекулярный пучок (СМП). Данный процесс приводил к образованию пленки фуллеренов на подложках. Одной из важных характеристик образовавшихся фуллереновых пленок является образование в них монослоя фуллереновых молекул, структура которого «определяет рост и формирование структуры последующих слоев».

Таким образом, фуллереновые пленки, полученные с применением СМП, структурированы, в отличие от фуллеритовых пленок, где при сохранении структуры самих фуллеритов $C_{60}$ структурирования самой пленки не происходит, и пленка, как следствие, имеет аморфную структуру.

Описывая результаты расчетов, следует иметь в виду, что в качестве потенциала взаимодействия «Fe – Fe», «C – C», «Fe – C» использовался потенциал MEAM, однако применение других потенциалов может уточнить и дополнить картину процесса осаждения и взаимодействия фуллеритов $C_{60}$ с подложкой железа (Fe), что требует дополнительных исследований в дальнейшем.

Также следует отметить, что дальнейшие исследования могут быть направлены на моделирование:

– создания одно- и многослойных фуллетировых пленок, полностью покрывающих подложку твердого тела, и определения условий их формирования;

– определение степени адгезии между пленкой и подложкой в зависимости от различных условий формирований.

## Заключение

Исходя из результатов моделирования осаждения фуллеритов $C_{60}$ на подложку железа, можно сделать следующие выводы:

1) фуллериты $C_{60}$ осаждались на подложку и агломерировали между собой, образуя пленку, при этом образовавшаяся фуллеритовая пленка имеет два или три слоя фуллеритов;

2) при контакте фуллерита с подложкой происходит частичное разрушение фуллеренов $C_{60}$, входящих в состав фуллерита и непосредственно контактирующих с подложкой;

3) образующаяся в результате осаждения система «фуллериты – подложка» устойчива.

Обобщая результаты, можно заключить, что при осаждении фуллеритов $C_{60}$ на подложку железа образуется многослойная пленка, имеющая аморфную структуру и, возможно, адгезию с подложкой.

## Библиографический список


1. Ruoff R.S., Ruoff A.L. Is $C_{60}$ stiffer than diamond // Nature. – 1991. – Vol. 350 – P. 663–664.

2. Ultrahard and superhard phases of fullerite $C_{60}$: comparison with diamond on hardness and wear / V. Blank, M. Popov, G. Pivovarov, N. Lvova, K. Gogolinsky, V. Reshetov // Diamond and Related Materials. – 1998. – Vol. 7, no. 2–5. – P. 427–431. DOI: 10.1016/S0925-9635(97)00232-X

3. Кравчук А.С., Трубиенко О.О. Модели и численное решение некоторых динамических контактных задач наномеханики // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. Математическое моделирование систем и процессов. – 2010. – № 1. – С. 72–79.

4. Лурье С.А., Соляев Ю.О. Модифицированный метод Эшелби в задаче определения эффективных свойств со сферическими микро- и нановключениями // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. Математическое моделирование систем и процессов. – 2010. – № 1. – С. 80–90.

5. Coarse-grained potential models for phenyl-based molecules: II. Application to fullerenes / C. Chiu, R. DeVane, M.L. Klein, W. Shinoda, P.B. Moore, S.O. Nielsen // J. Phys. Chem. B. – 2010. – Vol. 114. – No. 2. – P. 6394–6400.

6. Баран Л.В. Эволюция структуры фуллеритовых пленок, конденсированных на различные подложки // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – № 9. – С. 84–88.

7. Смирнов С.В., Смирнова Е.О., Голубкова И.А. Определение диаграмм деформационного упрочнения поверхностных слоев металлических материалов с использованием инструментария наномеханических испытательных комплексов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2011. – № 2. – С. 84–91.

8. Деформационная стабильность фуллерит/фуллеренов С60/70 / Р.М. Никонова [и др.] // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 406–410.

9. Гаришин О.К., Лебедев С.Н. Оценка механических свойств матрицы вокруг частиц наполнителя в полимерных нанокомпозитах с помощью атомно-силовой микроскопии // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2011. – № 3. – С. 15–25.

10. Композит на основе диоксида циркония, модифицированного углеродными нанотрубками: структура и механические свойства / Е.А. Ляпунова, М.В. Григорьев, А.П. Скачков, О.Б. Наймарк, С.Н. Кульков // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 4. – С. 308–316. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.18

11. Об учете масштабных эффектов при моделировании механических и трибологических свойств двухфазных микро- и наномодифицированных полимерных покрытий / В.М. Бузник, С.А. Лурье, Д.Б. Волков-Богородский, А.Г. Князева, Ю.О. Соляев, Е.И. Попова // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 4. – С. 36–54. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.03

12. Mahmoud Nasrollahzadeh, S. Mohammand Sajadi Chapter 1 – an introduction to nanotechnology // Interface science and Technology. – 2019. – Vol. 28. – P. 1–27.

13. M. Mohan Gokhale, R. Ravindra Somani Fullerenes: chemistry and its applications // Mini Rev Org Chem. – 2015. – Vol.12. – P. 355–366.

14. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физических наук. – 1995. – Т. 165, № 9. – С. 977–1009.

15. Depth profiling by cluster projectiles as seen by computer simulations / Z. Postawa, L. Rzeznik, R. Paruch, M.F. Russo, N. Winogradb, B.J. Garrison // Surf. Interface Anal. – 2011. – Vol. 43, no. 12. – P. 12–15. DOI: 10.1002/sia.3417

16. Вахрушев А.В., Суворов С.В. Моделирование процесса внедрения фуллерена $C_{60}$ в поверхность твердого тела // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 4. – С. 478–482.

17. Вахрушев А.В., Суворов С.В., Северюхин А.В. Моделирование поведения фуллеренового кластера на поверхности твердого тела // Химическая физика и мезоскопия. – 2013. – Т. 15, № 4. – С. 515–522.

18. Суворов С.В., Северюхин А.В., Вахрушев А.В. Моделирование взаимодействия фуллерита $C_{60}$ с подложкой твердого тела // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2019. – № 3. – С. 94–103. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.10

19. Суворов С.В., Северюхин А.В., Вахрушев А.В. Влияние угла «встречи» фуллерита $C_{60}$ с подложкой твердого тела на процесс осаждения // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – № 3. – С. 90–97. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.09

20. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 789 с.

21. Шайтан К.В., Терешкина К.Б. Молекулярная динамика белков и пептидов. – М.: Ойкос, 2004. – 103 с.

22. Разработка и исследование аэрозольных нанотехнологий / В.Н. Аликин [и др.]. – М.: Машиностроение, 2010. – 196 с.

23. Anderson H.S. Molecular dynamics simulation at constant pressure and/or temperature // J. Chem. Phys. – 1980. – Vol. 72 – P. 2384–2396.

24. Frenkel D., Smit B., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. – San Diego: Academic Press, 2002. – 638 p.

25. Haile M.J. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods. – N.Y.: Wiley-Interscience, 1992. – 386 p.

26. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble // Mol. Phys. – 1984. – Vol. 52. – P. 255–278.

27. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19.

28. Parallel reactive molecular dynamics: Numerical methods and algorithmic techniques / H.M. Aktulga, J.C. Fogarty, S.A. Pandit, A.Y. Grama // Parallel Computing. – 2012. – Vol. 38, no. 4. – P. 245–259. DOI: 10.1016/j.parco.2011.08.005

29. Large-Scale, Long-Term Nonadiabatic Electron Molecular Dynamics for Describing Material Properties and Phenomena in Extreme Environments / A. Jaramillo-Botero, J. Su, A. Qi, W.A. Goddard III // J. Comp. Chem. – 2012. – Vol. 32, no. 3. – P. 497–512. DOI: 10.1002/jcc.21637

30. Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid / M.K. Petersen, J.B.Lechman, S.J. Plimpton, G.S. Grest, P.J. in't Veld, P.R. Schunk // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol. 132, no. 17. – P. 174106. DOI: 10.1063/1.3419070

31. An enhanced entangled polymer model for dissipative particle dynamics / T. Sirk, Y. Sliozberg, J. Brennan, M. Lisal, J. Andzelm // J. Phys. Chem. – 2012. – Vol. 136, no. 13. – P. 134903. DOI: 10.1063/1.3698476

32. Sirk T.W., Moore S., Brown E.F. Characteristics of thermal conductivity in classical water models // J. Phys. Chem. – 2013. – Vol. 138, no. 6. – P. 064505. DOI: 10.1063/1.4789961

33. Plimpton S.J., Thompson A.P. Computational Aspects of Many-body Potentials // MRS Bulletin. – 2012. – Vol. 37, no. 5. – P. 513–521. DOI: 10.1557/mrs.2012.96

34. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations // Comp. Phys. Comm. – 2011. – Vol. 182. – P. 2201–2207.

35. Byeong-Joo Lee A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–C system // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54(3). – P. 701–711. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.09.034

36. Исследование свойств пленок фуллеренов, осажденных с высокой кинетической энергией, на различных поверхностях / М.А. Ходорковский, С.В. Мурашов, А.Л. Шахмин, Т.О. Артамонова, Л.П. Ракчеева, А.С. Мельников // Журнал технической физики. – 2006. – Т. 76, № 7. – С. 140–142.

## References

1. Ruoff R.S., Ruoff A.L. Is $C_{60}$ stiffer than diamond. *Nature.*, 1991, vol. 350, pp. 663-664.

2. Blank V., Popov M., Pivovarov G., Lvova N., Gogolinsky K., Reshetov V. Ultrahard and superhard phases of fullerite $C_{60}$: comparison with diamond on hardness and wear. *Diamond and Related Materials.*, 1998, 7(2-5), pp. 427-431. DOI: 10.1016/S0925-9635(97)00232-X

3. Kravchuk A.S., Trubienko O.O. Modeli i chislennoe reshenie nekotorykh dinamicheskikh kontaktnykh zadach nanomekhaniki [Models and numerical solution of some dynamic contact problems of nanomechanics]. *PGTU Bulletin. Mathematical modeling of systems and processes,* 2010, no.1, pp. 72-79.

4. Lur'e S.A., Soliaev Iu.O. Modifitsirovannyi metod Eshelbi v zadache opredeleniia effektivnykh svoistv so sfericheskimi mikro- i nanovkliucheniiami [The modified Eshelby method in the problem of determining effective properties with spherical micro and nanoinclusions]. *PGTU Bulletin. Mathematical modeling of systems and processes,* 2010, no.1, pp. 80-90.

5. Chiu C., DeVane R., Klein M.L., Shinoda W., Moore P.B., Nielsen S.O. Coarse-grained potential models for phenyl-based molecules: II. Application to fullerenes. *J. Phys. Chem. B.*, 2010, 114(2), pp. 6394-6400.

6. Baran L.V. Evoliutsiia struktury fulleritovykh plenok, kondensirovannykh na razlichnye podlozhki [Evolution of the structure of fullerite membrane condensed on various substrates]. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neitronnye issledovaniia*, 2010, no. 9, pp. 84-88.

7. Smirnov S.V., Smirnova E.O., Golubkova I.A. Determination of strain hardening diagrams of surface layers of metallic materials using the tools of nanomechanical test complexes. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 2, pp. 84-91.

8. Nikonova R.M., Lad'ianov V.I., Aksenov V.V., Pozdeeva N.S., Dorofeev G.A. Deformatsionnaia stabil'nost' fullerit/fullerenov C60/70 [Deformational stability of fullerite/fullerenes C60/70]. *Khimicheskaia fizika i mezoskopiia*, 2011, vol. 13, no 3, pp. 406-410.

9. Garishin O.K., Lebedev S.N. Evaluation of the mechanical properties of the matrix around the filler particles in polymer nanocomposites using atomic force microscopy. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 3, pp. 15-25.

10. Lyapunova E.A., Grigoriev M.V., Skachkov A.P., Naimark O.B., Kulkov S.N. Structure and mechanical properties of zirconium oxide modified with carbon nanotubes. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 4, pp. 308-316. DOI: 10.l5593/perm.mech/2015.4.18

11. Buznik V.M., Lurie S.A., Volkov-Bogorodskiy D.B., Knyazeva A.G., Solyaev Yu.O., Popova E.I. On account of scale effects in the simulation of mechanical and tribological properties of two-phase micro- and nanomodified polymer coatings. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2015, no. 4, pp. 36-54. DOI: 10.15593/perm.inech/2015.4.03

12. Mahmoud Nasrollahzadeh, S. Mohammand Sajadi Chapter 1 – an introduction to nanotechnology. Interface science and technology, 2019, v.28, pp. 1-27.

13. M. Mohan Gokhale, R. Ravindra Somani Fullerenes: chemistry and its applications**.** *Mini Rev Org Chem*, 2015, v.12, pp. 355-366.

14. Eletskii A.V., Smirnov B.M. Fullereny i struktury ugleroda [Fullerenes and carbon structures]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1995, vol. 165, no. 9, pp. 977-1009.

15. Postawa Z., Rzeznik L., Paruch R., Russo M.F., Winogradb N., Garrison B.J. Depth profiling by cluster projectiles as seen by computer simulations. *Surf. Interface Anal.,* 2011, 43(12), pp. 12-15. DOI: 10.1002/sia.3417

16. Vakhrushev A.V., Suvorov S.V. Modelirovanie protsessa vnedreniia fullerena $C_{60}$ v poverkhnost' tverdogo tela [Modeling the process of introducing fullerene $C_{60}$ into the surface of a solid]. *Khimicheskaia fizika i mezoskopiia – Chemical Physics and Mesoscopy*, 2011, vol. 13, no. 4, pp. 478- 482.

17. Vakhrushev A.V., Suvorov S.V., Severiukhin A.V. Modelirovanie povedeniia fullerenovogo klastera na poverkhnosti tverdogo tela [Modeling the behavior of a fullerene cluster on a solid surface]. *Khimicheskaia fizika i mezoskopiia*, 2013, vol. 15, no. 4, pp. 515-522.

18. Suvorov S.V., Severiuchin A.V., Vakhrushev A.V. Simulation of the interaction fullerite $C_{60}$ with the substrate solids. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2019, no. 3, pp. 94-103. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.10

19. Suvorov S.V., Severiuchin A.V., Vakhrushev A.V. The effect of the angle of "meeting" of fullerite C60 with a solid substrate on the deposition process. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2020, no. 3, pp. 90-97. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.09

20. Kittel' Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela [Introduction to Solid State Physics]. *Moscow, Nauka*, 1978, 789 p.

21. Shaitan K.V., Tereshkina K.B. Molekuliarnaia dinamika belkov i peptidov [Molecular dynamics of proteins and peptides]. *Moscow, Oikos*, 2004, 103 p.

22. Alikin V.N., Vakhrushev A.V., et al. Razrabotka i isledovanie aerozol'nykh nanotekhnologii [Development and research of aerosol nanotechnology]. *Moscow, Mashinostroenie*, 2010, 196 p. 23. Anderson H.S. Molecular dynamics simulation at constant pressure and/or temperature. *J. Chem. Phys.,* 1980, vol. 72, pp. 2384–2396.

24. Frenkel D., Smit B., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. *San Diego, Academic Press*, 2002, 638 p.

25. Haile M.J. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods. *New York, Wiley Interscience*, 1992, 386 p.

26. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble. *Mol. Phys.*, 1984, vol. 52, pp. 255-278.

27. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comp. Phys.*, 1995, vol. 117, pp. 1-19.

28. Aktulga H.M., Fogarty J.C., Pandit S.A., Grama A.Y. Parallel reactive molecular dynamics: Numerical methods and algorithmic techniques. *Parallel Computing*, 2012, 38 (4), pp. 245-259. DOI: 10.1016/j.parco.2011.08.005

29. Jaramillo-Botero A., Su J., Qi A., Goddard III W.A. LargeScale, Long-Term Nonadiabatic Electron Molecular Dynamics for Describing Material Properties and Phenomena in Extreme Environments. *J. Comp. Chem.*, 2012, 32 (3), pp. 497-512. DOI: 10.1002/jcc.21637

30. Petersen M.K., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S.,in't Veld P.J., Schunk P.R. Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid. *J. Chem. Phys.*, 2010, 132 (17), pp. 174106. DOI: 10.1063/1.3419070

31. Sirk T., Sliozberg Y., Brennan J., Lisal M., Andzelm J. An enhanced entangled polymer model for dissipative particle dynamics. *J. Phys. Chem.,* 2012, 136 (13), pp. 134903. DOI: 10.1063/1.3698476

32. Sirk T.W., Moore S., Brown E.F. Characteristics of thermal conductivity in classical water models. *J. Phys. Chem.,* 2013, 138 (6), pp. 064505. DOI: 10.1063/1.4789961

33. Plimpton S.J., Thompson A.P., Computational Aspects of Many-body Potentials. *MRS Bulletin*, 2012, 37 (5), pp. 513-521. DOI: 10.1557/mrs.2012.96

34. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations. *Comp Phys Comm.*, 2011, vol. 182, pp. 2201-2207.

35. Byeong-Joo Lee A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–C system // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54(3). – P. 701-711. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.09.034

36. Khodorkovski M.A., Shakhmin A.L., Artamonova T.O., Rakcheeva L.P., Murashov S.V., Mel'Nikov A.S. Properties of fullerene films obtained by high-kinetic-energy deposition on various surfaces. Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics., 2006, 51 (7). pp. 959-961.

**Финансирование.** Исследование не имело спонсорской поддержки.
**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
**Вклад авторов равноценен.**

**Financing.** The study was not sponsored.
**Conflict of interest.** The authors declare no conflict of interest.
**The contribution of the authors is equivalent.**