

# Au/Cu(001) 异质外延岛演化的分子动力学研究\*

孟 张庆瑜†

(大连理工大学三束材料改性国家重点实验室, 大连 116024)

(2005 年 2 月 4 日收到, 2005 年 6 月 16 日收到修改稿)

利用分子动力学弛豫方法模拟了 Au/Cu(001) 异质外延生长初期 Au 异质外延岛的形貌演化, 分析了 Au 外延岛演化过程中的局域应力及与基体结合能随表面岛尺寸的变化. 研究表明: 当异质外延岛小于  $7 \times 7$  时, 外延岛原子分布呈现 Cu 点阵形貌; 当外延岛达到  $8 \times 8$  后, 外延岛内开始出现失配位错, 失配位错数量随外延岛尺寸的增加而增加. 局域压力分析指出, 外延岛上原子之间的近邻环境不同导致了所受应力的差异, 而外延岛的形变则是由外延岛原子的应力分布所决定. 研究还发现, 失配位错的产生导致错位原子与基体原子之间的结合强度减弱, 但相对增加了非错位原子与基体原子之间的结合强度.

关键词: 异质外延, 表面形貌, 局域压力, 分子动力学模拟

PACC: 6855

## 1. 引 言

异质外延是薄膜生长中的普遍现象. 在异质外延生长过程中, 由于薄膜与基体点阵晶格常数的不同, 将在薄膜与基体的界面处导致应变的产生, 进而影响薄膜的物理性能. 从薄膜生长的整个过程上看, 不同的生长阶段薄膜与基体之间的应变将有所不同. 在薄膜的生长初期, 大量表面原子的聚积, 在基体表面形成异质外延岛, 而异质外延岛的形貌演化及其对基体表面形貌的改变将直接影响着薄膜的生长模式及薄膜与基体之间的结合强度. 因此, 研究异质外延岛的演化, 不仅对了解异质外延生长中薄膜的生长机制具有重要的理论意义, 而且对于指导薄膜生长工艺具有一定的实用价值.

早在 1949 年, Frank 和 van der Merwe<sup>[1]</sup> 在研究异质外延界面时就指出: 界面点阵原子因错配所导致的界面应力, 可以通过失配位错的形式而得以释放. 近年来, 随着表面分析技术的发展和计算机模拟技术的不断完善, 人们在异质外延生长方面的研究取得了一系列重要进展. Jacobsen 等<sup>[2]</sup> 通过扫描隧道显微镜 (STM) 研究了单层 Au 在 Ni(111) 表面的外延生长, 发现了因晶格失配所产生的应力而形成的位

错环. Cünther 等<sup>[3]</sup> 用 STM 观察 Cu/Ru(0001) 外延生长时发现: 随着薄膜厚度从 1 层增加到 4 层, 外延层表面呈现 4 种不同的形貌特征; 随后, Hamilton 和 Foiles<sup>[4]</sup> 采用 Frenkel-Kontorova 模型, 通过对 Cu/Ru(0001) 异质外延层演化的计算机模拟研究, 给予了理论上的支持. 此外, Brune 等<sup>[5]</sup> 利用 STM 研究了 Pt(111) 表面 Ag 外延生长的应变机制; Meunier 等<sup>[6]</sup> 利用分子动力学模拟研究了 Ag/Cu(111) 结构的界面应力; Vervisch 等<sup>[7]</sup> 研究了沉积在 MgO(100) 表面 Pd 团簇岛的应力变化. 在外延生长方面, Witten 等<sup>[8]</sup> 提出了扩散置限聚集理论解释低温分形生长现象, 刘邦贵等<sup>[9]</sup> 提出反应置限聚集理论解释了在表面存在活性剂情况下的外延生长现象. 有关外延生长中表面原子的各种动力学表现的详细评述见文献 [10, 11]. 这些研究工作, 不仅丰富了人们对异质外延界面应力变化的认识, 而且对人们进一步了解异质外延体系中薄膜的生长规律及其物理机制具有十分重要的价值.

由于受分析技术的限制, 目前有关异质外延岛, 特别是薄膜生长初期的小表面岛对基体表面影响的研究报道不多. Au, Cu 的晶格常数分别为  $a_{Au} = 0.408 \text{ nm}$  和  $a_{Cu} = 0.3615 \text{ nm}$ , 其晶格失配度高达 11.4%. 因此, 在异质外延生长的初期, 就有可能因

\* 国家自然科学基金和中国工程物理研究院基金 (批准号: 10476003) 联合资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: qyzhang@dlut.edu.cn

较大的晶格应力而导致失配位错的产生,从而对异质外延的生长模式产生重要影响.为了研究晶格失配对异质外延岛稳定性的影响,了解异质外延岛产生失配位错的临界尺度,我们利用嵌入原子方法(EAM)的原子间相互作用势,对Cu(001)基体上单层 $2 \times 2$ 到 $11 \times 11$ 的Au异质外延岛进行了分子动力学弛豫,系统研究了Au/Cu(001)体系异质外延岛的形貌演化,分析了异质外延岛所产生的应力变化及其对外延岛与基体之间界面结合强度的影响.

## 2. 物理模型和计算方法

### 2.1. 原子间相互作用势及物理模型

EAM中的原子间相互作用势<sup>[12,13]</sup>具有描述贵金属及其合金的能力,已被广泛应用于贵金属固体声子谱、缺陷、合金、杂质、表面吸附以及表面扩散等现象的研究中<sup>[14,15]</sup>,并取得了相当大的成功.在EAM原子间相互作用势中, $N$ 个原子体系的总势能为

$$E_{\text{total}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

式中, $r_{ij}$ 是原子 $i$ 、 $j$ 间的距离, $\phi_{ij}$ 是两体间的静电排斥势能, $F_i(\rho_i)$ 是原子 $i$ 的嵌入能,它是原子 $i$ 所处位置电子密度 $\rho_i$ 的函数,而电子密度 $\rho_i$ 是其他所有原子在原子 $i$ 处的电子密度贡献的线性叠加,

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}), \quad (2)$$

式中 $f_j(r_{ij})$ 是原子 $j$ 对原子 $i$ 所处位置电子密度的贡献.

我们选择的模拟体系的基体原子分为20层,通过表面岛稳定性随基体原子数目的变化情况而最终确定为每一层由512个原子组成.垂直于表面方向采用周期性边界条件,表面取向为(001)方向.基体温度初始设置为300 K,采用淬火分子动力学方法来获得体系的最稳定能量构型.在动力学弛豫过程中,基底最下面4层原子位置固定,近似模拟半无限的基体.具体的分子动力学模拟方法描述详见文献[16—19].

### 2.2. 物理参量的计算

为了定量地描述表面外延岛及基体原子的应力状态,我们计算了单个原子的局域压力.仿照宏观应力的定义,单个原子的局域压力定义为<sup>[6,7,20]</sup>

$$P_i = - \frac{dE_i}{d \ln V}, \quad (3)$$

式中, $E_i$ 为体系中原子 $i$ 的势能, $V$ 为原子 $i$ 的体积. $P_i$ 值除以一个合适的原子体积就是原子所受到的实际压力.通过 $P_i$ 值可以判断体系中每个原子的应力状态,局域压力的正与负代表着原子所处的状态是压应变还是张应变.

异质外延岛与基体之间的结合强度,可以通过异质外延岛与基体之间的结合能描述.我们定义异质外延岛与基底之间单个原子的平均结合能为

$$E_{\text{adh}} = \frac{E_{\text{total}} - E_{\text{island}}^{\text{Au-Au}} - E_{\text{sub}}^{\text{Cu-Cu}}}{N_{\text{interface}}}, \quad (4)$$

式中, $E_{\text{total}}$ 为体系弛豫后的总能量, $E_{\text{island}}^{\text{Au-Au}}$ 为Au外延岛自身的总能量, $E_{\text{sub}}^{\text{Cu-Cu}}$ 为异质外延岛所导致的形变后Cu基体总能量, $N_{\text{interface}}$ 为Au异质外延岛的界面原子数.异质外延岛在基体表面吸附后的结合能为负值,其绝对值越大界面就越稳定.此外,我们定义外延岛引起的Cu基体形变能为

$$E_{\text{deform}}^{\text{sub}} = E_{\text{sub}}^{\text{Cu-Cu}} - E_{\text{sub}}^{\text{free}}, \quad (5)$$

式中 $E_{\text{sub}}^{\text{free}}$ 为没有外延岛时基体的总能量.

## 3. 模拟结果及讨论

### 3.1. 表面形貌随外延岛尺度的演化

通过分子动力学弛豫,我们发现 $2 \times 2$ 到 $7 \times 7$ 的Au异质外延岛均保持规则的表面形貌,外延岛中的Au原子基本处于Cu(001)表面的四重稳定位置.图1是经分子动力学弛豫后的Au/Cu(001)异质外延岛 $2 \times 2$ , $6 \times 6$ 和 $7 \times 7$ 形貌.从图1可以看到,外延岛内的Au原子排列非常规整,呈现Cu点阵特征.但由于Au与Cu之间的晶格应力作用,外延岛内Au原子并不是严格排列在Cu表面的四重稳定位置上.表1给出了Au外延岛内近邻原子间横向平均距离 $\bar{L}_{\text{Au}}$ 与Cu相邻四重稳定位置间距 $L_{\text{Cu}}$ 的比较.从表1可知,在Au外延岛中相邻原子间距离始终都大于Cu相邻四重稳定位置间距,增加了5%左右.从表1中还可以看出, $\bar{L}_{\text{Au}}$ 随外延岛尺度的增加是非线性的.当外延岛为 $3 \times 3$ 时, $\bar{L}_{\text{Au}}$ 最大.此后 $\bar{L}_{\text{Au}}$ 随外延岛尺度的增加呈单调下降.Au原子平均距离的这种变化规律是Au原子间相互作用与Au-Cu原子间相互作用之间应力平衡的反映.

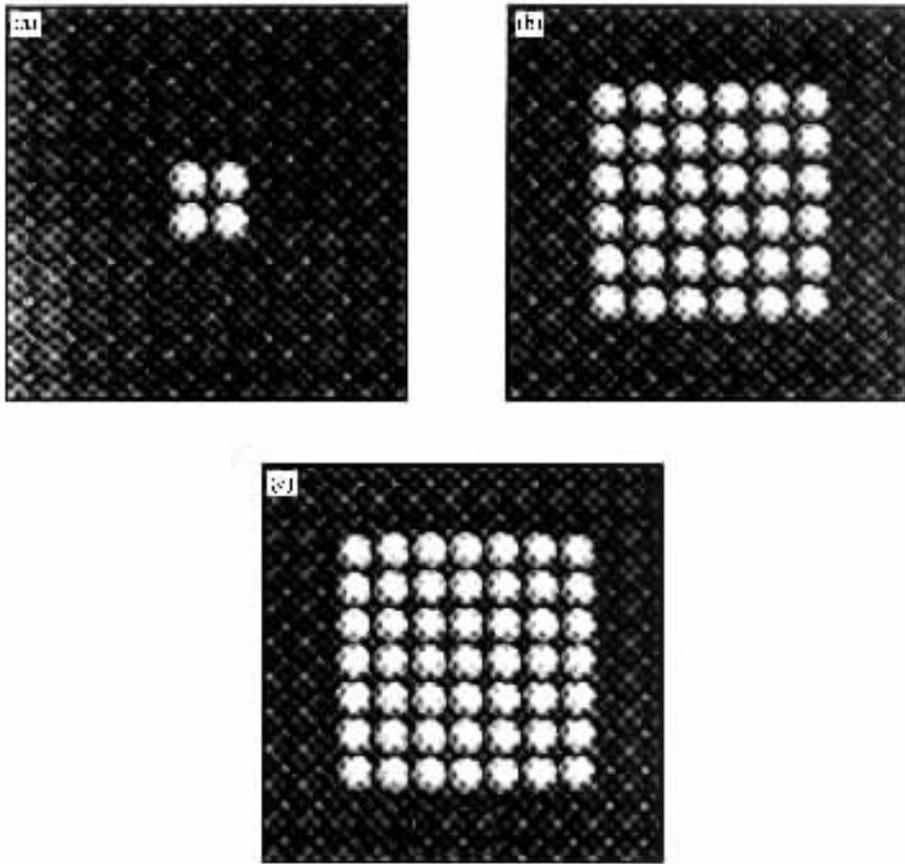


图1 弛豫后的 Au/Cu(001)外延岛形貌 (a)2×2 (b)6×6 ,(c)7×7

表1 Au/Cu(001)外延岛内 Au 原子平均距离的变化

	$\bar{L}_{Au}/nm$	$L_{Cu}/nm$	$\bar{L}_{Au} - L_{Cu}/nm$	变化率/%
2×2	0.2668	0.2557	0.0111	4.38
3×3	0.2689	0.2557	0.0132	5.20
4×4	0.2688	0.2557	0.0131	5.14
5×5	0.2681	0.2557	0.0124	4.88
6×6	0.2674	0.2557	0.0117	4.63
7×7	0.2668	0.2557	0.0111	4.37

实际上,外延岛内相邻原子间距离的变化是不均匀的,靠近外延岛的边缘原子横向间距相对较小,而外延岛内部原子间距相对较大.为了更全面地反映外延岛及基体表面的形貌变化,图2给出了7×7外延岛和基体表层原子质心位置的三维空间分布.从图2可以看出,外延岛内的原子位置高于外延岛边缘的原子位置,外延岛角上原子位置最低.外延岛内的原子位置相对于外延岛角上原子位置升高了约0.035 nm.从外延岛的表面形貌上可以清楚地看出,处于外延岛边缘的原子起着对形变外延岛的钉扎作用.同时,从图2(b)中可以看出,受外延岛形变

的影响,基体表面的形貌也发生了明显变形,在形变外延岛的作用下,外延岛下方的基体原子被抬起,呈现与外延岛类似的形貌,而处于外延岛角下面的基体原子位置反而有所下沉.

图3是经分子动力学弛豫后的Au异质外延岛8×8,9×9和10×10的形貌.从图3可以看到:当外延岛达到8×8时,由于外延岛边缘原子的钉扎力不足以平衡外延岛内部的原子间斥力,外延岛内开始出现失配位错以释放外延岛内部原子之间的排斥势能.位错线上的原子位置不再保持Cu点阵位置,位错线上的原子间距开始向纯Au原子间距转化.当外延岛达到9×9时,失配位错增加,并出现了失配位错的互相交错及空位.当外延岛达到10×10时,失配位错、交叉位错及空位进一步增加.这一结果说明:对于Au/Cu(001)异质外延体系,其外延岛保持Cu形貌的临界外延岛尺寸为7×7,其失配位错出现与Au,Cu晶格失配度密切相关.因为 $a_{Au}/a_{Cu} \approx 8/9$ ,所以,我们观察到的失配位错出现实际与Au,Cu晶格的调制周期上一致.

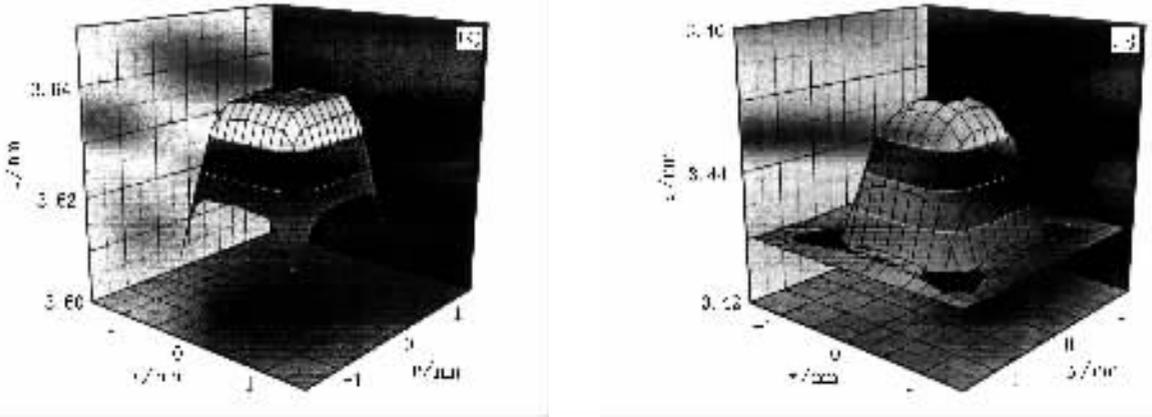


图 2 7×7 Au/Cu(001) 体系原子质心位置的三维空间分布 (a) 外延岛 (b) 基体表层

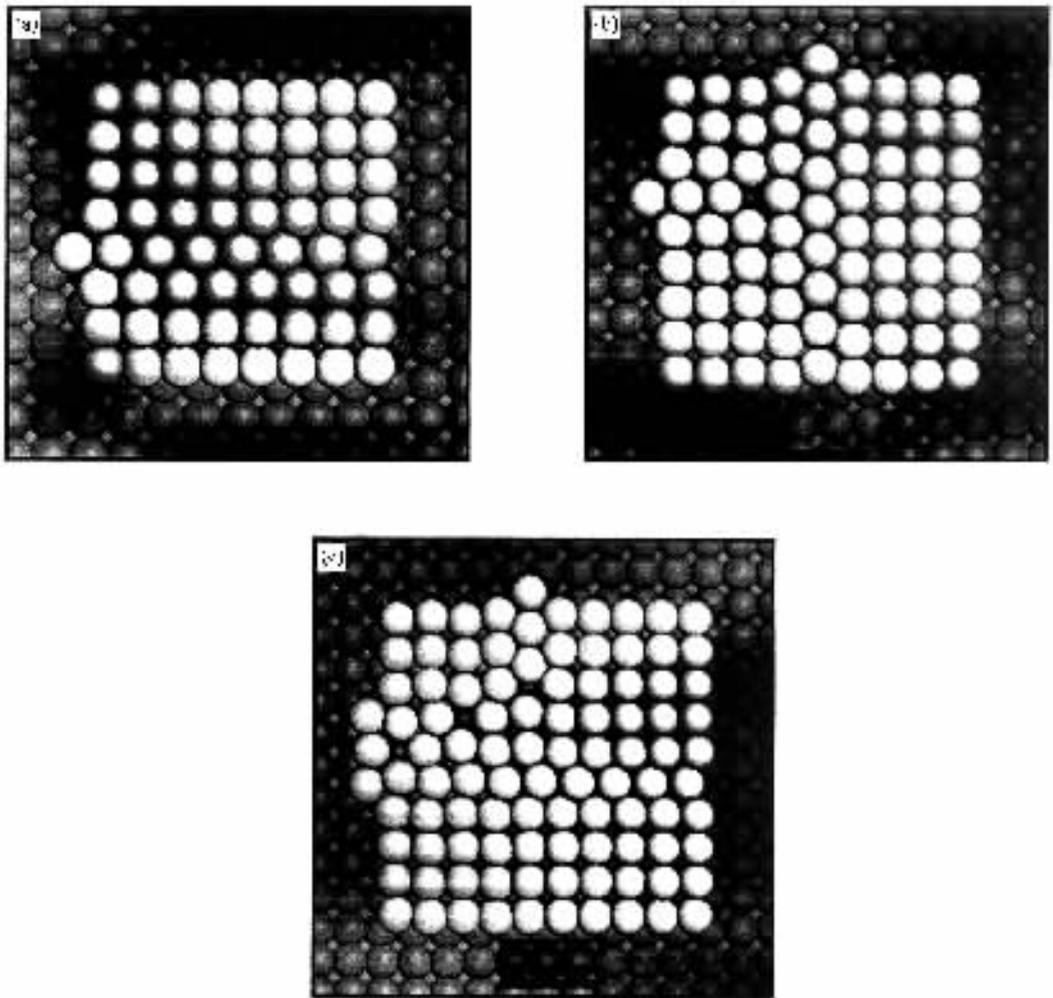


图 3 弛豫后的 Au/Cu(001) 外延岛形貌 (a) 8×8 (b) 9×9, (c) 10×10

图 4 给出了 8×8 外延岛和基体表层原子质心位置的三维空间分布. 从图 4 可以看出, 位错线中部的原子位置高于其周围原子. 这是因为非错位原子仍占据着 Cu 基体晶格的四重稳定位置, Au-Cu 原

子之间距离较小, 错位原子要适应 Au, Cu 晶格的调制周期, 占据在 Cu 基体表面桥位附近而被有所抬高. 9×9, 10×10, 11×11 的异质外延岛结果也显示了十分类似的规律, 即异质外延岛中的错位原子按

照接近于 Au 自身点阵排列,而非错位原子受限于 Cu 基体点阵,排布在 Cu 表面四重稳定位置上.同时,我们注意到外延岛上产生空位的位置均出现在四重稳定位置上,而不是在表面 Cu 原子之上,且空位附近的 Au 原子位置也相对较高.从图 4(b)中可以看到,位错线下面对应的 Cu 原子位置并未随位错线上外延岛原子的升高而升高,相反,这些原子相对于其周围的原子位置有所降低.这说明占据表面桥位附近的错位原子,由于受其周围原子拉力的影响而对基体表面原子产生了一定的压力.

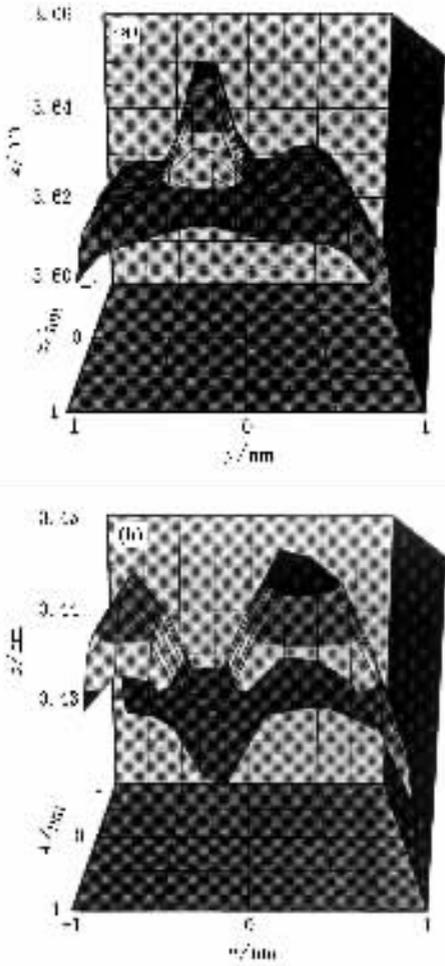


图 4  $8 \times 8$  Au/Cu(001)体系原子质心位置的三维空间分布 (a)外延岛 (b)基体表层

### 3.2. 局域压力随外延岛尺度的演化

图 5 为没有位错的外延岛中 Au 原子和其附近基体表面 Cu 原子的压力分布.从外延岛原子压力分布上看,无论是小外延岛( $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ )还是相对较大的外延岛( $6 \times 6$ ,  $7 \times 7$ ),外延岛上的 Au 原子都处于张应变状态,外延岛角上原子所受应力最大(浅

色)而外延岛非边缘原子所受应力最小(深色).为了定量描述外延岛内原子的压力随外延岛尺寸的变化情况,图 6 给出了外延岛角上原子和边上原子的平均压力随外延岛尺寸的变化.从图 6 可以看出:外延岛角上原子的平均压力在  $-1.0$  eV 左右,相当于  $14$  GPa 左右的张应力,且随外延岛尺寸的变化不大,外延岛边上原子的平均应力随外延岛尺寸的增加逐渐减小,介于  $8-10$  GPa 之间.而非边缘原子的平均应力比外延岛边上原子的平均应力还要小,特别是比较大的外延岛,非边缘原子的平均应力在  $4$  GPa 左右.实际上,外延岛原子所处的应力状态与其距基体表面的距离是一一对应的,即外延岛原子所受应力的大小与其距基体表面距离近似成反比.以上结果说明:直接影响外延岛上原子所处应力状态的是其周围的近邻环境,外延岛的角位、边位和内部原子的近邻环境不同导致了所受应力的差异,而外延岛的形变则是由外延岛原子的应力分布所决定.

从 Cu(001)表面原子的压力分布上看,外延岛边界以外的大部分区域内 Cu 原子仍处于张应变状态(浅色),表面原子的应力在  $8$  GPa 左右,且与不存在外延岛时的表面应力相比变化不大,说明 Au 外延岛对基体形变的影响是局域的.但是,处于外延岛附近的基体原子的应力变化十分显著.几乎所有外延岛附近的基体原子,其应变状态均从张应变状态转变为压应变状态.只有当外延岛比较小时,其角外侧的基体原子仍保持着比较小的张应变状态.我们注意到:处于外延岛角内侧的基体原子压力最大(深色),其次是处于外延岛边内侧的基体原子,即靠近外延岛边缘内侧的基体原子所感受到的压力相对较大,靠近外延岛中心和岛边缘外侧的基体原子所感受到的压力相对较小.为了更清楚地表现 Cu(001)表面原子的应力状态,图 7 给出了异质外延岛为  $6 \times 6$  时的 Cu(001)表面压力分布.从图 7 可以看到,基体表面原子所受到的压力与基体原子的起伏并不是完全一致的.虽然外延岛中心附近的基体原子位置最高,但其应力却相对较低.同时,需要指出的是外延岛对基体的影响不仅仅局限于表层,而是多达  $10$  层以上.这是因为外延岛通过对基体表面原子的作用使得表面原子及表面附近原子偏离其原有的平衡位置,这一偏离必将导致对基体更深层原子的影响,使更深层原子相对于原有平衡位置产生偏移,这种影响虽然随着距离基体表面原子层

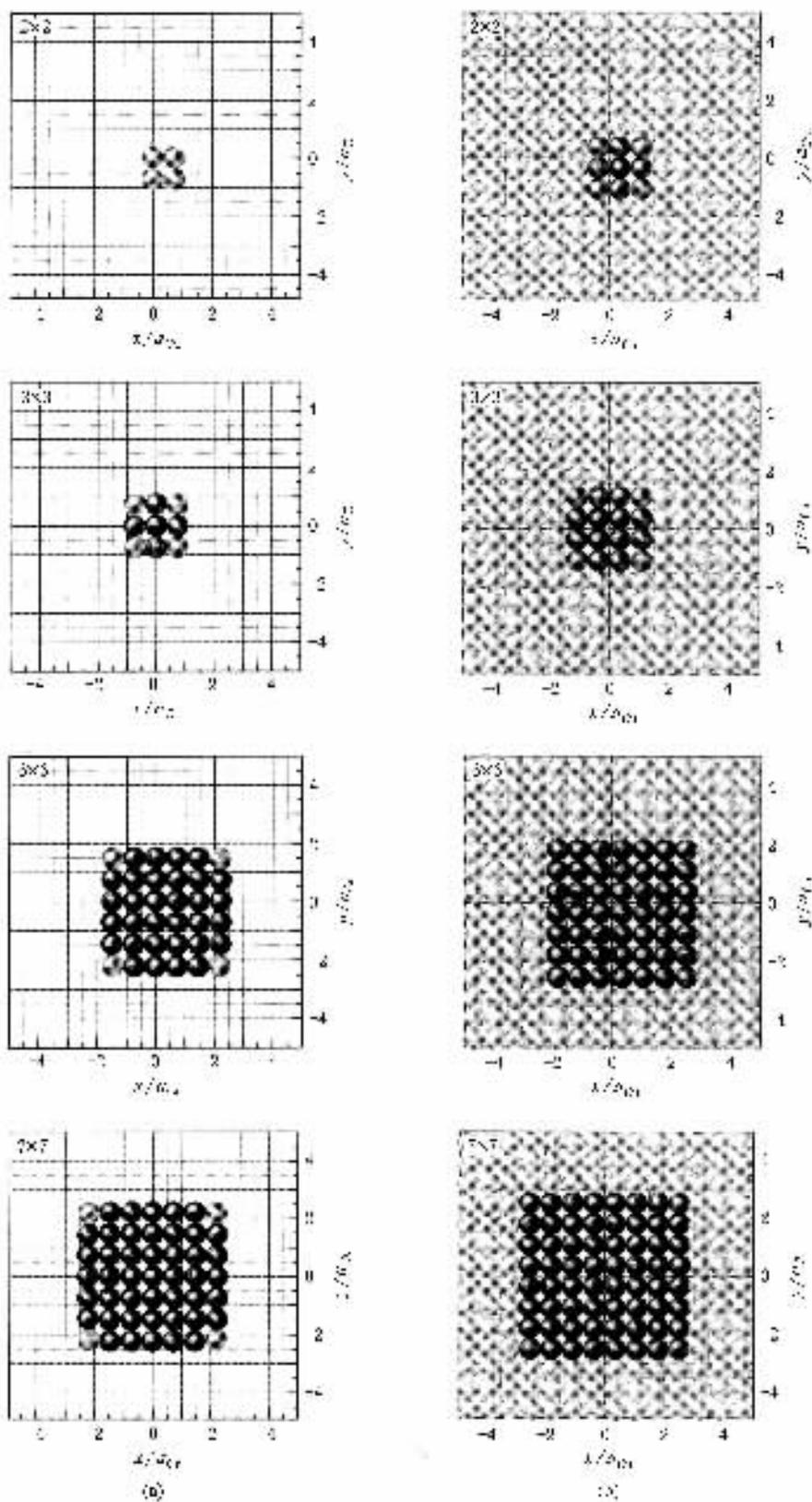


图 5 无位错的外延岛中 Au 原子 (a) 和其附近基体表面 Cu 原子 (b) 的压力分布。外延岛原子颜色从浅到深的变化对应的原子压力为  $-1.0 \sim -0.3$  eV, 约为  $-14 \sim -4$  GPa; 基体表面原子颜色从浅到深的变化对应的原子压力为  $-0.6 \sim -1.0$  eV, 约为  $-8 \sim -14$  GPa。

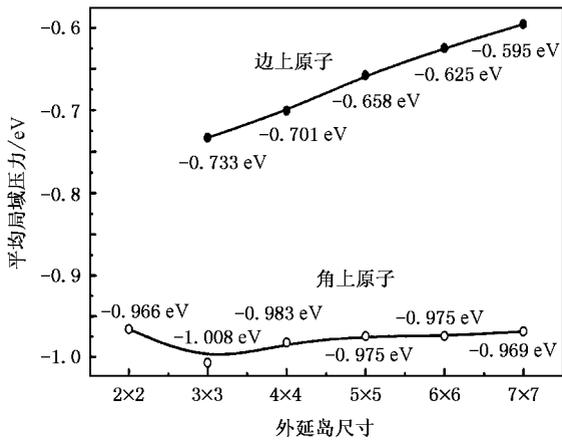


图 6 外延岛角上原子和边上原子的平均压力随外延岛尺寸的变化

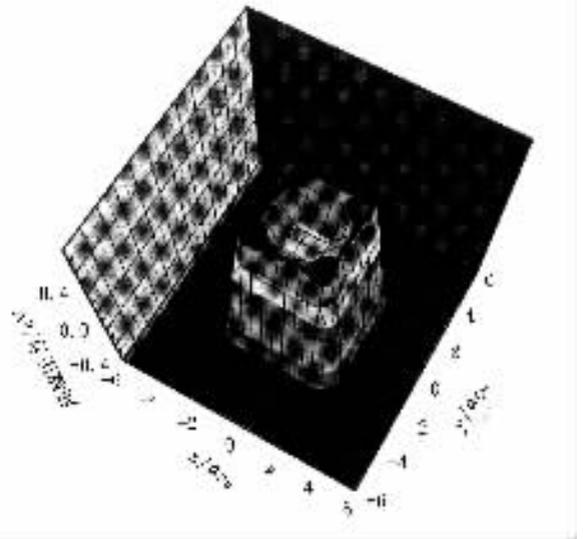


图 7 异质外延岛为 6x6 时的 Cu(001) 表面压力分布

数的增加而急剧减弱,但影响也达到了 10 层以上.

图 8 为有位错的外延岛中 Au 原子及其附近 Cu(001) 表面原子的压力分布. 从图 8 可以清楚地

看出,处于失配位错线上的错位原子处于张应变状态,而且其应力比其周围原子要大得多,甚至要高于

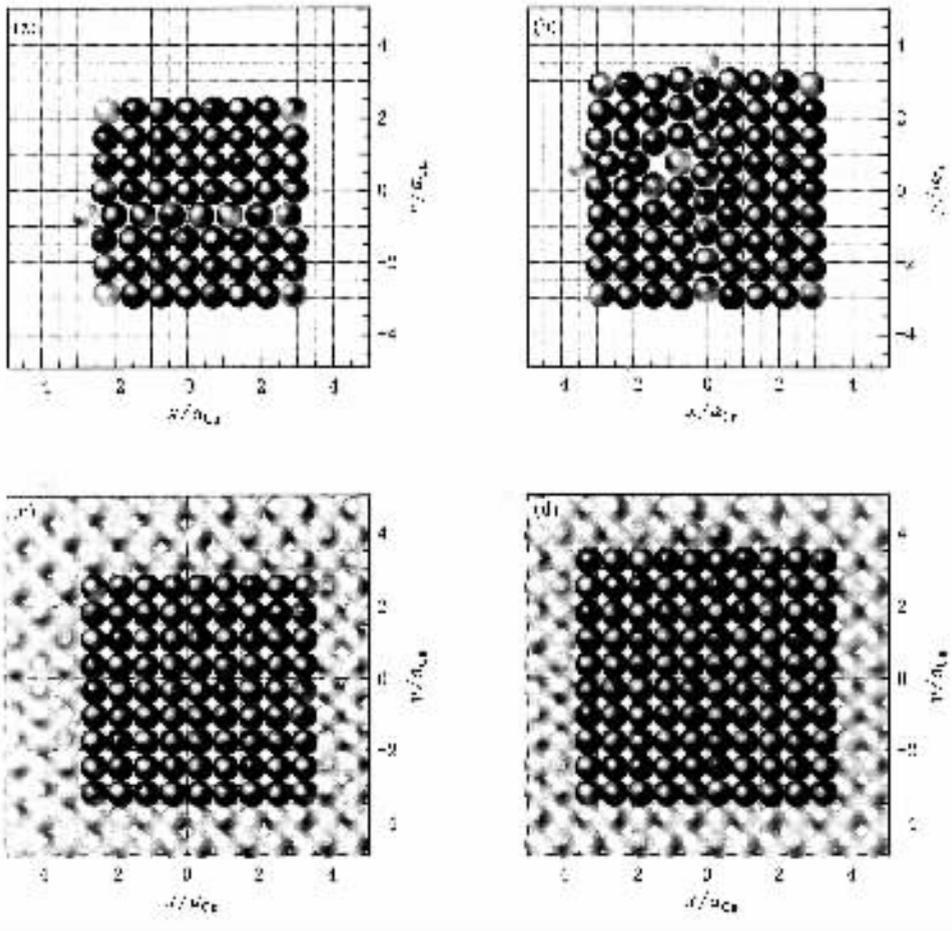


图 8 有位错的外延岛中 Au 原子及其附近 Cu(001) 表面原子的压力分布 (a)(b)为 Au 原子 (c)(d)为 Cu(001) 表面原子. 外延岛原子颜色从浅到深的变化对应的原子压力为 -1.2 — -0.2 eV 约为 -17 — -4 GPa; Cu(001) 表面原子颜色从浅到深的变化对应的原子压力为 -0.6 — -1.0 eV 约为 -8 — 14 GPa

外延岛边上原子的应力. 考虑到失配位错线上的原子位置高于其周围原子, 我们可以认为, 处在失配位错线上的外延岛原子, 其拉应力的主要来源是近邻的外延岛原子. 从图 8(b) 中我们还可以看到, 在失配位错交错所导致的空位附近, 错位原子也处于比较高的应力状态. 以上结果说明, 在失配位错和空位附近, 外延岛原子之间的吸引作用增强, 而错位原子与基体原子之间的吸引作用有所减弱.

从基体表面原子的压力分布上看, 外延岛以外的大部分原子仍处于张应变状态(浅色), 而外延岛附近的表面原子则仍处于压应变状态, 即失配位错的出现并没有改变基体表面原子的总体应力分布. 但从图 8(b) 中可以明显看到, 在失配位错和空位附近的基体表面原子所受到的压应力相对较大(深色), 主要原因是处于失配位错线上和空位附近的外延岛原子相对位置的升高而导致与周围原子的拉力增强, 从而产生了向下的压力使得附近基体表面原子的压应力增加. 这一结果再次说明, 失配位错的产生导致位错线上的错位原子与基体原子之间的吸引作用减弱. 这一结果同时意味着失配位错的产生将导致外延岛上的错位原子与基体的结合强度下降.

图 9 是外延岛原子的平均压力随外延岛原子尺度的变化. 从图 9 可以看到: 由于  $2 \times 2$  外延岛上只有 4 个角原子, 所以其平均压力为  $-0.97 \text{ eV}$ , 相当于约  $14 \text{ GPa}$  的张应力, 与纯 Au 表面的应力  $15 \text{ GPa}$  非常接近. 随着外延岛尺度的增加, 外延岛原子受到的平均应力逐渐减小, 在外延岛的尺度为  $7 \times 7$  时达到最小, 约为  $6.4 \text{ GPa}$ , 已经小于纯 Cu 表面的应力  $8 \text{ GPa}$ . 此后, 随着外延岛尺度的进一步增加, 失配位

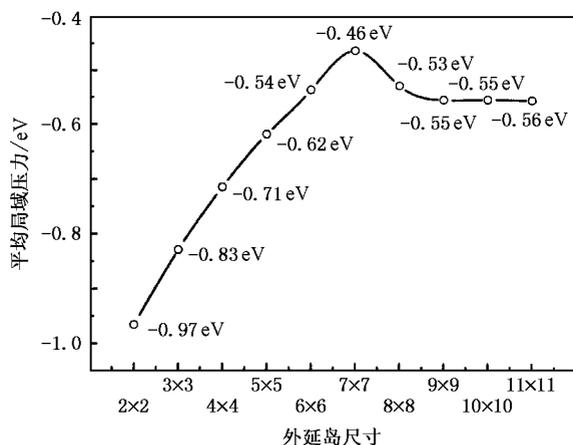


图 9 外延岛原子的平均压力随尺寸的变化

错开始产生, 外延岛原子的平均应力增加, 在外延岛的尺度为  $9 \times 9$  后基本保持不变. 此时, 外延岛的平均表面应力为  $8 \text{ GPa}$  左右, 与纯 Cu 表面的应力一致. 这一结果说明, 张应变状态(即原子间的吸引作用)是保持外延岛稳定的重要因素. 当外延岛的平均表面应力大于基体的表面应力时, 外延岛原子按基体原子的点阵排列; 当外延岛原子的平均表面应力小于基体的表面应力时, 按基体点阵排列的外延岛将处于能量的不稳定状态. 处于能量不稳定状态的外延岛, 只有通过形成失配位错的方式释放原子间的排斥势能而回到稳定状态.

### 3.3. 外延岛与基体结合能及基体形变能的变化

膜与基体结合强度是评价薄膜质量的重要物理参数之一. 研究异质外延岛与基体之间结合能随外延岛尺寸的演化, 对于了解膜与基体结合强度具有重要意义. 图 10 是 Au/Cu(001) 异质外延岛与 Cu 基体之间的结合能随外延岛尺寸的变化. 从图 10 可以看到: 当外延岛的尺寸为  $2 \times 2$  时, 外延岛与基体之间的结合能高达每个原子  $2.2 \text{ eV}$ , 即结合强度约为  $31 \text{ GPa}$ . 随着外延岛尺寸的增加, 外延岛与基体之间的结合强度基本呈指数逐渐下降. 当外延岛的尺寸达到  $8 \times 8$  以后, 由于失配位错的出现, 外延岛与基体之间的结合强度变化较小. 此时, 外延岛与基体之间的结合强度在  $21 \text{ GPa}$  左右. 这一结果说明: 外延岛内张应力的下降, 即外延岛内原子间排斥势能的增加是外延岛与基体之间结合强度下降的主要原因. 而失配位错的出现释放了部分外延岛内原子间的排斥势能, 尽管使位错线附近外延岛原子与基体原子之间的吸引作用减弱, 但相对增加了非错位

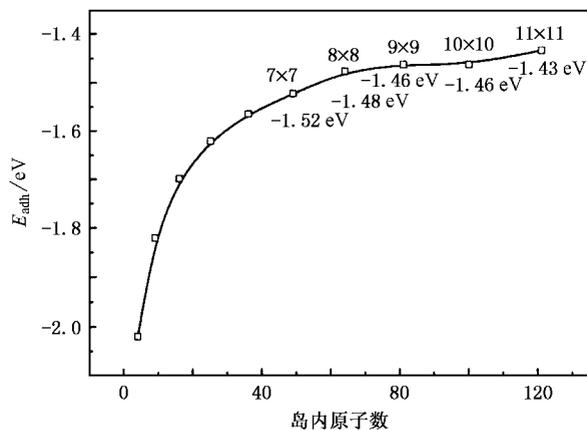


图 10 Au/Cu(001) 异质外延岛与 Cu 基体的结合能随外延岛尺寸的变化

原子与基体原子之间的结合强度,从而保证外延岛与基体之间的结合强度变化较小。

由于异质外延岛原子与基体原子的半径存在差异,因此外延岛的形成必将导致基体表面产生一定的变形。为了定量地分析外延岛尺寸对基体表面形变的影响,了解基体形变随外延岛演化的规律,我们根据(5)式的定义,计算了基体形变能随异质外延岛尺寸的变化,如图11所示。从图11可以看到:基体总的形变能随外延岛尺寸的增加而增加,即基体形变能( $E_{\text{deform}}$ )近似地与外延岛原子数的 $1/2$ 次方成正比, $E_{\text{deform}} \propto N^{1/2}$ ,其中 $N$ 为外延岛原子数。此外,我们注意到基体形变能对 $N^{1/2}$ 的偏离明显与Au,Cu晶格的调制比有关。这一点可以从外延岛原子对基体形变能的平均贡献 $\epsilon_{\text{deform}}$ 的变化趋势上更清楚地看出。同时,从 $\epsilon_{\text{deform}}$ 的数值上看,平均每个外延岛

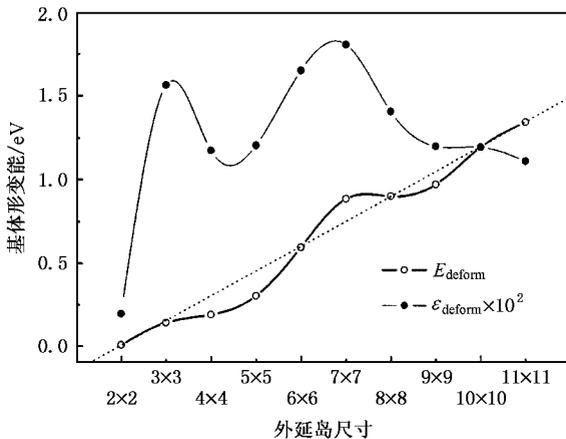


图11 Au/Cu(001)异质外延岛尺寸对Cu基体形变能的影响

原子对基体形变能的贡献在0.01 eV左右。这一结果意味着如果假设外延岛原子的存在只导致对应的基体表面原子的晶格畸变,并假设外延岛所对应的基体表面原子的平均应力为0.2—0.4 eV,则每个外延岛原子将引起5%—10%的表面晶格畸变。

## 4. 结 论

1)对于Au/Cu(001)异质外延体系,外延岛保持Cu形貌的临界外延岛尺寸为 $7 \times 7$ ,此时外延岛中的Au原子基本处于Cu(001)表面的四重稳定位置。当外延岛达到 $8 \times 8$ 时,外延岛内开始出现失配位错。随着外延岛尺寸的增加失配位错增加,并出现了失配位错的互相交错及空位。

2)直接影响外延岛上原子所处应力状态的是其周围的近邻环境,外延岛的角度、边位和内部原子的近邻环境不同导致了所受应力的差异,而外延岛的形变则是由外延岛原子的应力分布所决定。

3)受外延岛的影响,外延岛附近基体原子的应变状态均从张应变状态转变成成为压应变状态,但基体表面原子所受到的压力与基体原子的起伏不是完全一致,处于外延岛边缘内侧的基体原子的压应力较大。

4)原子间的吸引作用是保持外延岛稳定的重要因素。失配位错的产生将导致外延岛上的错位原子与基体的结合强度下降,但相对增加了非错位原子与基体原子之间的结合强度。

[1] Frank F C, van der Merwe 1949 *Proc. R. Soc. (London)* **198** 205  
 [2] Jacobsen J, Nielsen L P, Besenbacher F *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 489  
 [3] Cünther C, Vrijmoeth J, Hwang R Q *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 754  
 [4] Hamilton J C, Foiles S M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 882  
 [5] Brune H, Röder H, Boragno C *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2997  
 [6] Meunier I, Tréglia G, Legrand B *et al* 2000 *Appl. Surf. Sci.* **162—163** 219  
 [7] Vervisch W, Mottet C, Goniakowski J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245411  
 [8] Witten T A, Sander L M 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1400  
 [9] Liu B G, Wu J, Wang E G *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1195  
 [10] Wang E G 2003 *Prog. Phys.* **23** 1 (in Chinese) [王恩哥 2003 物理学进展 **23** 1]

[11] Wang E G 2003 *Prog. Phys.* **23** 145 (in Chinese) [王恩哥 2003 物理学进展 **23** 145]  
 [12] Daw M S, Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285  
 [13] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443  
 [14] Folies S M 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7685  
 [15] Folies S M, Daw M S, Baskes M I 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983  
 [16] Zhang Q Y, Pan Z Y, Tang J Y 1999 *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* **8** 296  
 [17] Zhang C, Lü H F, Zhang Q Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2329 (in Chinese) [张超、吕海峰、张庆瑜 2002 物理学报 **51** 2329]  
 [18] Ye Z Y, Zhang Q Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2798 (in Chinese) [叶子燕、张庆瑜 2002 物理学报 **51** 2798]  
 [19] Lu H F, Zhang C, Zhang Q Y 2003 *Nucl. Instr. Meth. B* **205** 22  
 [20] Mottet C, Tréglia G, Legrand B 1993 *Surf. Sci.* **287—288** 476

# Study on the evolution of Au heteroepitaxial islands on Cu(001) by molecular dynamics simulation \*

Meng Yang Zhang Qing-Yu<sup>†</sup>

( State Key Laboratory of Materials Modification by Laser , Ion and Electron Beams ,  
Dalian University of Technology , Dalian 116024 , China )

( Received 4 February 2005 ; revised manuscript received 16 June 2005 )

## Abstract

Molecular dynamics simulation was used to relax the heteroepitaxial Au islands in monolayer on Cu(001) substrate in the initial stage of film growth. The evolution of the morphology and local pressure of the heteroepitaxial Au islands as well as the adhesive energy to the substrate have been analyzed. The simulation results show that a pseudo-morphologically strained Au island is formed when the heteroepitaxial Au island is not larger than  $7 \times 7$ . When the heteroepitaxial Au island is as large as  $8 \times 8$ , however, a misfit dislocation induced by the stress, which results from the mismatch in the interface, appears. The number of the misfit dislocations increases with increasing scale of the heteroepitaxial Au island, and moreover, crossing dislocations and vacancies can be observed in large heteroepitaxial Au islands. The analysis results of the local pressure map show that the difference of the neighborhood results in the difference of the stress of the atoms in the heteroepitaxial Au islands. Furthermore, the pseudo-morphologically strained Au islands are the results of the different local pressure of Au atoms in the heteroepitaxial Au islands. On the other hand, we found that the misfit dislocations lead to the decrease of the adhesive energy of the mismatched atoms to the substrate, and the adhesion of other atoms increases relatively.

**Keywords** : heteroepitaxial , morphology , local pressure , molecular dynamics simulation

**PACC** : 6855

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China and the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics ( Grant No. 10476003 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : qy Zhang@dlut.edu.cn