

# 异质扩散过程中 ES 势垒的计算\*

李佳阳 李融武† 孙俊东 刘绍军

(北京师范大学物理学系, 北京 100875)

(2006 年 4 月 30 日收到, 2006 年 6 月 14 日收到修改稿)

利用分子动力学中的静态结构计算方法对 Pd, Ag 及 Cu 原子在面心立方铜的台阶表面扩散过程中的 Ehrlich-Schwoebel (ES) 势垒进行了模拟计算, 研究了各种台阶表面情况下增原子扩散过程中的 ES 势垒, 讨论了与衬底互溶的金属和与衬底不互溶的金属增原子扩散的 ES 势垒的异同, 并将模拟结果与同质情况的研究结果进行了对比. 结果表明: 1) 在同质和异质扩散过程中 ES 势垒随着台阶高度的变化关系是相似的, 即随着台阶高度的增加, ES 势垒逐渐增加; 当台阶高度达到某一高度时 ES 势垒将趋于定值. 2) 在跳跃机理下, 与 Cu 互溶的金属 (Pd) 在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大, 其次是 Cu, 最小的是与 Cu 不互溶的金属 (Ag); 而在交换机理下, 与 Cu 不互溶的金属 (Ag) 在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大, 其次是 Cu, 最小的是与 Cu 互溶的金属 (Pd). 3) 对大多数台阶的情况, 交换机理支配着原子在台阶边缘的扩散行为; 且表面台阶高度对交换扩散过程影响较大.

关键词: 异质表面原子扩散, 分子动力学, Ehrlich-Schwoebel 势垒

PACC: 6822, 7115Q

## 1. 引言

表面原子扩散控制着薄膜生长过程中表面原子的形核、表面岛的生长和粗化等诸多过程, 是当前表面科学领域的一个研究热点<sup>[1,2]</sup>, 对于理解表面原子的形核动力学过程、了解导致薄膜生长模式改变的物理机理都具有重要的理论价值.

表面岛是薄膜生长中常见的一种表面形貌. Ehrlich 和 Schwoebel 等人在研究单层表面岛上的增原子的扩散行为时发现, 在表面岛的边缘, 增原子发生层间扩散需要克服一个额外的能量势垒, 即 Ehrlich-Schwoebel (ES) 势垒<sup>[3,4]</sup>. 此后的研究发现 ES 势垒随台阶高度 (即表面岛的原子层数) 的变化而有所改变, 并提出了三维 ES 势垒 (3D-ES 势垒) 的概念<sup>[5-7]</sup>. 与单层原子岛的 ES 势垒 (现称为二维 ES 势垒, 即 2D-ES 势垒) 不同, 三维 ES 势垒被定义为原子越过台阶时总的能量势垒, 即增原子越过不同晶面的交线从交线的一侧向另一侧晶面扩散的总能量势垒. 通过定义原子扩散越过单层原子台阶边缘扭折 (kink) 处的势垒为一维 ES 势垒 (1D-ES 势垒), Lagally 和 Zhang 给出了材料原子级生长中原子扩散

的完整的图像<sup>[2]</sup>. 实验和 Kinetic Monte Carlo 模拟研究均表明 ES 势垒对薄膜的生长模式和形貌有重要影响<sup>[8,9]</sup>.

薄膜生长中表面活性剂 (surfactant) 的使用是一种重要的控制生长中的形貌变化的方法. 表面活性剂实际上是一种与衬底不同的原子, 附着于生长的表面而不参与生长, 只起到改变生长模式的作用. 在这方面已有大量的实验研究<sup>[10-14]</sup>. 表面活性剂主要是通过调节改变表面生长模式, 但这种机理的物理原因仍有待研究. 另外薄膜异质外延生长的研究主要集中在两个方面, 一方面是在实验上对异质外延生长中的各种结构的应变、应力的研究<sup>[15-17]</sup>, 并通过计算机模拟研究给予理论上的支持<sup>[18,19]</sup>; 另一方面是在实验上对异质外延生长中各种生长现象进行的研究<sup>[20-23]</sup>, 并在理论上给予解释<sup>[24,25]</sup>. 然而, 目前关于 ES 势垒, 特别是异质扩散的 ES 势垒的计算分析及其与表面原子扩散、生长模式的关系等仍有待进一步研究<sup>[26-30]</sup>.

本文采用分子动力学模拟程序中的静态结构计算方法 (淬火法), 对 Pd (与 Cu 互溶的金属), Ag (与 Cu 不互溶的金属) 和 Cu 增原子在 Cu 的各种表面台阶边缘扩散过程中的 ES 势垒进行了静力学计算.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 60471034) 资助的课题.

† E-mail: rongwuli@bnu.edu.cn

通过模拟计算讨论了异质扩散过程中 ES 势垒随台阶高度的变化规律及与衬底互溶的金属和与衬底不互溶的金属增原子扩散的 ES 势垒的异同,并将模拟结果与同质扩散情况的研究结果进行了对比。

## 2. 计算方法和模型

### 2.1. 表面势垒的计算方法

表面原子扩散势垒的计算一般采用分子动力学方法或静态计算方法。具体选择哪种方法关键在于权衡计算方法所适用的环境。分子动力学方法是通过分子动力学模拟扩散原子在不同温度下的运动,统计扩散原子在各种扩散机理下的扩散距离,进而计算出表面原子的扩散势垒<sup>[23,30,31]</sup>。而静态计算则是迫使扩散原子沿某一扩散路径运动,通过系统能量的变化来计算原子扩散激活能的一种方法<sup>[13]</sup>,因为比较适用于复杂体系的计算而在表面扩散研究中被广泛使用。本文采用的是静态计算方法,具体的计算方法在文献<sup>[32]</sup>中有详细地描述,这里只做简单介绍。沿着增原子的扩散路径画一条直线,再将此线段分成若干份,在每一份点处把增原子约束在垂直于扩散路径的平面上,通过对整个系统做淬火分子动力学弛豫(即控制弛豫温度,使其从高温逐渐降低到接近零度)得到系统的势能最小值,从而给出增原子在扩散路径上的势能曲线。由于二维和三维 ES 势垒的定义不同,为了便于比较,本文将二维 ES 势垒的值也都取为原子越过台阶时总的能量势垒。

### 2.2. 势函数的选取

本文采用的 Cu, Pd 以及 Ag 的势函数是 Cai 等人拟合的 EAM 势<sup>[33]</sup>。势函数的形式为

$$E_{\text{tot}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \sum_{i>j} \phi(r_{ij}), \quad (1)$$

其中

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

$$f(r) = f_e \exp[-\chi(r - r_e)], \quad (3)$$

$f_e$  是标度常数,  $r_e$  是平衡态下原子间最近邻距离。

$$F(\rho) = -F_0 \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \right] \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^n + F_1 \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right), \quad (4)$$

$$\phi(r) = -\alpha [1 + \beta(r/r_a - 1)] \exp[-\beta(r/r_a - 1)], \quad (5)$$

$\rho_e$  表示平衡态下电子密度,  $F_0$  和  $n$  是两个常数。取

$F_0 = E_c - E_v^n$ ,  $n = 0.5$ , 这样取只是为了形式上的简单,并不是从物理上考虑的。对于单一金属而言  $f_e = 1$ , 剩余的参数  $r_a, F_1, \alpha$  和  $\beta$ , 加上方程(3)中的  $\chi$ , 一共 5 个参数是需要通过实验数据进行拟合的;而对于合金  $f_e = (E_c/\Omega)^\gamma$ , 其中  $\gamma$  需要通过金属溶解热来拟合。

这个 EAM 势拟合了晶格常数  $a_0$ 、结合能  $E_0$ 、弹性常数  $C_{ij}$  和空位形成能  $E_f$  等实验参数,对势中包含长程相互作用。它能够更好地描述金属系统的性质,例如,表面、缺陷、杂质等,尤其是它能够很好地描述合金体系的性质。我们取势函数计算的截止半径等于  $1.65a_0$ 。

### 2.3. 计算模型

首先,构造一个 Cu 衬底,它是一个  $14a_x \times 14a_y \times 9a_z$  的长方体( $a_x, a_y, a_z$  分别为  $x, y, z$  方向上的最近邻原子间距离),包含 7000 多个 Cu 原子。为了模拟一个大的衬底,在  $x$  和  $y$  方向上采用周期性边界条件( $x, y, z$  方向如图 1 所示)在  $z$  方向上,上面 12 层为自由原子层,最下面的 6 层原子被固定在理想晶格位上。根据需要,衬底表面可以选择  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  或  $\{111\}$  面。然后,在衬底表面上加一个面积为  $7a_x \times 14a_y$  的三维岛,使岛的上表面与衬底表面平行。根据需要,岛的侧面可以是  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  或  $\{111\}$  面。这样,由衬底及其上面的三维岛就构成了模拟的表面台阶,如图 1 所示 (a)为俯视图 (b)为侧视图。图中衬底表面与岛的上表面为  $\{100\}$  面,台阶侧面为  $\{111\}$  面,台阶侧面与衬底表面的交线为  $110$  晶向,我们称之为  $\{100\}$  面上的  $110/\{111\}$  台阶。为了简便起见,本文对台阶的描述都采用这种方式。最后,在表面岛上分别加 Pd, Ag 或 Cu 增原子,并对不同增原子在各种表面岛边缘向下扩散过程中的 ES 势垒进行计算。

## 3. 结果与分析

台阶边缘的增原子扩散有 2 种机理:一种是跳跃(hop)机理,即增原子越过台阶边缘的原子掉下台阶;另一种是交换(exchange)机理,指增原子在扩散到台阶边缘时,将边缘处原子挤下台阶,而占据被挤掉原子的位置。原子到达台阶边缘时通常采用 ES 势垒较低的那种机理进行扩散。图 2 给出了一个 Pd 增原子由 Cu  $\{100\}$  面经过  $110/\{111\}$  台阶,扩散到

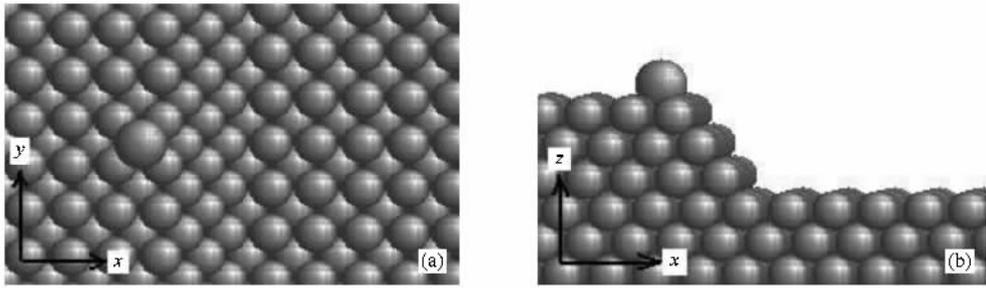


图 1 {100}面上的 110 /{111}台阶 (a)俯视图 (b)侧视图 ;最上面略大的原子为 Pd 增原子

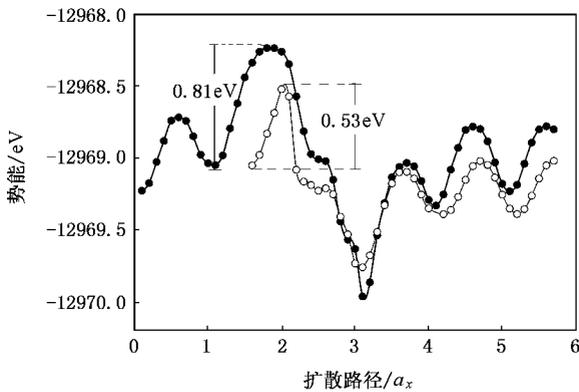


图 2 Pd 增原子由 Cu{100}面经过 110 /{111}台阶扩散到另一个 Cu{100}面的过程中的势能曲线(空心圆圈代表交换机理 ;实心圆圈代表跳跃机理 ;台阶高度为 2 层)

一个 Cu{100}面的过程中的势能曲线. 台阶高度为 2 层, 实心圆点代表跳跃机理, 空心圆圈代表交换

机理. 由图 2 可见, 在异质扩散过程中, 当增原子通过交换机理或者跳跃机理越过台阶边缘时势垒都明显增加, 这说明异质扩散过程中同样存在 ES 势垒. 图中数值表示的是两种机理的三维 ES 势垒.

本文对 Pd, Ag 及 Cu 增原子在各种台阶边缘通过跳跃和交换 2 种机理进行扩散的 ES 势垒分别做了计算, 计算结果见表 1.

### 3.1. 异质扩散过程中 ES 势垒随台阶高度的变化

图 3 给出了 Pd, Ag 及 Cu 增原子分别通过两种扩散机理由 Cu{100}面经过一个 110 /{111}台阶扩散到另一个 {100}面过程中, ES 势垒从二维到三维的转化(即此图中包括了异质和同质的情况). 由表 1 及图 3 可见, 对大多数台阶的情况, 在异质扩散过程中通过两种扩散机理得到的 ES 势垒都随台阶高度增加而增加, 并逐渐趋于定值, 定值的大小及 ES

表 1 各种台阶表面组合情况下 Ag, Cu 及 Pd 的 ES 势垒与台阶高度(层数)的关系

衬底表面及台阶上表面	交线 / {台阶面}	一层			二层			三层			四层			五层		
		Ag	Cu	Pd												
{100}	100 / {100}	0.41	0.38	0.34	0.11	0.12	0.26	0.26	0.20	0.26	0.26	0.20	0.25	0.26	0.20	0.26
		0.22	0.28	0.39	0.23	0.30	0.42	0.25	0.32	0.51	0.25	0.32	0.51	0.25	0.32	0.51
{100}	100 / {110}	0.41	0.38	0.34	0.43	0.40	0.36	0.43	0.40	0.36	0.42	0.40	0.36	0.43	0.40	0.36
		0.21	0.27	0.39	0.23	0.27	0.42	0.26	0.27	0.42	0.26	0.27	0.42	0.26	0.27	0.42
{100}	110 / {111}	0.52	0.48	0.44	0.69	0.55	0.53	0.69	0.55	0.53	0.69	0.55	0.53	0.69	0.55	0.53
		0.43	0.57	0.69	0.45	0.57	0.81	0.45	0.57	0.81	0.45	0.57	0.81	0.45	0.57	0.81
{110}	110 / {100}	0.41	0.45	0.46	0.62	0.47	0.62	0.62	0.64	0.62	0.62	0.64	0.62	0.62	0.64	0.62
		0.37	0.49	0.60	0.48	0.56	0.74	0.49	0.56	0.79	0.49	0.56	0.79	0.49	0.56	0.79
{110}	110 / {110}	0.41	0.45	0.46	0.21	0.22	0.37	0.20	0.22	0.37	0.20	0.22	0.37	0.20	0.22	0.37
		0.37	0.49	0.60	0.41	0.45	0.67	0.42	0.48	0.67	0.42	0.48	0.67	0.42	0.48	0.67
{110}	110 / {111}	0.65	0.58	0.52	0.69	0.60	0.53	0.69	0.60	0.53	0.69	0.60	0.53	0.69	0.60	0.53
		0.69	0.86	1.22	0.70	0.87	1.23	0.70	0.87	1.23	0.70	0.87	1.23	0.70	0.87	1.23
{111}	110 / {100}	0.27	0.18	0.21	0.35	0.20	0.32	0.35	0.27	0.32	0.35	0.27	0.29	0.35	0.27	0.32
		0.51	0.63	0.87	0.53	0.63	0.88	0.54	0.65	1.00	0.54	0.65	1.00	0.54	0.65	1.00
{111}	110 / {110}	0.19	0.07	0.05	0.19	0.10	0.05	0.20	0.11	0.06	0.20	0.11	0.06	0.20	0.11	0.06
		0.29	0.37	0.47	0.33	0.37	0.47	0.33	0.37	0.47	0.33	0.37	0.47	0.33	0.37	0.47
{111}	110 / {111}	0.19	0.07	0.05	0.53	0.29	0.28	0.53	0.31	0.29	0.53	0.31	0.29	0.53	0.31	0.29
		0.29	0.37	0.47	0.35	0.40	0.64	0.35	0.40	0.64	0.35	0.40	0.64	0.35	0.40	0.64

注: 第一行为交换机理的结果, 第二行为跳跃机理的结果.

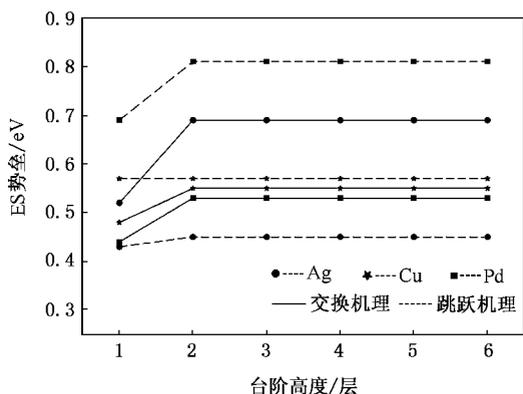


图3 Ag, Cu 及 Pd 增原子通过两种机理由 Cu{100} 面经过  $110 / \{111\}$  台阶扩散到另一个 {100} 面的 ES 势垒随台阶高度的变化

势垒由二维到三维的转变与台阶类型有关. 这与同质的情况类似<sup>[25]</sup>. 表 1 的计算结果表明, 各种台阶表面组合情况下 Ag, Cu 及 Pd 的 ES 势垒与台阶高度(层数)的关系, 对于与 Cu 互溶的金属(Pd)和不互溶金属(Ag)都存在类似的规律.

这说明在这类表面台阶情况下的异质扩散过程中, 台阶高度越高到达台阶边缘的增原子向下扩散的概率越小. 也就是说, 在薄膜生长过程中, 一旦由于随机涨落而形成了三维岛状结构, 沉积到岛上的原子就不容易从台阶上扩散下来, 从而有利于三维纳米结构的形成. 实验上, Bachmann 等人通过在 Cu {111} 面上沉积 Ag 原子, 在沿着  $110$  台阶方向上制成了 Ag 的纳米线, Ag 纳米线的侧面高度达到了  $3 \text{ nm}$ <sup>[34]</sup>.

此外, 研究发现异质扩散过程中增原子从指数为  $A$  的晶面扩散到指数为  $B$  的晶面和由  $B$  晶面扩散到  $A$  晶面的三维 ES 势垒不同, 这种差异将导致表面岛生长过程中竞争能力的不同. 例如对于 Pd 和 Ag 在 Cu 表面岛上扩散的情况, 从 {111} 晶面到 {100} 晶面的 3D-ES 势垒分别为  $0.32 \text{ eV}$  和  $0.35 \text{ eV}$ ; 而由 {100} 晶面到 {111} 晶面的 3D-ES 势垒分别为  $0.53 \text{ eV}$  和  $0.69 \text{ eV}$ , 显然形成 {111} 晶面的竞争能力比较强. 这与同质扩散的情况类似, 由表 1 可见, 对于 Cu 在 Cu 表面上扩散的情况, 从 {111} 晶面到 {100} 晶面的 3D-ES 势垒为  $0.27 \text{ eV}$ , 而由 {100} 晶面到 {111} 晶面的 3D-ES 势垒为  $0.55 \text{ eV}$ , 同样是形成 {111} 晶面的竞争能力较强.

我们通过比较其他情况的 ES 势垒发现, 在交换机理下, 由对称性高的晶面到对称性低的晶面的 3D-ES 势垒较小, 而由对称性低的晶面到对称性高

的晶面 3D-ES 势垒较大. 也就是说交换机理下, 形成对称性高的晶面竞争力较强.

### 3.2. 互溶金属(Pd 和 Cu)与不溶金属(Ag 和 Cu)ES 势垒的比较

图 3 可见, 在跳跃机理下, Pd 在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大, 其次是 Cu, 最小的是 Ag. 而在交换机理下, Ag 在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大, 其次是 Cu, 最小的是 Pd.

我们认为跳跃机理的 ES 势垒与增原子在表面的结合能有一定的关系. 我们分别计算了 Cu, Ag 和 Pd 增原子在 Cu 各个表面的结合能, 结果见表 2. 由表 2 可以看出, 各种不同的表面上, 结合能最大的都是 Pd 原子, 其次是 Cu 原子, 最小的是 Ag 原子. 并且 Cu 与 Ag 的结合能差异较小, 例如在 {100} 面上只有  $0.53 \text{ eV}$ , 而 Pd 与 Cu 的结合能之差较大, 在 {100} 面上为  $1.31 \text{ eV}$ . 而由表 1 可见, 在跳跃机理下, ES 势垒最大的是 Pd, ES 势垒最小的是 Ag, 且多数情况下 Pd 的 ES 势垒远大于其他两种原子的 ES 势垒. 即增原子在表面得结合能越小, 其通过跳跃机理扩散的 ES 势垒越小, 其通过跳跃机理扩散的概率就越大.

然而交换机理下, 增原子与表面原子互换的过程中涉及到较为复杂的情形, 因此不能完全由表面上增原子的结合能来解释. 但我们看到, 在大多数情况下, Cu 的 ES 势垒的大小处于其他两种 ES 势垒之间. 这与增原子与表面结合能中, Cu 在表面的结合能介于其他两种原子与表面的结合能之间的结果是一致的. 关于交换机理扩散的 ES 势垒部分, 我们正在用第一性原理计算的方法进行更详细的计算.

表 2 Cu, Pd 及 Ag 原子在 Cu 的三种表面的结合能

表面类型	增原子		
	Cu	Ag	Pd
{100}	3.24	2.71	4.55
{110}	3.24	2.95	4.94
{111}	2.75	2.44	3.95

### 3.3. 通过交换机理和跳跃机理扩散过程中 ES 势垒的比较

由表 1 可以看出, 对大多数情况, 通过交换机理的 ES 势垒明显低于通过跳跃机理的 ES 势垒. 这说明对大多数台阶的情况, 交换机理支配着原子在台阶边缘的扩散行为. 但对于 Ag 和 Cu 的某些台阶, 出现了交换机理的 ES 势垒大于跳跃机理 ES 势垒的情况, 在这些情况下, 原子在台阶边缘的行为由跳

跃机理支配。

同时由图 3 还可以看出,对于跳跃过程,2D-ES 势垒与 3D-ES 势垒的差异不是很明显,即跳跃扩散的 ES 势垒对台阶高度的变化不是很敏感;而对交换扩散过程,3D-ES 势垒比 2D-ES 势垒有明显提高,特别是对 Cu 和 Ag 的情况,其 2D-ES 势垒分别为 0.48 eV 和 0.52 eV,而 3D-ES 势垒分别达到 0.55 eV 和 0.69 eV。由表 1 可以看出,大多数台阶的情况均满足这一结果。这说明,一般情况下,表面台阶高度对交换扩散过程影响较大。

## 4. 结 论

通过计算我们可以得到以下结论:

1. 在同质和异质扩散过程中 ES 势垒随着台阶

高度的变化关系是相似的,随着台阶高度的增加,ES 势垒逐渐增加;当台阶高度达到某一高度时 ES 势垒将不再变化。

2. 在跳跃机理下,与 Cu 互溶的金属(Pd)在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大,其次是 Cu,最小的是与 Cu 不互溶的金属(Ag)。而在交换机理下,与 Cu 不互溶的金属(Ag)在 Cu 表面台阶上扩散的 ES 势垒最大,其次是 Cu,最小的是与 Cu 互溶的金属(Pd)。

3. 对大多数台阶的情况,交换机理支配着原子在台阶边缘的扩散行为;且表面台阶高度对交换扩散过程影响较大。

感谢清华大学物理系蔡军教授提供的势函数拟合程序及原子间异种势的讨论。

- [ 1 ] Zhang Z Y , Lagally M G 1997 *Science* **276** 377
- [ 2 ] Lagally M G , Zhang Z Y 2002 *Nature* **417** 907
- [ 3 ] Ehrlich G , Hudda F G 1966 *J. Chem. Phys.* **44** 1039
- [ 4 ] Schwoebel R L , Shipsey E J 1966 *J. Appl. Phys.* **37** 3682
- [ 5 ] Liu S J , Huang H C , Woo C H 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3295
- [ 6 ] Liu S J , Wang E G , Woo C H , Huang H 2001 *J. Compu. Aided Materials Design* **7** 195
- [ 7 ] Liu S J , Wang E G , Woo C H , Huang H 2001 *Advances in Applied Plasma Science* **3** 125
- [ 8 ] Zuo J K , Wendelken J F 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2791
- [ 9 ] Wu F M , Lu H J , Wu Z Q 2006 *Chinese Physics* **15** 807
- [ 10 ] Copel M , Reuter M C , Kaxiras E , Tromp R M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 632
- [ 11 ] Zhang Z Y , Lagally M G 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 693
- [ 12 ] Vrijmoeth J , van der Vegt H A , Meyer J A , Vlieg E , Behm R J 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3843
- [ 13 ] Markov I 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11271
- [ 14 ] Kandel D , Kaxiras E 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 2742
- [ 15 ] Cünther C , Vrijmoeth J , Hwang R Q , Behm R J 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 754
- [ 16 ] Brune H , Röder H , Boragno C , Kern K 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2997
- [ 17 ] Vervisch W , Mottet C , Goniakowski J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245411
- [ 18 ] Hamilton J C , Foiles S M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 882
- [ 19 ] Meunier I , Rrégliat G , Legrand B , Tétot R , Aufray B , Gay J M 2000 *Appl. Surf. Sci.* **162 - 163** 219
- [ 20 ] Palmberg P W , Rhodin T N 1968 *J. Chem. Phys.* **49** 134
- [ 21 ] Sprunger P T , Lægsgaard E , Besenbacher F 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8163
- [ 22 ] York S M , Leible F M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 2763
- [ 23 ] Xiang S , Zhang J , Liu L 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 678 ( in Chinese ) 向 嵩、庄 军、刘 磊 1998 *物理学报* **47** 678 ]
- [ 24 ] Witten T A , Sander L M 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1400
- [ 25 ] Liu B G , Wu J , Wang E G , Zhang Z Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1195
- [ 26 ] Bromann K , Brune H , Röder H , Kern K 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 677
- [ 27 ] Stepanyuk V S , Bazhanov D I , Baranov A N , Hergert W , Katsnelson A A , Dederichs P H , Kirschner J 2001 *Appl. Phys. A* **72** 443
- [ 28 ] Wu H T , Tsong T T 1994 *Surf. Sci.* **318** 358
- [ 29 ] Wang S C , Tsong T T 1982 *Surf. Sci.* **121** 85
- [ 30 ] Tang X , Zhang C , Zhang Q Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5797 ( in Chinese ) 唐 鑫、张 超、张庆瑜 2005 *物理学报* **54** 5797 ]
- [ 31 ] Zhuang J , Liu L 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2418 ( in Chinese ) 庄 军、刘 磊 1997 *物理学报* **46** 2418 ]
- [ 32 ] Li J Y , Li R W , Liu S J 2005 *Journal of Beijing Normal University ( Natural Science )* **41** 2418 ( in Chinese ) 李佳阳、李融武、刘绍军 2005 *北京师范大学学报(自然科学版)* **41** 484 ]
- [ 33 ] Cai J , Ye Y Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8398
- [ 34 ] Bachmann A R , Speller S , Mugarza A , Ortega J E 2003 *Surf. Sci.* **526** L 143

# Computation of the Ehrlich-Schwoebel barrier to adatom diffusion in heteroepitaxial systems \*

Li Jia-Yang Li Rong-Wu Sun Jun-Dong Liu Shao-Jun  
( Department of Physics , Beijing Normal University , Beijing 100875 , China )

( Received 30 April 2006 ; revised manuscript received 14 June 2006 )

## Abstract

The Ehrlich-Schwoebel ( ES ) barriers to the diffusion of adatoms ( Pd , Ag and Cu ) on different bench terraces of fcc Cu are compared by molecular dynamics computation. The computation reveals that : 1 ) For both heteroepitaxial and homoepitaxial systems , the ES barriers increase similarly with the increase of bench terrace height until a certain height is reached. 2 ) The ES barrier of adatom Pd is the biggest , the second one is that of adatom Cu , and the smallest one is that of adatom Ag for the hopping diffusion mechanism , while the ES barrier of adatom Ag is the biggest , the second one is that of adatom Cu , and the smallest one is that of adatom Pd for the exchange diffusion mechanism. 3 ) The ES barrier of exchange is lower than that of hopping mechanism in most cases of bench terraces.

**Keywords** : adatom diffusions on the heteroepitaxial surface , molecular dynamic simulation , Ehrlich-Schwoebel barrier

**PACC** : 6822 , 7115Q

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 60471034 ).