

Ag/Cu(111)与 Au/Cu(111)体系异质外延岛演化过程中的应变释放及其对 Moiré 结构形成的影响^{*}

颜超 张超 唐鑫 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)

(2006 年 11 月 29 日收到, 2007 年 3 月 9 日收到修改稿)

采用嵌入原子方法的原子间相互作用势, 利用分子动力学模拟方法研究了 Au/Cu(111)和 Ag/Cu(111)体系的异质外延结构特征以及外延岛形貌和应变释放的演化过程. 通过对比 Au/Cu(111)和 Ag/Cu(111)体系的异质外延结构及外延岛演化行为, 揭示了导致 Ag/Cu(111)体系中异质外延层形成 Moiré 结构的微观物理机理及其与外延体系的宏观物理特性之间的关系. 研究结果显示, 外延岛原子与基体表面原子之间的界面结合强度是形成 Moiré 结构的重要因素, 异质外延体系的界面结合强度取决于二者的合金熔解热. 当异质外延体系的合金熔解热为正值时, 界面结合强度较弱, 有利于 Moiré 结构的形成. 同时, 外延岛原子之间的相互作用决定着外延岛的面内弛豫行为, 对 Moiré 结构的形成有一定的影响. 外延岛的面内弛豫行为与外延层和基体之间的相对刚度有关, 弹性模量较大的外延层具有较强的延展能力, 对 Moiré 结构的形成有利. 此外, Moiré 结构的形成与外延岛的尺度有关, 主要是外延岛边界原子的钉扎作用对外延岛内原子弛豫行为的约束作用的影响.

关键词: 异质外延, Moiré 结构, 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. 在异质外延生长初期, 表面外延岛的形貌和结构影响着表面原子的扩散行为及外延薄膜的生长模式. Moiré 结构是亚单层异质外延原子形成的一种周期性超结构. 早在 1982 年人们就通过低能电子散射(LEED)在 Ag/Cu(111)体系中发现存在 $(10 \pm 1) \times (10 \pm 1)$ 的 Moiré 结构^[1], 但直到 1996 年才通过扫描隧道显微镜(STM)进行了详细的分析, 观察到 Moiré 结构向三角构型的转变^[2]. 此后, Meunier 等人证实 Moiré 构型是 Ag 在 Cu(111)表面的纯金属层, 而三角构型则属于 Cu-Ag 合金层^[3]. 除了 Ag/Cu(111)体系, 人们还通过 STM 在碳、过渡族金属的二硫化物等分层材料表面及其他金属薄膜外延生长中发现了 Moiré 结构^[4-12].

传统的薄膜生长理论认为, 异质外延结构取决于基体和薄膜之间的晶格失配. 虽然晶格失配对异

质外延结构有一定的影响^[13, 14], 但大量实验结果显示晶格失配理论不能解释异质外延岛的应变弛豫过程和 Moiré 结构的形成. 例如 Au 具有与 Ag 相同的晶格结构和非常接近的点阵常数($a_{\text{Ag}} = 0.409 \text{ nm}$, $a_{\text{Au}} = 0.408 \text{ nm}$), 却没有有关 Au/Cu(111)体系形成 Moiré 结构的报道, 说明晶格失配并不是决定 Moiré 结构形成的唯一因素. 最近, Pivetta 等人利用第一性原理计算发现, NaCl/Ag(100)体系中吸附原子位于基体原子正上方时局域功函数较小, 在基体原子空隙附近的局域功函数较大^[15]. Rasmussen 通过对 Ag/Cu(111)体系的分子动力学(MD)模拟发现, 随着温度的升高, Moiré 结构向基体表面位错环演化时, 位于外延岛原子正下方的基体表面最先形成空位^[16]. Meunier 等人通过 Monte Carlo 模拟发现, 在 225 K 时, Ag/Cu(111)形成 Moiré 结构, 随温度升高逐步转变为 10×10 的三角结构, 当温度到达 420 K 时, 发生三角构型向 9×9 的 Moiré 结构转变^[17]. 这些研究工作对于了解特定体系中 Moiré 结构的物理特性具有重要价值, 但并没有揭示决定 Moiré 结构形成

^{*} 国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院联合基金(批准号:10476003)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qyzhang@dlut.edu.cn

的物理机理.

本文选择具有相近晶格常数和相同晶格特征的 Au 和 Ag 作为研究对象, 利用嵌入原子方法(EAM)的原子间相互作用势, 通过对 Cu(111)基体上 Au 和 Ag 异质外延岛结构随外延岛尺寸演化行为的 MD 模拟, 比较了 Au/Cu(111)和 Ag/Cu(111)体系的外延岛形貌、应变场、微观失配、吸附能和基体形变能等方面的差异, 探讨了异质外延体系中 Moiré 结构形成的物理机理及其与异质外延体系宏观物理特性之间的联系.

2. 物理模型和计算方法

EAM 原子间相互作用势^[18,19]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^[20,21], 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

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

其中, r_{ij} 是 i 和 j 原子间的距离, ϕ_{ij} 是两者间的静电排斥势能, $F_i(\rho_i)$ 是原子 i 的嵌入能, 它是原子 i 所处位置的电子密度 ρ_i 的函数, 而电子密度 ρ_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,

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

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

我们选择的模拟体系与文献 [22] 中的类似, 基体原子分为 15 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 506 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 (111) 方向. 基体温度初始设置为 300 K, 采用淬火 MD 方法来获得体系的最稳定能量构型. 在 MD 弛豫过程中, 基底最下面 4 层原子位置固定, 来近似模拟半无限大的基体, 具体的 MD 模拟方法描述详见文献 [23,24].

3. 模拟结果与讨论

3.1. Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系的外延岛结构

图 1 给出了外延岛尺寸为 22×22 时 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系外延岛原子的高度分布. 从外延岛总体形貌上看, Au/Cu(111)有着与 Ag/Cu(111)类似的外延结构, 但外延岛原子的高度分布存在比较明显的差异. 从图中可以看出, Ag/Cu(111)外延岛原子的高度分布具有比较明显的六次对称性, 这是形成 Moiré 结构的重要特征, 然而, 对于 Au/Cu(111)体系的外延岛, 原子高度分布并不具有明显的旋转对称性, 说明 Au/Cu(111)体系没有形成 Moiré 结构. 我们的 MD 模拟结果与大量的实验事实是一致的. 仔细的观察可以发现, 形成 Moiré 结构的 Ag/Cu(111)外延岛, 原子的面内排列非常规则, xy 平面内的原子间距离几乎完全相同, 并接近 Ag 晶体中 {111} 面的原子间距. 但是, Au/Cu(111)外延岛原子

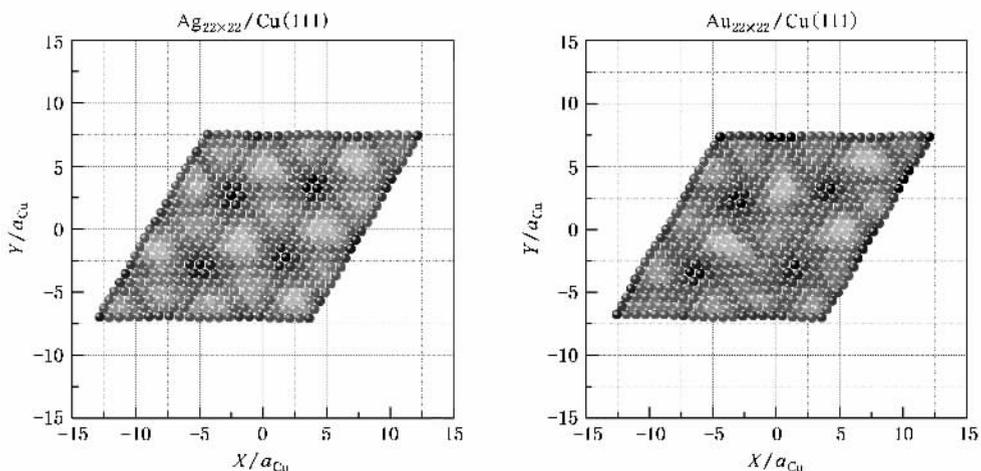


图 1 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系 22×22 外延岛形貌, 颜色从深到浅对应的原子高度分别为 3.12—3.16 nm和 3.11—3.15 nm

的面内排列不是很规则, xy 平面内的原子间距离差高达 0.3 nm, 从而导致外延岛原子排列点阵的扭曲. 由于 Au 和 Ag 的点阵常数差仅为 0.001 nm, 22×22 的异质外延岛之间不足以产生如此大的原子间距差异. 所以, 可以认为 Moiré 结构的形成并不完全由晶格失配所决定.

图 2 是 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 异质外延岛分别相对于 Ag{111} 和 Au{111} 晶面原子排列的应变场分布. 从图中可以看到, 尽管两者在 xy 平面内的原子位置排列存在明显的不同, 但其应变场分布十分相似, 较大的应变变化均集中在与 Moiré 结构

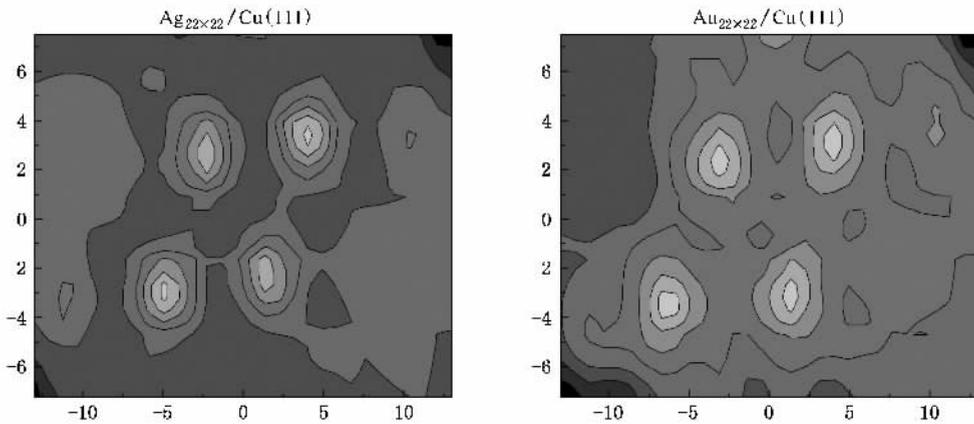


图 2 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 体系 22×22 外延岛的应变场分布, 颜色从深到浅对应的应变分别为 -5.5% — -2.0% 和 -8.5% — 0%

异质外延岛是一个单原子层的二维平面, 其应变场分布并不能描述外延岛原子的应力状态. 原子尺度的应力分布可以通过每个原子的局域压力近似描述. 仿照宏观应力的定义, 单个原子的局域压力定义为^[22, 25—27]

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

其中, 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, 局域压力的正与负分别代表着原子受到的应力是压应力和张应力. 图 3 和图 4 分别给出了 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 体系的外延岛原子和基体表面原子的局域压力分布. 可以看到, 无论是外延岛原子还是基体表面原子的局域压力分布与应变场分布和外延岛表面形貌之间均有着很好的对应关系, 而且 Ag/Cu(111) Moiré 结构的基体表面原子的局域压力呈现出与表面岛原子形貌类似的六次对称性. 但是, 我们注意到, 与表面岛原子的局域压

力与应变场的结果是相反的, 即张应变区域对应的局域压力是压应力, 而压应变区域对应的局域压力为张应力. 这一结果说明, 外延岛原子与基体原子之间的相互作用对局域应变和局域应力的贡献与外延岛内原子之间的相互作用的贡献是相反的, 即外延岛内原子之间距离的增加对应着外延岛原子与基体原子之间距离的减小, 反之亦然. 这一结果反映了外延岛形貌取决于外延岛内原子间相互作用和界面原子相互作用之间的力学平衡, 基体表面原子的局域压力分布正是外延岛原子与基体表面原子之间界面相互作用的反映. 同时, 我们发现, 形成 Moiré 结构的 Ag/Cu(111) 体系中, 外延岛原子对基体表面原子的影响范围相对较小, 这可能与 Moiré 结构具有规则的对称性有关. 而 Au/Cu(111) 体系中, 外延岛原子点阵中所出现的扭曲现象也在一定程度上影响到了基体表面原子的排列, 但不是很明显, 这主要是因为基体表面原子还受到次表层以下的基体原子约束的结果.

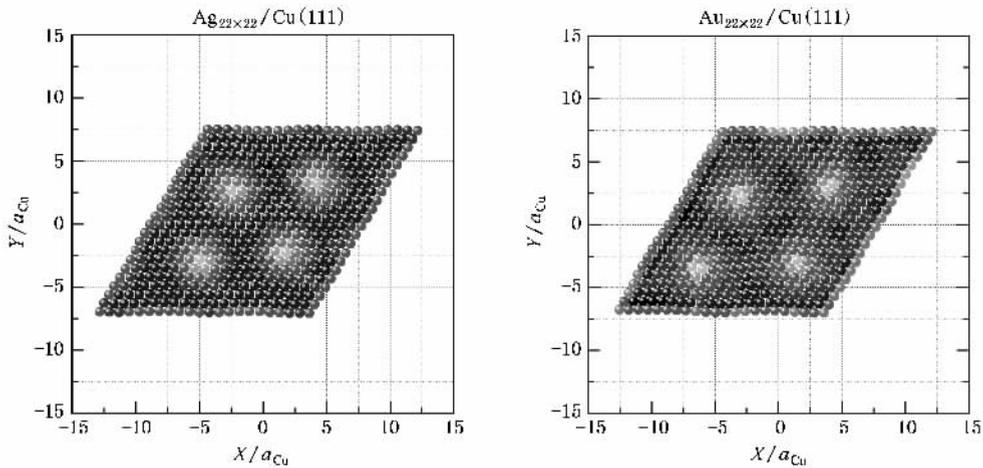


图3 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系 22×22 异质外延岛原子的局域压力分布(颜色从浅到深的变化分别对应于 -1—0.25 eV/原子和 -1.7—-0.3 eV/原子)

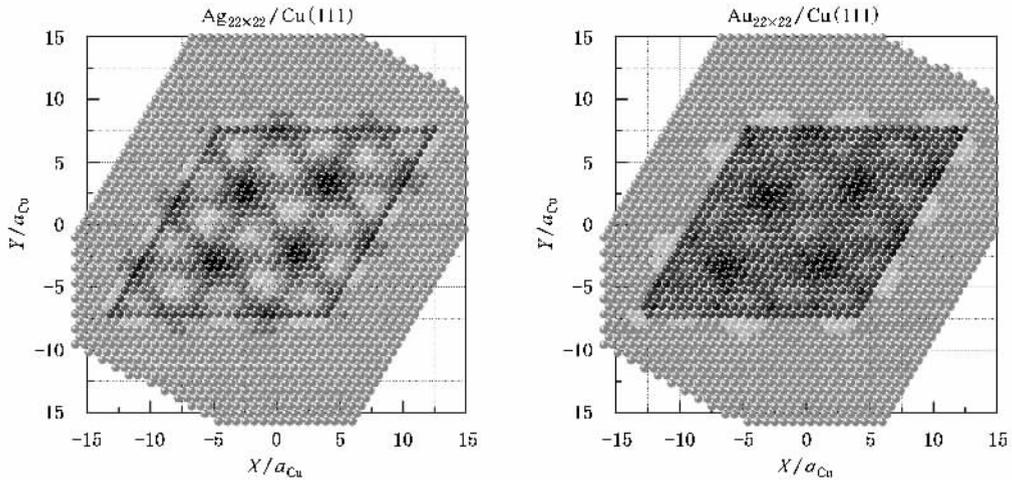


图4 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系 22×22 异质外延岛的 Cu(111)基体表面原子局域压力分布(颜色从浅到深变化分别对应于 -0.7—1.2 eV/原子和 -0.6—1.4 eV/原子)

3.2. Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)体系的外延岛演化

为了揭示 Moiré 结构形成的物理机理,我们研究了 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)异质外延岛的演化行为.图5是给定尺寸的 Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)外延岛的表面形貌.我们发现,当外延岛在 10×10 以下时,Au 和 Ag 的外延岛形貌没有明显的差异.但是,当外延岛增加到 11×11 时,Ag 外延岛突变成 Moiré 结构的基本结构单元,而 Au 外延岛却没有明显的变化.从外延岛原子与基体原子的结合上看,因在 xy 平面内配位原子的缺失将导致外延岛边界原子与基体原子之间结合力的增强,使得外延岛边界附近的原子起着钉扎外延岛的作用.同时,考虑

到 Ag 和 Au 与 Cu 之间的晶格调制比约为 8:9,我们认为,11×11 的 Ag 外延岛发生的形貌突变实际上是外延岛内部原子按满足 Ag 与 Cu 晶格调制比排列的结果.也就是说,排除外延岛原子边界效应的影响,Ag 原子在 Cu(111)表面上应该是按同步网格的方式排布的.但是,由于 Cu(111)表面不可能是理想的原子级平滑的平面,或多或少地存在着表面缺陷、台阶、杂质等,外延岛尺寸也不可能是无限大的,且形状各异,从而导致实验所观察到的 Ag/Cu(111)体系的异质外延结构为(10±1)×(10±1)Moiré 结构,而非 8×8 的同步网格.因此,可以认为,Ag/Cu(111)体系(10±1)×(10±1)Moiré 结构的形成是外延岛边界效应和同步网格排列的共同作用的结果.

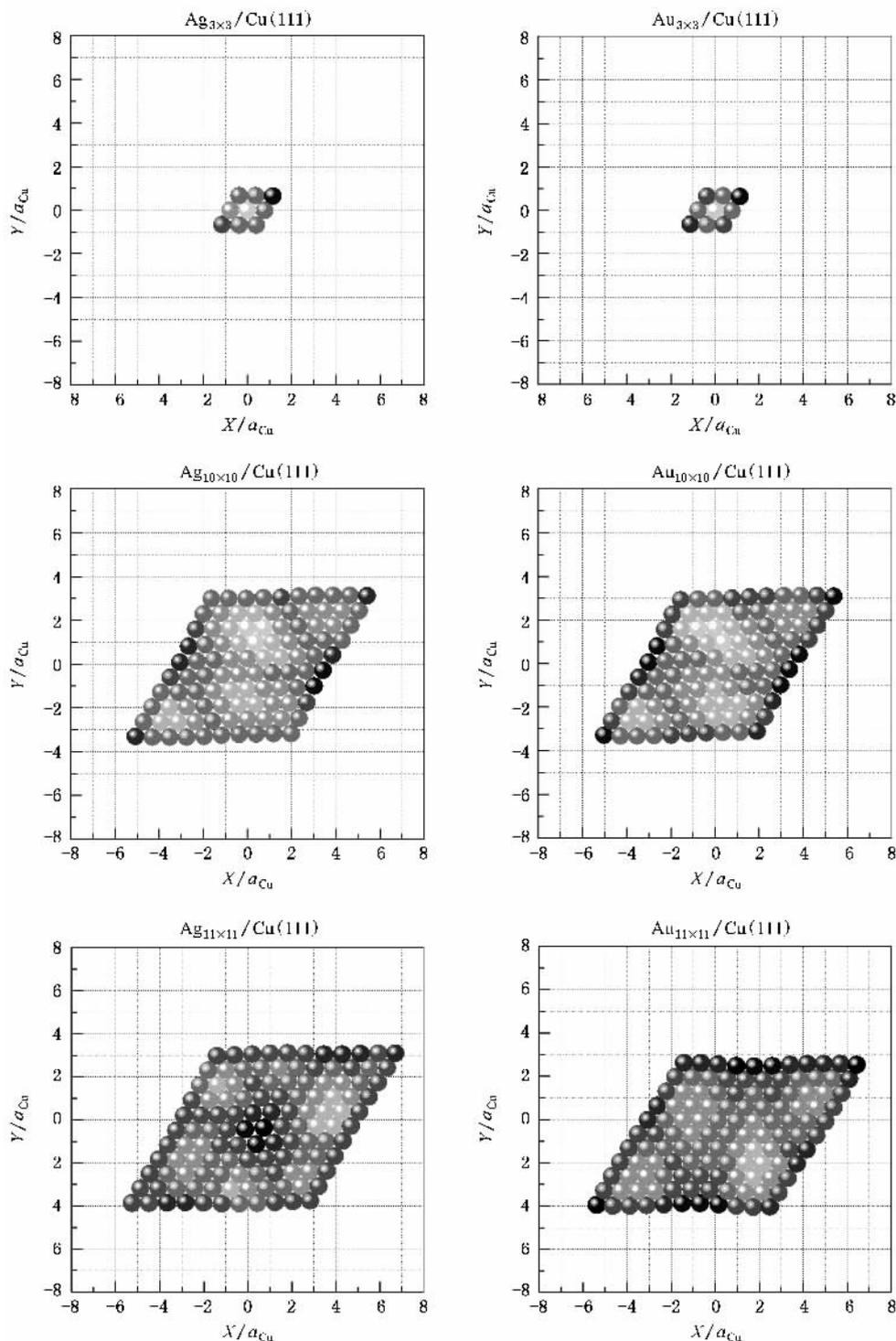


图5 3×3 , 10×10 , 11×11 的 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 外延岛形貌 (颜色从深到浅的变化分别对应于 3.125—3.165 nm 和 3.105—3.155 nm)

由于外延岛边界原子的比例随外延岛尺寸的增加而逐渐较小,可以推测,随着外延岛尺寸的增加,外延岛中 Moiré 结构的周期逐渐减小,并逐步趋近于同步网格结构。

同步网格排列意味着外延岛原子与基体表面原

子之间的相互作用相对较弱,使得外延岛内原子之间可以得以充分弛豫,原子间距离接近体材料的原子间距。图 6 是 Ag 和 Au 外延岛内原子间横向平均距离 \bar{L}_{Ag} 和 \bar{L}_{Au} 随外延岛尺寸的变化。可以看到,外延岛原子间平均距离远大于基体 Cu 原子间距,但

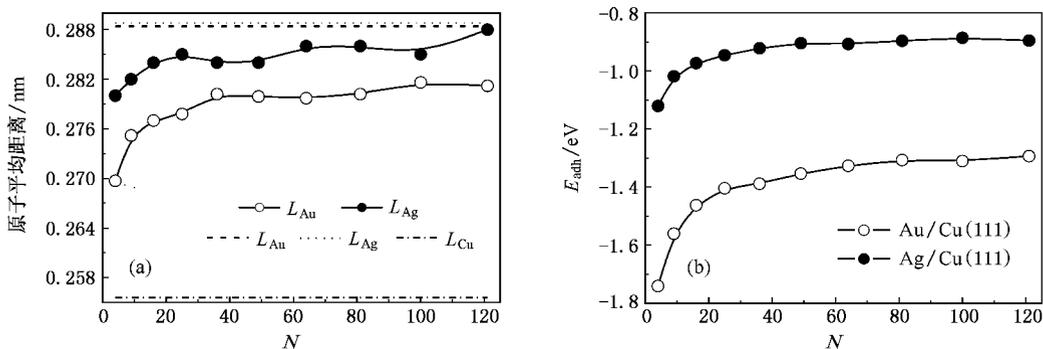


图 6 (a) Au/Cu(111) 和 Ag/Cu(111) 外延岛内原子平均距离随外延岛的变化 ;(b) Au/Cu(111) 和 Ag/Cu(111) 异质外延岛的结合能随外延岛尺寸的变化

均小于 Ag 和 Au 体晶格原子间距,且随着外延岛尺度的增加而逐渐增加的趋势. 10×10 以下时, L_{Ag} 与 L_{Au} 外延岛的变化趋势基本相同,但 $L_{Ag} \gg L_{Au}$;当达到 11×11 时, L_{Ag} 突然增大,已非常接近 L_{Cu} ,与形成 Moiré 结构实验结果是一致的^[11,12]. 这一结果说明,当达到 11×11 时, L_{Ag} 外延岛的应变发生了突然释放,这与我们前面的分析相同. 而 L_{Au} 外延岛大于 6×6 之后, L_{Au} 随外延岛尺寸的变化不大,与体晶格原子间距相差约 2.5%. 由于 Au 与 Ag 有着相近的点阵常数,所以 Au/Cu(111) 不能形成 Moiré 结构可能与外延岛原子和基体原子之间的结合强度有关. 正是较大的界面约束限制了 Au 外延岛内原子的应变释放.

外延岛原子和基体原子之间的结合强度可以通过界面平均结合能定量描述. 对于异质外延体系,外延岛与基体的界面平均结合能定义为^[22]

$$E_{adh} = \frac{E^{total} - E^{isl} - E^{sub}}{N}, \quad (4)$$

其中 E^{total} , E^{isl} 和 E^{sub} 分别为整个系统、外延岛和基体的总能量, N 为外延岛的原子数. 图 6(b) 是 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 体系中异质外延岛与基体之间的结合能随外延岛尺寸的变化. 可以看出,当外延岛尺寸较小时,随着外延岛的增大,两体系中的外延岛与基体间的结合强度均迅速下降;到达 6×6 时,结合强度的下降逐渐趋于平缓. 而且,当外延岛为 11×11 时, L_{Ag} 外延岛与基体的结合能并没有明显的突变,说明外延岛边界原子对岛内原子的约束是制约应变释放的主要原因. 定量的分析表明, Au 与 Cu(111) 的结合能约为 Ag 与 Cu(111) 的结合能的 1.5 倍,说明 Ag 外延岛原子受 Cu(111) 基体的约束较小,则更容易按体晶格的原子间距排布,从而形成

同步网格或 Moiré 结构. 同时,也证明了基体原子对外延岛的相对较大的约束是导致 Au/Cu(111) 体系不能形成 Moiré 结构的重要因素. 此外,我们以前得到的关于 Ag/Cu(001) 体系外延生长的结果也证实了这一点^[22],因为同样是 Ag 在 Cu 表面的异质外延生长,而原子排列不够紧密的(001)表面并没有 Moiré 结构形成,其外延岛与基体原子的结合能也要比 Ag/Cu(111) 体系小. 从更为本质的角度上看, Ag/Cu(111) 与 Au/Cu(111) 异质外延演化的差异起源于 Ag-Cu 和 Au-Cu 体系在形成合金方面的差异. Ag-Cu 体系的合金熔解热为正值,形成合金属于吸热过程,因此 Ag/Cu(111) 外延过程中倾向于外延岛原子以纯金属单层生长; Ag-Cu 体系的合金熔解热为负值,形成合金属于放热过程,因此 Au/Cu(111) 外延过程中倾向于外延岛原子与基体原子形成 Au-Cu 合金化表面. 正是合金熔解热方面的差异导致 Ag/Cu(111) 与 Au/Cu(111) 体系的界面结合强度上的不同.

为了进一步分析比较 Ag/Cu(111) 和 Au/Cu(111) 体系中基体对外延岛原子的影响,我们给出了异质外延岛原子的平均局域压力 P_{local} 和基体形变能随外延岛尺寸的变化,如图 7 所示. 从图中可以看出, Au 外延岛的平均局域压力明显高于 Ag 外延岛,说明基体对 Ag 外延岛的影响较小. 当形成 Moiré 结构时, Ag 外延岛原子的平均局域压力仅为 0.174 eV,远小于 Au 外延岛原子. 这与 Moiré 结构排列时外延岛与基体间仅有很小的压力是一致的^[12].

受外延岛原子的影响,因异质外延岛产生的基体形变能是很难准确计算的. 从电子密度的角度上看,外延岛原子的存在势必改变基体表面原子附近的电子密度,而且,电子密度的改变随外延岛原子的不同而有所不同. 因此,基体形变能的计算必须考

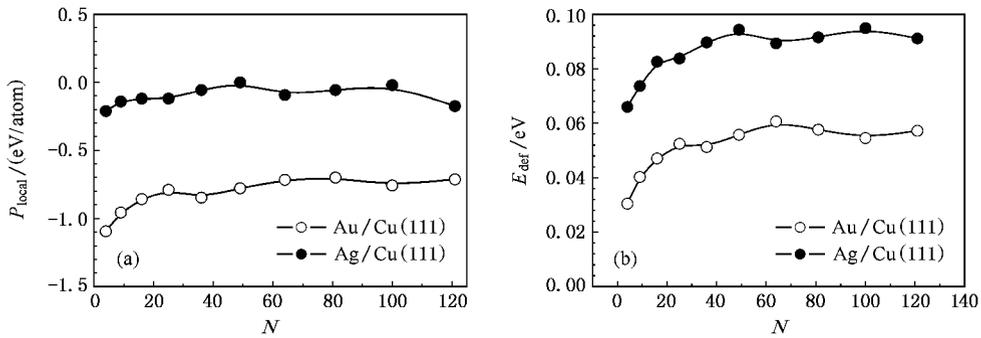


图7 (a) Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)异质外延岛原子平均局域压力随外延岛尺寸的变化 (b) Ag/Cu(111)和 Au/Cu(111)异质外延岛尺寸对基体形变能的影响

考虑电子密度的变化之后才可以进行可靠的比较. 为此, 我们定义每个外延岛原子引起的基体形变能为^[28]

$$E_{\text{def}} = \frac{E_{\text{sub}}^{\text{sub}} - E_0^{\text{sub}}}{N} + \frac{1}{2}(\gamma^{\text{sub}} - \gamma^{\text{isl}}), \quad (5)$$

其中 E_0^{sub} 和 $E_{\text{sub}}^{\text{sub}}$ 分别为形变前后基体的总能量, γ^{sub} 和 γ^{isl} 为基体原子和外延岛原子的表面能. $\gamma^{\text{Cu}} = 0.522 \text{ eV}$, $\gamma^{\text{Ag}} = 0.367 \text{ eV}$, $\gamma^{\text{Au}} = 0.476 \text{ eV}$ ^[29]. 从图中可以看到, 随着外延岛尺寸的增加, 两者的基体形变能均呈类似的增加趋势, 但 Ag 外延岛原子对基体形变能的影响明显大于 Au 外延岛原子. 从弹性力学的角度上看, 基体形变能的大小与外延岛和基体之间的相对刚度有关. 因此, 基体形变能越大说明外延岛的相对刚度较大, 这与 Ag 的弹性模量大于 Au 的事实是一致的. 因此, 从外延岛原子的物质特性上, 外延岛材料和基体材料之间的相对刚度是决定 Moiré 结构形成的另一个重要因素.

4. 结 论

1. 外延岛原子与基体表面原子之间的界面结

合强度是形成 Moiré 结构的重要因素, 异质外延体系的界面结合强度取决于二者的合金熔解热. 由于 Ag-Cu 具有正的合金熔解热, 使得 Ag/Cu(111) 异质外延体系界面结合强度较弱, 有利于 Moiré 结构的形成. 而 Au-Cu 具有负的合金熔解热, 使得 Au/Cu(111) 异质外延体系具有较大的界面结合强度, Cu(111) 晶格对外延层的约束较强, 不利于形成 Moiré 结构.

2. 外延岛原子之间的相互作用决定着外延岛的面内弛豫行为, 对 Moiré 结构的形成有一定的影响. 外延岛的面内弛豫行为与外延层和基体之间的相对刚度有关, 弹性模量较大的外延层具有较强的延展能力, 对 Moiré 结构的形成有利.

3. Moiré 结构的形成与外延岛的尺度有关, 外延岛边界原子的定扎作用对外延岛内原子弛豫行为有一定的约束作用, 进而限制了较小尺寸外延岛内 Moiré 结构的形成.

- [1] Bauer E 1982 *Appl. Surf. Sci.* **11-12** 479
- [2] Besenbacher F, Nielsen L P, Sprunger P T 1997 *The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis* (Elsevier, Amsterdam, edited by King D A and Woodruff D P) Vol. 8, Chap. 10
- [3] Meunier I, Tréglia G, Legrand B et al 2000 *Appl. Surf. Sci.* **162-163** 219
- [4] Rong Z Y, Kuiper P 1993 *Phys. Rev. B* **48** 17427
- [5] Parkinson B A, Ohuchi F S, Ueno K, Koma A 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 472
- [6] Kobayashi K 1996 *J. Vac. Sci. Technol. B* **14** 1075
- [6] Kobayashi K 1996 *Phys. Rev. B* **53** 11091
- [7] Jian W B, Su W B, Chang C S, Tsong T T 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 196603
- [8] Bendounan A, Cercellier H, Fagot-Revurat Y et al 2003 *Phys. Rev. B* **67** 165412
- [9] Repp J, Meyer G, Rieder K H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 36803
- [10] Sasaki M, Yamada Y, Ogiwara Y, Yagyū S, Yamamoto S 2000 *Phys. Rev. B* **61** 15653

- [11] Giinther C , Vrijmoeth J , Hwaag R Q , Behm R J 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 754
- [12] Jacobsen J , Nielsen L P , Besenbacher F *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 489
- [13] Zhou N G , Zhou L , Du M X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 372 (in Chinese) [周耐根、周浪、牡丹旭 2006 物理学报 **55** 372]
- [14] Zhou N G , Zhou L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3278 (in Chinese) [周耐根、周浪 2005 物理学报 **54** 3278]
- [15] Pivetta M , Patthey F , Stengel M *et al* 2005 *Phys. Rev. B* **72** 115404
- [16] Rasmussen T 2000 *Phys. Rev. B* **62** 12664
- [17] Meunier I , Tréglia G , Teétot R *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **66** 125409
- [18] Daw M S , Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [19] Daw M S , Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [20] Folies S M 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7685
- [21] Folies S M , Daw M S , Baskes M I 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983
- [22] Meng Y , Zhang Q Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5812 (in Chinese) [孟 、张庆瑜 2005 物理学报 **54** 5812]
- [23] Yan C , Lu H F , Zhang C , Zhang Q Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1352 (in Chinese) [颜超、吕海峰、张超、张庆瑜 2006 物理学报 **55** 1352]
- [24] Zhang Q Y , Pan Z Y , Tang J Y 1999 *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* **8** 296
- [25] Meunier I , Tréglia G , Legrand B *et al* 2000 *Applied Surface Science* **162-163** 219
- [26] Vervisch W , Mottet C , Goniakowski J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245411
- [27] Mottet C , Tréglia G , Legrand B 1993 *Surf. Sci.* **287-288** 476
- [28] Zhang C , Meng Y , Yan C , Zhang Q Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 452 (in Chinese) [张超、孟 、颜超、张庆瑜 2007 物理学报 **56** 452]
- [29] Skriver H L , Rosengaard N M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 7157

Strain relaxation in heteroepitaxial islands of Au/Cu(111) and Ag/Cu(111) systems and its effects on the formation of Moiré structure^{*}

Yan Chao Zhang Chao Tang Xin Meng Yang Zhang Qing-Yu[†]

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

(Received 29 November 2006 ; revised manuscript received 9 March 2007)

Abstract

Molecular dynamics simulation was used to study the strain relaxation and evolution of Ag/Cu(111) and Au/Cu(111) heteroepitaxial systems with embedded atom method. By comparing the evolution behaviors of the two systems, the atomistic mechanism leading to the formation of Moiré structure in Ag/Cu(111) epitaxial layer is studied and is related to the physical properties of the components in the heteroepitaxial system. It is found that the adhesion between epilayer and substrate is one of the important factors that affect the formation of Moiré structure. Positive solution heat of the alloy enables the adhesion of heteroepitaxial system to be weak and is helpful for the formation of Moiré structure. The relaxing ability of atoms in epilayer is also important in the formation of Moiré structure, which can be related to the bulk modulus of epilayer. The larger the bulk modulus of epilayer, the easier the formation of Moiré structure. On the other hand, the formation of Moiré structure is related to the island size, which is caused by the boundary atoms confining the relaxation of interior atoms in the island.

Keywords : heteroepitaxy , Moiré structure , molecular dynamics simulation

PACC : 6855

^{*} Project supported by NSFC-NSAF (Grant No. 10476003).

[†] Corresponding author : qy Zhang @ dlut . edu . cn