

非均一相互作用能对超薄膜生长影响的 Monte Carlo 模拟研究*

刘祖黎¹⁾ 苑新喜^{1)2)†} 魏合林¹⁾ 姚凯伦¹⁾

1)(华中科技大学物理学院, 武汉 430074)

2)(中国地质大学数学与物理学院, 武汉 430074)

(2009 年 8 月 20 日收到;2009 年 12 月 24 日收到修改稿)

利用 Monte Carlo (MC) 模拟技术研究了非均一的吸附原子与基底相互作用能在一定的生长条件下对超薄膜生长过程的影响. 非均一相互作用能是由基底表面原子在垂直和水平方向上实际位置与理想晶格原子位置的偏差所造成. 本文用高斯分布来表示这种非均一相互作用能. 模拟结果表明: 非均一相互作用能对超薄膜的形貌有显著的影响. 这种影响同时受到生长条件的限制, 在中等温度时相互作用能的非均一性对岛的个数、平均大小的影响最显著; 温度的增加在一定程度上可抵御相互作用能的非均一性对薄膜生长的影响.

关键词: 薄膜生长, Monte Carlo 模拟, 相互作用能

PACC: 6855, 6870

1. 引言

就一般情况而言, 在现代微电子及光电子工业中满足特殊需求的材料与器件都是通过薄膜生长而获得的^[1]. 长期的实验和理论研究^[1-7]表明, 薄膜生长过程的许多实验条件, 如基底温度、基底微结构、沉积速率、覆盖度、表面缺陷、沉积原子的剩余能量等, 对薄膜生长都有着不同形式和不同程度的影响. 从中可以看出, 薄膜生长是一个复杂的非平衡态过程. 在薄膜生长过程中, 其初期阶段的结构直接影响着整个薄膜的形貌和质量. 目前人们出于从理论研究或是实验应用的需要已对薄膜生长的初期阶段进行了许多方面的研究. 尽管如此, 薄膜生长的初期阶段仍有许多机理与细节尚不清楚, 有待进一步探求.

Monte Carlo (MC) 模拟不仅是原子表面扩散 (surface diffusion) 理论研究的主要方法之一^[8], 也是薄膜生长 (film growth) 理论研究的重要方法之一^[1]. 出于简化模型或优化计算等方面的考虑, 许多作者在运用 MC 模拟方法研究薄膜生长时, 基底

常常简单地被表示成一个理想的二维晶格表面^[2,9-13], 即吸附原子与基底的相互作用能是均一的, 不随吸附位置的改变而变化. 事实上, 真实的基底表面往往不完全是理想的二维晶格表面, 这直接导致了吸附原子与基底的相互作用能是不均一的, 即其随吸附位置的改变而有所变化. 因此一些作者进一步考虑到非均匀基底表面的情形. 如刘祖黎等^[3]的 MC 模拟中考虑了孤立的点缺陷; Wei 等^[4]简单讨论了基底表面的粗糙性; 特别值得一提的是, Nazzarro 等^[5]和陆杭军等^[6]的 MC 模拟中应用了类似棋盘状的非均匀基底; 同样, 高国良等^[14]提出了一个两相周期性分布的非均匀基底模型研究表面团簇生长; Elsholz 等^[15]利用 MC 模拟研究了基底表面粗糙引起沉积原子与基底结合能的随机性波动对生成膜粗糙度的影响. 和上述这些模型不同的是, 本文考虑到基底表面原子的位置高低不等和位置无序等现象的存在及其分布的随机性, 将吸附原子与基底的相互作用能拟合为一定的高斯分布, 利用 MC 模拟研究了这类非均一相互作用能对超薄膜生长的影响.

* 国家自然科学基金 (批准号: 10574047 和 20490210) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xyuan@cug.edu.cn

2. MC 模拟模型和方法

从原子尺度上看,在薄膜外延生长的初始阶段,生长材料的气态原子是直接沉积到基底表面,成为表面吸附原子.在我们的 MC 模拟中,将最上层的基底原子(即基底表面原子)设计为二维晶格排列,则吸附原子在基底表面上的稳定位置(即吸附位置)相应地构成二维晶格排列.作为示例,三角格子基底表面及其对应的吸附位置如图 1 所示.图中黑点表示基底表面原子的位置, A 与 B 表示吸附位置.吸附位置 A 与 B 是等同的,每个 A (或 B)位置都有三个最近邻的基底表面原子,都有三个次近邻的基底表面原子,都有三个最近邻的 A 和 B 位置等;它们的区别只在于在三角格子基底表面上进行立方密排或六角密排时,同一层的原子只占据 A 类位置或只占据 B 类位置,不能交叉混合占据 A , B 位置^[16].

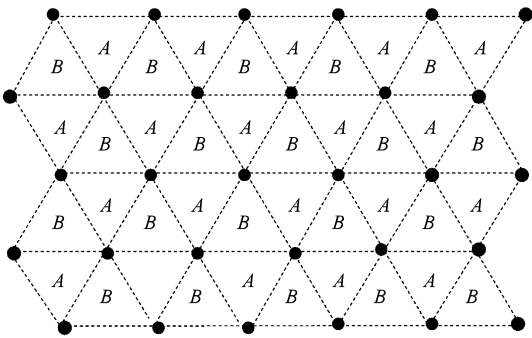


图 1 三角格子基底表面及其对应的吸附位置示意图

吸附原子与基底的相互作用能记为 E_s . 如果基底表面被设计成是理想的二维晶格表面,那么在各个吸附位置上,吸附原子所处的基底环境都是等同的,吸附原子与基底的相互作用能 E_s 都是相等的,不随吸附位置变化,即 E_s 是均一的.然而,对于实际的基底表面,由于表面上位错、空穴、杂质原子和台阶等晶格结构性缺陷使得吸附原子在不同吸附位置上所处的基底环境都不是等同的, E_s 随吸附位置不同而改变,不再是均一的.除此之外,我们还特别注意到其他两种表面现象也会在一定程度上导致 E_s 是不均一的:一是基底表面原子高低位置不等;二是基底表面原子的位置无序^[17]. 为了清楚地说明这两种现象,我们特用图 2 示意.图 2(a)为基底表面原子高低位置不等(即不在同一平面上)的示

意图,图中处于下方的实线圆表示基底表面原子,上方的虚线圆表示吸附原子;图 2(b)为基底表面一块 7×8 的二维四方格点位置无序(即在表面内原子互不等距)的示意图,图中黑点表示基底原子的位置.上述两种现象都表明基底表面原子的排布偏离了理想的规则整齐的排布,导致基底表面原子在垂直和水平方向上实际位置与理想晶格原子位置的偏差.为表述方便,本文在后面合称这两种现象为基底表面的不规整.

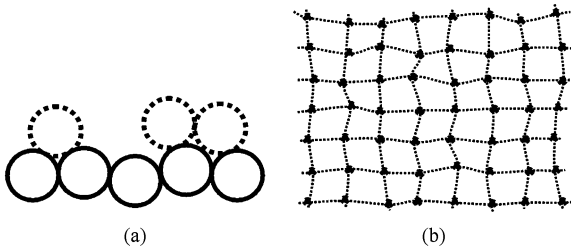


图 2 基底表面原子位置高低不等和位置无序示意图 (a) 位置高低不等示意图; (b) 位置无序示意图

要进一步深入了解和认识薄膜生长初期阶段的机理与细节,就不可避免地要探讨位错、空穴、杂质原子和台阶等这些晶格结构性缺陷和基底表面的不规整对超薄膜生长的影响.要在一个生长模型中把位错、空穴、杂质原子和台阶等这些晶格结构性缺陷和基底表面的不规整对 E_s 的影响都很好地体现出来,在目前看来,这是一个极具挑战性的工作.本文的目的仅仅限于探讨由基底表面的不规整所导致的 E_s 不均一性对超薄膜生长的影响.

我们认为基底表面的不规整是不可避免的,不可能完全根除,而且要精确计算基底表面的不规整对每一个吸附位置的 E_s 的影响是不现实的.这并不意味着对之完全无从认知.从整体上看,基底表面的不规整分布具有随机性,它对 E_s 不均一影响既不同于孤立的如空位或杂质原子之类的点缺陷,也不同于具有一定的相互关联的(一维或二维结构性的)位错或台阶之类的缺陷.若单纯考虑基底表面不规整的影响, E_s 应随吸附位置的改变而随机变化.因此,从整体上看, E_s 值的分布大致上可以拟合为高斯分布^[18]. 在有些情况下,如在三角格子表面上进行进行立方密排生长或六角密排生长时,同一层的吸附原子要么只占据 A 位置,要么只占据 B 位置,这时如果仅仅考虑基底表面的不规整,各个吸附位置上 E_s 的关联性不大.

基于以上认识,我们改变了在一般的 MC 模拟中将吸附原子与基底的相互作用能设为定值的做法. 在我们 MC 模拟中,先将吸附原子与理想的二维基底表面的相互作用能设为一定值 E_s , 然后在不同的吸附位置 (i, j) 上对 E_s 加一个修正值 ΔE_{ij} . ΔE_{ij} 的计算如下: $\Delta E_{ij} = E_s \cdot \alpha_{ij} \cdot q$. 其中, α_{ij} 与 q 是在 MC 模拟中引入的两类无量纲可调参数,下面就它们的取值和含义分别予以说明.

α_{ij} 是用来决定 ΔE_{ij} 的高斯正态分布特性的. 在我们的 MC 模拟中 α_{ij} 生成方式具体操作如下: 一组满足高斯正态分布的实数由计算程序自动生成,对于基底表面上每一个吸附位置 (i, j) , 由程序自动生成一个随机实数,与该位置唯一地对应,这个随机数记为 α_{ij} ; 如果有 $N \times N = N^2$ 个吸附位置,则最终生成 N^2 个随机实数 α_{ij} . 这 N^2 个随机实数 α_{ij} 可看成一个数集 $\{\alpha_{ij}\}$. 在不限制取值范围时, $\{\alpha_{ij}\}$ 的分布曲线如图 3, 纵坐标为分布个数. 由图 3 可知,如不限制 $\{\alpha_{ij}\}$ 取值范围,就会导致一些 ΔE_{ij} 的取值太大或太小,这是不适宜的. 为此,对 α_{ij} 取值范围有所限制,比如说,令 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$ 或 $-3.0 < \alpha_{ij} < 3.0$. 如果限制 $\{\alpha_{ij}\}$ 取值范围, $\{\alpha_{ij}\}$ 的分布曲线是高斯正态分布曲线的一部分; 比如,当 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$ 时, $\{\alpha_{ij}\}$ 的分布曲线如图 4. 总之,不同的位置 (i, j) , 相应的 α_{ij} 是不同的,以此体现同一表面上不同吸附位置之间的差别. 值得注意的是,由于基底近邻原子之间的关联性,显然位于相邻吸附位置上的能量偏差 ΔE_{ij} 或者 α_{ij} 是相互关联的,这种关联性会影响 ΔE_{ij} 的大小,但如图 1 所示,吸附原子在两个相邻吸附位置 (A-A 或 B-B) 之间移动时,只有一个基底原子是共用的,所以我们认为这种关联性不大,为了简化模型,本文并没有考虑这种关联性.

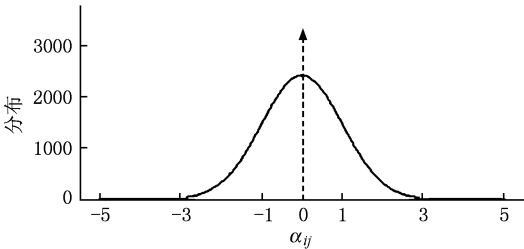


图 3 不限制取值范围时, $\{\alpha_{ij}\}$ 分布曲线图

同一基底表面上所有吸附位置 (i, j) 对应的 ΔE_{ij} 可看成一个数集 $\{\Delta E_{ij}\}$. q 是一个大于或等于

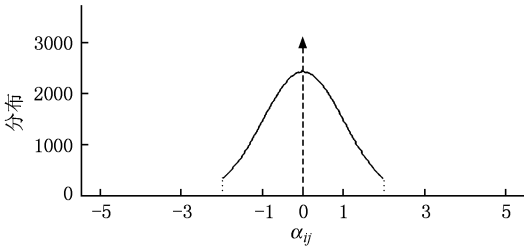


图 4 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$ 时, $\{\alpha_{ij}\}$ 的分布曲线图

零的无量纲小数,不随位置 (i, j) 变化,即对于同一个 $\{\Delta E_{ij}\}$, q 的取值都相同. 当 $q = 0$ 时, $\Delta E_{ij} \equiv 0$, 表示此时基底表面为一个理想的二维晶格表面. 给定一个 $\{\alpha_{ij}\}$ 分布后,若 q 取值小,则对应的 $\{\Delta E_{ij}\}$ 分布的离散度趋小,表明吸附原子与基底的相互作用能不均一程度相对小,基底表面在整体上不规整的程度小;反之, q 取值大, $\{\Delta E_{ij}\}$ 分布的离散度趋大,表明吸附原子与基底的相互作用能是不均一程度相对大,基底表面在整体上不规整的程度大. 因此相对于 $\{\alpha_{ij}\}$ 决定 $\{\Delta E_{ij}\}$ 的高斯正态分布特性的, q 决定 $\{\Delta E_{ij}\}$ 分布的离散度,它代表着吸附原子与基底的相互作用能的不均一程度, (在后文我们称之为相互作用能的不均一度),体现着不同的基底表面在整体上不规整 (即整体上偏离理想晶格表面) 的程度. 还要说明的是, q 取值的上限与 α_{ij} 的取值范围相关. 比如,当限定 $\{\alpha_{ij}\}$ 处于 -2.0 与 $+2.0$ 之间时,一方面考虑到使研究结果涵盖的范围适当广泛一些,另一方面考虑到 $\{\Delta E_{ij}\}$ 的取值范围又不能过大,为此在我们的 MC 模拟中,当 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$ 时,将 q 最大值设定为 0.19. 综上所述,在我们的 MC 模拟中,吸附原子与基底原子的相互作用能非均一性的两个方面都得以体现. 一方面,该相互作用能的非均一性在同一表面上不同位置之间的差别由 $\{\alpha_{ij}\}$ 体现;另一方面,非均一性在不同基底表面之间的差别由 q 的不同取值体现. 因此,同应用均一相互作用能的模型相比,它表示一个相对更加真实的基底表面形态.

在我们的 MC 模拟中,就单个沉积原子而言,考虑进行以下三个行为: 1) 沉积原子的吸附,即沉积原子到达基底表面,被表面吸附变为吸附原子; 2) 吸附原子在基底表面上的迁移扩散; 3) 吸附原子的脱附,即沉积原子从基底表面蒸发、脱离.

在上述三种行为中,吸附原子在基底表面上的迁移扩散是最重要的,但同时又极为复杂,且有很

多未解之谜^[8]. 在薄膜生长的 MC 模拟中, 吸附原子从一已占据位置 (i, j) 向附近一空位置迁移的速率 v 满足 Arrhenius 方程: $v = v_0 \exp(-E/k_B T)$, 其中 v_0 为基底原子的振动频率, 也称为尝试频率, T 为(基底)生长温度, k_B 为玻耳兹曼常数, E 为吸附原子该次迁移扩散所需克服的势垒.

对于三角格子表面, 如图 5 所示, 当图 5(a) 中吸附原子(图中用黑圆表示, 下同)跃迁到箭头所指的近邻空位置时, 该吸附原子所需克服的势垒 E 的计算考虑如下几项能量: 1) 该吸附原子与基底的相互作用能 $E_s + \Delta E_{ij}$; 2) 该吸附原子与占据它的近邻位置 2, 3, 4 上的近邻吸附原子的相互作用能 E_b , 因为吸附原子跃迁到新位置后, 与这些近邻吸附原子不再近邻, 吸附原子跃迁时要克服与这些近邻吸附原子的相互吸引; 3) 鞍点能 E_L , 吸附原子跃迁到新位置后与占据它的近邻位置 1, 5 近邻吸附原子虽然仍是近邻, 吸附原子跃迁时仍需要克服一定的能量, 这一能量称为鞍点能. 这几项能量的高低基本上就决定了吸附原子在基底表面上的迁移扩散速率的大小. 对于三角格子表面, E 的具体计算公式如下: $E = E_s + \Delta E_{ij} + (x - y)E_b + yE_L$, 其中 x 为吸附原子周围(近邻)位置上已占据的原子数, y 为位置 1 和 5 上已占据的原子数, 如图 5(b) 图所示情况时, $x = 3, y = 1$. 应该说 E_b, E_L 与 α_{ij} 和 q 值之间也存在一定的关联性, 但考虑到一般情况下 E_s 比 E_b 和 E_L 大很多, 吸附原子的迁移扩散速率主要由 E_s 决定. 经过仔细分析我们发现 E_b, E_L 与 α_{ij} 和 q 值之间的关联对模拟影响很小, 以致于可忽略不计. 因此为简化模型, 我们在本文中没有考虑 E_b, E_L 与 α_{ij} 和 q 值之间的关联.

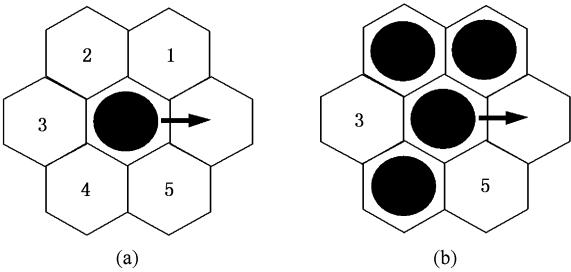


图 5 三角格子表面吸附原子跃迁示意图 (a) 跃迁吸附原子的近邻吸附位置编号示意图; (b) 吸附原子的近邻吸附位置被占据示例图

应用以上方法就可计算出基底表面上已有全部吸附原子的所有方向的迁移速率. 跃迁原子及其

跃迁方向的选择方法为: 首先将基底表面上所有吸附原子的所有方向的迁移速率 v 求累加和 $V = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^m v_{kl}$, 其 k 表示吸附原子的编号, 表示 l 吸附原子的迁移方向编号, n 为已吸附到基底表面上的原子总数, m 为单个吸附原子的迁移方向总数; 然后随机数发生器产生 $(0, 1)$ 间的一个随机数 ρ_1 , 找到满足 $\sum_{k=1}^s \sum_{l=1}^{r-1} v_{kl} \leq \rho_1 V < \sum_{k=1}^s \sum_{l=1}^r v_{kl}$ 的一组整数 (s, r) , 这意味着第 s 个吸附原子的第 r 个迁移方向被选中并实施迁移. 随后另外一个随机数发生器产生 $(0, 1)$ 间的一个随机数 ρ_2 , 计算 $\Delta t = 1/(\rho_2 V)$, 即设定第 s 个吸附原子的第 r 个方向跃迁发生在这个 Δt 内, 更新模拟时间 $t = t + \Delta t$. 只要模拟时间累计增加 ΔT , 就有一个沉积原子随机被吸附到基底表面上一空位置, ΔT 由沉积速率决定.

3. 结果与讨论

我们的模拟研究在三角格子基底上进行, 表面吸附位置格点为 200×200 , 模拟中应用了周期性边界条件. 沉积的总原子数 6000, 由此得覆盖度 $\theta = \text{沉积原子总数} / \text{格点总数} = 6000/40000 = 0.15$ ML(monolayer), 沉积速率为 1.75×10^{-5} ML/s, 比文献[19]报道的实验用的沉积速率 1.70×10^{-5} ML/s 略大. 模拟中尝试频率 $v_0 = 2 \times 10^{13}$ /s, 温度 $T = 150\text{--}600$ K, 势垒 E_s, E_b, E_L 等参量取自文献[3]中的 Rh 的参数, 即 E_s 为 0.75 eV, E_b 为 0.375 eV, E_L 为 0.15 eV. 考虑到吸附原子从清洁基底表面蒸发所需可服的势垒一般相对较大, 吸附原子的脱附概率很小, 因而在我们的模拟中不考虑吸附原子的脱附过程. 在模拟开始时没有设置任何生长点.

我们首先对 $q = 0$ 时, 即基底表面为完全理想的二维晶格排列时的情形进行了模拟, 结果表明: 岛的形貌与基底温度有密切关系, 如图 6 所示; 随着温度升高, 薄膜生长经历从分散生长(图 6(a)), 到分形生长(图 6(b)), 再到凝聚生长(图 6(c))的变化过程, 并且凝聚生长时初始阶段岛的形状与基底形貌有关(图 6(d)). 这基本上与实验观察^[19-21]的结果相符合, 说明我们的模型与基本参数设置合理. 在此基础上模拟研究了吸附粒子与基底的相互作用能的不均一性在不同温度时对薄膜生长岛的影响, 图 7 显示了模拟的结果, 模拟时取 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$.

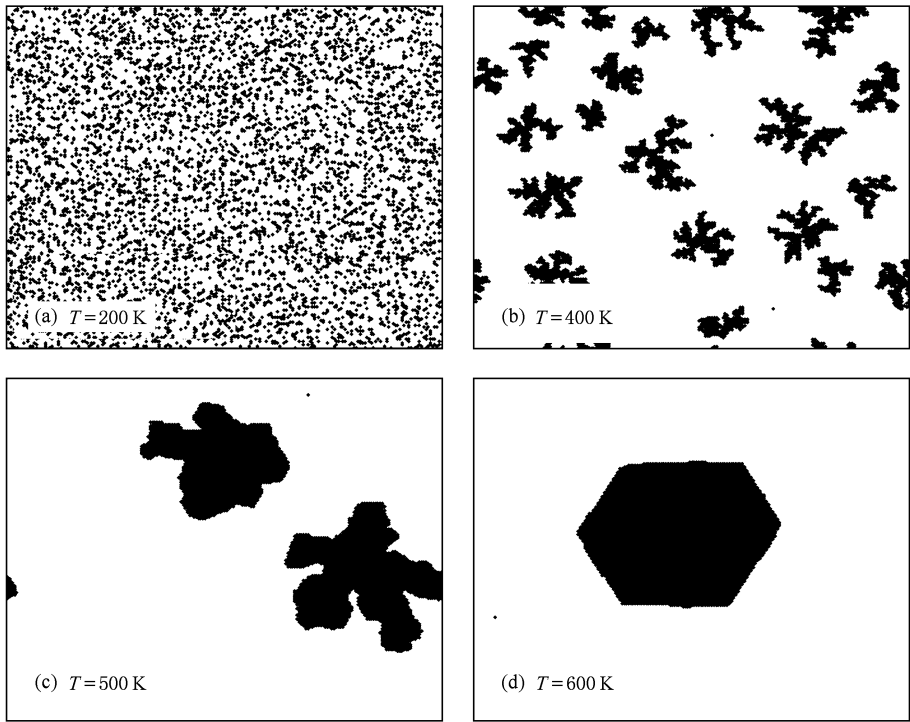


图6 基底表面为完全理想的二维晶格排列时薄膜生长形貌图 (a)一(d)的生长温度分别为 200 K,400 K,500 K,600 K

图 7(a)一(d) 显示了不同温度下薄膜生长岛的个数随相互作用能的不均一程度变化的情况. 图 7 中横坐标表示不均一度 q , 纵坐标代表比值 N/N_0 , 其中 N_0 为相互作用能完全均一时 (即 $q = 0.00$) 岛的个数 (其中 $T = 200\text{ K}$ 时, $N_0 = 2804$; $T = 350\text{ K}$ 时, $N_0 = 59$; $T = 450\text{ K}$ 时, $N_0 = 5$; $T = 600\text{ K}$ 时, $N_0 = 1$). N 为相互作用能具有一定的不均一程度 (即 $q > 0.00$) 时岛的个数. 模拟结果表明: 不同的生长温度下, 该相互作用能的非均一性对岛的数量和岛的平均大小的影响有着明显不同. 1) 在生长温度为低温 (如 $T = 200\text{ K}$) 时, 对岛的个数 N 、岛的平均大小 d ($=$ 沉积原子总数/生长岛总数, 由于本文中沉积总原子数为一定值, 故岛的平均大小 d 与岛的个数 N 是反比关系, 下同) 影响较小; 2) 在生长温度为中低温 (如 $T = 350\text{ K}$) 时, 随着温度的升高, 相互作用能的不均一性对岛的个数 N 影响趋于明显, N 基本上是随着 q 的增大而增大, 相应岛的平均大小 d 随之减小; 3) 在生长温度为中高温 (如 $T = 450\text{ K}$) 时, 相互作用能的不均一性对岛个数 N 、岛平均大小 d 的影响和 q 相关, 当 q 小时, 对岛的个数 N 影响不很明显, 当 q 较大时对岛的个数 N 、平均大

小 d 的影响变得很明显; 4) 在生长温度为高温 (如 $T = 600\text{ K}$) 时, 在 q 取值相当大的范围内, 看不到相互作用能的不均一性对岛的个数 N 的影响.

从以上的模拟结果看出, 在中间温区 (从如 350 K 和 450 K) 相互作用能的不均一性对岛个数 N 、岛平均大小 d 的影响最为显著. 我们认为, 这一现象是由于吸附原子与基底的相互作用能的不均一性导致吸附原子的平均迁移速率的降低而引起的. 吸附原子的平均迁移速率低, 吸附原子的平均迁移范围就小, 导致吸附原子黏结到附近原子岛的机会减少, 从而阻碍单个岛的生长, 使岛的个数增加; 反之亦然. 经过分析, 我们认为, 相互作用能的不均一性导致吸附原子的平均迁移速率降低的机理如下: 当 $a_{ij} > 0$ 时, $\Delta E_{ij} > 0$, 处于该位置的吸附原子与基底的相互作用能变大, 占据该点的吸附原子在迁移时要克服的势垒增大, 驻留该点的时间增加, 该吸附原子的迁移速率相应变小; 反之, 当 $a_{ij} < 0$ 时, $\Delta E_{ij} < 0$, 该位置的吸附原子与基底的相互作用能变小, 占据该点的吸附原子在迁移时要克服的势垒减小, 该吸附原子驻留该点的时间减少, 吸附原子的迁移速率相应增加; 二者竞争的结果是相对较多的吸附

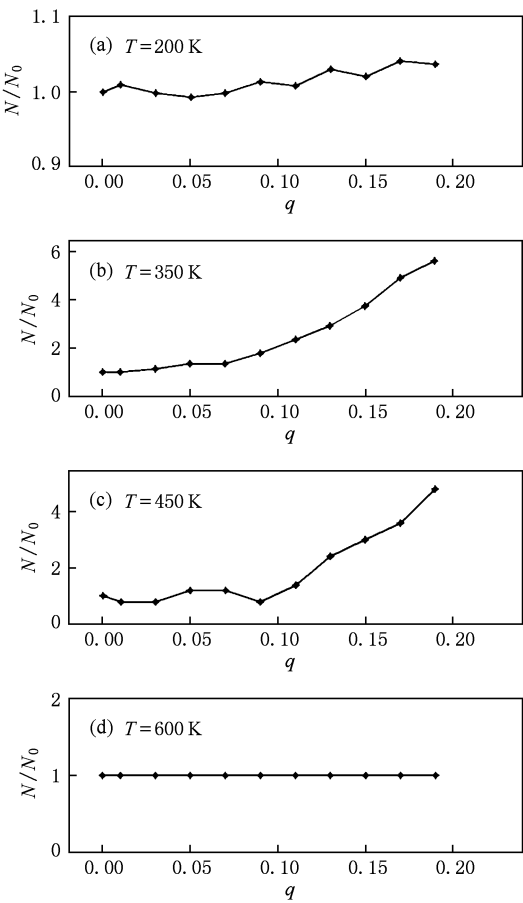


图 7 不同温度下薄膜生长岛的个数随 q 变化图 (a)–(d) 的生长温度分别为 200 K, 350 K, 450 K, 600 K

原子驻留在 $a_{ij} > 0$ 的地方,这样就导致吸附原子的平均迁移速率降低. 为了验证上述推断,我们统计了 $T = 350$ K 时 q 分别为 0.05 和 0.15 时吸附原子占据在 $a_{ij} > 0$ 位置的情况. 统计结果表明: $q = 0.05$ 时,处于 $a_{ij} > 0$ 位置的吸附原子占吸附原子总数的百分比为 50.7%; $q = 0.15$ 时,该百分比升至 54.2%.

从图 7 还看出,在低温区 and 高温区情况与中间温区有很大不同. 在低温 (如 $T = 200$ K) 时,吸附原子的迁移活动并不活跃,吸附原子迁移范围小,在一个个相互“割据”的小范围内吸附原子聚集成为小岛,生长形貌呈现如图 6(a) 所示的散沙状分散生长. 正是这种分散生长的模式,导致基底表面的不规整性对岛的生长数量、大小影响不大. 在高温区 (如 $T = 600$ K),岛的个数不随 q 变化. 这一现象可以这么解释:高温时,吸附原子的迁移活动很活跃,迁移能力强,从而对吸附粒子与基底的相互作用能

的不均一性有一定的抵抗作用,即吸附粒子热运动可以掩盖非均一性的影响. 我们进一步认为,在生长温度为中高温 (如 $T = 450$ K) 时,当 q 小时,对岛的个数 N 、平均大小 d 的影响不很明显,也是由吸附原子的迁移能力对相互作用能的不均一的抵抗所致.

在以上模拟中,我们限定 α_{ij} 处于 -2.0 与 $+2.0$ 之间. 改变 α_{ij} 的取值区间,相互作用能的不均一分布形态也会有相应的变化. 为此我们又模拟研究了 α_{ij} 处于高斯标准正态分布 -0.5 与 $+0.5$ 之间和 α_{ij} 处于高斯标准正态分布 -1.0 与 $+1.0$ 之间的情形. 模拟结果显示:在这两种情况下,岛的个数 N 、平均大小 d 随 q 变化而变化的趋势与 α_{ij} 处于 -2.0 与 $+2.0$ 之间的情形基本相似. 在图 8 中显示了 $T = 350$ K 时以上三种情形的模拟结果. 考虑到 ΔE_{ij} 的取值范围,在不同的情形下, q 的取值范围作了相应调整. 实际上,对模拟结果起决定性作用的是 ΔE_{ij} 的取值范围;当 ΔE_{ij} 的取值范围一定,不同 α_{ij} 的取值范围对结果有一定的影响. 比如 ΔE_{ij} 的取值范围为 $-0.3E_s$ 与 $+0.3E_s$ 之间时,三种情形对应的 q 最大值分别为 0.6, 0.3 和 0.15, 在 $T = 350$ K 时相应得到 N/N_0 分别为 4.83, 4.39 和 3.73.

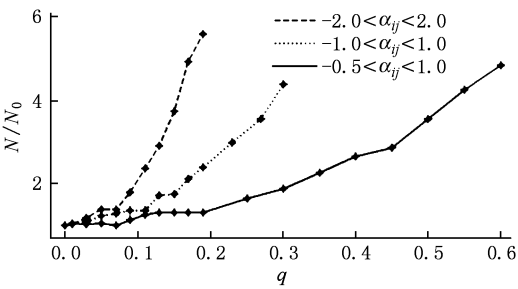


图 8 当 $T = 350$ K, α_{ij} 分别为 $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$, $-1.0 < \alpha_{ij} < 1.0$, $-0.5 < \alpha_{ij} < 0.5$ 时,岛的个数与 q 关系图

此外我们还注意到吸附原子与基底的相互作用能的不均一性对生长岛的形貌也有相当大的影响. 图 9 显示了在 $T = 400$ K, $q = 0.15$ 时的两个薄膜生长形貌图. 可以看出,与该温度下理想基底上的图 6(b) 相比,薄膜形貌已有相当大的变化,即在岛的平均尺寸变小的同时,存在着由分形生长向分散生长的退化趋势. 我们分析认为,这一现象也是由于吸附原子与基底的相互作用能的不均一性导致吸附原子的平均迁移速率的降低而引起的.

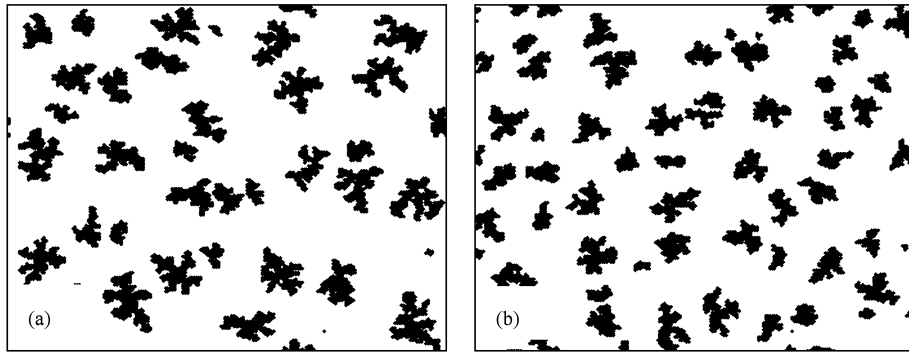


图9 $T=400\text{ K}$, $q=0.15$ 时薄膜生长形貌图 (a) $-1.0 < \alpha_{ij} < 1.0$; (b) $-2.0 < \alpha_{ij} < 2.0$

4. 结 论

考虑到基底表面原子的位置高低不等和位置无序等现象的存在及其分布的随机性,在本文中吸附原子与基底的相互作用能随吸附位置的改变而随机变化,并将之拟合为一定的高斯分布,建立了一个吸附原子与基底的相互作用能的非均匀性模型,在此基础上利用 MC 模拟研究了这类非均匀相

互作用能在一定的生长条件下对超薄膜生长的影响.模拟结果表明:相互作用能的非均匀性导致吸附原子的平均迁移速率降低,对超薄膜的生长过程及薄膜的形貌有显著的影响.这种影响同时受到生长条件的限制,在中等温度时相互作用能的非均匀性对岛的个数、平均大小的影响最显著;温度的增加在一定程度上可抵御相互作用能的非均匀性对薄膜生长的影响.

[1] Wang E G 2003 <i>Prog. Phys.</i> 23 1 (in Chinese) [王恩哥 2003 物理学进展 23 1] [2] Bruschi P, Cagroni P, Nannini A 1997 <i>Phys. Rev B</i> 55 7955 [3] Liu Z L, Wei H L, Wang H W, Wang J Z 1999 <i>Acta Phys. Sin.</i> 48 1302 (in Chinese) [刘祖黎、魏合林、王汉文、王均震 1999 物理学报 48 1302] [4] Wei H L, Liu Z L, Yao K L 2000 <i>Vacuum</i> 56 185 [5] Nazzarro M, Nieto F, Ramirez-Pastor A J 2002 <i>Surface Science</i> 497 275 [6] Lu H J, Wu F M 2006 <i>Acta Phys. Sin.</i> 55 424 (in Chinese) [陆行军、吴锋民 2006 物理学报 55 424] [7] Qian C J, Li H, Zhong R, Luo M B, Ye G X 2009 <i>Chin. Phys. B</i> 18 1947 [8] Ala-Nissila T, Ferrando R, Ying S C. 2002 <i>Advances in Physics</i> 51 949 [9] Wang X P, Zhao T X, Wu F M, Lin G, Wu Z Q 1999 <i>Acta Phys. Sin.</i> 48 1412 (in Chinese) [王晓平、赵特秀、吴锋民、林罡、吴自勤 1999 物理学报 48 1412] [10] Zhang Q Y, Ma T C, Pan Z Y, Tang J Y 2000 <i>Acta Phys. Sin.</i> 49 297 (in Chinese) [张庆瑜、马腾才、潘正瑛、汤家镛 2000 物理学报 49 297]	[11] Wu F M, Shi J Q, Wu Z Q 2001 <i>Acta Phys. Sin.</i> 50 1555 (in Chinese) [吴锋民、施建青、吴自勤 2001 物理学报 50 1555] [12] Ye J S, Hu X J 2002 <i>Acta Phys. Sin.</i> 51 1108 (in Chinese) [叶建松、胡晓君 2002 物理学报 51 1108] [13] Zheng X P, Zhang P F, Liu J, He D Y, Ma J T 2004 <i>Acta Phys. Sin.</i> 53 2687 (in Chinese) [郑小平、张佩峰、刘军、贺德衍、马健泰 2004 物理学报 53 2687] [14] Gao G L, Qian C J, Zhong R, Luo M B, Ye G X 2006 <i>Acta Phys. Sin.</i> 55 4460 (in Chinese) [高国良、钱昌吉、钟瑞、罗孟波、叶高翔 2006 物理学报 55 4460] [15] Elsholz F, Scholl E 2004 <i>App. Phys. Lett.</i> 84 4167 [16] Huang K, Han R Q 1988 <i>Solid Physics</i> (Beijing: Higher Education Press) p3 (in Chinese) [黄昆、韩汝琦 1988 固体物理学(北京:高等教育出版社)第3页] [17] Madelung O 2003 <i>Introduction to Solid-State theory</i> (Beijing: Beijing World Publishing Corporation) p436 [18] Cascarini de Torre L E, Bottani E J 1996 <i>Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects</i> 116 285 [19] Röder H, Hahn E, Brune H 1993 <i>Nature</i> 366 141 [20] Michely T, Hohage M, Bott M 1993 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 70 3943 [21] Brune H, Roder H, Boragno C 1994 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 73 1955
---	--

Monte Carlo simulation of influence of inhomogeneous interaction energy on thin film growth^{*}

Liu Zu-Li¹⁾ Yuan Xin-Xi¹⁾²⁾† Wei He-Lin¹⁾ Yao Kai-Lun¹⁾

1) (School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

2) (School of Maths and Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China)

(Received 20 August 2009; revised manuscript received 24 December 2009)

Abstract

The influence of inhomogeneous interaction energy between deposited atoms and substrate atoms on island film growth is investigated by Monte Carlo simulation on a triangular lattice substrate. The Gaussian distribution is employed to describe the inhomogeneity of interaction energy. The results illustrate that the influence of inhomogeneous interaction energy on the growth of thin film is related to the degree of the inhomogeneity and the experimental conditions (such as substrate temperature). At medium temperature the inhomogeneity of interaction energy has notable influence on the island number and the island size. Increasing in temperature could counteract the influence of the inhomogeneity of interaction energy.

Keywords: thin film growth, Monte Carlo simulation, interaction energy

PACC: 6855, 6870

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574047 and 20490210).

† Corresponding author. E-mail: xxyuan@cug.edu.cn