

动力学研究 $\text{AlN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 薄膜生长 初期的吸附与扩散*

杨 春^{1)†} 冯玉芳¹⁾ 余 毅³⁾

1) (可视化计算与虚拟实现四川省重点实验室, 四川师范大学, 成都 610068)

2) (电子薄膜与集成器件国家重点实验室, 电子科技大学, 成都 610054)

3) (四川师范大学学报编辑部自然科学版, 成都 610068)

(2008 年 7 月 6 日收到, 2008 年 9 月 7 日收到修改稿)

采用基于第一性原理的从头计算分子动力学方法, 计算了 300—800°C 下 AlN 吸附过程与系统能量、动力学轨迹以及扩散系数. 研究表明, 吸附过程由物理吸附、化学吸附和表面稳定态三个阶段组成, 在吸附成键过程中, 温度越高, 粒子平均表面扩散能力增强. N 原子的扩散系数大于 Al 原子的扩散系数, 尤其是在物理吸附阶段. 在较高温度条件下 (大于 700°C), N 的解吸附作用明显增强, 不利于 AlN 的稳定吸附生长, 500—700°C 之间的温度有利于 AlN 在 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面的稳定吸附生长.

关键词: $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面, 扩散, 吸附生长, 从头计算分子动力学

PACC: 7850, 6170, 6770

1. 引 言

蓝宝石上生长 AlN 薄膜材料具有宽禁带 (6.2 eV), 高热导率 ($2 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), 高硬度, 优良的热稳定性和化学稳定性等特点, 在紫外探测器、紫外发光二极管、紫外激光器和高频大功率高电子迁移率器件等光电器件中有重要的应用^[1,2]. 当前制备 AlN 薄膜的物理方法主要有分子束外延 (MBE)、激光分子束外延 (LMBE)、激光脉冲沉积 (PLD)、溅射沉积 (MRS) 等^[3-5]. 沉积粒子最初在表面的吸附与扩散决定了薄膜最初的生长点, 对薄膜生长模式、生长方向、薄膜织构等具有至关重要的影响. 因此运用上述物理方法制备 AlN 薄膜时, 生长初期的 AlN 粒子吸附与扩散过程将直接影响薄膜微观结构及薄膜的形成, 从而决定了 AlN 薄膜的物理性能. 然而, 实验上无法从原子尺度上获得粒子吸附生长过程的微观动态信息, 因此, 当前对 AlN 薄膜沉积生长过程的初期机理一直缺乏深入的理论研究. 随着计算机技术的发展, 采用基于第一性原理的动力学计算已成为研究薄膜生长机理的一种重要的手段和途径^[6-8].

有相当多的文献报导了 AlN/ $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 薄膜沉积的实验研究. 例如, 1999 年, Fan 等人^[9] 已经利用单能活化氮束在高架衬底温度 (900—1300°C) 下, 通过等离子体增强分子束外延的方法在 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面制得了 AlN 薄膜. 2003 年, 秦福文等人^[10] 采用 ECR-PEMOCVD 方法制备了具有 GaN 缓冲层的 AlN 单晶薄膜, 研究发现 700°C 的低温下生长出 c 轴取向的 AlN 单晶薄膜具有六方相晶体结构, 并且由 RHEED 图像观测到 AlN 表面的原子排列点阵又绕 GaN 缓冲层的 c 轴旋转了 30°, 从而获得了与 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 衬底一样的六方相 AlN 薄膜. 采用同样的 MOCVD 方法在直径为 50 mm 的 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面上直接生长 AlN 薄膜, 结果得到岛状生长较好的 AlN 薄膜^[11]. Huttel^[12], Guo 等人^[13] 在氩气和氮气环境下, 通过射频 (RF) 磁控溅射法, 采用纯铝为对象, 在蓝宝石衬底上生长氮化铝薄膜. 结果表明, 温度不高于 700°C 能够生长出具有纤锌矿结构的 AlN, 其最佳温度在 500°C 左右有利与氮化铝薄膜 c 轴择优生长. 另外, 2007 年吕磊等人^[14] 在室温下采用脉冲激光沉积法制得了高取向的 AlN 薄膜. 到

* 国家国防 973 基金 (批准号 81363) 四川省青年科技基金 (批准号 07ZQ026-021) 资助的课题.

† E-mail: chunyang_2000@263.net

目前为止,通过各种薄膜制备方法均在蓝宝石表面生长出较好质量的 AlN 薄膜,但是从实验上研究微观结构及其生长机理却是十分有限的.由于实验无法从原子尺度上获得基底表面物理、化学吸附生长的过程,以及粒子最初在表面的吸附位置以及运动轨迹,因此本文通过动力学理论计算直观地显示了 AlN 在理想蓝宝石表面吸附与扩散过程及其能量变化情况,这对探索 AlN 薄膜生长微观机理,进一步指导实验控制薄膜生长具有十分重要的意义.

2. 物理模型与计算方法

基片采用文献 [6] 报导已优化的超晶胞 6 个原子层的 slab 表面 (2×1) 模型,表面终止原子为单层 Al 的表面结构. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (0001) 基片表面原子结构为氧 6 重对称结构,为了考察 AlN 薄膜的表面生长吸附位置,模型中设定了 8 个不同的主要吸附位置^[15],这些位置实际上可以看作是 AlN 薄膜的最初生长点,见图 1(b). 在 (2×1) 的吸附模型图 1 中,为了观察 AlN 分子中的 Al 和 N 同基片表面的 Al, O 结合先后过程,我们将优化得到的气态 AlN 分子(键距 0.185 nm),水平置入基片上空,距离基片表面 0.3 nm,真空层设置为 2.0 nm,如图 1(a). 考虑两种典型情况:一是模型 A:Al, N 分别位于吸附位 S7 和 S6 上空,如图 1(c) 所示,AlN 分子中的 Al 与表面两个 Al 距离相等,而 N 距离表面 Al2 较近. 另一种情况相反,如图 1(d) 模型 B 所示, N 与表面两个 Al 距离相等,而 AlN 分子中 Al 距离表面 Al2 较近. 吸附模型 A

与模型 B 采用了相同的基片结构和计算条件,用于观察 AlN 分子初始不同位置对吸附结果的影响. 为了表述方便, AlN 分子中的 N 同表面的 Al 结合表示为 (Al)N—Al, 其 Al 同基片表面的 O 结合表示为 Al—O(基片).

图 1 中灰色小球代表基片 O 原子,黑色小球代表基片 Al 原子,白色小球代表 N 原子,深灰色小球代表 AlN 中的 Al 原子;大球为表面原子,小球为底层原子.

本文采用了基于密度泛函理论(density functional theory, DFT) 总能量赝势法,由 CASTEP (cambridge serial total energy package) 软件包^[16, 17] 实现计算. 运用 Vanderbilt 提出的超软赝势(ultrasoft pseudopotentials, USP)^[18] 来描述离子实与价电子之间的相互作用($\text{O } 2s^2 2p^4$, $\text{Al } 3s^2 3p^1$, $\text{N } 2s^2 2p^5$). 对电子交换相关项的计算选择了 Perdew 等人^[19, 20] 提出的广义梯度近似(general gradient approximation, GGA) 修正方法(PW91) 形式. 为了适当减小动力学的运算量,在采用超软赝势计算时,可以适当减小截断能 E_{cut} 的取值,设定为 340 eV. 对 2×1 表面 AlN 的吸附动力学模型,布里渊区 k -point 取的是 $5 \times 2 \times 1$, 即 10 个 k -point. 在每一步动力学 KS 方程求解中,电子能量自洽最小化运用了基于共扼梯度技术的全带方法(all bands scheme)^[16],其精度达到了 1.0×10^{-5} eV/atom. 粒子运动轨迹坐标积分计算采用了 Verlet 算法,积分时间步长设为 1.0 fs,模拟总时间为 1.5 ps. 体系温度分别恒定为 300°C, 400°C, 500°C, 600°C, 700°C, 800°C.

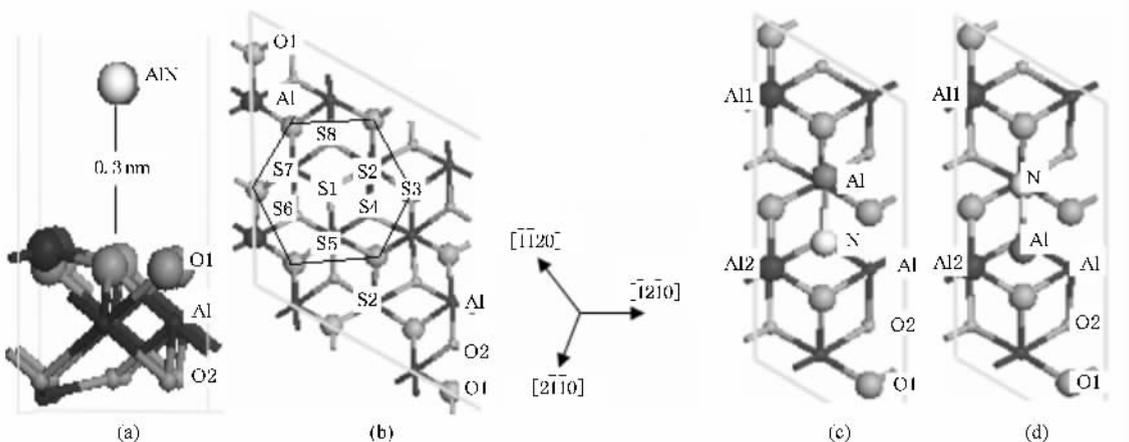


图 1 AlN/a- Al_2O_3 (0001) 表面吸附位置与 AlN 吸附模型 (a) 薄片吸附模型;(b) 顶层不同吸附位置;(c) 吸附模型 A;(d) 吸附模型 B

3. 吸附过程与能量

图 2 显示了不同温度下,模型 A, B 中 AlN 吸附过程系统能量变化. 模型 A 中 300°C , 400°C , 500°C , 600°C , 700°C , 800°C 的体系能量变化的平均振幅 E_{as} 分别为 0.358 eV , 0.491 eV , 0.610 eV , 0.698 eV , 0.831 eV , 0.901 eV , 而模型 B 中相对应的温度 ($300\text{—}800^\circ\text{C}$) 的体系能量变化的平均振幅 E_{as} 分别为 0.334 eV , 0.458 eV , 0.585 eV , 0.621 eV , 0.679 eV ,

0.848 eV . 温度越高,粒子的平均能量越大,表明粒子平均扩散能力增大. 在相同温度下,模型 A 的平均振幅比模型 B 的大,这与 AlN 吸附前初始方位有关,由于该模型 AlN 的 N 距离基片最外层 Al 较模型 B 的近,表层 Al 与 N 吸附作用强,使得 AlN 分子扩散能力增大. 两种吸附模型能量变化趋势相同,吸附与反应扩散过程相似,最终表面吸附构型如图 3,其中 A-①, A-②分别为模型 A 的稳定吸附态侧面图和俯视图, B-①, B-②分别为模型 B 的稳定吸附态侧面图和俯视图.

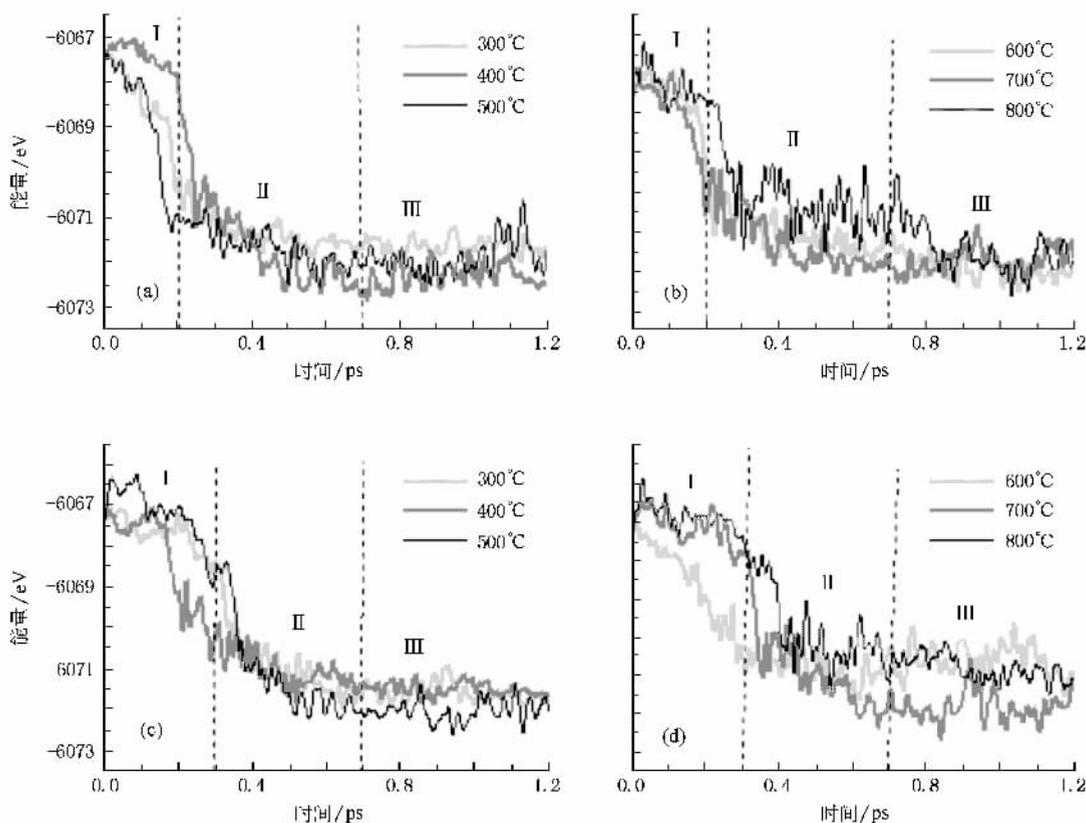


图 2 不同温度时体系能量变化图(a)(b)为模型 A 的能量变化图(c)(d)为模型 B 的能量变化图)

观察不同温度下体系能量变化图(图 2(a), (b))模型 A 中 AlN 分子的表面吸附可大分为 3 个阶段(I \times $0.0\text{ ps—}0.2\text{ ps}$)物理吸附过程. 由于暴露在基片最外表面 O 的电负性大,其中 Al 朝下被吸,使得 AlN 分子的键长变大,AlN 分子的键减弱.(II \times $0.2\text{ ps—}0.7\text{ ps}$)化学吸附过程,N,Al 先后分别与表面临近的 Al, O 成键,见图 3A-①,图 3B-①.(III \times 0.7 ps—)表面稳定吸附态形成. 在稳定的吸附位置处(Al)N—Al 键长为 $0.172 \pm 0.01\text{ nm}$,吸附后 AlN 的键长为 $0.189 \pm 0.010\text{ nm}$,表面吸附成键能

为 $4.844\text{ eV—}5.132\text{ eV}$,表明 AlN 在 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面发生了较强的化学吸附. 不同的是,模型 A 中 Al 的吸附位置趋近于 S7,而模型 B 中的 Al 稳定吸附位置在 S5,两者均偏离表面 O 六角对称约 30° . 见图 3A-②,图 3B-②.

4. 温度对扩散的影响

由于 AlN 沉积粒子在 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ 表面有强烈的化学吸附,因此有较长的驻留时间,并伴随着不

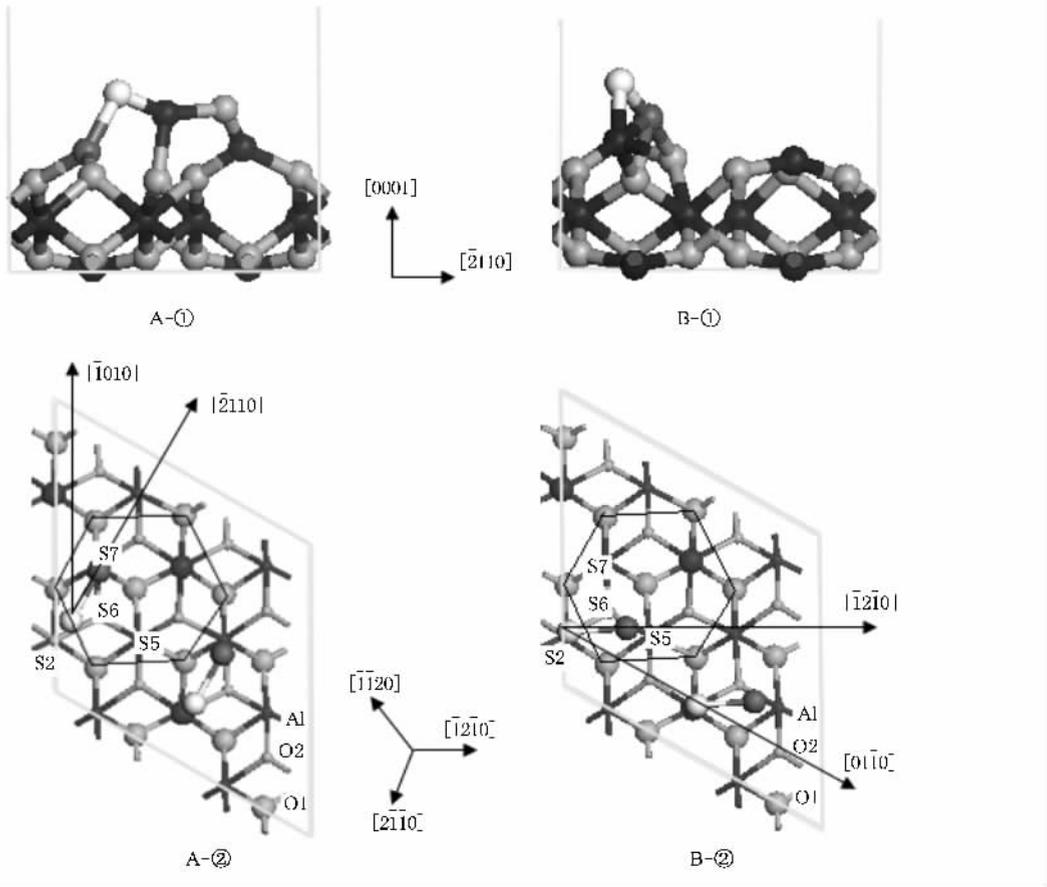


图 3 AlN/ α -Al₂O₃(0001)表面吸附的终态图(①稳定吸附侧面图;②稳定吸附俯视图,图中灰色小球代表基片 O 原子,黑色小球代表基片 Al 原子,白色小球代表 N 原子,深灰色小球代表 AlN 中的 Al 原子,大球为表面原子,小球为底层原子;A. 代表模型 A,B. 代表模型 B)

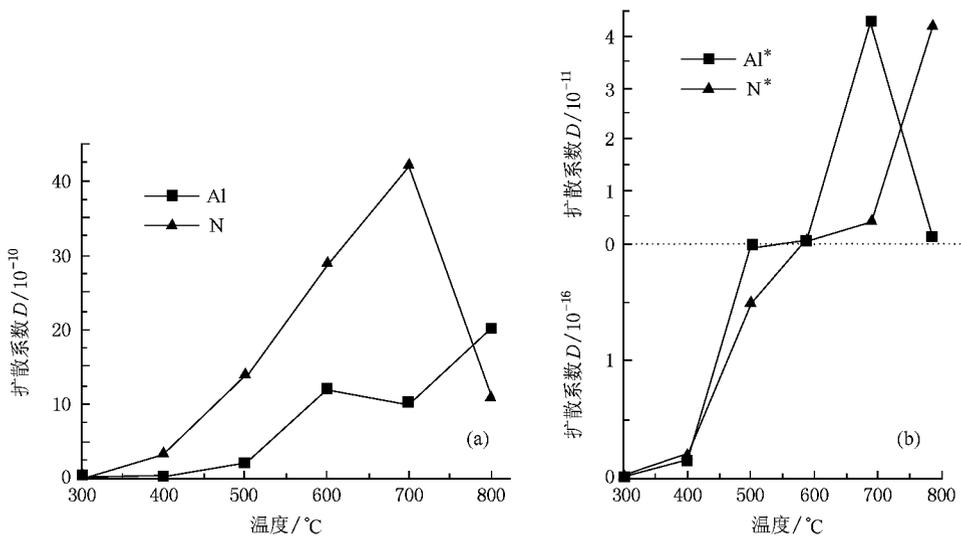


图 4 AlN 分子中 Al,N 原子在物理吸附和化学吸附阶段的扩散系数 (a)AlN 分子中 Al,N 原子在物理吸附阶段的扩散系数 (b)AlN 分子中 Al,N 原子在化学吸附阶段的扩散系数(标记为 Al* 和 N*)

断地扩散运动. 固体中的扩散是一个热激活过程, 扩散系数反映了原子扩散能力. 我们模拟了不同温度下 AlN/ α -Al₂O₃(0001) 表面原子的运动轨迹, 可以准确得到不同温度下 AlN 分子中 Al, N 原子在物理吸附和化学吸附阶段的移动距离和扩散系数(详细数据参见附录). 参照文献计算方法^[21], 由公式 $D = D_0 \exp(-\Delta E/k_B T)$, 其中 $D_0 = a^2 k_B T/h$, D_0 为扩散因子, a 为原子移动距离, ΔE 为平均扩散激活能, k_B 为波尔兹曼常数, T 为温度, h 为普朗克常数, 由此可计算出相应的扩散系数. 由于模型 A 与模型 B 吸附过程与扩散过程相似, 以扩散能力较大的模型 A 为例, 图 4 描述了 AlN 分子中 Al, N 原子在物理吸附和化学吸附阶段的扩散系数.

首先观察 AlN 分子在物理吸附阶段的扩散, 如图 4(a), 在整个 AlN 的物理吸附过程中, AlN 分子中 N 原子的扩散系数大于 Al 原子的扩散系数, N 的扩散系数为 $2.9 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, 明显大于 Al 的扩散系数 ($1.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), 由此导致了 AlN 分子中的 N 原子发生了 30° 的偏转. 在化学吸附阶段, 如图 4(b) 中非常明显的是, 在低温阶段(300—500°C) 时 AlN 分子中 Al^{*}, N^{*} 的扩散系数都很小 (10^{-19} — $10^{-16} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), 而随着温度的升高(500—700°C) 扩散系数在不断的增大 (10^{-15} — $10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), 这说明温度对扩散的影响作用非常明显.

对比图 4(a) 和 (b), 在整个扩散过程中, 物理吸附阶段的扩散系数 (10^{-11} — $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) 明显大于化学吸附阶段的扩散系数 (10^{-19} — $10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), 这说明在整个扩散过程中, 是经过物理扩散再到化学扩散, 进而形成稳定的吸附态, 扩散系数在逐渐减小的过程中, 稳定吸附态在逐渐的形成. 700—800°C 时, 在物理吸附阶段 N 的扩散系数降低, 同时 Al 的扩散系数升高, 而在化学吸附阶段 N 的扩散系数升高, Al^{*} 的扩散系数降低. 通过观察吸附动力学轨迹, 在物理吸附阶段 N 原子通过 30° 的旋转, 因而发生稳定的化学吸附; Al 原子与基片的吸附作用缓慢, 因而 N 的扩散系数降低显著. 而在化学吸附阶段 800°C 下 N 原子的解吸附作用增强, 相对 700°C 下 N 的扩散系数增加明显, 由此不利于 AlN 薄膜的

吸附生长. 但温度升高不会增加 Al 与基底 O 的解吸附作用. 无论是采用磁控溅射还是 MOCVD 方法制备 AlN 薄膜^[10—14], 均发现温度高于 700°C 时不利于 AlN 薄膜生长, 实验温度在 500°C—700°C 之间, 能够获得 AlN 良好的铅锌矿结构. 其机理在于温度对生长初期 Al, N 粒子表面扩散的影响, 温度高于 700°C 时, 扩散导致 N 的解吸附作用增强. 反应扩散是导致初期表面化学吸附发生偏转的直接原因, 从而也是导致 AlN 晶向相对与 c 轴发生一定偏转根本原因, 因此, 薄膜生长取向也决定于温度对扩散的影响机理.

5. 结 论

动力学计算了 AlN 分子在蓝宝石表面不同温度下的吸附与扩散过程, 及其体系的能量变化. 研究表明, 吸附过程由物理吸附、化学吸附和表面稳定态三个阶段组成. 在稳定的吸附位置处 (Al)N—Al 键长为 $0.172 \pm 0.01 \text{ nm}$, 吸附后 AlN 的键长为 $0.189 \pm 0.010 \text{ nm}$, 表面吸附成键能为 4.844 eV — 5.132 eV , 表明 AlN 在 α -Al₂O₃(0001) 表面发生了较强的化学吸附. 温度越高, 粒子的平均能量越大, 粒子平均扩散能力增强. 在整个吸附生长中, N 的扩散系数 ($2.9 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) 明显大于 Al 的扩散系数 ($1.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), 尤其是在物理吸附阶段, 在扩散初始阶段, 吸附扩散为主导作用, 而在较高温度条件下(大于 700°C) N 的解吸附作用明显增强, 不利于 AlN 的稳定吸附生长. 理论研究表明 500—700°C 温度有利于 AlN 在 α -Al₂O₃(0001) 表面的稳定吸附生长, 这与实验得到的较为宏观的现象相一致.

附录: AlN 分子在吸附过程中 Al, N 的扩散距离和扩散系数

(根据文献 [21] 的研究与计算方法, 表中扩散距离可以根据动力学轨迹, 观察原子坐标变化得到; 对于扩散激活能, 可根据扩散原子位置变化对体系能量变化的贡献得到. 其中 Al, N 为物理吸附阶段的数据, Al^{*}, N^{*} 为化学吸附阶段的数据)

温度/°C	扩散原子	扩散时间/ps	移动距离 a/nm	扩散激活能 E/eV	D_0	D
300	Al	0.000—0.093	0.1369	0.4324	2.2×10^{-7}	3.5×10^{-11}
	N	0.000—0.093	0.0771	0.4324	7.1×10^{-8}	1.1×10^{-11}
	N*	0.169—0.206	0.1079	1.3094	1.4×10^{-7}	4.2×10^{-19}
	Al*	0.094—0.182	0.0933	1.2025	1.0×10^{-7}	2.6×10^{-18}
400	Al	0.000—0.106	0.0361	0.3951	1.8×10^{-8}	2.0×10^{-11}
	N	0.000—0.106	0.1431	0.3951	2.9×10^{-7}	3.2×10^{-10}
	N*	0.207—0.241	0.0609	1.2546	5.2×10^{-8}	2.0×10^{-17}
	Al*	0.230—0.261	0.1009	1.3304	1.4×10^{-7}	1.5×10^{-17}
500	Al	0.000—0.090	0.0819	0.4204	1.1×10^{-7}	2.0×10^{-10}
	N	0.000—0.090	0.2156	0.4204	7.5×10^{-7}	1.4×10^{-9}
	N*	0.127—0.155	0.0274	1.2102	1.2×10^{-8}	1.5×10^{-16}
	Al*	0.150—0.194	0.1114	1.3621	2.0×10^{-7}	2.0×10^{-16}
600	Al	0.000—0.100	0.0946	0.3701	1.6×10^{-7}	1.2×10^{-9}
	N	0.000—0.100	0.1492	0.3701	4.0×10^{-7}	2.9×10^{-9}
	N*	0.184—0.235	0.0823	1.3076	1.2×10^{-7}	3.3×10^{-15}
	Al*	0.198—0.218	0.0485	1.2648	4.3×10^{-8}	2.1×10^{-15}
700	Al	0.000—0.084	0.0738	0.3913	1.1×10^{-7}	1.0×10^{-9}
	N	0.000—0.084	0.1492	0.3913	4.5×10^{-7}	4.2×10^{-9}
	N*	0.140—0.190	0.1055	1.3025	2.3×10^{-7}	4.1×10^{-14}
	Al*	0.162—0.222	0.1546	1.1679	4.8×10^{-7}	4.3×10^{-13}
800	Al	0.000—0.100	0.0962	0.4299	2.1×10^{-7}	2.0×10^{-9}
	N	0.000—0.100	0.0732	0.4299	1.2×10^{-7}	1.1×10^{-9}
	N*	0.237—0.273	0.1023	1.4348	2.3×10^{-7}	4.2×10^{-13}
	Al*	0.283—0.294	0.0307	1.3591	2.1×10^{-8}	8.6×10^{-15}

- [1] Saxler A , Kung P , Sun C J 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 339
- [2] Ohba Y , Sato R 2000 *J. Cryst. Growth* **221** 258
- [3] Stefan Z , Atul K , Gregory R B 1999 *Materials Research Society Symposium-Proceedings* **572** 231
- [4] Jacquot A , Lenoir B , Dauscher A 2002 *Appl. Surf. Sci.* **186** 507
- [5] Gurumurugan K , Chen H , Harp G R 1999 *Materials Research Society Symposium-Proceedings* **535** 213
- [6] Yang C , Li Y R , Li J S 2004 *Phys. Rev.* **B70** 045413
- [7] Yang C , Li Y R , Yan Q L , Liu Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2364 (in Chinese) [杨 春、李言荣、颜其礼、刘永华 2005 物理学报 **54** 2364]
- [8] Yang C , Yu Y , Li Y R , Liu Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5907 (in Chinese) [杨 春、余 毅、李言荣、刘永华 2005 物理学报 **54** 5907]
- [9] Fan Z Y , Rong G , Browning J 1999 *Materials Science and Engineering B* **67** 80
- [10] Qin F W , Gu B , Xu Y , Yang D Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1240 (in Chinese) [秦福文、顾 彪、徐 茵、杨大智 2003 物理学报 **52** 1240]
- [11] Jasinski J , Liliental Z W 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2811
- [12] Huttel J , Gomez H , Cebollada A , Armelles G , Alonso M 2002 *Journal of Crystal Growth* **242** 116
- [13] Guo Q X , Yahata K 2003 *Journal of Crystal Growth* **257** 123
- [14] Lv Lei , Li Q S , Li Li , Zhang L C 2007 *Photoelectron and Laser* **10** 1212 (in Chinese) [吕 磊、李清山、李 丽、张立春 2007 光电子与激光 **10** 1212]
- [15] Yang C , Li Y R , Xue W D , Tao B W , Liu X Z , Zhang Y , Huang W 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2268 (in Chinese) [杨 春、李言荣、薛卫东、陶伯万、刘兴钊、张 鹰、黄 玮 2003 物理学报 **52** 2268]
- [16] Payne M C , Teter M P , Allan D C , Arias T A , Joannopoulos J D 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 1045
- [17] Clarke L J , Stich I , Payne M C 1992 *Comput. Phys. Commun.* **72** 14
- [18] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [19] Perdew J P , Chevary J A , Vosko S H 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [20] Perdew J P , Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [21] Erich W , Walter W , Jürgen S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 134305

Dynamics study of the adsorption and diffusion in early growth stage of $\text{AlN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ films *

Yang Chun^{1,2†} Feng Yu Fang¹⁾ Yu Yi³⁾

1) (Visual Computing and Virtual Reality Key Laboratory of Sichuan Province , Sichuan Normal University , Chengdu 610068 , China)

2) (State Key Laboratory of Electronic Thin Films and Integrated Devices , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 China)

3) (Editorial Office , Journal of Sichuan Normal University , Chengdu 610068 , China)

(Received 6 July 2008 ; revised manuscript received 7 September 2008)

Abstract

The research of temperature effect on the surface adsorption and diffusion is an important problem for the initial growth mechanism of $\text{AlN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ thin films. Using the *ab initio* molecular dynamics method based on the first principles , the adsorption process , system energy , dynamic track and the diffusion coefficient are calculated at temperatures from 300°C to 800°C . The results indicate that the adsorption process can be divided into three stages , the physical adsorption , the chemical adsorption and the stable surface growth state. With the temperature increasing , the average diffusivity of the particles at $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ surface is enhanced in the bonding process. The diffusion coefficient of N atom is higher than that of the Al atom , especially in the physical adsorption stage. At higher temperatures (over 700°C) , the role of desorption of the N atom is markedly strengthened , so it is unfavorable to the stable absorption of AlN. The temperature between 500°C and 700°C is beneficial to the stable adsorption and the growth of the AlN on $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ surface.

Keywords : $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ surface , diffusion , adsorption , *Ab initio* molecular-dynamics

PACC : 7850 , 6170 , 6770

* Project supported by the National Defense Foundation of China (Grant No.61363) , the Science and Technology Foundation for Young Scientists of Sichuan Province , China (Grant No.07ZQ026-021) .

† E-mail : chunyang_2000@263.net