

入射能量对 Au/Au(111) 薄膜生长影响的分子动力学模拟

颜超[†] 黄莉莉 何兴道

(南昌航空大学测试与光电学院, 无损检测技术教育部重点实验室, 南昌 330063)

(2013年10月21日收到; 2014年1月23日收到修改稿)

利用分子动力学模拟了 Au 原子在 Au(111) 表面低能沉积的动力学过程. 采用嵌入原子方法的原子间相互作用势, 通过对沉积层原子结构的分析和薄膜表面粗糙度、层覆盖率的计算, 研究了沉积粒子能量对薄膜质量的影响及其机制. 结果表明: 当入射能量 $E_{in} < 25$ eV 时, 沉积层和基体表层均呈现规则的单晶面心立方 (111) 表面的排列, 沉积原子仅注入到基体最表面两层, 随着入射能量的增加, 薄膜表面粗糙度降低, 薄膜越趋于层状生长, 入射能量的增加有利于薄膜的成核和致密化; 当 $E_{in} \geq 25$ eV 时, 沉积层表面原子结构出现了较为明显的晶界, 沉积原子注入到基体表面第三层及以下, 随着入射能量的增加, 薄膜表面粗糙度增加, 沉积层和基体表层原子排列越不规则, 载能沉积会降低基体内部的稳定性, 导致基体和薄膜内部缺陷的产生, 降低薄膜质量. 此外, 当基体内部某层沉积原子数约等于该层总原子数的一半时, 沉积原子将能穿过该层进入到基体内部更深层.

关键词: 入射能量, 薄膜生长, 分子动力学

PACS: 68.55.J-, 68.55.-a, 68.55.A-

DOI: 10.7498/aps.63.126801

1 引言

在薄膜制备过程中, 低能 (能量小于几百个电子伏) 沉积粒子可以极大地改变薄膜在生长过程中的宏观和微观性能, 如: 薄膜的成核与生长、应力大小、膜基结合强度、致密度、薄膜的形貌以及晶体结构^[1,2]. 为了改善薄膜质量, 离子束辅助沉积、脉冲激光溅射沉积、过滤离子束沉积、加速分子束外延生长等均是以提高沉积离子、原子或原子团能量的薄膜制备技术^[3]. 此外, 一些特殊涂层的制备中也用到低能沉积的方法. 但是, 沉积能量的提高也会导致表面缺陷和溅射的产生, 严重影响薄膜质量^[4,5]. 因此, 人们研究了沉积能量对薄膜生长的影响, 已经得到一些研究结果, 如基体表面第一层和第二层原子增加的能量或沉积原子的平均能量对薄膜生长的影响^[6]. 但是, 根据文献^[6]的研究结

果, 人们不能精确地控制低能沉积的工艺参数, 对其中包含的物理机制也缺乏充分的了解. 因此, 无论是理论上还是实验上, 低能沉积的研究都有待进一步深入.

由于目前实验上尚无法从原子水平观察和跟踪薄膜生长的物理过程, 因此, 基于分子动力学的计算机模拟已成为研究薄膜生长微观机制的重要手段. 1999年, 张庆瑜^[7]采用分子动力学方法模拟了 Au/Au(100) 薄膜的生长过程, 研究表明沉积能量对生长模式有很大的影响, 沉积能量的提高促进薄膜生长方式发生岛状生长模式向层状生长模式的转变. 2002年, 叶子燕和张庆瑜^[8]采用分子动力学模拟了低能 Pt 原子团簇的沉积, 分析了不同初始原子平均动能下的原子团簇的沉积演化过程及其对基体表面形貌的影响. Pereira 和 Silva^[9]利用分子动力学模拟了 Pd 在 Au(100) 表面上的层状沉积生长, 分析了 Pd 薄膜内部的缺陷情况. 2012

[†] 通讯作者. E-mail: enjyuan@126.com

年, Hwang 等^[10]和 Gong 等^[11,12]研究了不同能量下 Cu 团簇在 Si 表面的沉积. 人们通过对入射能量 (E_{in}) 低于 5 eV 时沉积薄膜的分子动力学模拟研究发现: 外延度和薄膜的平整度均随着入射能量的增加而增加^[11,12]; 对于 Cu 表面 Al 原子的沉积, 沉积原子能量对表面粗糙度的影响比入射角度的影响更大^[13]; 当 $E_{in} = 3$ eV 时, MgO 薄膜的表面覆盖率最大^[14]. 近年来, Jing 等^[15]和 Cao 等^[16]通过对 $E_{in} \leq 10$ eV 薄膜的生长过程的模拟研究, 得到当沉积能量为 10 eV 时出现界面原子混合, 表面粗糙度随沉积能量的增加而增加. 张宇军等^[17]通过分子动力学模拟了入射能量对含氢类金刚石膜沉积过程的影响, 通过分析得到最优沉积入射能量为 50 eV. 黄晓玉等^[18]通过研究 0.1—20 eV 的入射能量对 Be 原子同质沉积薄膜形貌结构的影响, 得到过高的入射能量不利于减小薄膜表面的粗糙度, 0.1—5 eV 的入射能量影响对 Al 沉积 Pd 基体时的界面间原子混合^[19]. Hwang 等^[10]通过模拟 0.5, 5, 15, 40 eV 的 Cu 团簇在 Si 表面的沉积, 讨论了入射能量、基体温度、团簇尺寸对外延、混合和溅射的影响, 结果显示, 入射能量的影响最大, 当入射能量为 15 eV 时表面粗糙度最小. 这些研究工作不仅建立了原子水平上研究载能粒子沉积的计算机模拟方法, 而且也说明了入射能量对薄膜生长的重要影响, 并且揭示了载能沉积薄膜生长过程中的一些物理机制.

在以前的工作中, 我们利用分子动力学模拟单个低能原子与基体的相互作用, 系统研究了载能沉积作用下产生的溅射、吸附和空位^[20]. 本文选用贵金属 Au 作为研究对象, 利用分子动力学模拟 1—50 eV 的 Au 原子沉积 Au(111) 表面的薄膜生长过程. 主要通过对不同入射能量时薄膜表面原子结构和粗糙度的分析, 讨论入射能量对薄膜生长的影响; 根据入射能量对原子注入及基体稳定性的影响, 揭示入射能量影响薄膜生长的物理机制.

2 物理模型和计算方法

我们选择的模拟体系与文献^[21]中的类似, 选用的基体是一个具有周期性边界、表面取向为 (111) 平滑表面的计算单胞 (如图 1 所示). 计算单胞体积为 $4\sqrt{6}a_0 \times 9\sqrt{2}a_0 \times 4\sqrt{3}a_0$ ($a_0 = 0.408$ nm 为 Au 的晶格常数), 其中包含有 3456 个原子, 864

个晶胞, 每层有 16×18 个原子, 共分 12 层, 以满足较低入射能量 ($E_{in} \leq 30$ eV) 和较高入射能量 ($E_{in} \geq 30$ eV) 的模拟过程.

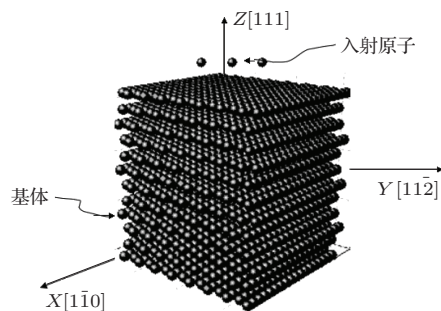


图1 模拟中所采用的晶体模型

我们以 Au 在 Au(111) 表面的同质沉积作为研究对象. 由于我们所关注的是低能原子的沉积行为, 文献^[6]指出, 当入射能量在 10—100 eV 的范围内, 尤其是当粒子能量不高出 30 eV 太多时, 有利于很多工艺的良好实施. 所以在模拟中入射原子的能量为 1—50 eV. 在模拟过程中, 基体温度选择为 300 K. 在进行模拟之前, 理想表面经过了一个 5 ps 的等温弛豫过程, 以保证基体表面的微观状态更接近于真实的基体表面的初始状态. 入射原子从基体上方垂直入射到基体表面, 入射原子的初始位置可以忽略入射原子与基体原子间相互作用. 入射点在计算基体面积 ($4\sqrt{6}a_0 \times 9\sqrt{2}a_0$) 的范围内随机选取. 原子沉积速率为 1 ps^{-1} , 沉积完成后弛豫 50 ps, 保证系统最终处于平衡状态. 原子间相互作用势采用嵌入原子法的多体势^[22,23], 多原子体系的牛顿方程采用变步长速度 Verlet 算法求解^[24]. 在镶嵌原子势函数的原子间相互作用势中, N 个原子体系的总势能^[22,23]为

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

其中, r_{ij} 是原子 i, j 间的距离, ϕ_{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.

3 模拟结果与讨论

3.1 原子结构图

大量研究表明, 入射能量会影响薄膜表面结构. 我们以 $E_{in} = 25$ eV 时沉积 5 个单层 (monolayer, ML) 5×288 个原子后的晶体模型为例, 给出对沉积各层和基体各层的定义 (如图 2 所示), 定义界面处的沉积层和基体层分别为沉积一层 (dep1) 和基体表面第一层 (sub1).

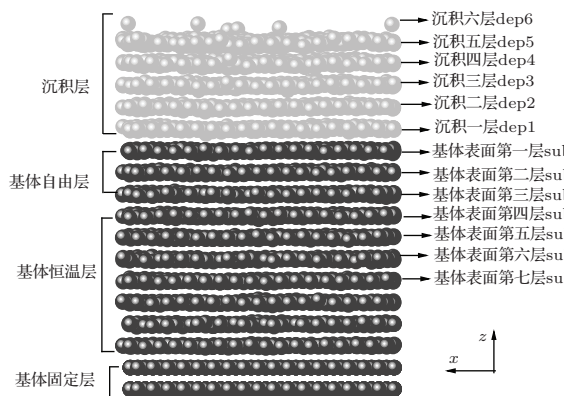


图 2 沉积后晶体模型图, 定义界面处的沉积层和基体层分别为沉积一层 dep1 和基体表面第一层 sub1

图 3 分别给出了以不同入射能量沉积 5 ML 个原子时的薄膜表面形貌图. 从图中可以看出, 当 $E_{in} < 25$ eV 时, 原子呈现规则的单晶面心立方 FCC(111) 表面的排列, 随着入射能量的增加, 沉积最表层 (沉积 6 层) 原子数目减少, 沉积层内部空位减少, 层状结构越明显; 当 $E_{in} \geq 25$ eV 时, 表面原子结构不再呈现规则的单晶面心立方 FCC(111) 排列, 出现了较为明显的晶界, 呈现多晶生长的趋势, 随着入射能量的增加, 沉积表层原子数目增加, 沉积层内部空位和位错增加. 当 E_{in} 为 20 和 25 eV 时, 沉积薄膜最趋近于层状生长. 这一结果与大量的实验结果 [25] 一致, 即在低能沉积过程中, 适当提高入射能量有助于薄膜层状生长, 但是过高的能量反而不利于薄膜的层状生长.

在以往的研究中 [20], 我们了解到不同的入射能量对基体表面会产生不同的影响, 对同质沉积, 沉积层原子倾向于按照基体原子结构排列. 因此, 我们分别给出了不同入射能量下沉积 5 ML 的 Au 原子时, 界面处基体原子层 (基体表面第一层) 的原子构型图 (图 4). 从图中可以看出, 当 $E_{in} \leq 25$ eV

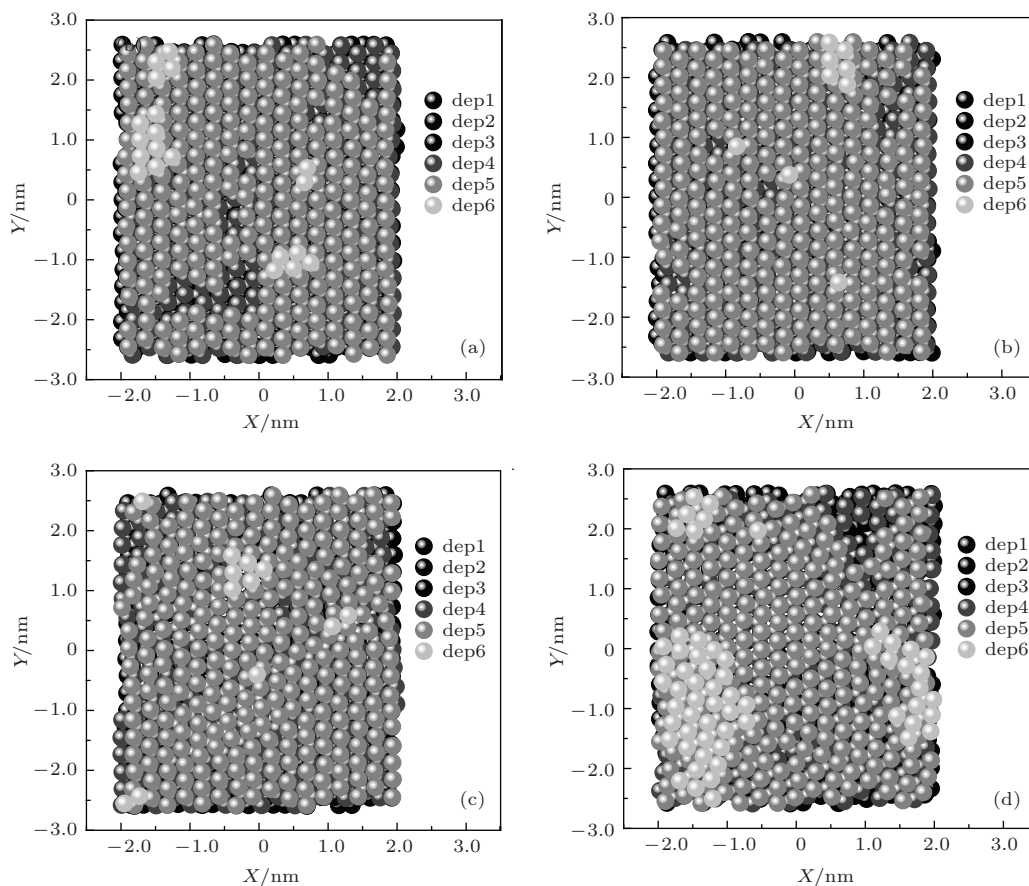


图 3 不同入射能量下, 沉积 5 ML 的 Au 原子时沉积层原子结构 (a) $E_{in} = 10$ eV; (b) $E_{in} = 20$ eV; (c) $E_{in} = 25$ eV; (d) $E_{in} = 30$ eV

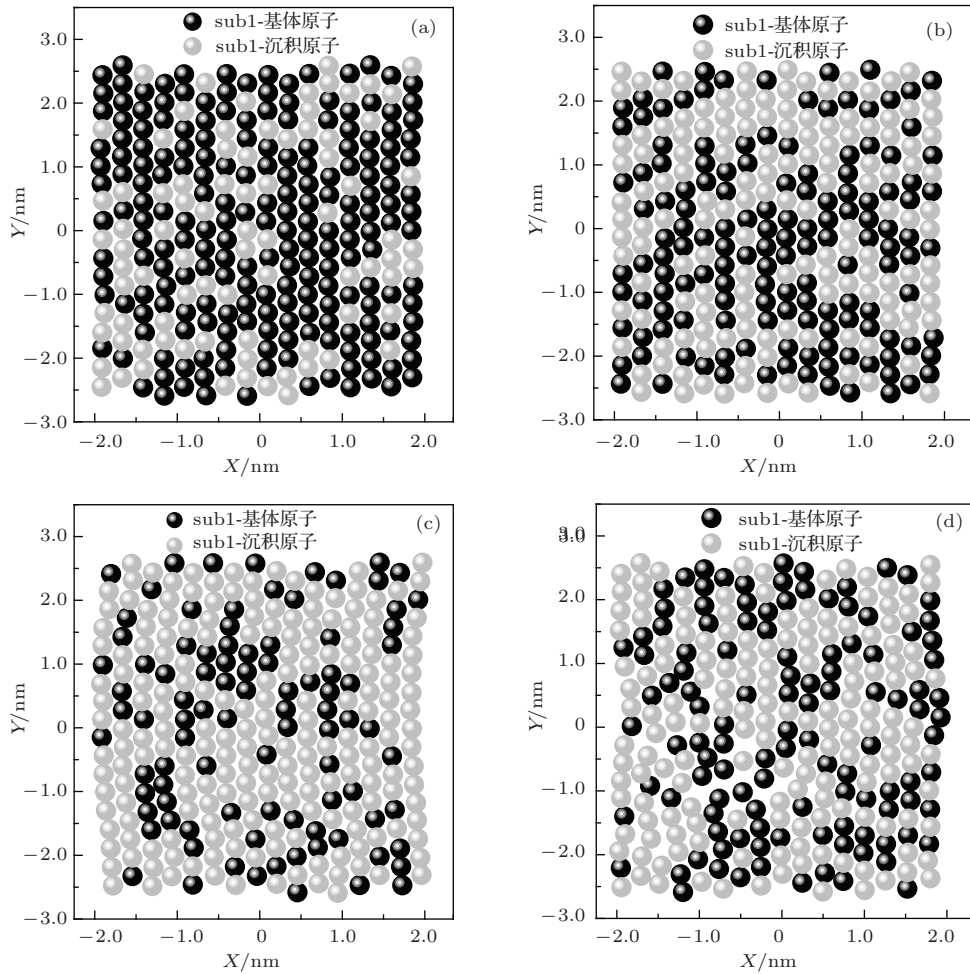


图4 在 Au(111) 表面沉积 5ML 的 Au 原子时, 不同入射能量下界面处基体层 (基体表面第一层) 原子结构 (a) $E_{in} = 10$ eV; (b) $E_{in} = 25$ eV; (c) $E_{in} = 30$ eV; (d) $E_{in} = 40$ eV

时, 界面处基体层呈现规则的单晶面心立方 (111) 结构, 即沉积过程不会影响基体的原子排列; 在 $E_{in} > 25$ eV 时, 基体表面层的原子不再呈现规则的单晶 FCC(111) 排列, 入射能量越大, 原子排列越不规则, 即与沉积层原子结构随入射能量的变化规律一致. 当 $E_{in} = 30$ eV 时, 基体表层依然是单晶面心立方排列, 原子列略有弯曲, 当 $E_{in} = 40$ eV 时, 基体表层原子出现明显的错排, 形成了空位和位错等缺陷.

3.2 粗糙度和层覆盖率

为了进一步明确入射能量对沉积层的影响, 我们给出了在 Au(111) 表面分别沉积 4ML 和 5ML 的 Au 原子时, 沉积薄膜粗糙度^[26] (W) 随入射能量的变化 (如图 5 所示), $1 \text{ eV} \leq E_{in} \leq 50 \text{ eV}$:

$$W = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (h_i - \bar{h})^2}{N}}, \quad (3)$$

其中 h_i 表示 i 处覆盖原子的高度, \bar{h} 表示所有覆盖原子高度的平均值, N 表示每层覆盖的原子个数. 当 W 值越接近 0 nm 时, 表示表面越光滑, 而 W 值越大表明表面越粗糙.

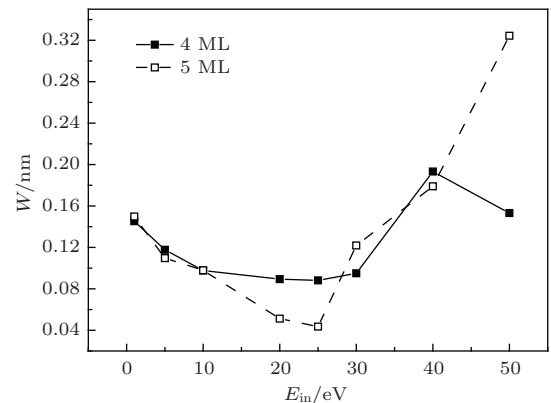


图5 沉积 4 ML 和 5 ML 原子时沉积层粗糙度随入射能量的变化

从图 5 中可以看出, $E_{in} \leq 25$ eV 时, 薄膜表面粗糙度随入射能量的增加而减小; $E_{in} > 25$ eV 时,

粗糙度随入射能量的增加而增加, 即入射能量在 25 eV 时薄膜表面粗糙度最小. 这一定量分析的结果与根据原子结构图得到的结果一致. 为了更详细地了解入射能量对沉积层中原子分布的影响, 图 6 给出了层覆盖率随入射能量的变化. 定义层覆盖率 (γ) 为

$$\gamma = \frac{n}{N}, \quad (4)$$

其中, N 为沉积原子理想排布时每层的原子数; n 为沉积层某层上的实际原子数.

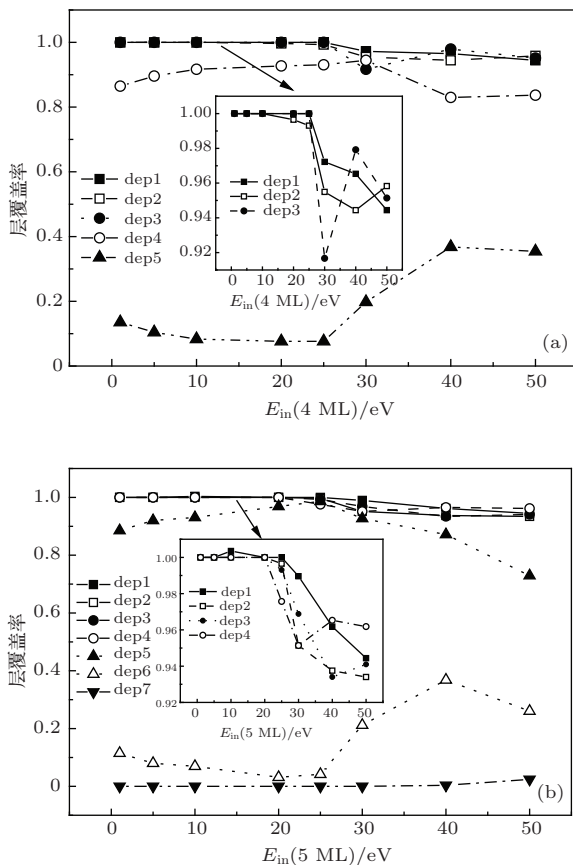


图 6 沉积 4 ML 原子 (a) 和 5 ML 原子 (b) 时沉积层各层的覆盖率随入射能量的变化

从图 6 中可以看出, 当沉积 4 ML 原子时, 沉积层的最大高度为 5 层; 当沉积 5 ML 时, 沉积层的最大高度为 6 层. 当 $E_{in} \leq 25$ eV 时, 沉积层只有最表面两层覆盖率明显小于 1, 其他层的覆盖率均等于或接近 1. 随入射能量从 1 eV 增加到 25 eV, 沉积 4 ML 时, 沉积最表面层 (dep5) 的覆盖率从 0.14 减小到 0.07, 沉积次表层 (dep4) 的覆盖率从 0.86 增加到 0.94; 沉积 5 ML 时, 沉积最表面层 (dep6) 的覆盖率从 0.11 减小到 0.04, 沉积次表层 (dep5) 的覆盖率从 0.88 增加到 0.99. 当 $E_{in} > 25$ eV 时, 沉积各

层的覆盖率均小于 1, 随着入射能量的增加, 沉积最表层的覆盖率增加, 沉积次表层的覆盖率减小. 这一结果进一步显示, 当 $E_{in} \leq 25$ eV 时, 沉积层内部空位缺陷较少, 随入射能量的增加, 沉积层表面越呈现层状生长的趋势; 当 $E_{in} > 25$ eV 时, 沉积层内部存在明显的空位缺陷, 随入射能量的增加, 沉积层表面越呈现岛状生长的趋势.

3.3 入射能量对薄膜质量影响的物理机制

为揭示入射能量影响薄膜生长的物理机制, 我们首先计算了不同入射能量时的溅射率. 溅射率分别定义如下:

$$Y_{dep} = \frac{m_{dep}}{N_{dep}}, \quad (5)$$

$$Y_{sub} = \frac{m_{sub}}{N_{sub}}, \quad (6)$$

$$Y_{sub}^L = \frac{m_{sub}^L}{N_{sub}^L}, \quad (7)$$

Y_{dep} 为沉积原子溅射率, Y_{sub} 为基体原子溅射率, Y_{sub}^L 为基体表面第 L 层原子的溅射率, m_{dep} 为沉积原子中被溅射的原子数, m_{sub} 为基体原子中被溅射的原子数, m_{sub}^L 为基体表面第 L 层被溅射的原子数, N_{dep} 为沉积原子总个数, N_{sub} 为基体原子总个数, N_{sub}^L 为基体表面第 L 层的原子总数.

溅射阈值与单个原子沉积时计算的溅射阈值接近, 约等于 25 eV^[20]. 从图 7 (a) 中可以看出, 随着入射能量的增加, 沉积原子的溅射率 (Y_{dep}) 和基体原子的溅射率均逐渐增加; 图 7 (b) 显示, 随入射能量的增加, 基体最表层原子的溅射率减小, 而最表层以下各层的溅射率均呈现增加的趋势. 这一结果说明, 当 $E_{in} \leq 25$ eV (溅射阈值) 时, 没有溅射产生, 载能沉积对基体内部的影响较小; 当 $E_{in} > 25$ eV 时, 随入射能量的增加, 溅射率增加, 载能沉积对基体内部的影响和破坏增加.

为明确载能沉积对基体内部的影响, 我们计算了单个原子沉积对基体稳定性的影响. 在我们的物理模型中, 沉积速度是 1 ps^{-1} , 因此, 我们给出了单个原子沉积 1 ps 之后, 基体总的能量和基体各层的能量分布, 并与沉积前基体的能量进行了比较. 从图 8 (a) 可以看出, 沉积后基体总的能量均高于沉积前的基体总能量. 随着入射能量的增加, 沉积后

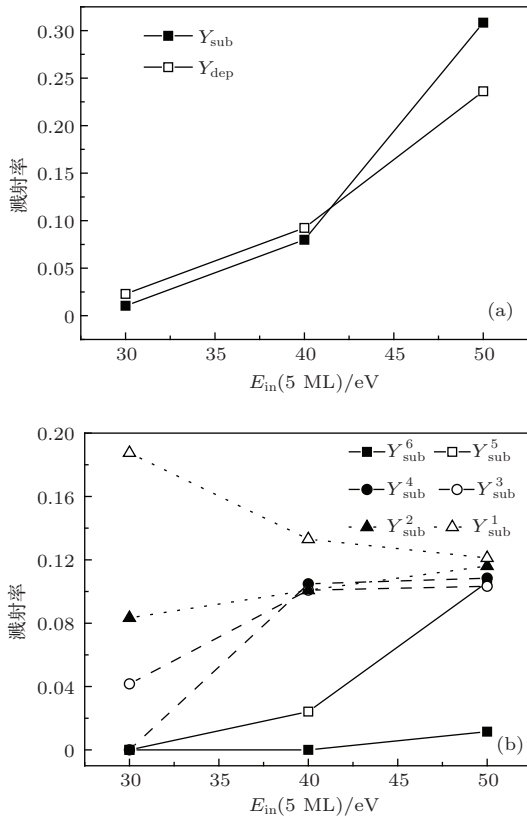


图7 溅射率随入射能量的变化 (a) 基体原子和沉积原子总的溅射率; (b) 基体各层原子的溅射率

基体总能量先增加后略有减小, 最后又增加, 在 25 eV 时存在一个极小值. 在载能沉积过程中, 入射能量的增加, 一方面, 会导致基体总能量增加, 降低基体的稳定性; 另一方面, 会导致表面原子活性增强, 从而降低基体总能量, 提高基体的稳定性. 因此, 从图 8(a) 中可以看出, 当 $10 \text{ eV} < E_{in} \leq 25 \text{ eV}$ 时, 随入射能量的增加, 基体总能量降低, 即表面原子活性增强对降低基体稳定性的效果更明显. 为了更清楚地显示入射能量对基体稳定性的影响, 图 8(b)—(d) 分别显示了不同入射能量下基体各层的总能量, 并与未沉积时基体各层总能量进行了比较. 从图中可以看出, 未沉积时, 基体原子处于动态平衡状态, 基体各层能量范围约为 9.7—11.8 eV. 沉积后, 当 $E_{in} \leq 10 \text{ eV}$ 时, 仅基体最表面两层的能量接近或高于未沉积时动态平衡状态下最大的层能量 (11.8 eV), 即沉积主要影响最表面两层, 由于此时表面原子较少^[20], 难以通过扩散降低基体能量, 因此, 基体总能量随入射能量的增加而增加, 薄膜粗糙度较高; 当 $10 \text{ eV} < E_{in} \leq 25 \text{ eV}$ 时, 沉积过程对基体最表面三层的稳定性有一定的影响, 由于此时低能沉积的主要作用是产生表面吸附原子^[20], 又没有溅射产生, 表面原子活性增强有利于薄膜的

成核和致密化, 因此, $E_{in} = 25 \text{ eV}$ 时, 薄膜粗糙度最低, 表面最为平整. 当 $E_{in} > 25 \text{ eV}$ 时, 可以看出, 沉积过程会影响到基体表面以下第五层, 即导致基体内部稳定性变差. 单原子沉积的结果显示入射能量较低时, 沉积原子主要是亚注入 (注入到基体表面两层), 当入射能量较高时, 沉积原子会注入到基体内部^[20]. 我们推测, 基体各层稳定性的变化与沉积原子的注入情况有关.

因此, 图 9 统计了分别沉积 4 ML 和 5 ML 原子时, 沉积原子的注入情况. 图 9(a) 为总的注入率 (注入基体的沉积原子数/总的沉积原子数). 从图中可以看出, 随入射能量的增加, 注入率呈现增加趋势, 在 $20 \text{ eV} \leq E_{in} \leq 25 \text{ eV}$ 时, 注入率随入射能量的变化存在一个转折; 当 $E_{in} \leq 20 \text{ eV}$ 时, 注入率随入射能量的增加呈较缓和的线性增加趋势; 当 $E_{in} > 25 \text{ eV}$ 时, 随入射能量的增加, 注入率急剧增加. 为了更详细地了解沉积原子注入的情况, 图 9(b) 和 (c) 分别计算了沉积 4 ML 和 5 ML 原子时, 基体各层中沉积原子所占的比率 (注入基体某一层的沉积原子数/基体该层总的原子数). 当 $E_{in} \leq 25 \text{ eV}$, 沉积原子在基体表面第三层及以下所占的比率约等于 0, 随入射能量的增加, 基体表面第一层和第二层的沉积原子比率依次从 0 开始呈现线性增加趋势. 当 $E_{in} = 25 \text{ eV}$ 时, 基体表面第一层的注入百分比均约等于 0.5; 当 $E_{in} > 25 \text{ eV}$ 时, 沉积原子开始注入到表面第三层及以下, 随着入射能量的增加, 从基体表面第一层到基体表面第六层, 沉积原子所占的比率依次先急剧增加然后略有减小, 最后保持在 0.5 左右. 这一结果证实了我们的推测, 当 $E_{in} \leq 25 \text{ eV}$ 时, 原子注入到表面两层, 因此, 仅对基体最表面三层的稳定性影响较大; 当 $E_{in} > 25 \text{ eV}$ 时, 沉积原子能注入到基体内部第六层, 因此, 对基体表面五层的稳定性影响均较大, 从而容易导致基体内部缺陷的产生. 从图中可以看出, 在基体内部 (基体表面第二层以下), 当基体表面第 n ($n \geq 2$) 层注入百分比达到 0.5 左右时, 第 $n + 1$ 层就开始有沉积原子注入. 基体层沉积原子所占比率随入射能量变化的结果显示, 在基体内部, 当某一基体层中沉积原子数明显低于一半时, 沉积原子较难穿过该层注入到下一层; 当某一基体层中沉积原子数达到一半时, 沉积原子较容易穿过该层注入到下一层. 这一结果表明, 当入射原子仅注入到基体表面两层时, 没有溅射产生, 入射能量

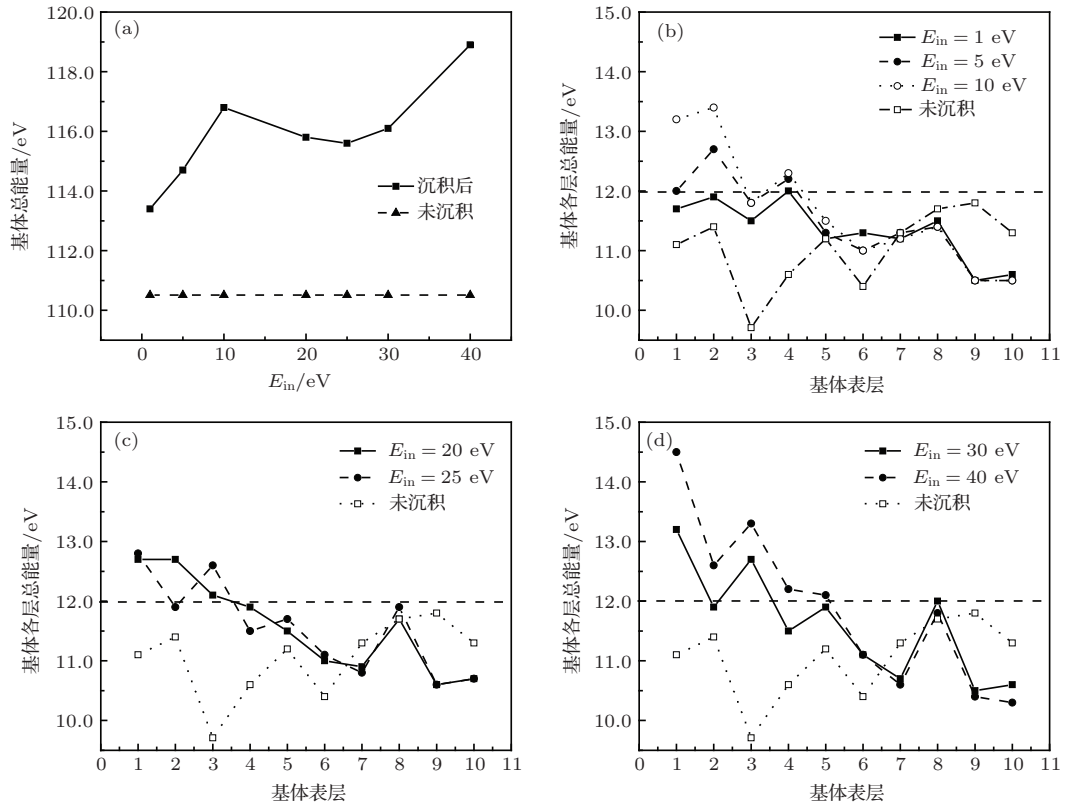


图8 单个原子沉积 1 ps 后, 基体的总能量随入射能量的变化 (a); (b)—(d) 不同入射能量下基体各层总能量

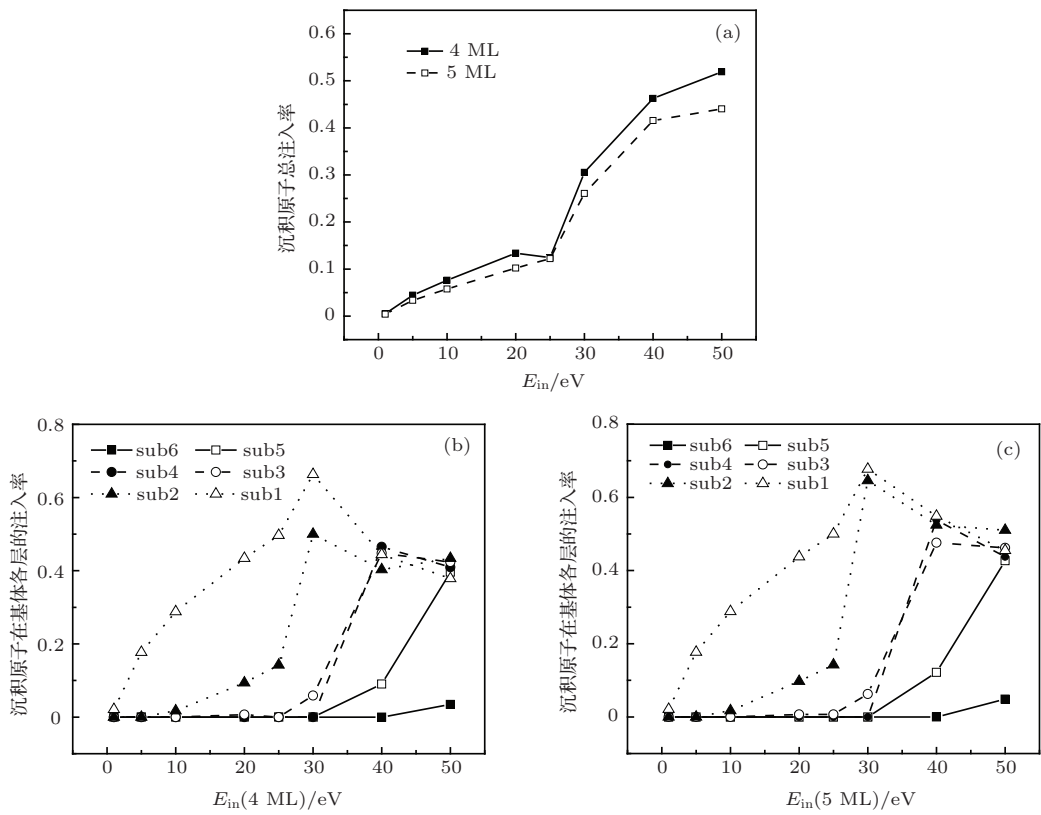


图9 沉积原子注入基体的百分比随入射能量的变化 (a) 总的注入随入射能量的变化; (b) 沉积 4 ML 时, 沉积原子在基体表面各层的注入百分比随入射能量的变化; (c) 沉积 5 ML 时, 沉积原子在基体表面各层的注入百分比随入射能量的变化

的增加利于薄膜的成核和致密化; 当入射原子注入到基体表面第三层及以下时, 开始有溅射产生, 入射能量的增加会导致薄膜和基体内部缺陷的增加.

4 结 论

利用分子动力学方法模拟了 Au 在 Au(111) 表面的沉积过程. 不同入射能量范围对薄膜表面形态的影响存在一定的差异. 根据分子动力学模拟的结果, 揭示了入射能量对薄膜表面形态影响的物理机制. 当入射能量低于溅射阈值时, 没有溅射产生, 沉积原子为亚注入 (注入深度为两个原子层), 沉积过程对基体内部的稳定性影响较小, 主要作用是产生表面原子, 表面原子的扩散有助于薄膜的层状生长; 当入射能量高于溅射阈值时, 沉积原子可以注入到基体表面第三层及以下, 当基体某层中沉积原子数达到该层总原子数一半左右时, 沉积原子能穿过该层注入到基体更深层, 有溅射产生, 沉积过程降低基体内部的稳定性, 导致基体缺陷的产生和沉积层原子的不规则排列, 从而降低薄膜质量. 大量的实验结果表明^[27-30], 适当地提高入射能量有助于提高薄膜质量, 过高的入射能量则会导致基体和薄膜内部缺陷的产生, 降低薄膜质量. 文献^[27]根据脉冲激光沉积 Au/Co/Au(111) 的实验结果得到: 与热沉积相比较, 脉冲激光沉积由于能量的增加, 一方面会导致薄膜的层状生长, 降低表面粗糙度; 另一方面会加强界面的混合, 增加界面的粗糙度. 界面混合的增加正是由于入射原子注入深度和注入百分比的增加所导致的. 因此, 文献^[6]中给出对于优化沉积参数的研究准则是: 在提高沉积原子能量的前提下, 要控制每个沉积原子的入射能量不超过沉积原子在基体表面从亚注入到注入转变的分界能量, 而不是控制所有沉积原子的平均能量, 如在脉冲激光沉积中, 控制每个原子的能量在 30 eV 左右, 可以得到高质量的薄膜甚至外延膜. 这一结果与本模拟所得到的结果符合得很好. 根据单原子沉积的分子动力学模拟结果, 在 Au(111) 表面, 这一分界能量为 45 eV^[31]. 薄膜生长是一个多原子沉积过程, 原子沉积过程不断降低基体表面的稳定性, 因此, 本模拟中得到的分界能量为 25 eV 更接近实际情况.

参考文献

- [1] Pagon A M, Partridge J G, Hubbard P, Taylor M B, McCulloch D G, Doyle E D, Latham K, Bradby J E, Borisenko K B, Li G 2010 *Surf. Coat. Technol.* **204** 3552
- [2] ElGaz H, Abdel-Rahman E, Salem H G, Nassar F 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 2056
- [3] Zhao H W, Bie Q S, Du J, Lu M, Sui Y X, Zhai H R, Xia H 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2047 (in Chinese)[赵宏武, 别青山, 杜军, 鹿牧, 眭云霞, 翟宏如, 夏慧 1997 物理学报 **46** 2047]
- [4] 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]
- [5] Chen M, Wei H L, Liu Z L, Yao K L 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2446 (in Chinese)[陈敏, 魏和林, 刘祖黎, 姚凯伦 2001 物理学报 **50** 2446]
- [6] Colligon J S 1995 *J. Vac. Sci. Technol. A* **13** 1649
- [7] Zhang Q Y 1999 *J. Dalian Univ. Tech.* **39** 730 (in Chinese)[张庆瑜 1999 大连理工大学学报 **39** 730]
- [8] 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]
- [9] Pereira Z S, Silva da E Z 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195417
- [10] Hwang S F, Li Y H, Hong Z H 2012 *Comput. Mater. Sci.* **56** 85
- [11] Gong H F, Lu W, Wang L M, Li G P, Zhang S X 2012 *Comput. Mater. Sci.* **65** 230
- [12] Gong H F, Lu W, Wang L M, Li G P, Zhang S X 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 024903
- [13] Hong Z H, Hwang S F, Fang T H 2010 *Comput. Mater. Sci.* **48** 520
- [14] Liu M L, Zhang Z N, Li W, Zhao Q, Qi Y, Zhang L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S199 (in Chinese)[刘美林, 张宗宁, 李蔚, 赵寒, 祁阳, 张林 2009 物理学报 **58** S199]
- [15] Jing X B, Liu Z L, Yao K L 2012 *Appl. Surf. Sci.* **258** 2771
- [16] Cao Y Z, Zhang J J, Sun T, Yan Y D, Yu F L 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 5993
- [17] Zhang Y J, Dong G N, Mao H J, Xie Y B 2007 *Chin. Sci. Bull.* **52** 2813 (in Chinese)[张宇军, 董光能, 毛红军, 谢友柏 2007 科学通报 **52** 2813]
- [18] Huang X Y, Cheng X L, Xu J J, Wu W D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 096801 (in Chinese)[黄晓玉, 程新路, 徐嘉靖, 吴卫东 2012 物理学报 **61** 096801]
- [19] Huang X Y, Cheng X L, Xu J J, Wu W D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 016805 (in Chinese)[黄晓玉, 程新路, 徐嘉靖, 吴卫东 2012 物理学报 **61** 016805]
- [20] Yan C, Duan J H, He X D 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8807 (in Chinese)[颜超, 段军红, 何兴道 2010 物理学报 **59** 8807]
- [21] Yan C, Lü H F, Zhang C, Zhang Q Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1351 (in Chinese)[颜超, 吕海峰, 张超, 张庆瑜 2006 物理学报 **55** 1351]
- [22] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [23] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983
- [24] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637

- [25] Adamović D, Chirita V, Münger E P, Hultman L, Greene J E 2007 *Phys. Rev. B* **76** 115418
- [26] Jing X B 2011 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [荆兴斌 2011 博士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [27] Clavero C, Cebollada A, Armelles G, Fruchart O 2010 *J. Magn. Magn. Mater.* **322** 647
- [28] Singh R K, Naravan J 1990 *Phys. Rev. B* **41** 8843
- [29] Meyerheim H L, Przybylski M, Ernst A, Shi Y, Henk J, Soyka E, Kirschner J 2007 *Phys. Rev. B* **76** 035425
- [30] Lee S H, Kwak E H, Kim H S, Lee S W, Jeong G H 2013 *Thin Solid Films* **547** 188
- [31] Yan C, Zhang C, Zhang Q Y, Liu T W, Huang H 2009 *Appl. Surf. Sci.* **255** 3875

Molecular dynamics simulation of the effect of incident energy on the growth of Au/Au (111) thin film

Yan Chao[†] Huang Li-Li He Xing-Dao

(Key Laboratory of Nondestructive Testing of Ministry of Education, School of Measuring and Optical Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

(Received 21 October 2013; revised manuscript received 23 January 2014)

Abstract

The low-energy bombardment on Au (111) surface by Au atoms is studied by molecular dynamics (MD) simulation. The atomic interaction potential of embedded atom method is used in the simulation. The incident-energy effects on the morphologies and the surface roughness values of the deposited films are observed and summarized. The incident energy (E_{in}) varies from 0.1 eV to 50 eV. The transition of incident energy dependence occurs when the energy value is about 25 eV. The incident energy of about 25 eV is the sputtering threshold of Au (111) substrate. When the incident energy is lower than 25 eV, no atoms can be implanted into the depth beyond the second layer and all atoms are in face-centered cubic (111) arrangement without dislocation. The surface roughness decreases with the increase of the incident energy. For the case of $E_{in} \geq 25$ eV, the deposited atoms reach the third layer. When the number of atoms deposited in a substrate layer reaches about half the total number of atoms in this layer, the deposited atoms could go through this layer and enter into a deeper layer in the substrate. Surface roughness increases with the increase of the incident energy, and the energetic deposition can produce defects in both substrate and film.

Keywords: incident energy, film growth, molecular dynamics

PACS: 68.55.J-, 68.55.-a, 68.55.A-

DOI: 10.7498/aps.63.126801

[†] Corresponding author. E-mail: enjoyyan@126.com