

文章编号: 1007-4627(2019)02-0235-07

低能 Cu_{13} 团簇沉积薄膜的分子动力学模拟研究

张世旭^{1,2}, 刘惠伟¹, 贺亦文¹, 张梅玲¹, 李公平^{1,2,†}

(1. 兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000;
2. 兰州大学特殊功能材料与结构设计教育部重点实验室, 兰州 730000)

摘要: 利用分子动力学模拟方法对 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面上沉积薄膜进行了研究, 分析了不同沉积条件对薄膜生长模式的影响, 对比分析了不同沉积条件下表面粗糙度、缺陷分布和外延度等薄膜性质的差异。 Cu_{13} 团簇的初始沉积能量范围为 0.1~10.0 eV/atom, 沉积率为 1.0 clusters/ps, 衬底温度分别为 300, 700 和 1000 K。模拟结果表明: 团簇初始沉积能量主要影响薄膜生长模式, 当初始沉积能量为 7.5 eV/atom 的 Cu_{13} 团簇沉积到温度为 300 K 的 Fe(001) 表面时, 可形成表面光滑、内部缺陷少和较好外延度的高质量 Cu 薄膜。

关键词: 分子动力学模拟; 团簇沉积薄膜; Cu_{13} 团簇; Fe(001) 表面

中图分类号: O484.1 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.36.02.235

1 引言

Fe/Cu 磁性多层膜材料因具有显著的巨磁电阻效应, 可使器件小型化、廉价化, 而被广泛应用于高密度读出磁头、磁传感器以及随机存储器^[1-5]等方面, 使得关于 Fe/Cu 磁性多层膜的研究一直是材料科学研究热点之一, 实验上关于 Fe/Cu 磁性多层膜性能方面的研究工作已有大量报道^[1-11]。在薄膜材料制备过程中, 薄膜的结构已经形成, 薄膜结构决定了薄膜材料的性能。目前, Fe/Cu 磁性多层膜材料制备方法使用最为广泛的是磁控溅射方法^[1-9], 在磁控溅射方法中, 气相成分中常存在大量等离子体尘埃颗粒, 同时在粒子输送到衬底的过程中, 许多原子也将结合形成液滴, 这些低能团簇的存在将对薄膜质量产生严重影响。因此, 团簇沉积在 Fe/Cu 磁性多层膜材料制备过程中对薄膜的结构和质量有着重要影响, 研究团簇沉积薄膜的生长机制和薄膜性质将为实验上制备特定质量 Fe/Cu 磁性多层膜提供参考。

由于目前实验技术和条件的限制, 无法从实验上直接观察到薄膜形成的微观过程, 限制了人们对薄膜微观结构形成机制的理解, 因此, 关于薄膜结构形成机制方面的实验研究很少被报道。然而, 在原子水平上的分子动力学 (Molecular Dynamics, MD)^[12]模拟方法可以重现薄膜形成的微观动态物理过程, 有助于详细

分析薄膜的生长机制和薄膜结构形成机制。自 1987 年, Müller^[13]首次利用二维分子动力学方法来模拟离子束辅助沉积生长薄膜过程之后, 人们已利用分子动力学方法在团簇沉积薄膜方面做了大量模拟研究工作^[14-21]。Hong 等^[18]利用 MD 模拟了低能 Co_{10} 团簇和 Fe_{10} 团簇在 Cu(001) 表面沉积成膜, 探究团簇初始沉积能量和衬底温度对薄膜结构的影响, 模拟结果表明, 随着团簇初始沉积能量的增加, 薄膜表面粗糙度减小并且团簇原子与衬底在界面处混合程度增强。Hwang^[19]等进行了 Cu 团簇在 Si(001) 表面沉积成膜的 MD 模拟, 探究团簇初始沉积能量、衬底温度等沉积条件对团簇沉积薄膜的影响。研究发现, 更小尺寸的团簇有助于沉积更加光滑的薄膜表面, 衬底温度的升高能减小沉积薄膜的表面粗糙度。团簇初始沉积能量低时薄膜为类外延生长, 当团簇初始沉积能量达到一定值, 开始出现原子溅射现象。

课题组目前已完成了对单个 Cu 团簇沉积到 Fe(001) 表面的 MD 模拟研究工作^[22-25], 全面理解了单个 Cu 团簇与 Fe(001) 表面相互作用的微观机制, 详细讨论了不同沉积条件对团簇沉积效果的影响。但关于 Cu 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的 MD 模拟研究工作很少被报道, 因此, 本文在原有的研究工作基础上, 利用自开发的 MD 模拟程序对初始沉积能量范围 0.1~10.0 eV/atom 的 Cu_{13} 团簇分别在衬底温度为

收稿日期: 2018-09-15; 修改日期: 2019-01-24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11604129); 兰州大学中央高校基本科研业务费专项资金资助项目 (lzujbky-2015-67, lzujbky-2019-56)

作者简介: 张世旭 (1984-), 男, 内蒙古呼伦贝尔人, 副教授, 博士, 从事射线与物质相互作用研究; E-mail: zhangshixu@lzu.edu.cn

† 通信作者: 李公平, E-mail: ligp@lzu.edu.cn.

300, 700 和 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜进行模拟研究, 重现不同沉积条件下 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的微观动态过程, 探究不同沉积条件下 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的生长机制和演化规律, 通过分析不同沉积条件下表面粗糙度、缺陷分布和外延度等薄膜性质的模拟计算结果, 探究团簇初始沉积能量和衬底温度对 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面形成薄膜性质的影响。

2 分子动力学模型

图 1 为 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的三维模型图。Fe 衬底为 bcc 结构, 尺寸为 $37a \times 37a \times 10a$ (晶格常数 $a = 2.9607 \text{ \AA}$), 共包含 27380 个 Fe 原子。衬底质心位置为模拟体系的坐标原点, 衬底在 X 和 Y 方向上采用周期性边界条件, Z 方向未采用周期性边界条件。衬底 Z 方向共包含 20 个原子层, 其中衬底最底下两个原子层 (绿色小球) 为固定层, 用于防止在团簇沉积过程中模拟体系的坐标原点发生移动。固定层之上的六个原子层 (橙色小球) 为热控层, 在模拟体系演化过程中, 利用 Nosé-Hoover 控温^[26]方法来对该层原子的速度进行重新调整, 以保证整个衬底温度恒定为预设温度。靠近衬底表面的 12 个原子层 (蓝色小球) 为自由表面层, 该层原子除了受原子间相互作用力外, 没有其他约束条件的限制, 能够在团簇沉积过程中使团簇原子自由地与衬底原子进行能量交换, 而尽量减少其他约束条件的影响。 Cu_{13} 团簇采用单层正二十面体结构^[27], Cu_{13} 团簇初始位置随机分布在衬底 XY 平面范围内, Z 方向距离衬底 Fe(001) 表面上方 42 \AA , 团簇初始沉积方向为垂直衬底 (001) 表面, 如图 1 所示。

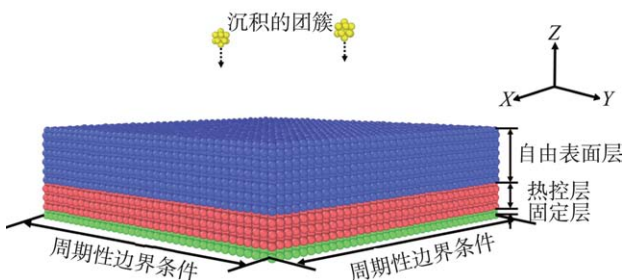


图 1 (在线彩图) Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的三维模型图

本文采用自开发的 MD 模拟程序对 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜进行模拟研究, 模拟程序中采用 Ackland 等^[28]提出的 Finnis-Sinclair 形式的多体势函数来描述模拟体系中 Fe-Fe, Cu-Cu 以及 Fe-Cu 原子间相互作用, 并采用 Verlet-元胞链接列表法^[28]来提高

计算效率; 采用速度 Verlet 算法^[29-30]来求解牛顿运动方程, 积分时间步长为 1.0 fs 。衬底温度分别选取 300, 700 和 1000 K, 衬底原子的初始速度由相应温度下的 Maxwell-Boltzmann 分布^[31]求得, 在团簇沉积前, 衬底在预设的温度下弛豫 30 ps 以达到系统稳定。在团簇沉积前, Cu_{13} 团簇在 0 K 下弛豫 20 ps , 团簇初始沉积能量范围 $0.1 \sim 10.0 \text{ eV/atom}$, 分别选取 0.1, 2.5, 5.0, 7.5, 10.0 eV/atom 五个能量值为团簇初始沉积能量, 团簇原子初始沉积速度由对应的初始沉积能量决定。对于每个模拟事件共沉积 1000 个 Cu_{13} 团簇, 沉积团簇原子数目相当于 10 个单分子层 (Monolayers, ML) 的 Cu 原子数目, 团簇沉积率为 1.0 clusters/ps , 模拟总时间为 1100 ps , 其中最后 100 ps 用于团簇沉积完成后模拟体系的弛豫。

3 结果分析

3.1 生长模式

薄膜生长模式对薄膜结构、界面的形成和薄膜性能有着重要影响, 主要有岛状生长 (Volmer-Weber mode)^[32], 层状生长 (Frank-van der Merwe mode)^[33] 和层岛混合生长 (Stranski-Krastanov mode)^[34] 三种生长模式。图 2 为不同初始沉积能量的 Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300 K 的 Fe(001) 表面沉积 1, 5 和 10 ML 薄膜时, 衬底表面之上原子的高度分布图。当沉积薄膜厚度为 1 ML 时, 团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 衬底表面之上原子形成明显的岛状结构, 随着团簇初始沉积能量的增加, 团簇与衬底表面相互作用时完全失去团簇初始结构, 团簇原子在衬底表面附近实现完全重构, 形成相对比较扁平的结构, 使岛状结构逐渐减少, 团簇初始沉积能量为 7.5 和 10.0 eV/atom 时, 岛状结构几乎完全消失, 衬底表面上原子相对均匀地分布在衬底表面之上。当沉积薄膜厚度为 5 ML 时, 团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 衬底表面之上原子高度梯度差异较大, 且具有较多孔洞, 已形成明显的岛状结构, 随着团簇初始沉积能量的增加, 衬底表面之上原子高度梯度差异逐渐减小, 且孔洞逐渐消失, 团簇初始沉积能量为 7.5 和 10.0 eV/atom 时, 岛状结构完全消失, 衬底表面上原子高度梯度较小, 形成相对平坦的薄膜。当沉积薄膜厚度为 10 ML 时, 团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 与沉积薄膜厚度为 5 ML 时相比孔洞较少, 但仍有明显的孔洞存在, 且原子高度梯度差异仍较大, 具有明显的岛状结构; 随着团簇初始沉积能量的增加, 衬底表面之上原子高度梯度差异逐渐减小, 团簇初始沉积能量为 7.5 和 10.0 eV/atom 时, 形成原子高

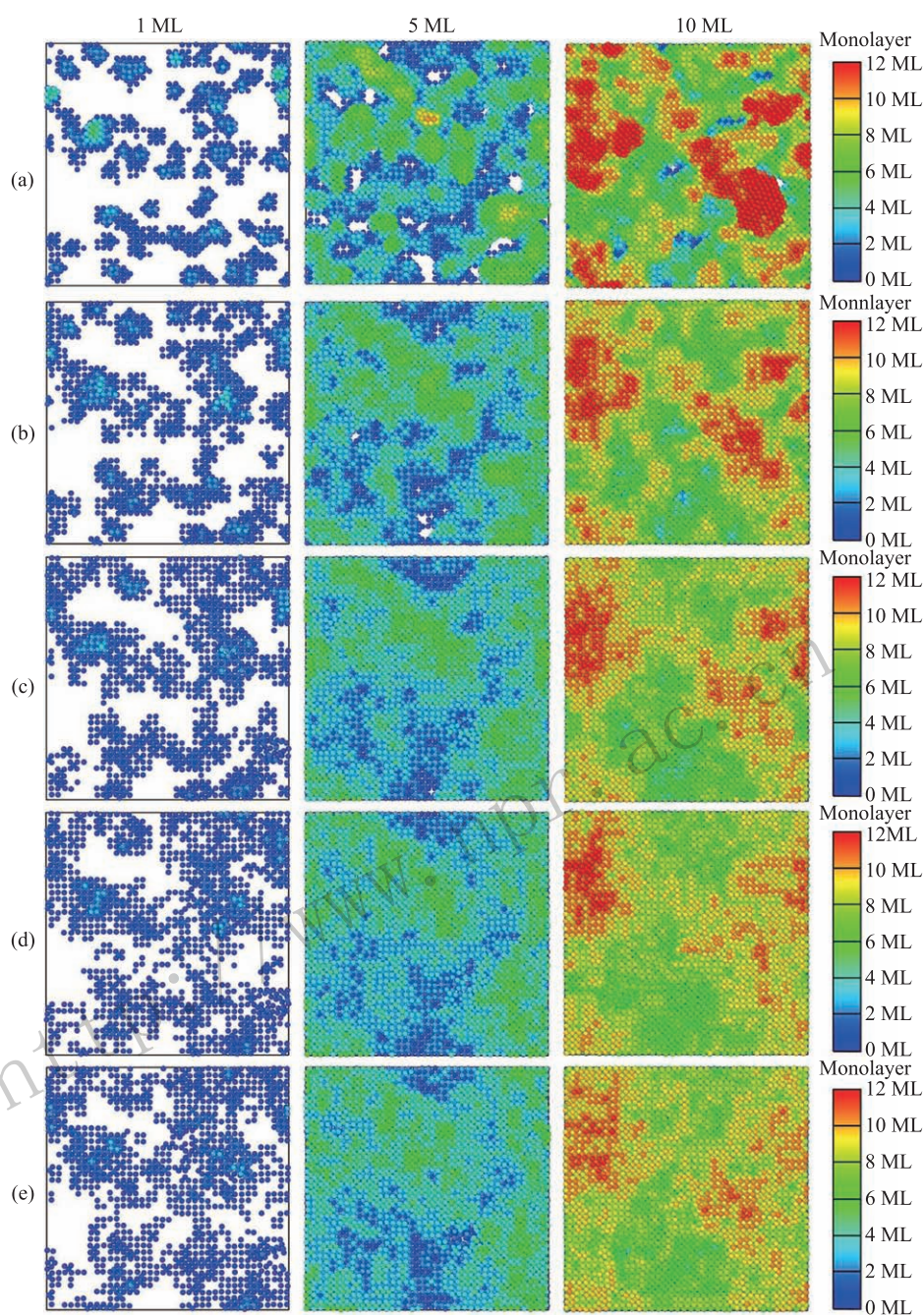


图 2 (在线彩图) 不同初始沉积能量: (a) 0.1 eV/atom, (b) 2.5 eV/atom, (c) 5.0 eV/atom, (d) 7.5 eV/atom 和 (e) 10.0 eV/atom, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300 K 的 Fe(001) 表面沉积 1, 5 和 10 ML 薄膜时, 衬底表面之上原子的高度分布图

度梯度差异较小的平坦薄膜。因此, 当团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, Cu_{13} 团簇在温度为 300 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜以岛状生长模式为主, 当团簇初始沉积能量为 7.5 和 10.0 eV/atom 时, Cu_{13} 团簇在温度为 300 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜以层状生长模式为主, 当团簇初始沉积能量为 2.5 和 5.0 eV/atom 时, 衬底表面之上原子结构由岛状结构向层状结构过渡, 此时 Cu_{13} 团簇在温度为 300 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜

以层岛混合生长模式为主。

随着衬底温度的增加, 使得表面原子扩散能力增强, 衬底表面之上原子形成的薄膜结构在不同温度下有一定差异, 尤其在团簇初始沉积能量较低时差异明显, 如图 3 所示。但温度的变化不足以改变不同团簇初始沉积能量下团簇沉积薄膜的生长模式, 因此, Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的生长模式主要由团簇初始沉积能量决定。

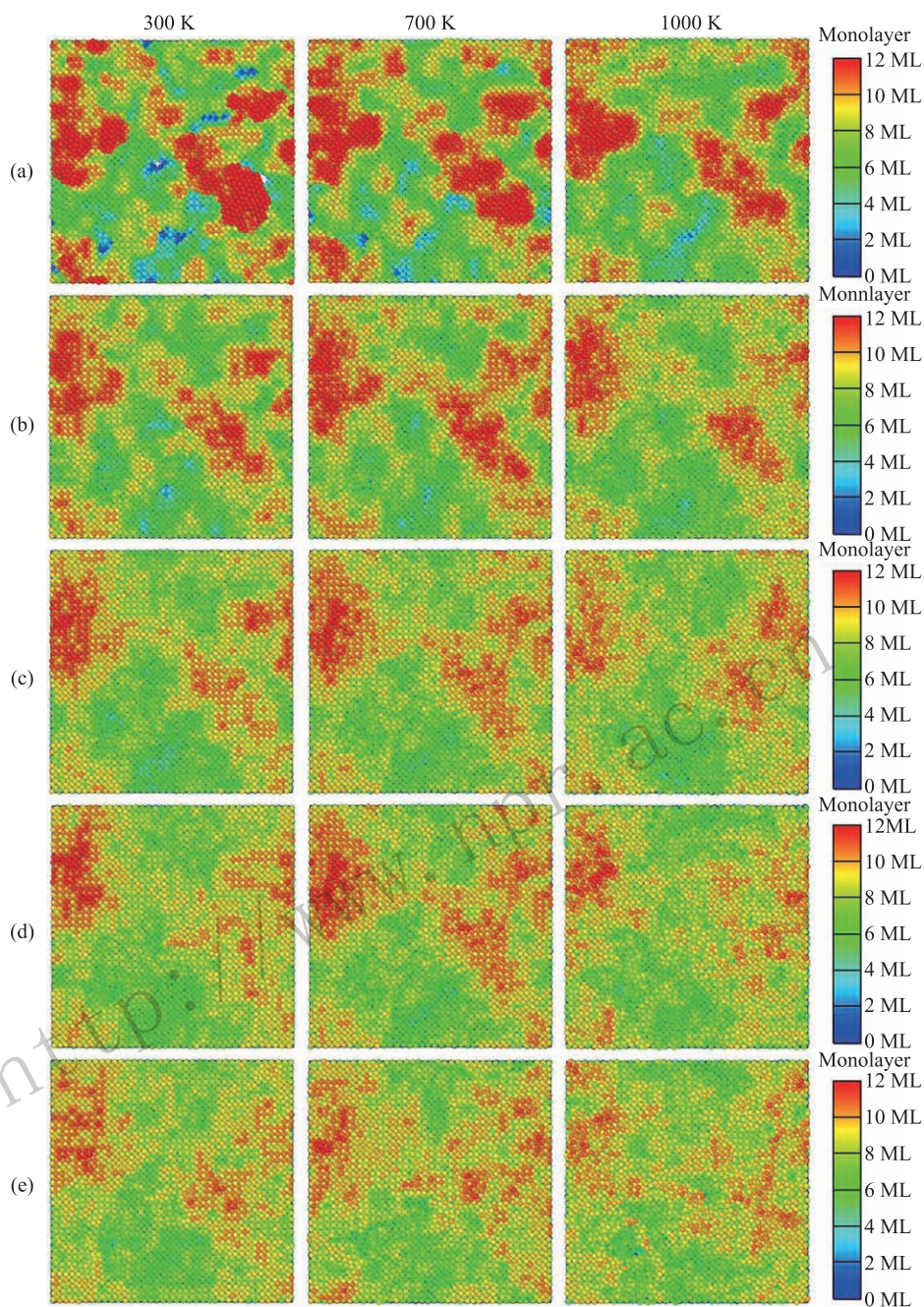


图 3 (在线彩图) 不同初始沉积能量: (a) 0.1 eV/atom, (b) 2.5 eV/atom, (c) 5.0 eV/atom, (d) 7.5 eV/atom 和 (e) 10.0 eV/atom, Cu₁₃ 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积 10 ML 薄膜时, 衬底表面之上原子的高度分布图

3.2 表面粗糙度

本文采用RMS^[19]来表征Cu₁₃团簇沉积薄膜的表面粗糙度, 其表达式为

$$R_q = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Z_i - \bar{Z})^2}{N}}, \quad (1)$$

式(1)中 N 为原子数, Z_i 为原子 i 的高度值, \bar{Z} 为表面

原子平均高度值。RMS 值越小表示沉积薄膜的表面越光滑。图 4 为模拟结束时, Cu₁₃ 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜的表面粗糙度随团簇初始沉积能量变化曲线。在团簇的初始沉积能量范围为 0.1 ~ 5.0 eV/atom 时, Cu₁₃ 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的表面粗糙度随团簇初始沉积能量的增加迅速减小; 当团簇初始沉积能量大于 5.0 eV/atom 时, 沉积薄膜的表面粗糙度随团簇初始沉积能量的增加而缓

慢减小。随着团簇初始沉积能量的增加, 薄膜生长模式由岛状生长逐渐向层状生长演变, 沉积薄膜内孔洞逐渐消失, 薄膜表面上的原子高度差异逐渐减小; 因此在相对较高的团簇初始沉积能量时形成的薄膜表面更加光滑。当团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 薄膜表面粗糙度随衬底温度的升高而显著减小, 当团簇沉积能量达到 2.5 eV/atom 后, 薄膜表面粗糙度随衬底温度的升高而增大, 如图 4 所示。在团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 薄膜以岛状生长为主, 衬底温度的增加有助于表面原子热扩散, 因此, 在团簇初始沉积能量较低时, 衬底温度对薄膜表面粗糙度有较大影响。当团簇初始沉积能量达到 2.5 eV/atom 时, 团簇开始对衬底表面结构产生破坏, 由于衬底温度的升高, 衬底原子间结合能下降, 相同团簇初始沉积能量时, 对温度较高的衬底破坏更加严重, 使得温度较高的衬底上沉积薄膜的表面粗糙度更大, 但温度对薄膜表面粗糙度的影响没有在团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时那么显著, 如图 4 所示。因此衬底温度对薄膜表面粗糙度的影响趋势在不同团簇初始沉积能量时表现不同。

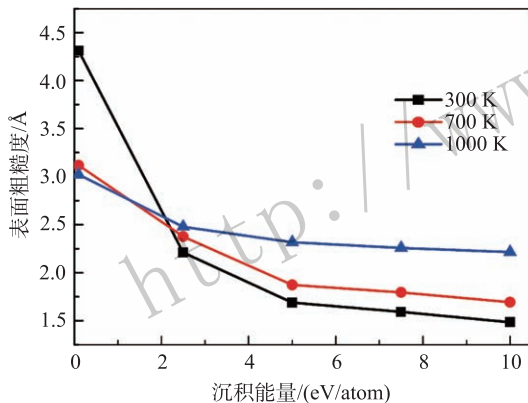


图 4 (在线彩图) 模拟结束时, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜的表面粗糙度随团簇初始沉积能量变化曲线

3.3 缺陷分布

薄膜内缺陷的存在对薄膜性质有着重要影响, 本文采用魏格纳-塞兹 (Wigner-seitz)^[35] 原胞对沉积薄膜内缺陷数目进行统计, 其中统计的缺陷类型为空位缺陷和间隙原子。图 5 为模拟结束时, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜内缺陷数目随团簇初始沉积能量变化曲线。当团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 衬底温度为 700 和 1000 K 时与衬底温度为 300 K 时相比, 沉积薄膜内缺陷数目明显减少, 这是由于在团簇初始沉积能量低时, 薄膜以岛状生长模式为主, 此时薄膜内存在大量的孔洞, 导致薄膜内

缺陷较多, 增加衬底温度可促进表面原子热扩散, 使薄膜内缺陷数目减少。随着团簇初始沉积能量的增加, 沉积薄膜内孔洞逐渐减小, 薄膜内缺陷数目随团簇初始沉积能量的增加明显减少。但随着团簇初始沉积能量的增加, 团簇对衬底表面的破坏程度增大, 使得团簇初始沉积能量达到一定值后, 沉积薄膜内缺陷数目开始增加, 而且随着温度的增加, 团簇对衬底的破坏能力增强, 这种变化趋势随衬底温度的增加而表现得更加明显。因此, 随着衬底温度的升高薄膜内缺陷数目最小时所对应的团簇初始沉积能量减小, 如图 5 所示。

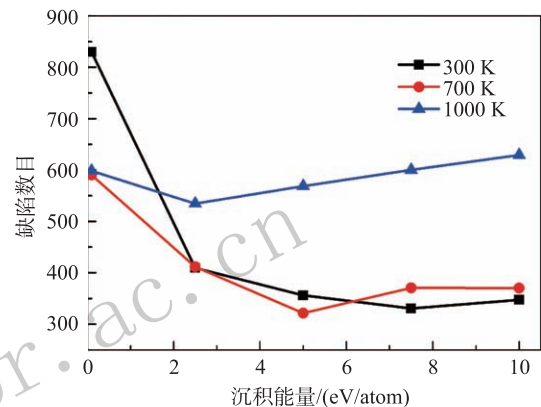


图 5 (在线彩图) 模拟结束时, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜内缺陷数目随团簇初始沉积能量变化曲线

3.4 外延度

外延度是描述沉积薄膜结构与衬底结构的相似程度的参数, 本文采用薄膜的结构常数^[35]来表征 Cu_{13} 团簇在 Fe(001) 表面沉积薄膜的整体外延度, 结构常数越大, 表明沉积薄膜结构与衬底结构越接近。图 6 模拟结束时, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜的外延度随团簇初始沉积能量变化曲线。当团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 团簇初始沉积能量不足以破坏团簇初始结构, 只有靠近衬底表面的团簇原子实现部分重构, 团簇上半部原子仍保持团簇的初始结构, 使得此时团簇沉积薄膜的结构常数较小。当衬底温度升高, 加剧原子热运动, 即使在团簇初始沉积能量为 0.1 eV/atom 时, 也能实现较大程度的团簇原子重构, 且温度越高团簇原子的重构程度越大, 使得在温度较高时, 沉积薄膜也具有较好的外延程度^[23], 如图 6 所示。随着团簇初始沉积能量的增加, 团簇原子具有足够的能量实现团簇整体重构, 因此当团簇初始沉积能量增加到 2.5 eV/atom 时, 沉积薄膜已具有较好的外延度, 且随着团簇初始沉积能量的继续增加, 沉积薄膜的外延度没有较大的变化, 并且当团簇初始沉

积能量较高时, 沉积薄膜均可具有较高的外延度。但温度的增加会加剧原子热运动, 使原子间相对位置波动较大, 导致沉积薄膜的外延程度随衬底温度的增加而降低。因此, 当团簇初始沉积能量区间为 2.5~10.0 eV 时, 团簇沉积能量足以使团簇在衬底表面发生完全重构, 在此沉积能量范围内沉积的薄膜外延度会随衬底温度的增加而减小, 如图 6 所示。

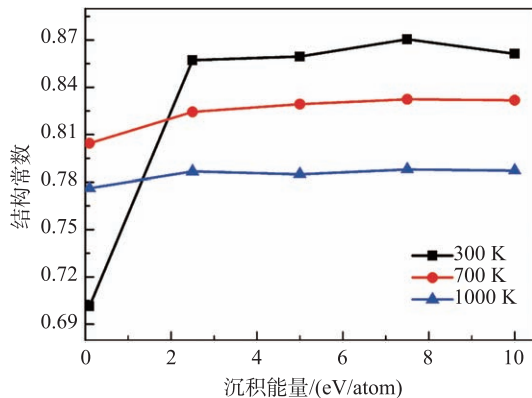


图 6 (在线彩图) 模拟结束时, Cu_{13} 团簇在衬底温度为 300, 700, 1000 K 的 Fe(001) 表面沉积薄膜的外延度随团簇初始沉积能量变化曲线

4 总结

本文利用分子动力学模拟方法对初始沉积能量范围为 0.1~10.0 eV/atom 的 Cu_{13} 团簇分别在衬底温度为 300, 700 和 1000 K 的 Fe(001) 表面上沉积薄膜进行了研究。分析了不同沉积条件对薄膜生长模式的影响, 对比分析了不同沉积条件下沉积薄膜的表面粗糙度、缺陷分布和外延度等薄膜性质差异。模拟结果表明, 团簇初始沉积能量和衬底温度对薄膜生长过程均有一定影响, 但团簇初始沉积能量是影响薄膜生长模式的主要因素。在团簇初始沉积能量较低时, 薄膜以岛状生长模式为主; 随着团簇初始沉积能量的增加, 薄膜主要生长模式由岛状生长逐渐演变成层岛混合生长; 当团簇初始沉积能量达到一定能量值后, 薄膜开始以层状生长模式为主。由于薄膜生长模式的差异, 导致不同薄膜生长模式下, 薄膜的性质有较大差异。当薄膜以岛状生长模式为主时, 薄膜表面粗糙, 存在较多孔洞, 且外延程度较低; 而当薄膜以层状生长模式为主时, 薄膜内孔洞基本消失, 表面比较光滑, 且具有较高的外延度。综合考虑不同沉积条件下薄膜性质, 可知, 当初始沉积能量为 7.5 eV/atom 的 Cu_{13} 团簇沉积到温度为 300 K 的 Fe(001) 表面时, 可形成表面光滑、内部缺陷少和较好外延度的高质量 Cu 薄膜。

参考文献:

- [1] ROBBENOLT S, QUINTANA A, PELLICER E, *et al.* *Nanoscale*, 2018, **10**(30): 14570.
- [2] MODAK R, SRINIVASU V V, SRINIVASAN A. *Magnetism and Magnetic Materials*, 2018, **464**: 50.
- [3] KREUZPAINTNER W, WIEDEMANN B, STAHN J, *et al.* *Physical Review Applied*, 2017, **7**(5): 054004.
- [4] ZHOU L, MA L, LIU T, *et al.* *Superconductivity and Novel Magnetism*, 2016, **29**(5): 1325.
- [5] TOPKAYA R. *Superconductivity and Novel Magnetism*, 2016, **30**(5): 1275.
- [6] MORADIAN R, GHADERI A, ELAHI S M. *Materials Science: Materials in Electronics*, 2016, **27**(8): 7987.
- [7] DESAUTELS R D, SHUEH C, LIN K W, *et al.* *Applied Physics Letters*, 2016, **108**(17): 172410.
- [8] TÄLU S, STACH S, SOLAYMANI S, *et al.* *Electroanalytical Chemistry*, 2015, **749**: 31.
- [9] STACH S, GARCZYK Z, TALU S, *et al.* *Physical Chemistry C*, 2015, **119**(31): 17887.
- [10] GAO F, PENG X, HUANG C, *et al.* *AIP Advances*, 2018, **8**(4): 045208.
- [11] ZHANG X, HICKEL T, ROGAL J, *et al.* *Physical Review Letters*, 2017, **118**(23): 236101.
- [12] Allen M P, Tildesley D J. *Computer Simulation of Liquids[M]*. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [13] MULLER K H. *Applied Physics*, 1987, **61**(7): 2516.
- [14] HWANG C C, CHANG J G, HUANG G J, *et al.* *Applied Physics*, 2002, **92**(10): 5904.
- [15] ZAMINPAYMA E, NAYEBI P, MIRABBASZADEH K. *Cluster Science*, 2008, **19**(4): 623.
- [16] CHEN C K, CHANG S C, CHEN C L. *Applied Physics*, 2017, **107**(12): 124309.
- [17] HONG Z H, FANG T H, LIN S J, *et al.* *Computational Materials Science*, 2010, **49** (4): 850.
- [18] HONG Z H, HWANG S F, FANG T H. *Surface Science*, 2011, **605**(s1-2): 46.
- [19] HWANG S F, LI Y H, HONG Z H. *Computational Materials Science*, 2012, **56**: 85.
- [20] CHENG Y T, LIANG T, NIE X W, *et al.* *Surface Science*, 2014, **621**: 109.
- [21] ZHU G, SUN J, ZHANG L, *et al.* *Crystal Growth*, 2018, **492**: 60.
- [22] CHEN X Z, ZHANG S X, LI G P. *Atomic and Molecular Physics*, 2017, **34**(5): 865. (in Chinese)
(陈炫芝, 张世旭, 李公平. *原子与分子物理学报*, 2017, **34**(5): 865.)
- [23] ZHANG S X, GONG H F, CHEN X Z, *et al.* *Applied Surface Science*, 2014, **314**: 433.
- [24] ZHANG S X, GONG H F, GAO N, *et al.* *Computational Materials Science*, 2014, **85**: 230.
- [25] ZHANG S X, LI G P, GONG H F, *et al.* 2015, **97**(1): 165.
- [26] NOSE S. *Chemical Physics*, 1984, **81**(1): 511.
- [27] ZHANG M L, LI G P. *Solid State Phenomena*, 2007, **121**-

- 123: 607.
- [28] ACKLAND G J, BACON D J, CALDER A F, *et al.* *Philosophical Magazine A*, 1997, **75**(3): 713.
- [29] SWOPE W C, ANDERSEN H C, BERENS P H, *et al.* *Chemical Physics*, 1982, **76**: 637.
- [30] ANDERSEN H C. *J Comput Phys*, 1983, **52**: 24.
- [31] HAILE J M, JOHNSTON I, MALLINCKRODT A J, *et al.* *Computers in Physics*, 1993, **7**: 625.
- [32] VOLMER M, WEBER A. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 1925, **119**: 277.
- [33] FRANK F C, VAN D M J H. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1949, **198**(1053): 205.
- [34] PIMPINELLI A, VILLAIN J. *Materials Research Bulletin*, 1998, **1**(3): 400.
- [35] ZHANG Shixu. Molecular Dynamics Simulation of Cu Clusters Deposition on a Fe(001) Surface[D]. Lanzhou: Lanzhou University, 2014. (in Chinese)
(张世旭. Cu团簇沉积到Fe(001)表面的分子动力学模拟[D]. 兰州: 兰州大学, 2014.)

Molecular Dynamics Simulation Study on the Film Formation by Low Energy Cu₁₃ Clusters Deposition

ZHANG Shixu^{1,2}, LIU Huiwei¹, HE Yiwen¹, ZHANG Meiling¹, LI Gongping^{1,2,†}

(1. School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China;

2. Key Laboratory of Design of Special Function Materials and Structures Ministry of Education, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The formation of Cu film on Fe (001) surface by depositing Cu₁₃ clusters was investigated via the molecular dynamics simulation. The incident energy range of Cu₁₃ clusters was from 0.1 to 10.0 eV/atom, and the deposition rate was 1 clusters/ps. The temperature of substrate was 300, 700 and 1 000 K, respectively. The effects of incident energy of cluster and substrate temperature on the growth mode, surface roughness, defects distribution and epitaxy degree of film were studied. The simulation results show that the incident energy of Cu₁₃ clusters plays a dominant role in the growth mode of film. In addition, when the incident energy of Cu₁₃ clusters is 7.5 eV/atom and the substrate temperature is 300 K, the Cu film formed on Fe(001) surface is smoother, few defects and better epitaxy degree.

Key words: molecular dynamics simulation; film formation deposited by clusters deposition; Cu₁₃ cluster; Fe(001) surface

Received date: 15 Sep. 2018; **Revised date:** 24 Jan. 2019

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (11604129); Fundamental Research Funds for Central Universities (lzujbky-2015-67, lzujbky-2019-56)

† **Corresponding author:** LI Gongping, E-mail: ligp@lzu.edu.cn.