

# 低能入射 Si 与 Si(001)2×1 重构表面相互作用过程的分子动力学模拟\*

朱林山<sup>1</sup> 金石声<sup>1</sup> 苟富均<sup>1,2</sup> 谢 泉<sup>1,†</sup>

(1 贵州大学电子科学与信息技术学院, 贵阳 550025)

(2 荷兰莱顿大学化学研究所, 2300 莱顿皇家学会, 荷兰)

**摘要:** 利用 Tersoff 势函数, 对 300K 时初始入射动能为 0.03eV 的单个 Si 原子从 6 个不同位置轰击 Si(001)2×1 重构表面的动力学过程进行了模拟. 分析了入射 Si 原子的动能变化、势能变化以及其运动轨迹. 结果表明: 入射原子与表面原子相互作用几个皮秒后即可进入稳定位置, 其与基底原子的结合能最大可以达到 2.99eV; 从位置 1, 2, 3, 4 入射的原子不能使基底表面的二聚体键断开, 而从位置 5 和位置 6 入射时, 表面二聚体键的断开在入射原子与基底表面原子发生相互作用几十飞秒后即可完成.

**关键词:** 分子动力学; 二聚体; Tersoff 势函数; 势能

**PACC:** 6120J; 6820

**中图分类号:** TN304.1<sup>+</sup>2

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2007)11-1748-08

## 1 引言

薄膜技术在半导体元器件的制备过程中起着重要的作用, 而薄膜生长过程直接影响到薄膜的结构以及它最终的性能. 近些年来, 虽然 MBE 方法和 CVD 方法在制作高质量的薄膜器件上取得了很好的效果, 但仍然有很多薄膜生长过程中的细节问题没有解决. Si 是制作半导体器件运用最重要最广泛的材料, 所以从微观角度分析 Si 在 Si(001) 基底表面上的运动过程及成键机理, 对制作高质量薄膜器件具有重要的意义.

入射原子与基底表面相互作用过程极其短暂(皮秒级), 用传统的物理实验手段难以监控反应发生过程中的细节现象, 也就难以深入了解薄膜生长的微观过程和机理. 随着计算机计算性能的大幅提高以及并行计算的应用, 大规模的计算机模拟成为可能, 并且得到了迅速发展. 分子动力学(MD)方法通过求解牛顿运动方程, 可以精确地给出粒子运动的速度和运动轨迹, 是研究微观系统动态过程的一种有效方法.

国内外一些学者对 Si(001) 表面进行了研究. Roland 等人<sup>[1,2]</sup> 指出吸附原子在 Si(001) 表面沿着二聚体方向的扩散速度远大于垂直于二聚体方向的扩散速度, 并且指出吸附原子的结合能可以达到

3eV. Terakure 等人<sup>[3]</sup> 对吸附原子在 Si(001)2×1 表面可能形成的较为稳定的结构进行了模拟计算, 指出最稳定的位置位于沟槽处两个二聚体之间的位置. Garrison 等人<sup>[4]</sup> 的研究发现初始动能为 5~10eV 的 Si 粒子可以使得表面的二聚体键断裂. Zhang 等人<sup>[5]</sup> 的研究说明表面二聚体键的断开在薄膜沉积的最开始阶段就可以完成, 单个入射 Si 原子打断二聚体键的可能性较小, 而两个吸附原子构成二聚体的过程可以使表面的二聚体键断裂. 郑正明等人<sup>[6]</sup> 的研究表明 1eV 的入射 Si 原子对表面的原子行为影响不大, 而 10 和 100eV 的入射原子则一方面增强了表面原子形成二聚体的能力, 另一方面使表面原子排列更加无序. 虽然很多研究表明了吸附原子的稳定位置及其扩散方向的不对称性<sup>[1~3,7~10]</sup>, 但对原子从开始与基底发生作用到其进入稳定位置的过程的细节描述还未见报道.

大多数研究选用的是紧束缚势<sup>[7~9]</sup> 和 Stillinger-Weber(SW) 势<sup>[1,2,5,6]</sup>, 紧束缚势主要应用于体心立方金属和过渡金属; SW 势虽然是考虑了多体力的团簇势, 但一般只用来描述稳定的正四面体结构. 本文采用的 Tersoff 势函数也是一种团簇势, 与 SW 势相比, Tersoff 势不仅能正确描述 SP<sup>3</sup> 成键类型的金刚石体系, 而且对低于或高于 4 配位的结构也能给出正确的描述, 更加适合表面的研究. 同时为了不损坏到基底<sup>[10]</sup>, 我们选择对初始动能为

\* 国家自然科学基金(批准号:60566001)和贵州省优秀青年科技人才培养计划(批准号:黔科合人 20050528)资助项目

† 通信作者. Email: quanxiegz@gzu.edu.cn

2007-04-16 收到, 2007-07-05 定稿

0.03eV 的入射 Si 原子与 Si(001)2×1 重构表面相互作用的动力学过程进行模拟。

## 2 模型及实验方法

Si(001)表面存在重构现象,能量最小化方法计算证明非对称翘曲二聚体模型是最稳定的结构<sup>[11]</sup>,与未发生重构的理想表面相比表面原子发生偏移(nm): $\Delta x_1 = 0.046, \Delta x_2 = -0.108, \Delta z_1 = -0.008, \Delta z_2 = -0.053$ .形成非对称翘曲二聚体结构时,会产生较深的弛豫,一般为 4~5 原子层,翘曲的方向是从一个二聚体到相邻的二聚体这样交替变化,并且翘曲的角度一般说来并不相同.这样的模型在进行模拟时对表面原子的处理势必繁琐.有计算表明<sup>[12]</sup>对称二聚体结构与非对称二聚体结构之间的能量相差很小,故为简化计算,我们采用对称二聚体模型<sup>[11]</sup>(如图 1 所示): $\Delta x_1 = -\Delta x_2 = 0.075\text{nm}; \Delta z_1 = \Delta z_2 = -0.022\text{nm}$ .

选用的 Tersoff 势函数的一般形式是<sup>[13,14]</sup>:

$$f_{ij}(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R^{(1)} \\ \frac{1}{2} - \frac{9}{16} \sin\left(\pi \frac{r_{ij} - (R^{(2)} + R^{(1)})/2}{R^{(2)} - R^{(1)}}\right) - \frac{1}{16} \sin\left(3\pi \frac{r_{ij} - (R^{(2)} + R^{(1)})/2}{R^{(2)} - R^{(1)}}\right), & R^{(1)} < r_{ij} < R^{(2)} \\ 0, & r_{ij} > R^{(2)} \end{cases} \quad (8)$$

其中  $R^{(1)} = 0.27\text{nm}, R^{(2)} = 0.30\text{nm}$ .其他参数  $n = 0.78734, \delta = 0.63505, d = 0.16, h = -0.59826$ .

程序采用 Verlet 算法<sup>[16]</sup>求解牛顿方程组.在  $x$  ( $[1\bar{1}0]$ )方向与  $y$  ( $[110]$ )方向采用周期性边界条件,在  $z$  ( $[001]$ )方向则采用将基底底部数层原子固定的方法.用 Berendsen 方法<sup>[17]</sup>通过调节粒子速度来维持系统温度恒定:

$$V = \lambda V, \lambda = \left[1 + \frac{\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\right]^{1/2} \quad (9)$$

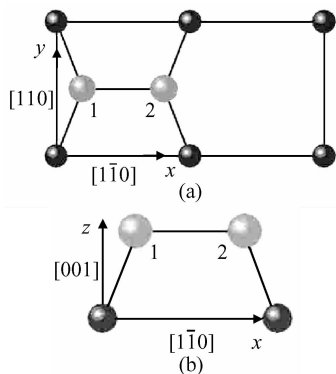


图 1 Si(001)表面对称二聚体模型

Fig. 1 Symmetric dimer model for Si(001) surface

$$U = \sum_i \sum_{j>i} \phi_{ij} \quad (1)$$

$$\phi_{ij} = V_R(r_{ij}) - b_{ij}V_A(r_{ij}) \quad (2)$$

其中  $\phi_{ij}$ 是原子  $i$  与原子  $j$  之间的势能函数,由排斥作用和吸引作用两部分组成:

$$V_R(r_{ij}) = f_{ij}(r_{ij})A \exp(-\lambda r_{ij}) \quad (3)$$

$$V_A(r_{ij}) = f_{ij}(r_{ij})B \exp(-\mu r_{ij}) \quad (4)$$

式中  $r_{ij}$ 是原子  $i$  与原子  $j$  之间的距离,在 Si-Si 系中,我们取  $A = 1830.8\text{eV}, B = 471.18\text{eV}, \lambda = 24.799\text{nm}^{-1}, \mu = 17.322\text{nm}^{-1}$ .

$b_{ij}$ 表示键合强度,是体现多体效应的重要因子,

$$b_{ij} = (1 + \xi_{ij}^n)^{-\delta} \quad (5)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq j} f_{ik}(r_{ik}) g_i(\theta_{ijk}) \quad (6)$$

$$g(\theta_{ijk}) = d(h - \cos\theta)^2 \quad (7)$$

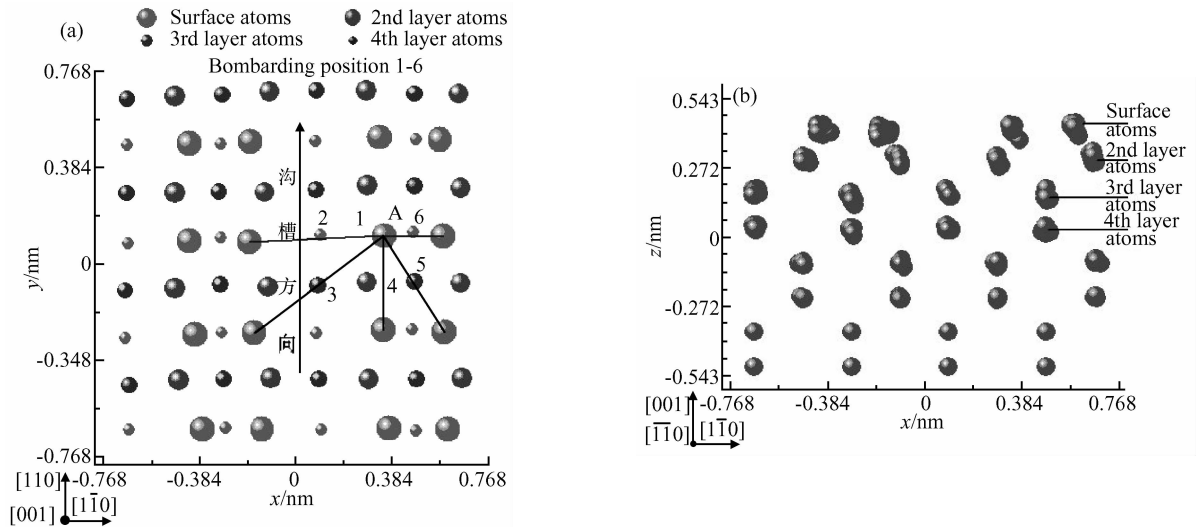
其中  $\xi_{ij}$ 是有效配位数, $\theta_{ijk}$ 是  $(i-j)$ 键与  $(i-k)$ 键之间的夹角.(3),(4)和(6)式中的  $f_{ij}(r_{ij})$ 是相互作用截断函数,为了平滑地表示其变化过程,可由下式表示<sup>[15]</sup>:

式中  $\Delta t$ 是时间步长; $\tau$ 是代表恒温程度的参数; $T_0$ 是系统设定温度; $T$ 是系统的瞬时温度.

模拟在 300K 下进行,选择的 Si 基底有 512 个原子,表面原子数 64 个,底部 2 层原子保持固定; $\tau$ 取值  $0.01\text{ps}$ <sup>[17]</sup>,时间步长为  $2 \times 10^{-4}\text{ps}$ .基底原子的初始位置由 0K 时 Si 原子的金刚石结构晶体构型给出,并在 300K 条件下弛豫 100ps.为了清楚地了解入射 Si 原子与 Si 基底表面间的动力学过程及能量转化,我们选取了 6 个入射位置(如图 2 所示).入射位置 1 在选取的基点原子 A 的正上方,位置 2,3,4,5 和 6 分别为基点原子 A 与表面不同方向上近邻原子连线的中点,入射 Si 原子初始位置均在基底表面上方约 1nm 处.每个位置的模拟时间均为 20ps.整个模拟过程中系统总能量的偏移  $\Delta E < \pm 0.2\%$ .在结果分析中我们认为如果两个 Si 原子之间的距离大于 0.30nm,它们之间就没有相互作用.

## 3 计算结果与分析

图 3,图 4,图 5,图 6,图 7 和图 8 分别对应的是入射 Si 原子从位置 1,位置 2,位置 3,位置 4,位置 5 和位置 6 入射时的动能、势能变化以及其运动轨迹.

图 2 Si(001)  $2 \times 1$  基底结构 (a) 俯视图; (b) 侧面图Fig. 2 Structure of the Si(001)  $2 \times 1$  substrate (a) Top view; (b) Side view

从图 3(c), (d) 得到: 位置 1 入射 Si 原子的平衡位置位于沟槽处两个二聚体之间, 第二层原子正上方的位置. 20ps 时它与表面最近邻两个原子间的距离分别为 0.240 和 0.243nm. 图 3(a) 是入射 Si 原子的动能随模拟时间的变化关系, 为了清楚地分析入射原子与表面开始作用的情形, 我们放大了开始阶段的变化图, 将整个区间的变化图放在插图里(对其他位置入射的情形也这样处理); 图 3(b) 是入射 Si 原子势能随时间的变化曲线. 从曲线上可以看到在 1.73ps 时, 入射 Si 原子开始与表面原子发生相互作用, 势能开始降低. 对照图 3(a), 我们看到入射 Si 原子的动能此时开始增加, 这表明系统的一部份势能开始转化为入射原子的动能. 得到加速的入射 Si 原子在 1.75ps 时动能达到最大值 1.39eV, 远大于初始动能 0.03eV. 在 1.73~2.5ps 阶段, 入射 Si 原子与基底原子之间的相互作用很不稳定, 入射原子在空间位置的波动较大(运动轨迹如图 3(c), (d) 中曲线 1 所示), 说明在基点原子 A 的正上方附近, 不是一个原子的稳定位置. 在 2.0~5ps 时势能平均约为 -1.22eV. 在约 5ps 后势能曲线突变至约 -2.01eV, 对照动能曲线图 3(a), 知在 5ps 附近动能出现了一个峰值为 0.66eV, 这个值得使得入射 Si 原子可以跨过此处的势垒从而进入一个更为稳定的位置(运动轨迹如图 3(c), (d) 中曲线 2 所示), 还可看到在 11.5ps 时动能有一个峰值约为 0.60eV, 但此时却并没有引起势能的较大变化, 可知在平衡位置的势垒高度大于 0.60eV. 入射 Si 原子平衡位置在 z 方向与表面的距离约为 0.151nm, 与一个原子层高度 0.136nm 接近. 结合以上分析, 入射 Si 原子在 20ps 与最近邻两原子分别形成 Si-Si 键.

对于从其他 5 个位置入射的情形可作类似分析, 6 个不同位置入射的 Si 原子与基底原子相互作用的主要结果列于表 1 中.

从位置 2, 5, 6 入射的 Si 原子与基底原子发生相互作用大约 0.5ps(1.7~2.2ps) 后就基本达到了各自的平衡状态, 其稳定后的平衡位置在生长下一层原子所要占据的位置附近; 位置 1 的入射原子则先达到了一亚稳定状态, 在与基底原子相互作用大约 3.4ps(1.7~5.1ps) 后达到了平衡状态; 位置 3, 4 入射的原子则经过了两个亚稳定状态, 分别与基底原子相互作用 6.5ps(1.7~8.2ps) 和 3.1ps(1.7~4.8ps) 后才达到其平衡状态.

位置 3 入射的 Si 原子的平衡位置距表面的距离约为 0.068nm, 远小于一个原子层高度. 这主要是由于入射的位置恰好在沟槽中四个表面原子围成区域的中心, 距离四个表面原子的距离相对都较远, 在入射时受到表面原子的排斥作用小, 从而可以更加接近基底表面, 这同时也使得入射 Si 原子与基底第二层原子的相互作用加强, 在其与基底原子形成的 3 个 Si-Si 键中便有一个是与第二层原子(图 5(c) 中的原子 B) 结合得到的.

位置 4 入射的 Si 原子途径沟槽上方绕过了表面原子 A, 运动到了与入射位置环境相同的相邻位置上, 这主要可能是表面原子 A 在 z 方向坐标值较大, 使得入射原子首先受到了它的吸引作用. 入射 Si 原子的运动过程中势能出现了一个极小值 -3.30eV, 这是由于入射原子基本进入了基底表面, 与其发生作用的基底原子增多; 同时, 由于与基底原子的距离过小而受到强的排斥作用, 使得入射原子很快就离开基底表面, 回到了势能为 -2.65eV 附近振荡.

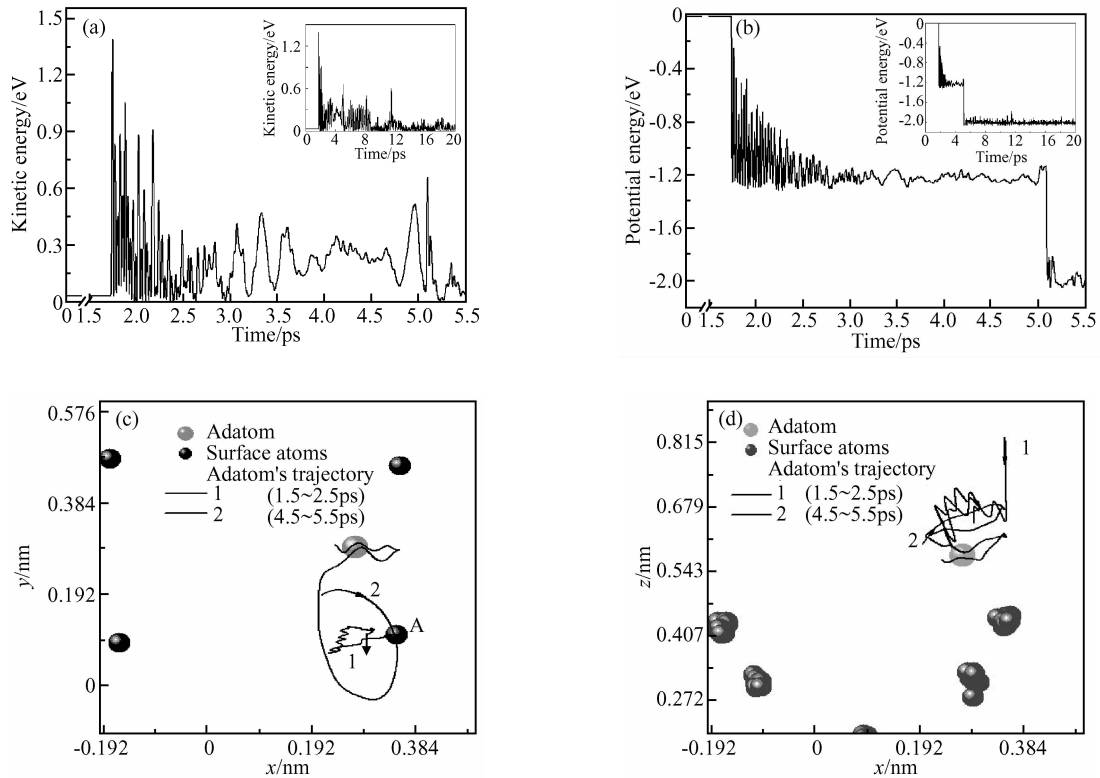


图 3 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 1 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在 x-y 平面的运动轨迹(c) 及在 x-z 平面的运动轨迹(d)

Fig. 3 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the x-y plane (c) and on the x-z plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 1 at 300K

表 1 6 个不同初始位置入射的 Si 原子与基底原子相互作用的主要结果

Table 1 Main results of the incident Si atom interacting with the substrate atoms from 6 different bombarding sites

初始入射位置	动能达到的最大值 /eV	达到平衡时与基底作用的时间 /ps	平衡时与基底原子的接合能/eV	平衡时与基底原子形成的 Si—Si 键数	平衡位置距基底表面的距离 /nm	能否断开基底二聚体键
位置 1	1.39	3.4	2.01	2	0.151	不能
位置 2	1.24	0.5	1.27	1	0.228	不能
位置 3	0.83	6.5	2.51	3	0.068	不能
位置 4	0.94	3.1	2.00	2	0.150	不能
位置 5	1.64	0.5	2.99	3	0.114	能
位置 6	1.30	0.5	2.43	2	0.130	能

位置 5 入射的 Si 原子虽然不是直接射向二聚体的中间, 但可以看到其在向二聚体处运动时动能达到了最大值 1.64eV, 并且由于其在 y 方向的动能较大, 在其越过二聚体上方时, 不仅使得二聚体键断开, 从而与分开的两个二聚体原子形成了 2 个 Si—Si 键, 而且还与相邻的一个二聚体的一个悬键形成了 1 个 Si—Si 键。

对于入射原子的动能, 我们发现从不同位置入射的 Si 原子与基底原子发生碰撞时, 动能的最大值为 1.64eV, 最小值也达到了 0.83eV, 均远大于初始入射动能 0.03eV. 这主要是由于入射 Si 原子向基

底运动的过程中, 当距基底原子较近时会受到基底原子势场的吸引作用而加速运动, 此时部分势能转化为动能, 动能增加, 也即对应图中入射原子的动能会在与基底表面相互作用的开始阶段必然首先增加, 达到一个极大值. 在入射原子运动到距基底足够近的时候则会受到基底原子势场的排斥作用从而减速运动, 动能减小, 如此反复在势场中运动, 这导致了图中相互作用发生的开始阶段入射 Si 原子动能出现了数次较大的波动. 在与基底原子发生多次碰撞后, 入射原子的动能传递给了基底原子, 自身动能逐渐减小. 当入射原子的动能难以越过向其他位置

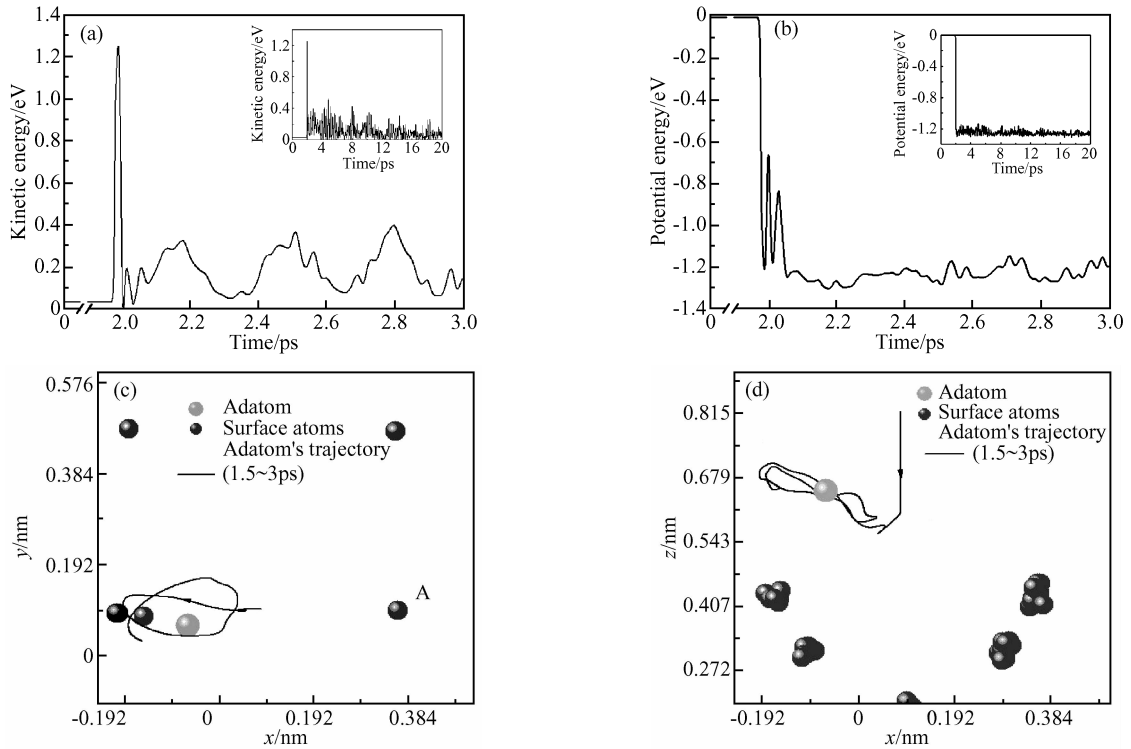


图 4 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 2 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在  $x-y$  平面的运动轨迹(c) 及在  $x-z$  平面的运动轨迹(d)

Fig. 4 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the  $x-y$  plane (c) and on the  $x-z$  plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 2 at 300K

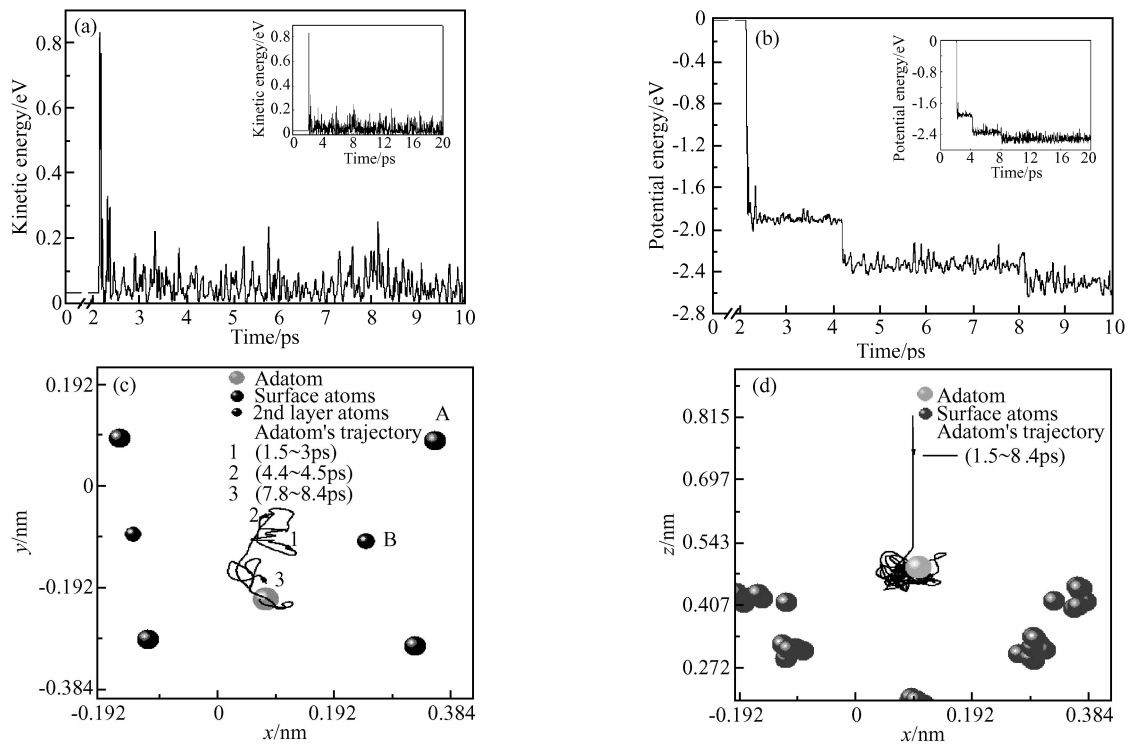


图 5 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 3 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在  $x-y$  平面的运动轨迹(c) 及在  $x-z$  平面的运动轨迹(d)

Fig. 5 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the  $x-y$  plane (c) and on the  $x-z$  plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 3 at 300K

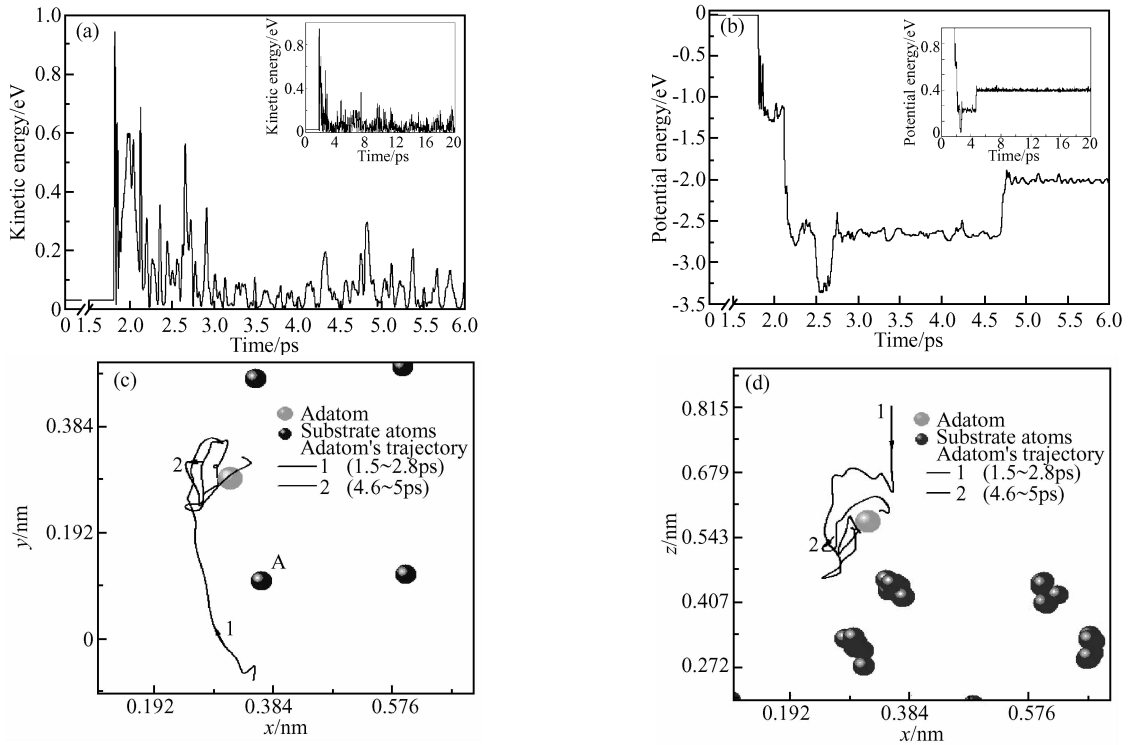


图 6 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 4 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在  $x-y$  平面的运动轨迹(c) 及在  $x-z$  平面的运动轨迹(d)

Fig. 6 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the  $x-y$  plane (c) and on the  $x-z$  plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 4 at 300K

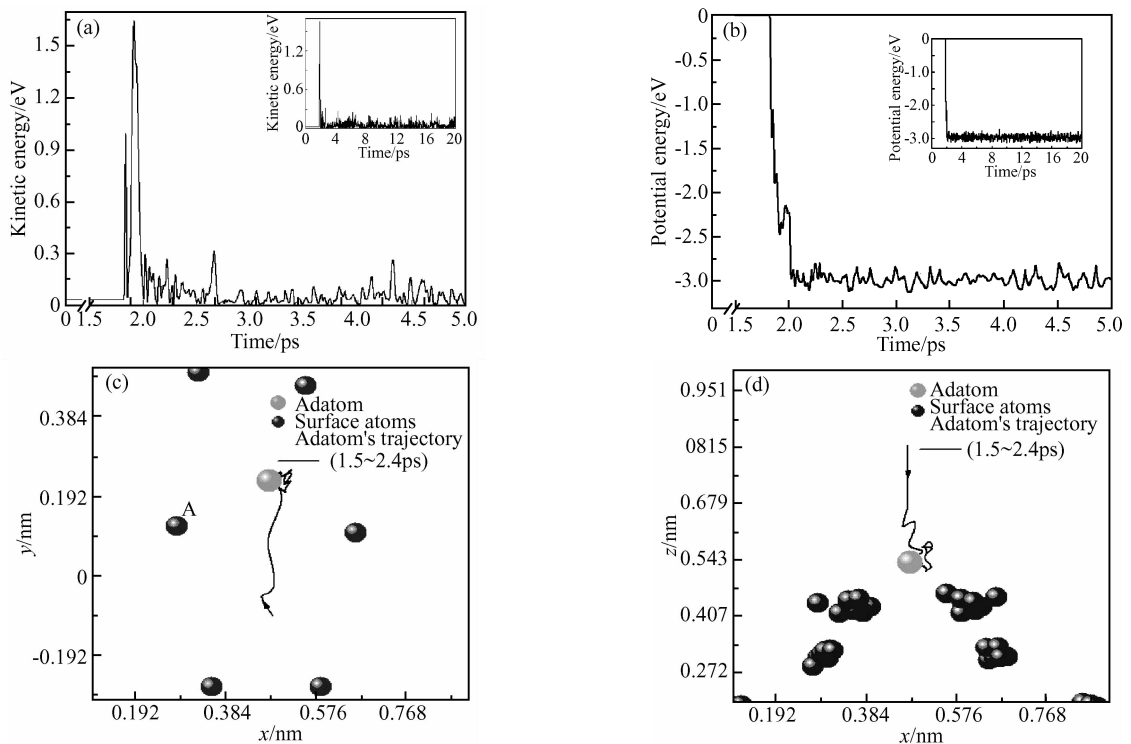


图 7 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 5 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在  $x-y$  平面的运动轨迹(c) 及在  $x-z$  平面的运动轨迹(d)

Fig. 7 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the  $x-y$  plane (c) and on the  $x-z$  plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 5 at 300K

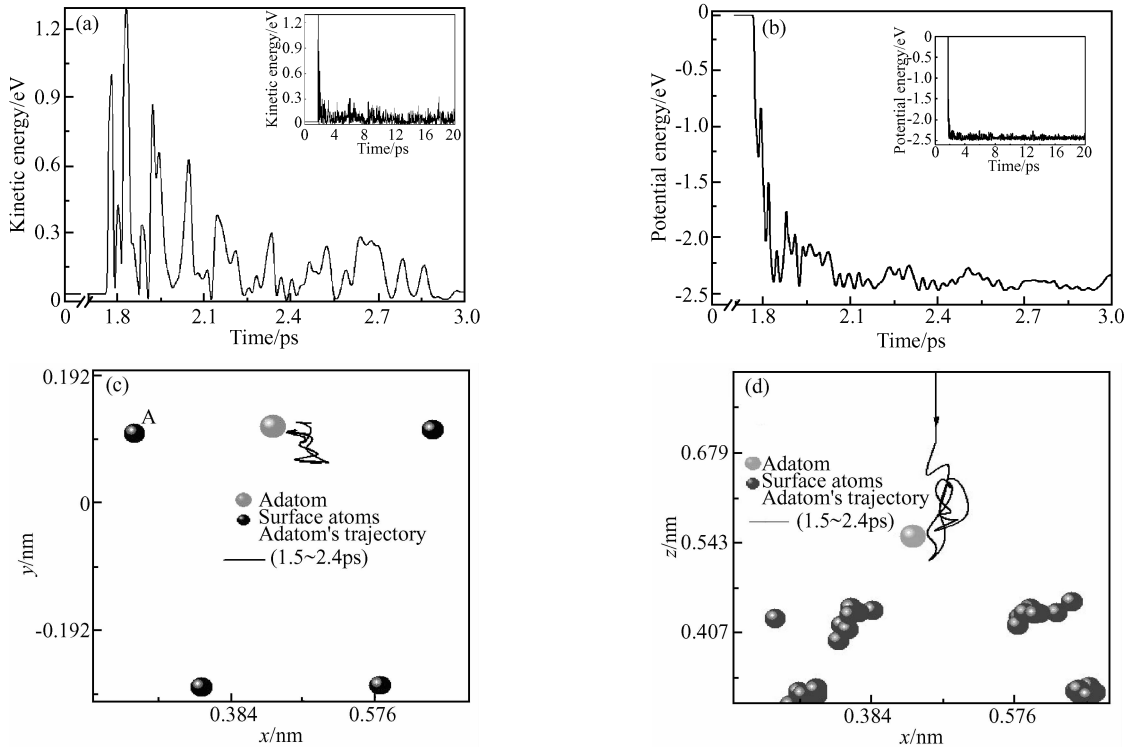


图 8 300K, 初始动能为 0.03eV Si 原子从位置 6 入射时的动能变化(a), 势能变化(b), 在  $x-y$  平面的运动轨迹(c) 及在  $x-z$  平面的运动轨迹(d)

Fig. 8 Evolution of the kinetic energy (a), potential energy (b), trajectory on the  $x-y$  plane (c) and on the  $x-z$  plane (d) for the incident Si atom with the initial kinetic energy of 0.03eV from position 6 at 300K

运动的势垒时, 入射原子即达到了平衡位置. 在常温条件下, 低能入射原子与基底原子在经历了短暂的激烈作用后(最多为几个 ps), 所具有的动能一般不再具备越过势垒的能量(此时的动能与初始入射动能没有关系, 只与系统温度有关), 其将在平衡位置附近做小幅振动, 平衡时入射 Si 原子动能的量级为  $3/2kT$ .

0.03eV 入射的 Si 原子由于本身的能量较低, 除了位置 5 和位置 6 入射的 Si 原子使得一对表面二聚体原子复位之外, 入射 Si 原子没有带来基底其它原子位置上的明显变化. 这与郑正明等人<sup>[6]</sup>的结果基本一致. 通过监控基底原子 A 所在二聚体两个原子之间距离的变化发现: 位置 5 和位置 6 入射的 Si 原子在很短的时间内(分别约为 80fs 和 40fs)就可以完成打断二聚体键的过程. 这与 Garrison<sup>[4]</sup>以及 Zhang 等人<sup>[5]</sup>的提出的断开键所需的时间基本一致. 不同的是: Garrison 等人的研究还指出 2~7.5eV 的入射 Si 原子嵌入到二聚体之间(相当于位置 6 入射)可以使得二聚体键断开, 小于 1eV 的入射原子不能使二聚体键断开, 0.026eV 入射的 Si 原子只是与二聚体原子的悬键接合, 而在我们的模拟中则发现 0.03eV 的入射 Si 原子同样也可能在很短的时间内使得二聚体键断开. 我们认为这主要是由

于入射原子在与基底作用的开始阶段受到基底原子的吸引作用, 在发生碰撞前动能(位置 6 入射时动能达到了 1.3eV)已远大于初始动能 0.03eV, 这虽然小于二聚体的键能(约 2eV), 但考虑到在相互作用发生的开始阶段, 入射原子位置附近的基底原子会具有较强烈的热振动, 故入射 Si 原子仍然可以使得二聚体键断开, 与分开的 2 个二聚体原子形成 2 个新的 Si-Si 键. 对于 Garrison 提出的另外两种二聚体键断开机制: 一是入射原子撞开二聚体后与其中的 1 个二聚体原子以及邻近的 1 个二聚体的悬键接合成键; 另一是入射原子直接替换二聚体中的一个原子, 而把该二聚体原子挤到嵌入位上. 由于此两种机制所需的能量比前面提到的嵌入断键机制所需的能量要大, 而我们选取的入射能量 0.03eV 较小, 故没有观察到此现象.

## 4 结论

本文用 Tersoff 势函数, 对在 300K 时入射动能为 0.03eV 的单个 Si 原子轰击 Si(001)  $2 \times 1$  重构表面的动力学过程进行了模拟. 结果表明: (1) 入射原子在与基底表面发生相互作用几个皮秒后即可进入稳定位置; (2) 入射 Si 原子与基底表面原子的结合能最大可以达到 2.99eV; (3) 从位置 1, 2, 3, 4 入射

时入射原子不能使基底表面的二聚体断开, 而从位置 5 和位置 6 入射时, 表面二聚体键的断开在入射原子与基底表面原子发生相互作用几十飞秒后即可完成.

**致谢** 文中用到的所有数据都由曙光 4000A 超级计算机完成, 感谢上海超级计算中心提供的硬件资源及张挺专员给予的技术支持.

### 参考文献

- [1] Roland C, Gilmer G H. Epitaxy on surfaces vicinal to Si (001). I. Diffusion of silicon adatoms over the terraces. *Phys Rev B*, 1992, 46: 13428
- [2] Roland C, Gilmer G H. Epitaxy on surfaces vicinal to Si (001). II. Growth properties of Si(001) steps. *Phys Rev B*, 1992, 46: 13437
- [3] Terakure K, Yamasaki T, Uda T, et al. Atomic and molecular processes on Si(001) and Si(111) surfaces. *Surf Sci*, 1997, 386: 207
- [4] Garrison B J, Miller M T. Kinetic energy enhanced molecular beam epitaxial growth of Si(100). *Chem Phys Lett*, 1988, 146: 553
- [5] Zhang Zhenyu, Metiu H. The microscopic mechanisms of dimer opening in the early stages of Si deposition on Si(100)- $(2\times 1)$ . *Surf Sci*, 1991, 245: 353
- [6] Jia Zhengming, Yang Genqing, Cheng Zhaonian, et al. Study of effects of low-energy bombardments of Si(001)- $2\times 1$  by molecular dynamics simulation. *Acta Physica Sinica*, 1994, 43: 1809 (in Chinese) [郑正明, 杨根庆, 程兆年, 等. 低能粒子轰击对 Si(001)- $2\times 1$  表面原子行为的影响: 分子动力学模拟研究. *物理学报*, 1994, 43: 1809]
- [7] Fu C C, Weissmann M, Saul A. Finite temperature simulation of ad-dimer diffusion between dimer row and trough on Si (001). *Appl Surf Sci*, 2001, 175/176: 36
- [8] Fu C C, Weissmann M, Saul A. Diffusion pathways for Si ad-dimers on Si(001): a high temperature molecular dynamics study. *Surf Sci*, 2001, 481: 97
- [9] Fu C C, Saul A. Theoretical study of the role of surface defects on the dimer dynamics on Si(001). *Surf Sci*, 2003, 527: 113
- [10] Kitabatake M, Greene J E. Molecular dynamics and quasidynamic simulations of low-energy particle bombardment effects during vapour-phase crystal growth: 10–50eV Si and In atoms incident on  $(2\times 1)$ -terminated Si(001). *Thin Solid Films*, 1996, 272: 271
- [11] Chadi D J. Si(100) surfaces: Atomic and electronic structures. *J Vac Sci Technol*, 1979, 16(5): 1290
- [12] Batra I. Atomic structure of the Si(001)- $(2\times 1)$  surface. *Phys Rev B*, 1990, 41: 5048
- [13] Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys Rev B*, 1989, 39: 5566
- [14] Abrams C F, Graves D B. Molecular dynamics simulations of Si etching by energetic  $CF_3^+$ . *J Appl Phys*, 1999, 86: 5938
- [15] Murty M V R, Atwater H A. Empirical interatomic potential for Si-H interactions. *Phys Rev B*, 1995, 51: 4889
- [16] Verlet L. Computer experiments on classical fluids: I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys Rev*, 1967, 159: 98
- [17] Berendsen H J C, Postma J P M, van Gunsteren W F. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *J Chem Phys*, 1984, 81(8): 3684

## Molecular Dynamic Simulation of the Interaction Between a Low Energy Bombarding Si Atoms and the Si(001) $2\times 1$ Reconstructed Surface\*

Zhu Linshan<sup>1</sup>, Jin Shisheng<sup>1</sup>, Gou Fujun<sup>1,2</sup>, and Xie Quan<sup>1,†</sup>

(1 College of Electronic Science & Information Technology, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

(2 Leiden Institute of Chemistry, 2300 RA Leiden, Netherlands)

**Abstract:** Molecular dynamic simulations are performed to investigate the microscopic process when a Si atom with an incident energy of 0.03eV bombards a Si(001)  $2\times 1$  reconstructed surface at 300K using the Tersoff potential. Six different bombarding sites are chosen in order to study the interaction between the bombarding Si atom and substrate surface atoms. We map the bombarding Si atom's kinetic energy, potential energy and trajectory. The results show that the interaction between the bombarding Si atom and the substrate surface atoms completes in a few picoseconds. The max binding energy of an adatom to a Si(001)  $2\times 1$  reconstructed surface is about 2.99eV. A single, 0.03eV incident Si atom can open a surface dimer in dozens of femtoseconds after the interaction takes place from positions 5 or 6, while the atom bombarded from positions 1, 2, 3, 4 cannot.

**Key words:** molecular dynamics; dimer; Tersoff potential; potential energy

**PACC:** 6120J; 6820

**Article ID:** 0253-4177(2007)11-1748-08

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60566001) and the Program for Excellent Young Talents of Guizhou Province (No. 20050528)

† Corresponding author. Email: quanxiegz@gzu.edu.cn

Received 16 April 2007, revised manuscript received 5 July 2007