

基于分子动力学模拟真空成膜过程辅助实验教学

杨 亮¹, 霍纯青¹, 涂进春¹, 张 盛², 王小红^{2*}

¹海南大学材料科学与工程学院, 海南 海口

²海南大学化学化工学院, 海南 海口

收稿日期: 2025年9月18日; 录用日期: 2025年10月22日; 发布日期: 2025年10月29日

摘 要

真空镀膜实验因其操作复杂、知识量大及应用面广在材料类实验项目中占据重要地位, 探索不同教学手段和教学方法以提高教学质量成为实验指导教师的教学任务之一。本文以分子动力学方法为工具, 以金属铝、金及镍为研究对象对成膜过程及膜生长模式进行了仿真, 直观展现了岛状生长、层状生长及岛状-层状生长三种膜生长模式。通过这种方法, 学生可以直观观察到膜生长的微观演化过程及生长模式, 提高科学素养, 培养解决问题的能力。同时, 该仿真方法有利于提高实验教学质量和探索基于分子动力学算法的虚实结合实验教学模式。

关键词

真空镀膜, 分子动力学, 生长模式, 虚拟仿真, 实验教学

Molecular Dynamics Simulation-Assisted Experimental Teaching of Thin Film Deposition in Vacuum

Liang Yang¹, Chunqing Huo¹, Jinchun Tu¹, Sheng Zhang², Xiaohong Wang^{2*}

¹School of Materials Science and Engineering, Hainan University, Haikou Hainan

²College of Chemistry and Chemical Engineering, Hainan University, Haikou Hainan

Received: September 18, 2025; accepted: October 22, 2025; published: October 29, 2025

Abstract

Vacuum thin film deposition experiments play a crucial role in materials science education due to

*通讯作者。

文章引用: 杨亮, 霍纯青, 涂进春, 张盛, 王小红. 基于分子动力学模拟真空成膜过程辅助实验教学[J]. 教育进展, 2025, 15(10): 1410-1417. DOI: 10.12677/ae.2025.15101984

their complex procedures, extensive theoretical background, and broad applications. To enhance teaching effectiveness, exploring diverse instructional approaches and methods has become a key task for educators. In this study, molecular dynamics (MD) simulations were employed to investigate the deposition processes and growth modes of aluminum (Al), gold (Au), and nickel (Ni) thin films. The simulations visually demonstrated three fundamental growth modes: island growth (Volmer-Weber), layer-by-layer growth (Frank-van der Merwe), and mixed island-layer growth (Stranski-Krastanov). Through this approach, students can directly observe the microscopic evolution of film formation and distinguish between different growth mechanisms, thereby improving their scientific literacy and problem-solving skills. Furthermore, this work provides a valuable exploration of virtual-physical integrated experimental teaching based on molecular dynamics, contributing to the advancement of experimental pedagogy.

Keywords

Vacuum Thin Film Deposition, Molecular Dynamics, Growth Mode, Virtual Simulation, Experimental Teaching

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

真空镀膜实验是《材料合成与制备综合实验》的核心实验项目之一，许多本科院校均有开设[1][2]，学生通过该实验可以了解真空获得原理、真空测量技术、掌握镀膜过程、探索镀膜工艺及熟知镀膜机理并能探索物理规律，使自身的知识结构、操作技能和创新能力得到提升[3]。真空镀膜实验由于设备结构复杂、操作过程繁琐及实验学时较长等因素影响，真空镀膜通常开设成演示实验[4]，但随着材料工程、化学工程、物理学、微电子学、光电子学等专业的兴起，真空镀膜技术得到高校高度重视，一些高校开发了专门的镀膜设备[5]-[7]，甚至建设了专门的真空镀膜实验室[8]，使真空镀膜实验教学得以快速发展和壮大。但随着教学质量要求的提高、教学改革的需要、虚拟仿真教学的引入和 AI 浪潮对教育教学的冲击，传统教学方法已经不能满足当前的教学需要，亟需对教学方法[9]及教学手段[10]进行探索和重构。新技术的引入推动了基于仿真技术[11][12]、虚拟技术[13]-[15]等模拟实验场景、人机交互的仿真实验操作过程，设备工作原理和实验教学方法快速发展。甄聪棉等[16]详细讨论了真空镀膜的物理机理及镀膜的过程，但未能从微观形貌及膜机理等方面进行讨论。刘海勇等[17]讨论了膜稳定性与均匀性方面的影响因素，主要影响因素仅由参数层面进行讨论，未能由微观层面或原子之间相互作用层面进行分析与讨论。苏文礼[18]在镀膜实验中仅对铝进行了研究，而对于其他金属的未进行对比较研究。高雁[19]较系统地研究了宏观膜厚的影响因素但未考虑成膜初期表面形貌及微观厚度的影响因素，也未对不同材料进行区分。以上研究均基于宏观规律进行镀膜研究，而基于物理算法的微观尺度方面的成膜机理仿真较少或缺失，不利于学生掌握镀膜的微观机理，提高科学素养。基于此，本文利用分子动力学方法模拟了不同金属在不同温度下成膜的微观过程，以揭示微观成膜机理，提高学生对成膜机理的理论认知，培养学生的科学素养。

2. 教学模型的构建

线下实验的真空镀膜过程采用电阻加热靶材(一般采用铝材或熔点较低的其他金属)，基底采用一般的载

玻片,在真空环境($<10^{-3}$ Pa)内实现蒸镀操作,基底材料一般不加热。仿真过程为了更接近实验环境,特别设计了三个方向 $20 \times 20 \times 20$ 晶格长度的模拟盒子,金属表面为 $10 \times 10 \times 5$ 晶格长度尺寸,该表面底部分为固定层($20 \times 20 \times 2$)和位于模拟盒子顶部 Z 方向 16~19 晶格长度处的原子注入区,具体结构如图 1 所示。

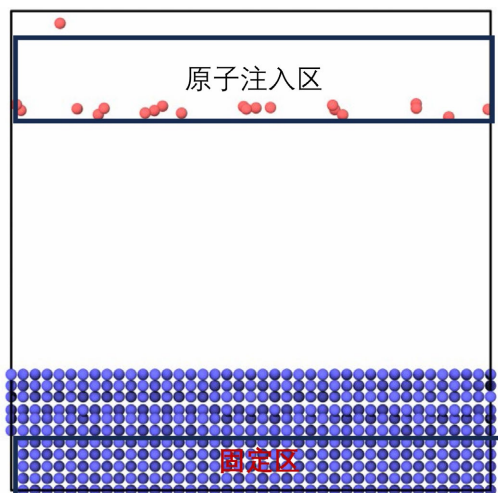


Figure 1. Schematic diagram of the three-dimensional model structure of the vacuum thin film deposition simulation process
图 1. 真空镀膜模拟过程三维模型结构示意图

3. 教学仿真参数设置

为了使教学过程更有趣味性,本教学仿真采用分子动力学方法[20],模拟软件使用 LAMMPS [21]软件,势函数使用多体效应的嵌入原子势(embedded atom method, EAM) [22],模拟过程时间步长设置为 1 fs,整个模拟过程使用 NVT 系综进行时间积分,注入原子采用随机方式生成,但是如果生成原子与体系中原子距离小于 1 个晶格长度,为了保持仿真正常进行则取消生成原子,最大生成原子数量限制为 8000 个原子,实验测得 Al 原子在真空的速度为 50~123 km/s [23],本文生成原子 Z 方向向下初速度为 10 km/s,整体模拟时长为 50 ns。图像生成采用 Ovito Python 包[24]在 Linux 下使用基于 NVIDIA OptiX Ray Tracing Engine 的 AnariRenderer 渲染方法,直接调用 CUDA 进行渲染,每点采样 64 次,环境光采样 32 次,以生成高质量的动画和图片以供教学使用。

4. 教学仿真结果及教学应用

目前,主流薄膜生长模式被抽象为三类:岛状生长模式(Volmer-Weber) [25]、层状生长模式(Frank-van der Merwe) [26]和岛状-层状生长模式(Stranski-Krastanov) [27]。为弥补线下实验在微观机理、成膜生长模式及基底温度调控方面的不足,本仿真过程使用金属铝、金属金及金属镍,以期较全面地向学生展示不同金属膜生长过程中表现出的不同生长模式。同时,对不同基底进行了控温处理,以展示不同基底温度对成膜质量的影响,学生可以直观地感受实验条件对材料生成的影响。

基于蒙特卡罗方法进行模拟仿真膜生长已经应用于实验教学[28],但由于网站计算能力限制,学生可仿真原子数量较少,仅可以模拟铝原子在膜生长初期的生长行为,不利于学生了解膜生长已经铺满表面后的生长行为。因此,利用分子动力学方法进行了长达 50 ns、最高可沉积 8000 个原子的仿真,表达完整的膜生长过程,如图 2 所示。模拟结果表明,铝膜生长初期表现为岛状生长,但随沉积原子数量增加及模拟时间延长,铝膜生长模式表现出典型的岛状-层状复合生长模式(三维生长过程参看视频网站[29]),通过三维生长过程演示,可以使学生更好地了解岛状-层状复合生长模式。

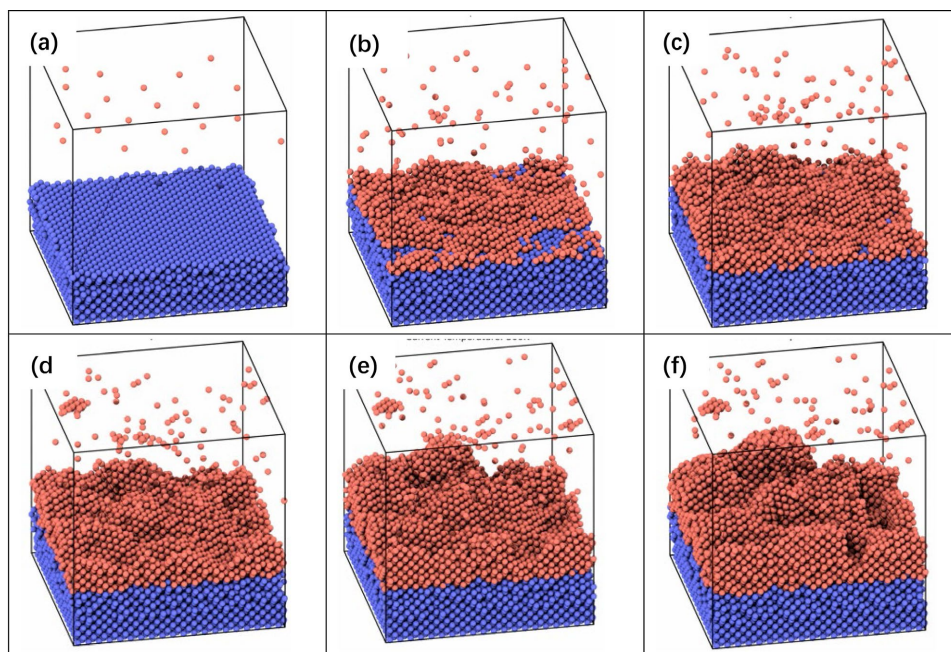


Figure 2. Evolution of the microscopic film-forming process of aluminum atoms in vacuum at 300 K: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

图 2. 300 K 铝原子真空微观成膜演化过程: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

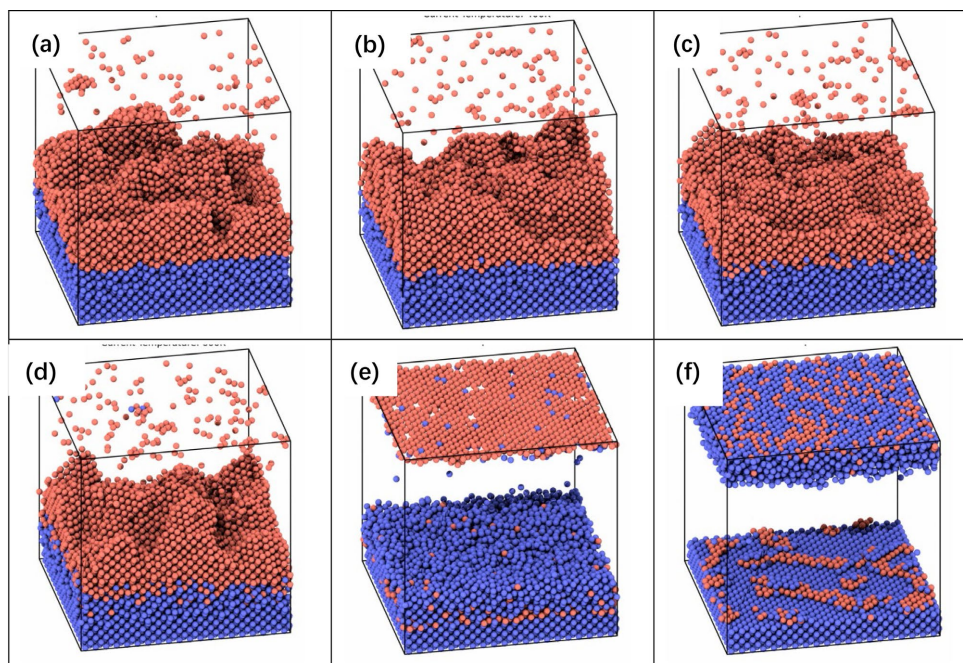


Figure 3. Morphology of aluminum film growth at different substrate temperatures: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

图 3. 不同基底温度下铝膜生长形貌: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

真空镀膜实验是物理气相沉积制备薄膜的一种方法, 一般情况下基底是不需要加热处理的。为了使用学生更加全面地了解镀膜过程温度的影响, 模拟了不同温度基底对膜的影响, 如图 3 所示。模拟结果表明, 当基底温度低于 600 K 时, 膜生长模式以岛状-层状生长为主; 当基底温度达到 700 K 时, 表面

原子开始融化，沉积原子与基底原子混合；当温度大于 800 K 时，基底的铝原子大部分已经蒸发，表面沉积的原子数很少，很难形成薄膜。通过以上考察不同基底温度的成膜过程的仿真，可以最直观地向学生展示基底温度对成膜过程的影响。

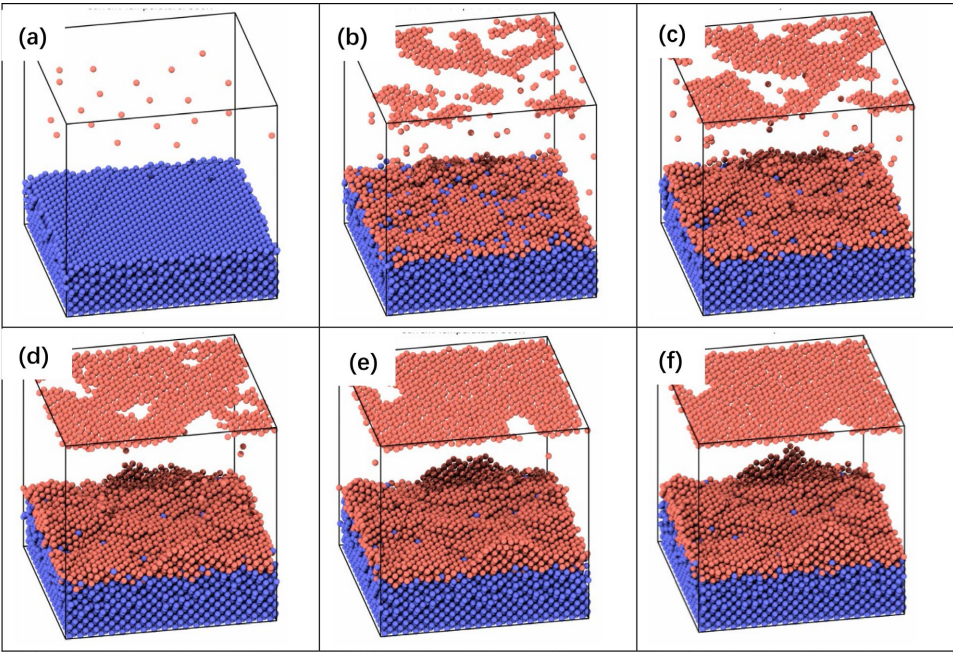


Figure 4. Evolution of the microscopic film-forming process of gold atoms in vacuum at 300 K: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

图 4. 300 K 金原子真空微观成膜演化过程: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

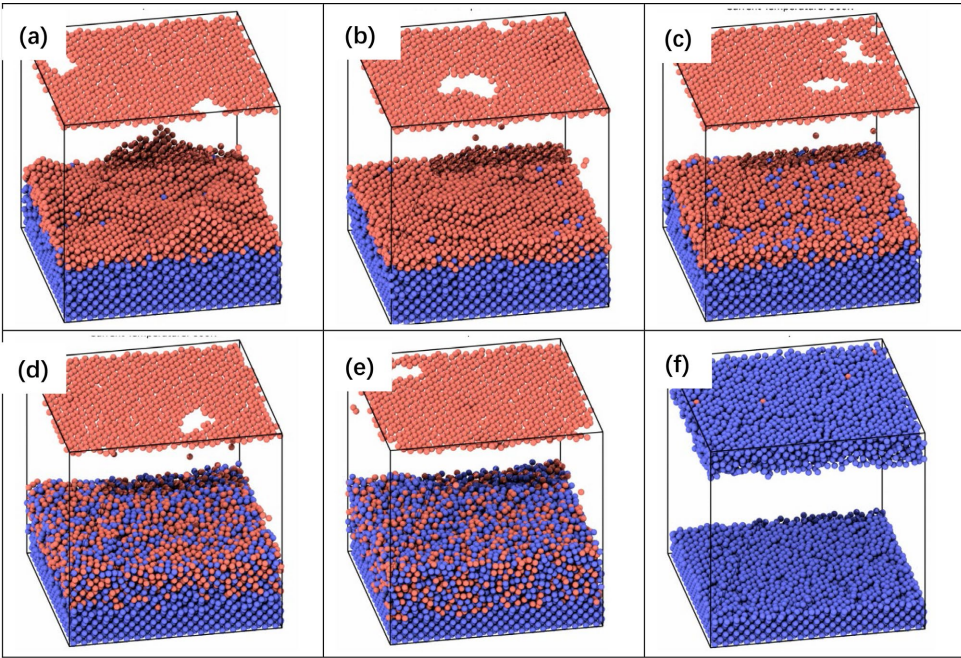


Figure 5. Morphology of gold film growth at different substrate temperatures: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

图 5. 不同基底温度下金膜生长形貌: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

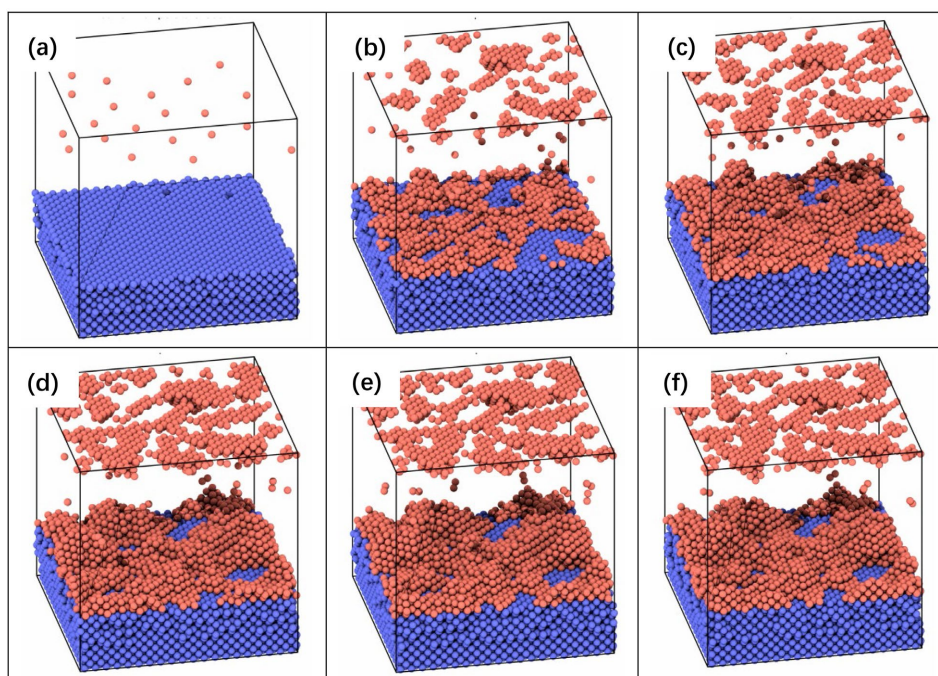


Figure 6. Evolution of the microscopic film-forming process of nickel atoms in vacuum at 300 K: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

图 6. 300 K 镍原子真空微观成膜演化过程: (a) 0 ns; (b) 10 ns; (c) 20 ns; (d) 30 ns; (e) 40 ns; (f) 50 ns

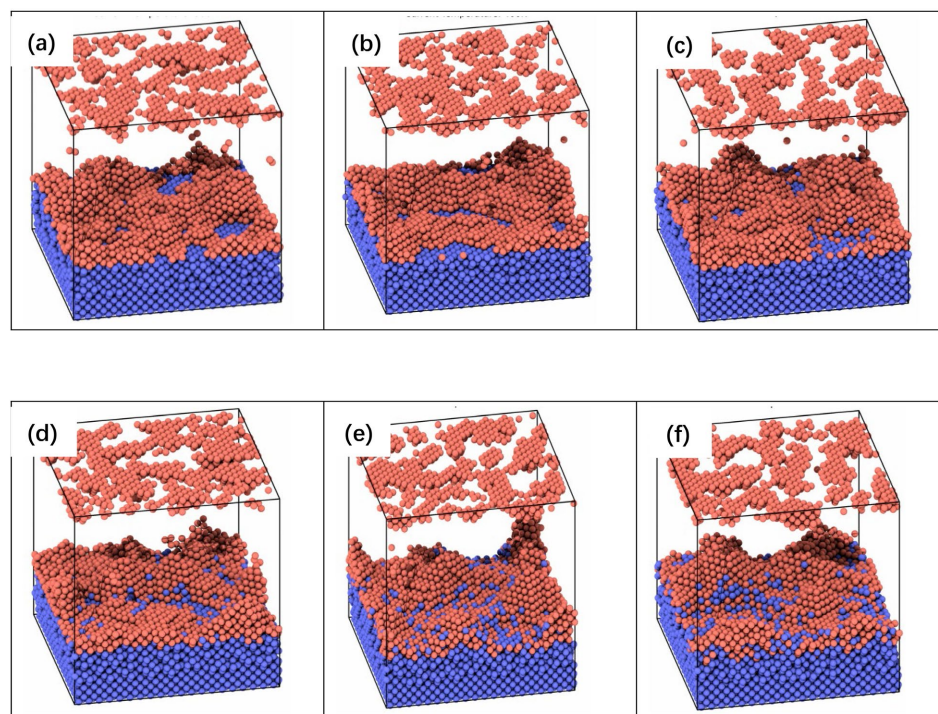


Figure 7. Morphology of nickel film growth at different substrate temperatures: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

图 7. 不同基底温度下镍膜生长形貌: (a) 300 K; (b) 400 K; (c) 500 K; (d) 600 K; (e) 700 K; (f) 800 K

为了使學生直观地比较层状生长模型的生长过程，图 4 模拟了具有典型层状外延生长的金属金的生

长过程。基底温度保持 300 K 恒温的条件下, 在生长初期, 金原子在表面表现出明显的层状生长特征, 10 ns 时几乎铺满表面且没有明显的团簇生成, 表面相对平整; 随模拟时间的延长, 表面出现了明显的突起, 这是由于模拟时间过短, 表面原子来不及驰豫到平衡位置就已经固定, 使表面相对较粗糙。

不同基底温度对金成膜具有较大的影响, 如图 5 所示, 温度低于 300 K 时, 表面明显出现了岛状; 400 K 时岛状开始消失; 大于 500 K 时表面原子与沉积原子混合在一起; 当温度大于 800 K 时, 基底表面原子发生蒸发。上述现象总体与铝金属相似, 但铝表面表现出更强的粗糙度。

图 6 为 300 K 基底表面的镍原子沉积演化过程显示, 镍原子在其表面形成明显的岛状生长特征且整个生长过程中保持较明显。镍原子在未到达表面前发生严格的团聚现象, 团聚的镍原子到达表面后形成了明显的岛状结构, 随沉积时间延长, 岛状表面结构保持较好, 至 50 ns 后依然可见基底原子。

不同基底温度对镍膜生长的影响不大, 如图 7 所示, 即使基底温度达到 800 K, 镍膜还保持显示的岛状生长模式, 基底也未因温度过高而产生原子蒸发现象, 仅有少量镍原子扩散进入基底原子之中。

5. 结论

借助分子动力学手段方法直观展现铝、金及镍三种金属膜生长不同时间及不同基底温度下生长的演化过程, 学生可以直接观察膜的生长过程、生长模式及微观成膜过程, 提高科学家素养、拓宽知识面及培养解决问题的能力。同时, 可提高实验教学效果、激发学生的学习兴趣, 深挖实验教学内容, 探索一种可复制、可移植及可推广的全新实验教学方法。

基金项目

2024 年度海南省高等学校教育教学改革研究项目(Hnjg2024ZD-12); 海南大学高等教育(研究生)教学成果奖培育项目(HDYJXCG2024004); 海南大学研究生创新能力提升建设项目 - 专业学位研究生教学案例建设项目(HDJXAL2025Y0017); 海南大学教研项目(hdjy2408)。

参考文献

- [1] 武钰铃, 余春燕, 杨文静, 等. “材料合成与制备技术”课程教学改革的探索与实践[J]. 山西能源学院学报, 2025, 38(1): 100-102.
- [2] 李炜, 黎夏生, 叶穗红. 真空镀膜实验课教学活动浅探[J]. 新余高专学报, 2004(2): 86-87.
- [3] 赵晓辉. 薄膜传感器实验教学创新与实践[J]. 实验科学与技术, 2017, 15(6): 103-106.
- [4] 杨艳, 罗乐, 巫丛平, 等. 微电子工程中薄膜工艺教学设计与实践[J]. 集成电路应用, 2024, 41(5): 78-80.
- [5] 安奎生, 付申成, 谷德山. 教学用金属真空蒸发镀膜实验装置的研制[J]. 大学物理实验, 2016, 29(6): 98-100.
- [6] 庄娟, 杨华, 李雪春, 等. 自制真空系统渐进式系列实验教学[J]. 物理与工程, 2017, 27(S1): 293-295.
- [7] 刘嘉滨, 沈学浩, 王晓玲. 真空镀膜机控制系统的温控改造[J]. 实验室研究与探索, 2014, 33(12): 49-53.
- [8] 贾宏杰, 程树英, 夏岩. 真空镀膜实验室建设与管理实践[J]. 大学教育, 2018(12): 79-81.
- [9] 张平, 蔡培阳, 赵先锐, 等. 关于应用型人才培养背景下大型设备实验教学及考核的思考——以台州学院材料类专业磁控溅射镀膜实验教学为例[J]. 教育教学论坛, 2018(30): 274-276.
- [10] 杨继凯, 王连锴, 王国政, 等. 基于产学研协同育人的薄膜物理与技术课程教学模式探索——以长春理工大学为例[J]. 高教学刊, 2024, 10(7): 102-105.
- [11] 杨亮, 刘钟馨, 林仕伟, 等. 构建真空镀膜实验三维仿真系统[J]. 实验技术与管理, 2012, 29(2): 71-75.
- [12] 杨亮, 林仕伟, 潘能乾, 等. 基于 OpenGL 实现真空镀膜机三维仿真[J]. 实验技术与管理, 2011, 28(9): 91-94.
- [13] 朱归胜, 陈彩明, 赵昀云, 等. 材料类专业虚拟仿真实验项目建设与应用[J]. 高教学刊, 2023, 9(27): 22-25.
- [14] 郭纪源, 厉淑贞, 韩汝取, 等. 脉冲激光沉积镀膜实验虚拟仿真教学的设计与实践[J]. 实验科学与技术, 2023, 21(3): 77-81, 107.

- [15] 王晓峰, 杨珺, 陈估. 薄膜材料虚拟仿真实验的建设与教学实践——磁控溅射镀膜和原子力显微镜(AFM)在氢化纳米硅薄膜制作过程中的应用[J]. 物理通报, 2023(8): 111-116.
- [16] 甄聪棉, 李壮志, 侯登录, 等. 真空蒸发镀膜[J]. 物理实验, 2017, 37(5): 27-31.
- [17] 刘海勇, 刘丽娜, 高鹏. 真空镀膜稳定性与均匀性研究[J]. 中国新技术新产品, 2015(7): 59-60.
- [18] 苏文礼. 真空镀金属膜厚度及光学常数的测量[J]. 计量与测试技术, 1999(6): 28-29.
- [19] 高雁. 影响真空蒸发镀膜膜厚的因素分析[J]. 太原科技, 2008(9): 78-79, 82.
- [20] 华春燕. 科教融合促进卓越育人——分子动力学虚拟仿真教学[J]. 实验室研究与探索, 2022, 41(5): 248-252.
- [21] Thompson, A.P., *et al.* (2021) LAMMPS—A Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales. *Computer Physics Communications*, **271**, Article ID: 108171.
- [22] Stukowski, A., Sadigh, B., Erhart, P. and Caro, A. (2009) Efficient Implementation of the Concentration-Dependent Embedded Atom Method for Molecular-Dynamics and Monte-Carlo Simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **17**, Article ID: 075005. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/17/7/075005>
- [23] 姜远飞, 陈安民, 刘航, 等. 真空中脉冲激光烧蚀铝等离子体发射光谱及粒子速度研究[J]. 原子与分子物理学报, 2009, 26(04): 677-682.
- [24] Stukowski, A. (2009) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, Article ID: 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [25] Volmer, M. and Weber, A. (1926) Keimbildung in übersättigten Gebilden. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, **119**, 277-301. <https://doi.org/10.1515/zpch-1926-11927>
- [26] Frank, F.C. and van der Merwe, J.H. (1949) One-Dimensional Dislocations. I. Static Theory. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, **198**, 205-216.
- [27] Stranski, I.N. and Krastanow, L. (1937) Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. *Monatshefte für Chemie*, **71**, 351-364.
- [28] <https://www.ilab-x.com/details/page?id=12400&prev=1>
- [29] <https://b23.tv/nXQ3wCu>