

碳团簇与硅单晶表面重构的蒙特卡罗模拟探索^{*}

梁志均, 黄臻成, 王 莉, 邵元智, 何振辉

(中山大学 光电材料与技术国家重点实验室 // 物理科学与工程技术学院, 广东 广州 5100275)

摘 要: 利用基于经验势 (Tersoff 势) 的蒙特卡罗方法研究碳团簇稳定结构和硅片 (100) 表面重构这两个物理过程。模拟结果是含有偶数个原子的小团簇是主要由六圆环平铺而成, 像石墨片似的平面结构。而含有奇数个原子的小团簇, 会在团簇中心生成碳五圆环, 团簇的会围绕五圆环卷曲。得到的结论是碳团簇的结构与团簇的幻数有关。模拟硅片表面重构的结果显示硅单晶表面有五种不同的重构模式, 并且在不同的温度条件下, 这几种重构模式所占的比重也不一样。低温时, 硅单晶表面是以无重构的 1×1 二聚体为主。随温度升高, 硅单晶表面出现 2×1 、 $c(2 \times 2)$ 、 $c(4 \times 2)$ 等重构模式。而在高温时, 单晶硅 (100) 表面将出现的一种新的重构方式——吸附二聚体, 它很可能是硅片的外沿生长、成核过程的关键。

关键词: Tersoff 势; 蒙特卡罗法; 碳团簇; 幻数; 硅单晶表面重构; 吸附二聚体

中图分类号: O561 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2004) S1-0026-07

随着半导体产业进入深亚微米的时代, 集成电路中一个三极管变得越来越细薄, 最薄的只是由硅片表面几个原子层构成的。所以, 从原子的尺度去分析各种表面工艺变得越来越重要。

本文尝试从原子尺度对硅片 (100) 面的原子重构过程的模拟, 因为此过程是各种半导体表面工艺基础。另外, 本文还将对碳团簇稳定结构做模拟, 为下一步模拟离子注入法合成碳化硅单晶而做好准备^[1-4], 具体的项目流程如图 1。

对半导体表面工艺的理论分析主要有两个途径: 部分研究者利用从头计算方法计算硅片表面各种重构模式的结合能; 也有研究者^[5-8]利用经验势做模拟分析。蒙特卡罗 (MC) 模拟是一种从原子尺度模拟系统行为的一种有效的方法, 比起从头计算方法和分子动力学 (MD), MC 可以模拟大系统在很长一段时间内行为, 而且结果准确, 计算速度快^[9,10], 因此, 本文采用 Tersoff 势, 利用 MC 法模拟对碳团簇稳定结构和硅片 (100) 面的原子重构做蒙特卡罗模拟。

1 模拟的流程图

我们编写出基于 tersoff 势的 MC 算法程序, 为了证明蒙特卡罗程序的正确性, 要对程序进行测试, 以证明程序是正确和忠于基本算法的。因此设计实验的流程图, 打算先进行一些小规模的模拟, 像计算碳团簇的稳定结构, 一方面是为了证明程序

的正确性, 另一方面是为大规模的模拟计算积累经验。下一步工作, 我们将尝试对退火扩散形成碳化硅单晶的过程做模拟。

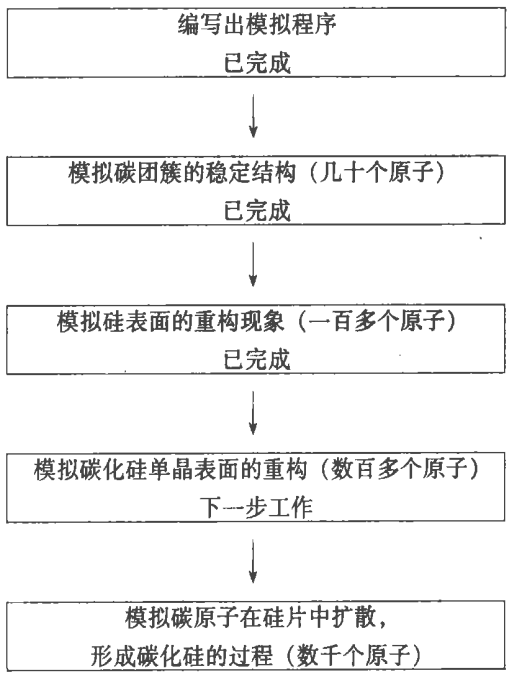


图 1 模拟流程图

Fig 1 Flow chart of simulation

2 计算的势函数

单晶硅是共价键晶体, 由于共价键的方向性和饱和性, 导致经典的二体势不能描述硅单晶的原子相互作用, 必须考虑多个配位原子的多体作用。本

^{*} 收稿日期: 2004-04-12

文采用的 Tersoff 势就是通过拟合关于共价键饱和性和多体作用的量子力学计算曲线而得到的半经验势。它的形式^[11-13]：

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \tag{1}$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_{ij}^n \zeta_{ij}^n) - \frac{1}{2n_i} \tag{2}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \tag{3}$$

其中， V_{ij} 为 i, j 原子间成键的能量，它包含有描述两体系吸引部分 f_A 和描述两体系排斥部分 f_R ， f_c 为一个光滑切断函数，它使两原子间的相互作用在距离较远时光滑地趋向于零，而函数 b_{ij} 被称为键序函数 (bond order function)，它由同一原子的两个共价键的夹角 (θ_{ijk}) 即体系中原子的三维空间结构决定，它反映共价键的方向性。另外，键序函数 b_{ij} 也反映共价键的饱和性：如果一个原子的配位数 ξ 越多，则每个键的键能就减弱， b_{ij} 越小，而如果有效配位数越少，成键越强， b_{ij} 越大。硅原子的 Tersoff 势的具体参数，由文献 [12, 13] 给出。

3 模拟碳团簇的稳定结构

3.1 初始条件的设置

我们用蒙特卡罗法计算团簇的最低能的构型。这个模拟是利用蒙特卡罗法去搜索系统构型空间中的能量最低点，采用模拟退火法，从远高于系统熔点的温度开始，缓慢地降低系统的温度，只要降温过程足够地慢，蒙特卡罗的试探行走就能遍历系统构型空间。那么，退火后系统构型必定是该团簇最稳定的结构。下面是具体的初条件的设置：

(1) 在正方体容器里随机位置放一定数目的碳原子。正方形的尺寸是由碳原子的数目而定，一般要保证空间要足够大。

(2) 用蒙特卡罗法模拟退火法，必须从远高于系统熔点的初温开始退火。因为不知道碳团簇的熔点，保险起见，把初温设高一点。令系统从远高于熔点的初温 220 000 K 降温到室温。降温过程中，粒子按照 Metropolis 准则随机行走，每次行走的最大位移 (MC 步长) 为 0.2 nm，为并观察碳团簇构型的演化过程。

(3) 退火过程采用指数退火 (即系统温度从初温呈指数下降到末温的退火方式)，共计算 100 万次。

3.2 结果和讨论

图 2 是模拟程序经过 100 万次算出的碳团簇的稳定结构。

可以见到原子个数为偶数的碳团簇中，图 2

(a) (b) 的团簇中均由石墨结构的六原子环平铺而成，而图 2 (c) (d) 也是以六圆环为主，只是在团簇边缘的地方，会出现 7 个原子组成的环。六圆环中的碳原子是采用平面型的 sp^2 的杂化方式 (键角为 120°)，团簇的原子基本上都在同一平面；而边缘的七圆环由于比六环多一个原子，给平面结构带来了不少的应力，因此在边缘的七环会稍微翘曲起来，也因为这些应力的作用导致七圆环的不稳定性。

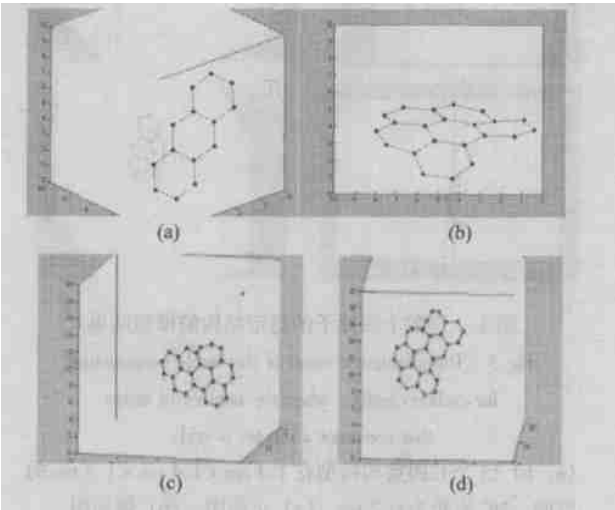


图 2 偶数个碳原子的稳定结构的模拟结果
Fig 2 The simulation result for the stable constructure of carbon cluster, when the number of atoms that construct a cluster is even

- (a) 14 个 C 的团簇 1 nm×1 nm×1 nm 的空间；
- (b) 22 个 C 的团簇在 1 nm×1 nm×1 nm 的空间；
- (c) 26 个 C 的团簇在 1.6 nm×1.6 nm×1.6 nm 的空间；
- (d) 30 个 C 的团簇在 2 nm×2 nm×2 nm 的空间

我们又尝试计算奇数个碳原子的稳定结构。我们计算了包含 15、21、23 个碳原子的这 3 种团簇系统的稳定结构。计算结果如图 3 所示。

从图 3，发现奇数个原子所形成的团簇，是呈卷曲状，各个原子都几乎处在同一个球面上，这与含偶数个原子团簇的平铺状有明显的区别。在图 3，还发现一个规律：碳五圆环总是会出现在团簇的中心附近，打破了六圆环的平面结构，使得与它邻接的六圆环受到应力，被迫发生卷曲；并且它们卷曲的方向和弯曲度都较一致，总体的弯曲效果就像一个球面。

尝试追踪图 2 (c) 所示 26 个碳原子团簇模拟退火法中形成的过程，追踪的结果如图 4 (a)，(b)，(c)，(d) 所示。

从图 4 可见，当系统从远高于系统熔点的温度降到室温过程中，团簇的构型是从高温时的分

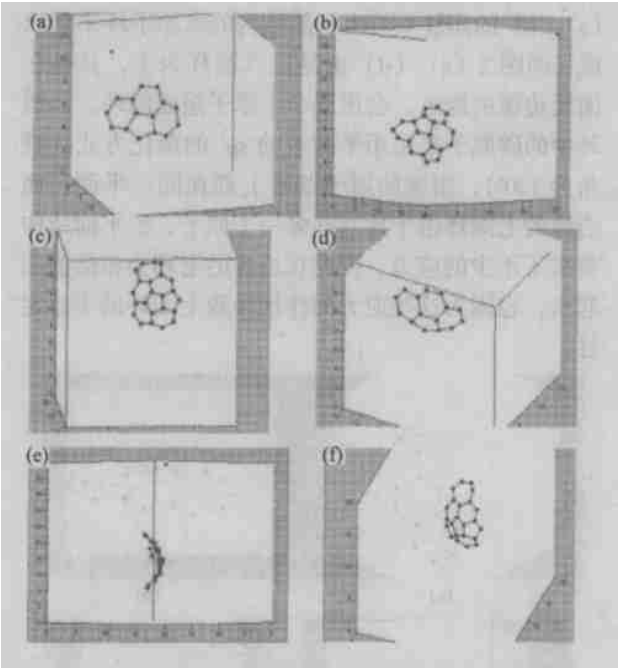


图 3 奇数个碳原子的稳定结构的模拟结果

Fig 3 The simulation result of the stable constructure for carbon cluster, when the number of atoms that construct a cluster is odd.

(a, b) 15 个 C 团簇的构型在 $1.4\text{ nm} \times 1.4\text{ nm} \times 1.4\text{ nm}$ 的空间, MC 步长为 0.2 nm , (a) 正面图, (b) 侧面图.
(c, d) 21 个 C 团簇的构型在 $2\text{ nm} \times 2\text{ nm} \times 2\text{ nm}$ 的空间, MC 步长为 0.2 nm , (c) 正面图, (d) 侧面图.
(e, f) 23 个 C 团簇的构型在 $2\text{ nm} \times 2\text{ nm} \times 2\text{ nm}$ 的空间, MC 步长为 0.2 nm , (e) 正面图, (f) 侧面图

散、混沌状态逐渐凝聚成一个有序的状态。并且从图 4 (e) 还可以看到这个从无序到有序的转变就发生在 $20\,000 \sim 3\,000\text{ K}$ 区间。因为在高温的时候, 系统的热扰动能量比团簇的结合能还要大, 团簇即使能形成, 也会由于热扰动, 很快地散开, 重归混沌。而在 $20\,000 \sim 3\,000\text{ K}$ 区间, 系统的热扰动能量稍微小于 C—C 键的键能, 这种条件下团簇可以尝试结合, 如果结合得不好, 还可以借助于热激发的能量换一种方式再结合, 直到团簇形成一个稳定的结构。在 $3\,000\text{ K}$ 以下, 团簇的构型基本不变, 只是有个别的原子会微调一下位置。

以上的结果都是可重复的, 只要计算的次数达到 100 万次, 碳团簇基本上都生成同样的构型, 只是计算的结果的具体位置有不同, 结构的方位也可能转动一定角度。由于计算次数是 100 万次, 可以说模拟的结果是系统的基态的概率很大。但对于原子数更大的团簇模拟仍需对程序作进一步的优化以及运算速度更快的计算机。

(1) 碳五圆环总是可以稳定在团簇的中心, 而

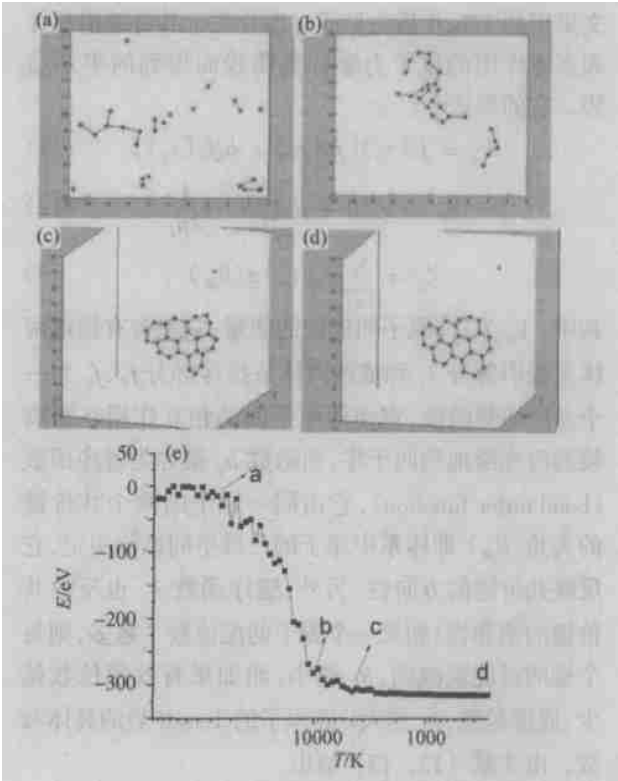


图 4 26 个碳原子团簇在 $2\text{ nm} \times 2\text{ nm} \times 2\text{ nm}$ 空间 (MC 步长为 0.2 nm) 的形成过程

Fig 4 The formation process of of the carbon cluster which is constructed by 26 carbon atoms

- (a) 温度为 $20\,510\text{ K}$ 时团簇的构型;
- (b) 温度为 $8\,000\text{ K}$ 时团簇的构型;
- (c) 温度为 $4\,578\text{ K}$ 时团簇的构型;
- (d) 300 K 时团簇的构型;
- (e) 在退火过程中, 系统温度与结合能的关系图

碳七圆环总是游离于团簇的边缘; 而且五圆环与六圆环的结合显然是更为紧凑。因此, 我们可以说碳五圆环比七圆环稳定。

(2) 在制备碳团簇实验过程中发现, 含某些原子数目的碳团簇特别稳定, 这些数目称为幻数。我们猜测碳五环结构的出现与碳团簇的幻数有关。换言之, 碳团簇是呈卷曲状还是呈平铺状可能是取决于团簇的幻数。团簇物理学^[14]中有文献记载, 在团簇所含的原子数 N 小于 30 时, 碳团簇的幻数一般是奇数, 很有可能含奇数的原子的团簇会较容易生成碳五圆环, 并且沿五圆环的边界卷曲, 这种卷曲有利于减少边界的悬键, 使系统更稳定。关于这一点, 文[14]报道: 团簇的生长过程是从平面石墨结构开始, 逐渐卷曲, 当卷曲到成大半个球形时, 如果有碳的五圆环加入, 则变成碳 60 的稳定结构, 不再生长。如果没有的则继续螺旋地卷曲下去。可见, 五圆环个数的确是决定碳团簇构型的关键因素。

4 硅片 (100) 面的原子重构的模拟

硅片 (100) 面的原子重构效应是各种表面工艺的基础。对这个重构效应的研究是很有价值。在进入 2000 年后, 物理学家在低温 STM 实验中发现硅片 (100) 面原子重构中的新的现象, 对这些新现象的实验观察和理论的模拟研究已发表^[15-18]。本文做这个模拟对理解硅片 (100) 面的原子在低温下的重构是很有意义的。

4.1 初条件的设置

模拟采用的硅单晶的计算原胞为 12 层, 每层由 100 个 (10×10) 碳原子组成, 原胞尺寸大小为 3.7 nm×3.7 nm×3.7 nm, 共 1 200 个原子 (见图 5)。

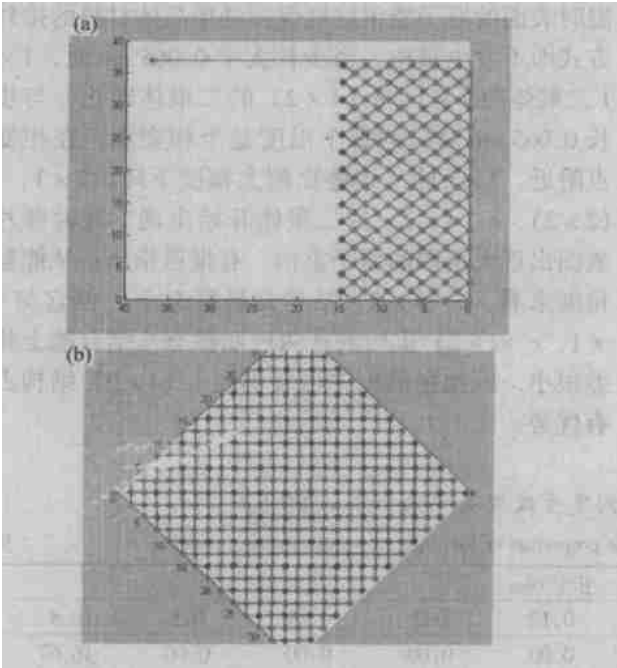


图 5 硅片 (100) 表面硅原子的初始位置

Fig 5 The initial position of atoms on a silicon wafer (100) surface

(a) 从 [100] 方向看单晶硅片表面;
(b) 从 [010] 方向看单晶硅片表面。
浅灰色点代表静态衬底的硅原子, 深黑色点代表表面的硅原子。黑色的线段代表硅-硅键。

硅原子的初始坐标由 0 K 温度下理想的单晶硅体材料晶格位置确定。在 x 和 y 方向, 采用二维周期性边界条件, 使粒子在水平面上成为无限, 而在 z 方向, 让表面原子自由, 使模拟的表面对应于真空下的清洁表面^[19]。底部 11 层原子 (即图 5 中浅灰色的原子) 作为静态衬底而被固定在原来的晶格位置上不动, 以理想的单晶硅体材料无重构的 (1×1) 重构表面为模拟起点, 用基于 Tersoff 势的

蒙特卡罗法, 使表面的一层原子 (即图 5 中深黑色色的原子) 在 300 K 的温度中进行弛豫、重构, 并使用类似 Verlet 邻表的技术加快运算速度^[20]。仅让表面一层原子参与重构是因为我们曾试过让表面的几层原子自由地重构, 但发现除了内层原子是很稳定, 几乎是不参与重构的。因此, 我们适当地做出简化: 仅让表面一层原子参与重构。

4.2 结果和讨论

5.2.1 模拟重构表面的构型 硅片 (100) 的表面的构型如图 6。

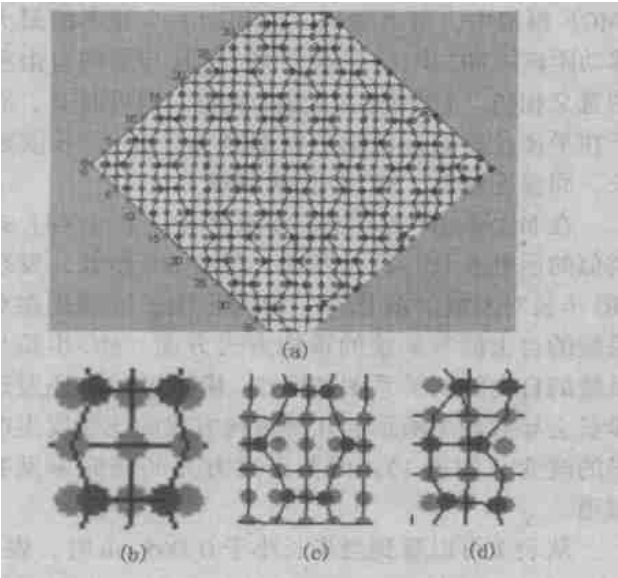


图 6 硅片 (100) 表面原子重构模拟结果

Fig 6 The simulation result for the reconstruction of silicon (100) surface

温度为 300 K, MC 步长为 0.2 nm, 计算次数是 10 万次
(a) 是整体结果, 浅灰色点代表的是静态衬底的硅原子, 深黑色点代表的是表面重构的硅原子。黑色的线段是代表硅-硅键。
(b)、(c)、(d) 是 (a) 的局部放大图, 分别代表重构方式是硅表面 (100) 面的 2×1 重构、c(2×2) 重构、c(4×2) 重构中的二聚体单元结构, 坐标轴读数单位是 0.1 nm。

可以看到图 6 中的模拟出的重构模式与前人根据重构硅单晶表面的低能电子散射 (LEED) 斑点图提出来硅片表面原子排列情况的几种模型很相似。这几种模型包括: Schlier 的 2×1、c (2×2) 重构模型, Chadi 的 c (4×2) 重构模型^[21]。但也有不同的地方: 用 Tersoff 势模拟出来的结果, 不是采用单纯的一种的重构方式, 而是这 3 种重构方式的结合体。硅片表面重构模拟结果是 3 种重构方式的结合的原因: 因为一个系统一般有很多个亚稳态, 每个亚稳态的自由能差不多, 这会导致在重构过程中, 系统是很容易陷入其中一个亚稳态。实际

中硅片表面在一定温度下发生重构, 得到的构型往往是亚稳态的构型。亚稳态的多样性决定了重构形式的多样性。因此, 一般的重构表面都不会是单纯采用同一种的重构模式, 并且这论点得到 STM 实验的结果的支持^[5,22,23], 有研究员报道用 Tersoff 势模拟出与图 6 类似的亚稳态重构结果^[9]。但从他们的模拟结果并不能清楚分辨每一种重构的模式而且未见关于温度对各种重构方式的所占比例带来影响的报道。

4.2.2 温度对各种重构方式的影响 在蒙特卡罗 (MC) 模拟中, 每次随机试探移动一个原子的最大移动距离 (MC 步长), 这个 MC 步长与平均自由程的意义相仿, 它一般是由温度决定。温度越高, 原子在平衡位置附近振动的振幅越大, MC 步长就越长。而温度越低, MC 步长就越短。

在 MC 模拟中 MC 步长和温度有一个与 (4) 式类似的函数关系。研究发现, 改变 MC 步长, 发现 MC 步长对系统的演化有一定的影响, 特别是在对系统的自由能和系统的重构方式方面。MC 步长与系统的自由能的关系图如图 7。模拟过程中还发现步长会导致图 1 所示的几种重构方式的比例发生明显的改变 (如表 1), 而关于这方面的研究未见有报道。

从表 1 可以看到当步长小于 0.065 nm 时, 表

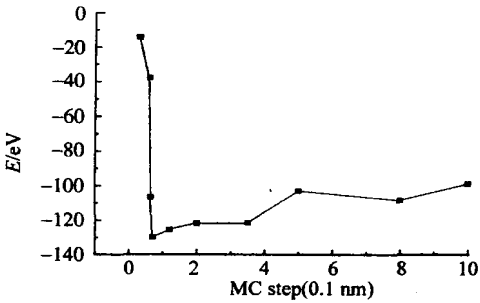


图 7 MC 步长与重构前后系统自由能改变量的关系图
Fig 7 The relationship between the MC step and the system energy

面的硅原子基本上是没有发生重构, 所以, 没有重构时的 1×1 二聚体占了绝大部分, 这相当于在低温时表面的原子能很好地保持硅单晶体材料的排列方式而不发生重构。当步长大于 0.065 nm 时, 1×1 二聚体向 2×1 、c (4×2) 的二聚体转化, 与步长 0.065 nm 对应的那个温度是个相变点, 在相变点附近, 1×1 的二聚体比例大幅度下降, 2×1 、c (2×2)、c (4×2) 的二聚体开始出现, 此时硅片表面出现大范围的原子重构。有报道指出: 从能量角度来看, c (4×2) 结构是最稳态^[21], 但它与 2×1 、c (2×2) 重构的这两种亚稳态从结合能上相差很小, 因此在模拟中也看不到 c (4×2) 结构占有优势。

表 1 步长导致几种重构方式的比例发生改变关系表 ($T=300\text{ K}$)

Tab 1 the relationship between the MC step and the proportion of the different restructure model

%

构型	步长/nm								
	0.03	0.06	0.065	0.07	0.12	0.2	0.35	0.5	0.8
1×1 dimer	100.00	96.30	15.63	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	16.67
2×1 dimer	0.00	3.70	21.88	30.14	23.21	23.42	18.84	3.61	0.00
c (2×2) dimer	0.00	0.00	56.25	43.84	44.64	46.85	46.38	30.12	22.22
c (4×2) dimer	0.00	0.00	3.13	5.48	28.57	19.82	15.94	34.94	23.61
ad dimer	0.00	0.00	6.25	20.55	3.57	9.91	15.85	31.33	37.50

当步长大于 0.5 nm 时, 硅片的表面开始变得凹凸不平 (图 8 中三角形的原子就是凸起来的), 其标志是吸附二聚体^[21] (ad dimer) 的出现。

这是由于在高温下, 一些区域内的原子两个、两个地配对重构成二聚体, 一些落单的表面原子周围找不到配对原子, 于是它们的悬键多, 不能稳定下来。在热激发的帮助下, 它们有部分会跑到旁边已配对二聚体上边, 形成吸附单体^[21] (monomers), (如图 8 (c) 中的三角形的原子)。

如果两个吸附单体相遇并结合, 就形成吸附二聚体 (ad dimers) (如图 8 (b))。由于吸附二聚体

的出现, 引起硅片表面的原子层的高度不一致, 并导致表面粗糙度上升。(如图 8); 如果吸附二聚体连成一片的二维岛, 就形成一个表面的台阶。这个过程实际上也是个二维的台阶生长^[21] (step flow) 的过程。从 STM 实验中^[21], 知道硅片表面在高温下往往是呈台阶状的形貌, 可见图 8 的模拟的结果是比较符合实际的。

4.3 结果的可靠性

为了保证结果的可靠性, 分析了不同步长时该系统的收敛性。

步长为 0.07 nm 时的收敛情况如下: 当计算次

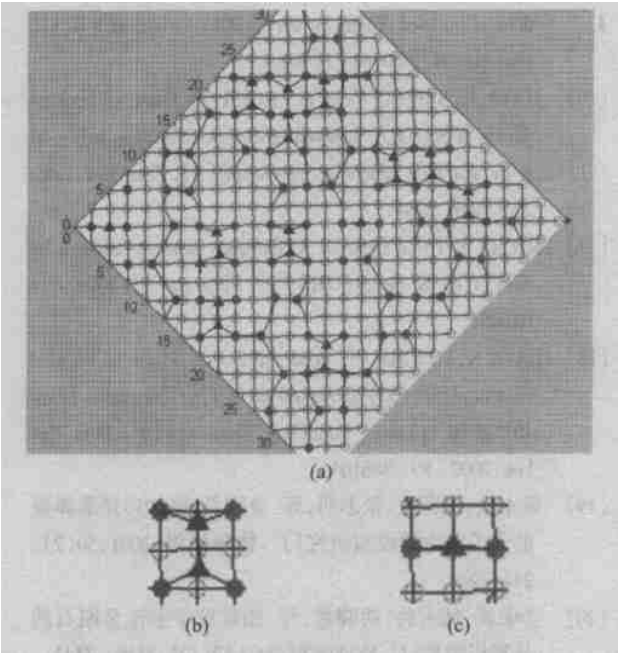


图 8 MC 步长为 0.8 nm 时硅片 (100) 表面的重构情况

Fig. 8 The simulation result for the reconstruction of silicon (100) surface

浅灰色空心圆点代表的是静态衬底的硅原子；深黑色圆点是表面重构层的原子；黑色三角形是代表在重构层的上方的表面吸附层原子。

- (a) MC 步长为 0.8 nm 时硅片 (100) 表面的重构情况；
- (b)、(c) 是 (a) 的局部放大图，
- (b) 吸附二聚体 (ad dimer) 单元结构，(c) 是吸附单体的单元结构

数大于 40 000 时，系统已经处于稳定状态，能量基本上不再降低。这个说明系统很快的落入一个与初始态附近的势能较低的亚稳态，即使计算次数再增加，系统也不会跳出亚稳态的势阱。可以看到此时的收敛性很好。此时，对应的物理图像是系统的热激发小，表面原子一旦结合成二聚体结构就不再分开。而当步长为 0.2 nm 时，系统的收敛性稍微降低，要求计算次数大于 80 000 时，系统才会达到稳定时。当步长为 0.8 nm 时，计算的收敛速度就要更慢，当计算次数大于 140 000 时，系统还未完全收敛。这是由于步长大于 0.5 nm 时，计算结果的物理意义就发生变化，一般固体硅片表面重构中原子在平衡位置附近的振动不会有这么大，除非是有外界离子轰击或者是在高频放电的状态下。而这些外界状态是经常会在离子束合成单晶埋层法，PECVD 法等合成外延薄膜的工艺中出现，所以，MC 步长大于 0.5 nm，对应的物理图像就可能是非平衡的薄膜表面的生长过程，因此，MC 步长大于 0.5 nm 所对应的模拟结果 (图 8) 中出现的吸附二聚体，它很可能是硅片的外沿生长、成核过程的关

键。

4. 4 硅片 (100) 面的原子重构的模拟的小结

利用基于经验势 (Tersoff 势) 的蒙特卡罗法研究单晶硅 (100) 表面重构的微观行为。

(1) 模拟了初始为单晶硅无重构 (100) 表面的原子在 300 K 温度下的弛豫、重构过程，并发现重构后的表面构型是这 3 种已提出的重构方式的结合体。这 3 种重构方式分别为：Schlier 的 2×1 、c (2×2) 重构模式、Chadic 的 c (4×2) 重构模式。

(2) 研究了在不同温度 (MC 步长) 下的重构结果，发现在不同温度下，这几种重构方式所占的比重不同。而且在高温时，单晶硅 (100) 表面将出现的吸附二聚体 (ad dimers) 这种重构方式，这种吸附二聚体可能是是硅片的外沿生长、成核过程的关键。

5 展 望

上述的算法中，每次试探移动是完全随机移动，但实际中并不完全是这样的。相对而言，成了键的原子它们的自由度受到键的限制，试探移动的方式应该不是完全随机。它们的试探移动应该改为围绕该键伸缩、扭转。并考虑增加一种试探移动方式：几个成了键的原子团可能会做整体的试探移动。

进一步，我们将用蒙特卡罗法探讨碳化硅单晶埋层形成的微观机制。如果模拟成功，可以把微观机制的关键过程抽象和建立一个介观的模型，并用原胞自动机 (CA) 等方法进行从介观尺度模拟碳化硅单晶埋层形成。并希望探索一个多尺度 (multi scale) 的模拟方法。

致谢：谢中山大学物理系陈弟虎老师和邵元智老师对我们的工作提了很多宝贵的意见，并感谢中山大学物理科学与工程技术学院的低温实验室、IC 设计中心、计算中心对我们工作的支持。

参考文献:

[1] CHEN D, CHEUNG W Y, WONG S P. Ion beam induced crystallization effect and growth kinetics of buried SiC layers formed by carbon implantation into silicon [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 1999, 148: 589-593.

[2] 杨克武 潘静. SiC 半导体材料及其器件应用 [J]. 半导体情报, 2000, 37(2): 13-15.

[3] 张进城, 郝跃, 赵天绪, 等. SiC 新型半导体器件及其应用 [J]. 西安电子科技大学学报(自然科学版), 2002, 29(2): 157-159.

[4] 孙钟林, 薛俊明, 耿卫东, 等. 硅中注入高浓度碳形成微

- 晶碳化硅的研究[J]. 光电子·激光, 2001, 12(12).
- [5] NURMINEN L, TAVAZZA F, et al. Comparative study of Si (001) surface structure and interatomic potentials in finite-temperature simulations[J]. Physical Review B, 2003, 67: 035405.
- [6] 郑正明, 杨银庆, 程兆年, 等. Si(001) 表面层及近表面层原子行为的分子动力学模拟研究[J]. 物理学报, 1994, 43(4): 609—615.
- [7] 于威, 滕晓云, 李晓苇, 等. C 与 Si 重构表面碰撞过程的分子动力学模拟[J]. 光电子·激光, 2001, 12(6): 578—581.
- [8] GAWLINSKI E T, et al. Molecular-dynamics simulation of molecular-beam epitaxial growth of the silicon (100) surface [J]. Phys Rev B, 1987, 36(9).
- [9] 黄继颇, 王连卫, 林成鲁. Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd, 2000.
- [10] 杨玉良, 张东红. 高分子科学中的 Monte Carlo 方法[M]. 上海: 复旦大学出版社.
- [11] TERSOFF J. New empirical model for the structural properties of silicon[J]. Phys Rev Lett, 1986, 56: 632.
- [12] TERSOFF J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems[J]. Phys Rev Lett, 1988, 61: 2879.
- [13] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems[J]. Phys Rev B, 1989, 39: 5566.
- [14] 王广厚. 团簇物理学[M]. 上海: 上海科学技术出版社.
- [15] YOKOYAMA T, TAKAYANAGI K. Anomalous flipping motions of buckled dimers on the Si(001) surface at 5 K[J]. Phys Rev B, 2000, 61: R5078.
- [16] HATA K, SAINOO Y, et al. $p(2 \times 2)$ Phase of buckled dimers of Si(100) Observed on n-type Substrates below 40 K by scanning tunneling microscopy[J]. Phys Rev Lett, 2001, 86: 3084.
- [17] MITSUI T, TAKAYANAGI K. Extrinsic structure changes by STM at 65 K on Si(001) [J]. Phys Rev B, 2000, 62: R16251.
- [18] HATA K, YOSHIDA S, et al. $p(2 \times 2)$ Phase of Buckled Dimers of Si(100) Observed on n-Type Substrates below 40 K by Scanning Tunneling Microscopy[J]. Phys Rev Lett, 2002, 89: 286104.
- [19] 戴永兵, 沈荷生, 张志明, 等. 金刚石硅(001) 异质界面的分子动力学模拟研究[J]. 物理学报, 2001, 50(2): 244—249.
- [20] 李荣斌, 戴永兵, 胡晓君, 等. 能量粒子轰击金刚石的计算机模拟[J]. 物理学报 2003 52(12): 3136—3141.
- [21] DABROWSKI J, MUSSIG H J. Silicon surface and formation of interface[M]. 兴界图书出版公司, 1999.
- [22] EBNER C, SERIPLE J V, et al. Simulation of a lattice model for the evolution of Si(001) surfaces exposed to oxygen at elevated temperatures[J]. Phys Rev B, 1995, 52: 16651.
- [23] TOH C P, ONG C K. Diffusion of a Si atom on the Si(001) 2×1 surface: A Monte Carlo study[J]. Phys Rev B, 1992, 45: 11120—11125.
- [24] 许振嘉. 近代半导体材料的表面科学基础[M]. 北京: 北京大学出版社.

The Monte Carlo Simulation for the Carbon Cluster and the Reconstruction of the Silicon (100) Surface

LIANG Zhi jun, HUANG Zhen cheng, WANG Li, SHAO Yuan zhi, HE Zhen hui

(School of Physics Science and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: The stable structure of carbon cluster were simulated with the monte carlo method, which is based on the tersoff potential, and we found that when the number of atoms that construct a cluster is even, the carbon cluster would have a graphite-like planar structure, but when the number is odd, the carbon cluster would tend to huddle. By simulating the reconstruction process of Si atoms in a fresh (100) surface, we found that there are different reconstruction modes, and at different temperature condition, the dominating reconstruction mode would be different. One of these mode's, is the so called ad dimer, may play the key role in the epitaxial growth.

Key words: SiC; computer simulation; Monte Carlo; tersoff; ion beam implantation; carbon cluster; the reconstruction of silicon wafer surface; magic numbers of carbon clusters