

# 金刚石/硅(001)异质界面的分子动力学模拟研究\*

戴永兵<sup>1)</sup> 沈荷生<sup>1)</sup> 张志明<sup>1)</sup> 何贤昶<sup>2)</sup> 胡晓君<sup>2)</sup> 孙方宏<sup>1)</sup> 莘海维<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>上海交通大学微电子技术研究所,上海 200030)

<sup>2)</sup>上海交通大学材料学院,上海 200030)

(2000年6月29日收到,2000年9月12日收到修改稿)

采用分子动力学方法模拟研究了未重构的金刚石/硅(001)面相接触时界面层原子的弛豫过程及所形成的异质界面的结构特征. 硅碳二元系统中原子间的相互作用采用 Tersoff 多体经验势描述. 弛豫前沿[110]与[1 $\bar{1}$ 0]方向界面碳硅原子数之比均为 3:2. 界面碳硅原子总数之比为 9:4. 弛豫后金刚石与硅界面处晶格匹配方式改变为 [110]方向基本上以 3:2 关系对准,而 [1 $\bar{1}$ 0]方向大致以 1:1 关系对准. 相应地,界面碳硅原子总数之比接近 3:2. 界面下方部分第二层硅原子在弛豫过程中向上迁移至界面是引起这种变化的原因,同时该层其他原子及其底下一到两个原子层厚度的区域在 [001]方向上出现一定程度的无序化转变倾向. 金刚石/硅异质界面处的硅碳原子发生强烈键合,形成平均键长为 0.189 nm 的硅碳键. 研究证实,晶格匹配主要呈现界面及其附近硅原子迎合界面碳原子排列的特点.

关键词:金刚石,硅,异质界面,分子动力学

PACC:6848,6185,3420,6190

## 1 引 言

金刚石薄膜在单晶硅衬底上的异质外延是其电子学应用中的关键问题. 实验上,目前已在单晶硅衬底上实现了无  $\beta$ -SiC 及其他过渡层的局域异质外延<sup>[1,2]</sup>. 进一步实现大面积异质外延尚需在金刚石薄膜成核、生长机制及异质界面的结构特性上进行深入细致的研究. 尽管 HRTEM 已被成功应用于检测金刚石/硅异质界面,并用于识别哪些位置有利于异质外延的发生<sup>[3]</sup>,但是对于了解异质界面附近硅碳原子排列与键合的细节仍嫌不够充分. 因此,发展经验及半经验的原子级异质界面结构模型便很有必要. 近年来这方面也展开了较多的工作. Verwoerd 提出了金刚石以  $(1/\sqrt{2} \times 1/\sqrt{2})R45^\circ$  组态在硅(001)面上异质外延的模型,即所谓的  $45^\circ$  旋转匹配模型<sup>[4]</sup>. 尔后又受硅(001)衬底上立方氮化硼外延实验的启发而提出了 3:2 晶格匹配模型<sup>[5]</sup>. 随后, Tucker 等人<sup>[6]</sup>通过实验及扩展 Hückel 紧束缚电子结构计算,得出 3:2 匹配模型优于  $45^\circ$  旋转匹配模型的结论. 最近, Zhang 等人<sup>[7]</sup>通过分析势能等高线图

以确定碳沉积位置的方法研究了硅衬底上金刚石异质外延膜的逐步形成问题,也认为界面可以 3:2 方式实现匹配,尽管这会导致形成密度至少为  $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  的位错. Sternberg 等人<sup>[8]</sup>则研究了金刚石/硅界面在石墨中间层存在与否时的原子级结构,发现石墨层的存在能量上是不利的. 在 Sternberg 等人的模型中,也是假设金刚石与硅以 3:2 方式实现晶格匹配的. 尽管已有这些工作,但是上述模型所依赖的计算方法,如半经验分子轨道方法,扩展 Hückel 紧束缚电子结构计算方法,紧束缚分子动力学方法等,运算量大,因此所能研究的界面结构在尺寸上是较小的,不能充分反映较大范围内原子的对应关系,也不能充分反映异质界面上的各种缺陷与不均匀性,因此有必要对尺寸较大的系统进行研究. 此外,上述半经验模型在一些基本问题上仍存在较大的分歧. 如界面是否存在硅碳互混层,界面硅碳原子层是否二聚化,界面碳硅原子数之比是 3:2 还是 9:4 等. 这些问题都有待实验与理论的进一步澄清.

分子动力学方法是获取界面原子级结构信息的一种有效手段. Tersoff 多体势<sup>[9]</sup>是适合于硅/碳/锗多元系统的一种经验势. 本文采用 Tersoff 经验势描

\* 国家高技术研究发展计划(批准号:715-002-0010)和中国博士后科学基金资助的课题.

述硅碳二元系统原子间相互作用,利用分子动力学方法研究了未经重构,即保持体内原子排列方式的金刚石与硅(001)面相接触时,界面硅碳原子的弛豫过程,并对由此而形成的异质界面结构中原子的排列与键合情况进行了探讨。值得一提的是,利用经验势计算量小的优点,我们构筑了一个迄今为止面积最大的界面结构模型,观察到了未见报道的界面原子排列及键合情况的多样性与复杂性。

## 2 界面模型

金刚石/硅异质界面模型按以下步骤逐步构成。

### 1. 硅单晶与金刚石单晶体材料模型的建立

分子动力学建模前,首先得构筑研究对象的计算原胞。硅单晶的计算原胞由12层每层100个( $10 \times 10$ )碳原子组成,大小为 $3.84 \text{ nm} \times 3.84 \text{ nm} \times 1.63 \text{ nm}$ 。金刚石单晶的计算原胞由12层每层225个( $15 \times 15$ )碳原子组成,大小为 $3.79 \text{ nm} \times 3.79 \text{ nm} \times 1.07 \text{ nm}$ 。硅碳原子的初始坐标由0K下体材料的晶格位置确定。两个系统均采用三维周期性边界条件, $x, y, z$ 的正方向均分别平行于 $[110]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[001]$ 晶向。在金刚石薄膜的低压化学气相沉积中,衬底温度一般在 $700\text{--}900^\circ\text{C}$ 范围内。我们选择 $1073\text{K}$ ( $\sim 800^\circ\text{C}$ )为两个系统的共同温度,并让硅与金刚石系统在这个温度下分别弛豫8 ps与5 ps以达到各自的平衡。值得指出的是,弛豫会使原子的位置发生一定幅度的移动,不便于说明两个系统之间精确的对准关系。因此在下面的面内与垂直对准关系中,我们仍假定原子保持在0K下的晶格位置上。

### 2. 硅衬底与金刚石薄膜的形成

在建立体材料模型后进而就可构筑硅衬底与金刚石薄膜的结构模型,方法是:去掉 $z$ 方向的周期性边界条件限制。构筑硅衬底模型时还另外让计算原胞底部两层原子冻结在 $1073\text{K}$ 温度下弛豫结束时的位置上。此外可进一步让构成的硅衬底在与金刚石薄膜拼接前弛豫一段时间以使其表面原子发生二聚,这也是Sternberg等人在构筑金刚石/硅异质界面模型时采用的方法。在模拟金刚石异质外延生长时,这样的弛豫显然是必要的。然而在用拼接法形成异质界面时,未必需要这么做。原因是:金刚石薄膜的生长是在富氢环境下进行的,氢可以打开硅表面的二聚键。因此,在最后形成的异质界面上,不一

定就像Sternberg等人的模型一样,界面处的硅原子是全部二聚化了的。事实上,无论是Verwoerd模型还是Zhang等人的模型,界面处的硅原子都没有二聚。

### 3. 硅衬底与金刚石薄膜的面内对准

硅衬底表面与金刚石薄膜下表面原子的面内对准关系如图1(a)所示。实际上,这也是两个系统复合前,硅计算原胞最顶层原子与金刚石计算原胞最底层原子的面内对准关系。为了更加直观、清楚地表现金刚石与硅晶格之间的面内3:2对准关系,图1(b)进一步给出复合前硅计算原胞最底层原子与金刚石计算原胞最底层原子的对准关系。值得强调的是,这一硅原子层也正是硅衬底上同质外延生成的单晶硅膜的最底层原子。事实上,我们构筑异质界面模型时,只是将这一层硅原子按图1(b)所示的对准关系换成了碳原子层。在图1(b)中,计算原胞中心附近的 $2 \times 2$ 个硅表面单胞组成一个匹配单元,而 $3 \times 3$ 个金刚石表面单胞组成另一个匹配单元。模型中令这两个特定匹配单元(为便于观察,已用虚线框围出)的中心重合。由于 $3a_D$ 略小于 $2a_S$ ( $a_D, a_S$ 分别为金刚石与硅的晶格常数),因此金刚石匹配单元的面积略小于硅匹配单元。显而易见,离开计算原胞中心越远,金刚石/硅匹配单元的匹配程度就越低。同时,就 $x$ - $y$ 面内的截面积而言,金刚石计算原胞必定要小于硅计算原胞。本文采用在金刚石计算原胞 $x$ - $y$ 截面四周补充真空区的方法来消除与硅计算原胞在截面积上的差异。这种做法与文献[8]不同。在文献[8]中,金刚石晶格是通过在 $x$ - $y$ 面内均匀膨胀来适应硅衬底尺寸的。

### 4. 硅衬底与金刚石薄膜的垂直对准

在将金刚石薄膜置于硅衬底之上时,还得考虑硅表面原子所在平面与金刚石薄膜下表面原子所在平面的垂直距离。我们取两个平面的垂直距离为 $0.2 \text{ nm}$ ,比硅碳键键长( $0.189 \text{ nm}$ )稍长一些。

至此已构筑好了金刚石/硅二元复合系统。新的计算原胞尺寸为 $3.84 \text{ nm} \times 3.84 \text{ nm} \times 2.79 \text{ nm}$ ,共3900个原子。随后,让这个新系统在 $1073\text{K}$ 温度下弛豫5 ps。在此期间观察与分析界面及其邻近区域原子的移动与键合情况。

在分子动力学计算中,运动方程的数值积分采用速率版的Verlet算法,时间步长为1 fs。采用自动更新的Verlet邻表技术<sup>[10]</sup>加快运算速度。

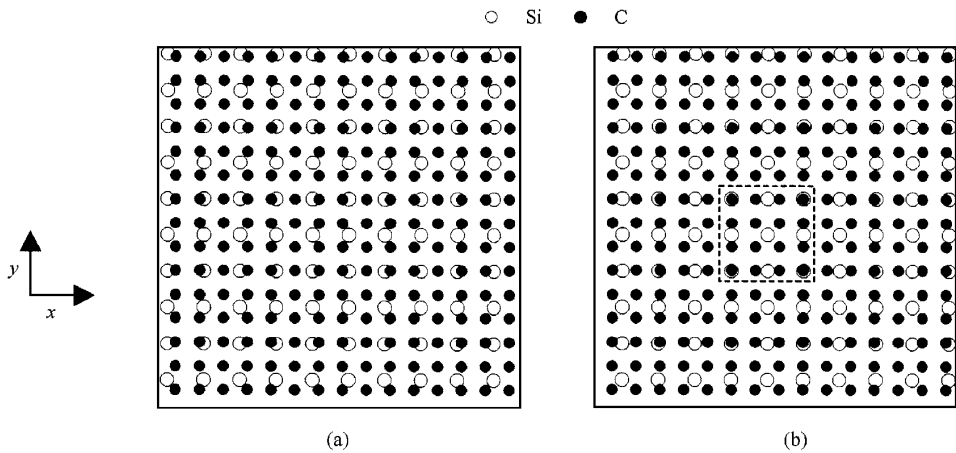


图 1 (a) 硅计算原胞最顶层原子与金刚石计算原胞最底层原子的面内对准 (b) 硅计算原胞最底层原子与金刚石计算原胞最底层原子的面内对准

### 3 结果与讨论

硅碳二元复合系统在 1073K 温度下, 经 5 ps 弛豫后系统能量已趋于稳定, 即系统已处于平衡状态. 图 2 给出此时界面硅碳原子的对准关系. 与图 1 比较, 可以看出原子对准关系弛豫前后的变化十分显著. 在原始给定的对准关系中, 沿  $[110]$  及  $[1\bar{1}0]$  方向碳硅原子数之比均为 3:2, 总的界面碳硅原子数之比为 9:4. 弛豫后  $[110]$  方向碳硅原子数之比基本上仍为 3:2, 而  $[1\bar{1}0]$  方向却大致上已变成 1:1, 由此也使得总的界面碳硅原子数之比接近 3:2. 弛豫前后, 界面碳原子数维持不变, 而硅原子数则从弛豫前的 100 增加为弛豫后的 146, 几乎增加了一半. 图 3 给出弛豫时间为 0.2 ps 与 5 ps 时, 二元复合系统界面附近原子的瞬态构型. 由图 3 可知, 界面硅原子数

的增加是因其底下一层, 即第二层的部分硅原子发生了向上迁移的过程. 具体地说, 是第二层沿  $[110]$  方向的一排硅原子向上迁移至界面. 在将硅衬底表面与金刚石薄膜表面衔接在一起之前, 由于这两个表面都是未重构的, 因此金刚石薄膜表面与硅衬底表面的悬键密度之比为 9:4. 当两个表面衔接在一起后, 在金刚石一侧预期将留下一半以上的悬键未被饱和. 然而, 第二层部分硅原子的上移及其与界面碳原子的成键使得这种未饱和的悬键密度降至一半以下, 也使得整个系统趋于更加稳定.

就界面碳硅原子数之比而言, 这里给出的结果与最近 Zhang 等人提出的模型一致, 但在细节上存在显著差异. 在 Zhang 等人的模型中, 界面硅原子的面密度与单晶硅 (001) 面的原子面密度一样, 而界面碳原子的面密度却只有金刚石 (001) 面原子面密度的  $2/3$ . 与之相反, 在我们的模型中, 界面碳原子的面密度与单晶金刚石 (001) 面原子面密度一样, 而界面硅原子的面密度却近似为硅单晶 (001) 面原子面密度的 1.5 倍. 另外值得一提的是, Verwoerd 提出的金刚石/硅异质界面 3:2 匹配模型与 Zhang 等人的模型相似, 只是将界面碳原子层中的部分碳原子替换成了硅原子, 从而使界面包括硅原子层与硅碳互混层. 不过, 硅碳互混层与硅原子层的原子数之比仍为 3:2. 在我们的模型中, 虽然硅原子出现了较大范围的迁移, 但是, 与 Zhang 等人的模型一样, 也没有出现这种界面互混现象.

从图 3 可以看到部分界面硅碳原子的键合情况. 图 4 给出界面硅碳键的键长分布. 经计算, 平均

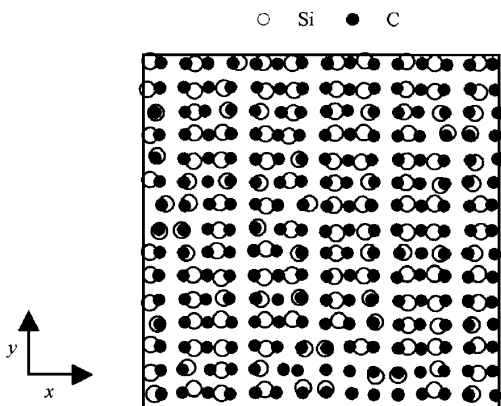


图 2 硅碳二元复合系统在 1073K 温度下经 5 ps 弛豫后界面硅碳原子的对准关系

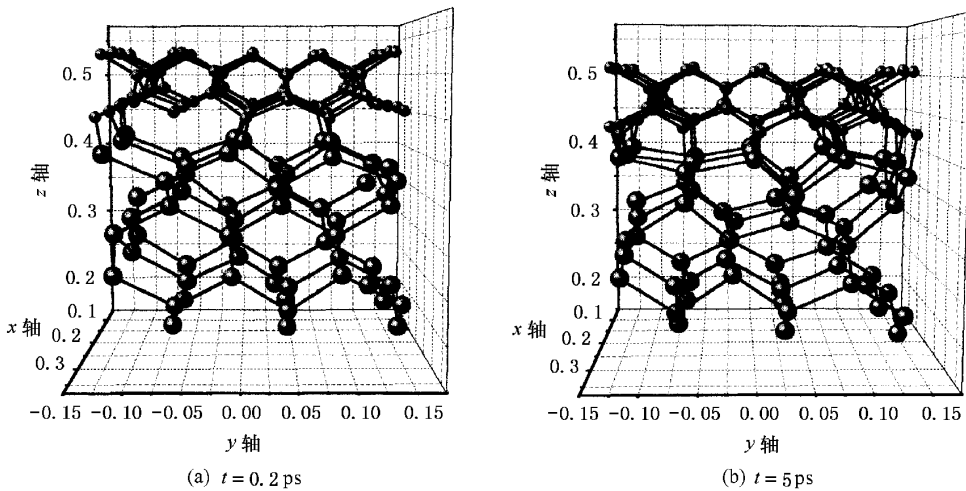


图3 弛豫时间为 0.2 ps 与 5 ps 时,金刚石/硅界面附近原子的瞬态构型(小球为碳原子,大球为硅原子)

的硅碳键键长为 0.189 nm,与  $\beta$ -SiC 晶体中的硅碳键键长相等<sup>[8]</sup>,表明界面硅碳原子之间的键合是牢固的.需说明的是,弛豫前界面硅碳原子层的距离设置为 0.2 nm.显然,弛豫过程使得硅碳原子层更紧密地结合在一起.

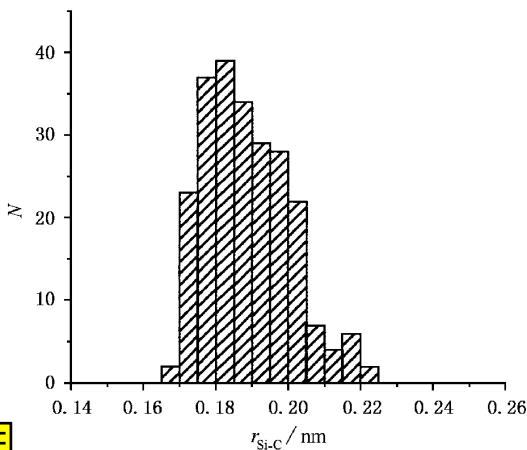


图4 金刚石/硅界面处硅碳键的键长分布

为了阐明界面硅碳原子的键合规律及其与弛豫过程的关系,在图2的基础上,图5进一步将界面硅原子分为两类,一类是原先的表面硅原子,图中以○表示,另一类则是弛豫后迁移至界面层的,图中以●表示.此外,图中还给出了界面硅碳原子之间的键合关系.根据界面硅碳原子键合形成的图案,可将界面划分成三类区域.第一类区域在图5中以虚线框围出,其图案特征是由六个硅原子(其中两个迁移自第二层)与九个碳原子构成,在界面上相对独立,即与周围硅碳原子没有成键,其中心碳原子可与左侧或

- 表面硅原子
- 弛豫后迁移至界面层的硅原子
- ⊙ 碳原子

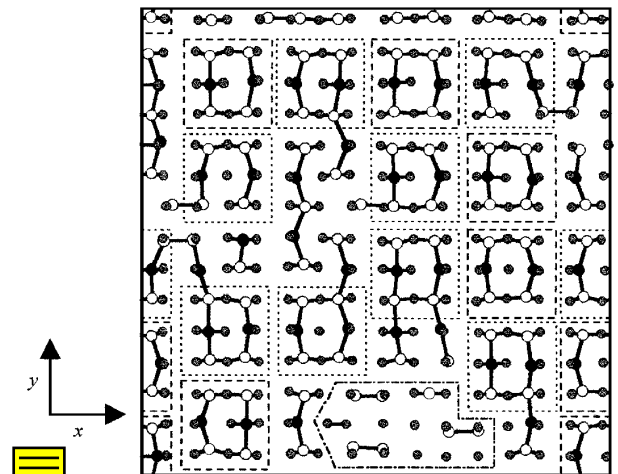


图5 金刚石/硅界面处硅碳原子的键合情况

右侧硅原子键合,也可以不与它们成键.图6给出这种图案的立体构型.第二类区域在图5中以点线框围出,其构成图案是第一类区域图案的变体.相同特征是:也由六个硅原子(其中两个迁移自第二层)与九个碳原子构成,中心碳原子可与左侧或右侧硅原子键合,也可以不与它们成键.和第一类的区别是:点线框中的硅碳原子与其周围原子之间有一至两条化学键相连而使其丧失独立性.另外,一些图案缺少一条硅碳键,使得本由六个硅原子与两个碳原子形成的闭环结构被打开.第三类区域是界面上除了第一、二类区域之外的区域.不同区域的形成与第二层硅原子的迁移特性密切相关.第一、二类区域中来自

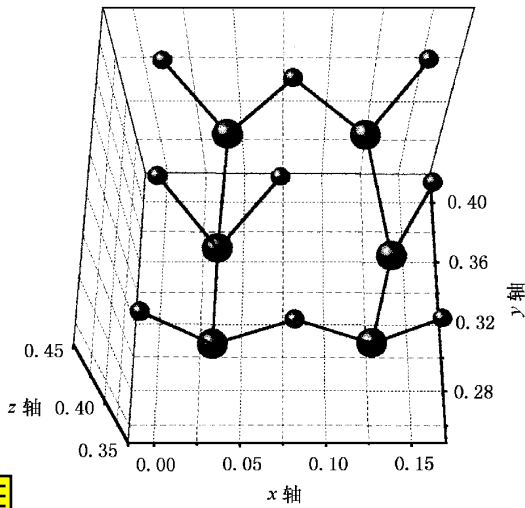


图6 第一类区域图案的立体构型  
(小球为碳原子, 大球为硅原子)

第二层的硅原子的迁移是基本有规律的. 第二类区域中的图案与第一类区域中的图案有所差异, 主要由该区域周围来自第二层的硅原子的迁移出现偏差及区域内外两个原始界面硅原子之间的二聚所致. 第三类区域中来自第二层的硅原子的迁移出现相当程度的混乱因而难以形成规则的图案. 此外, 图5中隶属第三类区域的由虚点线围出的子区域内没有出现迁移自第二层的硅原子. 在这个小区域内, 界面碳硅原子数之比接近 9:4 且两者均不同程度地出现了沿  $[110]$  方向的二聚现象. 在文献 [8] 中, Sternberg 等人也采用了与我们相似的方法建立金刚石/硅的异质界面模型. 但是, 在他们的模型中, 硅表面一开

始就假定已经二聚化了的. 在此基础上, 他们观察到了界面碳原子的二聚化现象. 同时, 在他们的模型中, 没有出现第二层硅原子向界面迁移的现象, 界面碳硅原子数之比为 9:4. 由此看来, Sternberg 等人的界面模型与我们的界面模型中的这一小部分区域是基本一致的.

除了第二层部分硅原子迁移导致界面碳硅原子数之比从 9:4 下降为接近 3:2 外, 该层其他原子及其下方一至两个原子层厚度的区域在弛豫过程中也发生了显著的结构变化. 图7给出弛豫前后沿  $[001]$  方向硅碳原子数分布的演变情况. 从图7可以看出, 弛豫过程对碳原子数分布的影响较小, 而对硅原子数分布的影响很大. 这种影响除了体现在界面硅原子数增加, 界面下方硅原子数减少之外, 另一重要特征是界面下方约两到三个原子层厚度区域内的原子在沿  $[001]$  方向的排列上出现一定程度的无序化, 即层与层之间的界限变得模糊了. 尽管如此, 这一区域的原子在  $x-y$  面内仍保持一定的有序度. 图8给出图7中  $z = 1.21 - 1.45 \text{ nm}$  区域硅原子的排列及键合情况. 这一区域的原子包括第二层、第三层及第四层的硅原子. 从图8可以看到, 第二层的硅原子基本上还在格点上, 只是由于迁移中存在的某种混乱使得硅原子的排列也相应地存在某种混乱. 第三层硅原子在  $x-y$  面内也基本有序. 由于原子沿  $[001]$  方向的迁移, 第二层的两个硅原子与第四层的两个硅原子出现成键现象. 另外还可以发现, 在  $x-y$  平面内看, 第二层中少量硅原子沿接近  $[1\bar{1}0]$  的方向二聚, 而第三层中的少量硅原子则沿接近  $[110]$  的方向二

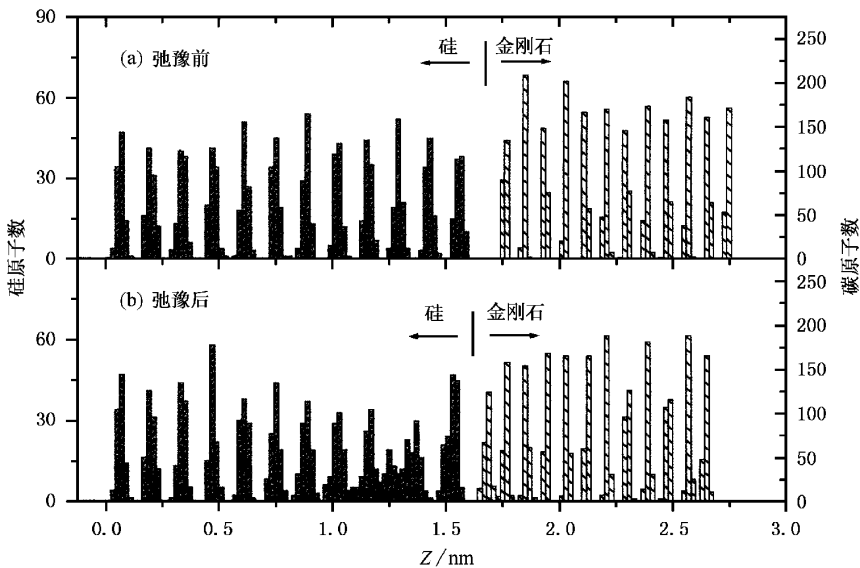


图7 弛豫前后沿  $[001]$  方向硅碳原子数的分布

聚. 图中箭头所指处为二聚键. 形成二聚键的地方均是第二层原子的迁移出现了局域混乱的地方.

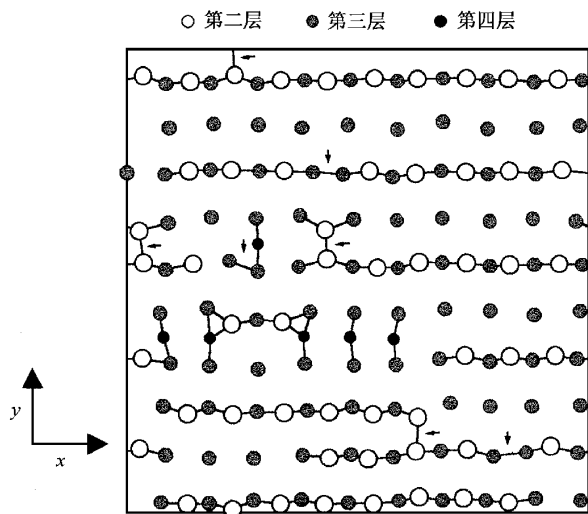


图 8 图 7 中  $z = 1.21-1.45$  nm 区域内硅原子的排列及键合情况

从弛豫前后硅碳原子的演变情况来看, 一个明显的特征是界面处及其附近的硅原子在金刚石晶格的影响下偏离原格点位置发生位移, 并迎合碳原子的晶格排列. 这一点除了体现在第二层部分硅原子向上迁移至界面以减少金刚石一侧的悬键密度外, 还体现在晶格匹配过程中原始界面硅原子的面内迁移幅度也远大于界面碳原子. 如图 5 中有不少本为同一行(沿  $[110]$  方向)的硅原子在弛豫过程中甚至沿  $[1\bar{1}0]$  方向发生了  $\frac{\sqrt{2}}{2}a_D$  的相对位移, 即弛豫后隶属不同的行了, 相应地还伴随出现第二层硅原子向界面迁移时的错行现象. 而在另一方面, 界面碳原子的面内移动幅度就小得多. 我们认为, 由于碳碳原子间的相互作用要强于硅碳及硅硅原子间的相互作用<sup>[11]</sup>, 因此硅原子迎合碳原子的排列是合理的, 因为这种迎合只需破坏较弱的硅硅键或使之发生畸

变. 相反, 若碳原子迎合硅原子的排列则需使较强的碳碳键被破坏或发生畸变, 这在能量上是不利的. 由此我们推断, 在实际金刚石膜的异质外延过程中, 硅衬底表面层及近表面层的部分区域可能会在碳沉积层作用下出现较大幅度的结构变化. 在这一点上, 以往的模型还很少强调过.

迄今为止, 我们讨论的是金刚石/硅(001)界面. 这也是目前实验与理论建模中较为关注的问题. 此外, 近年也有少量关于金刚石/硅(111)界面的研究工作<sup>[12]</sup>. 除此以外, 有关金刚石/硅两相取向关系的研究则似乎少有报道. 这与其他材料, 如 SiC 晶须增强 Al 基复合材料的研究中报道了多种 Al/SiC 取向关系<sup>[13]</sup> 颇不相同. 尽管如此, 文献<sup>[13]</sup> 提出的采用结合能计算来寻找更多两相取向关系的方法或许有助于找到金刚石与硅之间更为完美的界面匹配方式.

## 4 结 论

本文对未重构的金刚石与硅(001)面相接触时界面附近原子层的弛豫过程及形成的异质界面结构进行了分子动力学模拟. 研究发现异质界面碳硅原子层的原子总数之比从弛豫前的 9:4 下降为弛豫后的接近 3:2. 界面处金刚石与硅晶格沿  $[110]$  与  $[1\bar{1}0]$  方向分别大致采取 3:2 与 1:1 的方式实现匹配, 而原始这两个方向碳硅原子数之比均为 3:2. 界面下方部分第二层的硅原子发生了迁移至界面的过程是导致这一变化的原因. 此外, 该层其他原子及其底下一至两个原子层厚度的区域在  $[001]$  方向出现朝无序化转变的倾向. 界面处碳硅原子形成强烈的键合, 平均键长为 0.189 nm. 研究表明, 晶格匹配过程主要是硅原子迎合碳原子排列的过程.

[1] X. Jiang, C. P. Klages, *Diamond Relat. Mater.*, **2**(1993), 1112.

[2] Ke-an Feng, Jie Yang, Zhang-da Lin, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 2264.

[3] S. T. Lee, H. Y. Peng, X. T. Zhou *et al.*, *Science*, **287**(2000), 104.

[4] W. S. Verwoerd, *Diamond Relat. Mater.*, **1**(1992), 195.

[5] W. S. Verwoerd, *Surf. Sci.*, **304**(1994), 24.

[6] D. A. Tucker, D. K. Seo, M. H. Whangbo *et al.*, *Surf. Sci.*, **334**(1995), 179.

[7] R. Q. Zhang, E. Bertran, W. L. Wang *et al.*, *Diamond Relat. Mater.*, **9**(2000), 146.

[8] M. Sternberg, W. R. L. Lambrecht, Th. Frauenheim, *Phys. Rev.*, **B56**(1997), 1568.

[9] J. Tersoff, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 5566.

[10] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*

(Oxford University ,Oxford ,1987).

69(1996),1086.

[ 11 ] J. Yamauchi ,M. Tsukada ,*App. Surf. Sci.* , **75** (1994) ,58.

[ 13 ] Xuan Luo ,Ge-fei Qian ,E. G. Wang *et al.* ,*Phys. Rev.* ,**B59**

[ 12 ] R. Q. Zhang ,W. L. Wang J. Esteve *et al.* ,*Appl. Phys. Lett.* ,

(1999) ,10125.

## A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF DIAMOND/SILICON( 001 ) INTERFACE\*

DAI YONG-BING<sup>1)</sup> SHEN HE-SHENG<sup>1)</sup> ZHANG ZHI-MING<sup>1)</sup> HE XIAN-CHANG<sup>2)</sup>

HU XIAO-JUN<sup>2)</sup> SUN FANG-HONG<sup>1)</sup> XIN HAI-WEI<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>*Institute of Microelectronic Technology , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200030 ,China )*

<sup>2)</sup>*School of Materials , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200030 ,China )*

( Received 29 June 2000 ; revised manuscript received 12 September 2000 )

### ABSTRACT

The structure of diamond/silicon interface , which was formed by the contact and the subsequent relaxation of the unreconstructed( 001 ) surfaces of diamond film and silicon substrate , has been investigated by molecular dynamics simulation. The interaction among atoms of the silicon/carbon binary system was described by Tersoff many-body empirical potential. Before relaxation , the ratios of silicon atoms to carbon atoms along [ 110 ] and [  $1\bar{1}0$  ] directions are both 3:2 and the ratio of the total number of interfacial silicon atoms to that of carbon is 9:4. After relaxation , the matching of diamond and silicon lattices has been changed : along [ 110 ] direction , a 3:2 coincidence relation is roughly remained , but along [  $1\bar{1}0$  ] direction , a 1:1 coincidence relation is approximately adopted. Accordingly , the ratio of the total number of interfacial silicon atoms to that of carbon is near 3:2. The migration of partial silicon atoms , which were originally in the second layer , upward to the interface is responsible for such changes. The silicon lattice near the interface shows the tendency of disordering along [ 001 ] direction. The strong bonding between interfacial silicon and carbon atoms was found and Si-C bonds with an average length of 0.189 nm were formed. This study has confirmed that the main feature of lattice matching is the meeting of silicon atoms at and near the interface to the arrangement of interfacial carbon atoms.

**Keywords** : diamond , silicon , interface , molecular dynamics

**PACC** : 6848 , 6185 , 3420 , 6190

\* Project supported by the Foundation of High Technology Research and Development Plan of China( Grant No. 715-002-0010 ) and by China Post-doctoral Science Foundation.