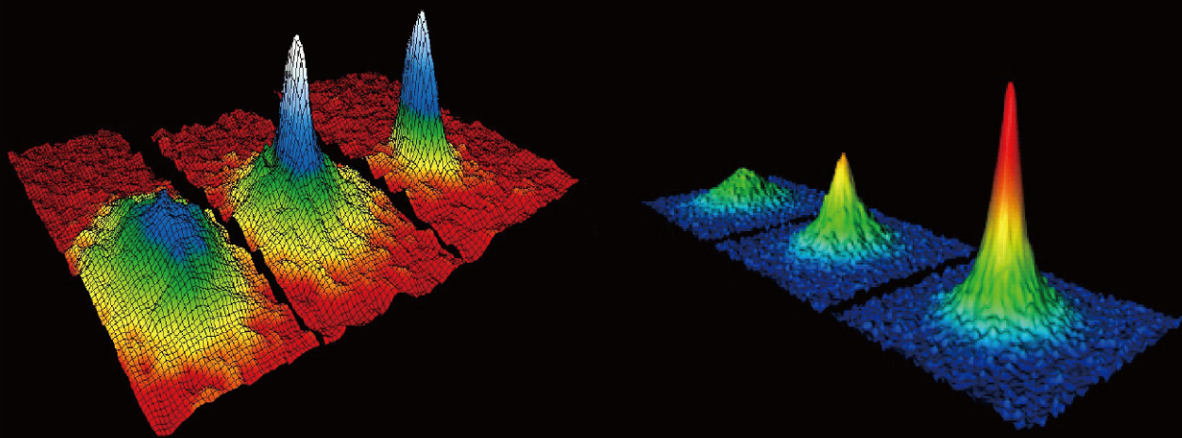




DANGJIN WULIXUE QIANYAN WENTI XUANJIANG

当今物理学前沿问题选讲

◎ 童国平 主编

当今物理学前沿问题选讲

童国平 主编



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS

浙江大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

当今物理学前沿问题选讲/童国平主编. —杭州:
浙江大学出版社, 2010. 11

ISBN 978-7-308-08006-4

I. ①当… II. ①童… III. ①物理学—研究 IV.
①04

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 190741 号

当今物理学前沿问题选讲

童国平 主编

责任编辑 石国华

封面设计 刘依群

出版发行 浙江大学出版社

(杭州市天目山路 148 号 邮政编码 310007)

(网址: <http://www.zjupress.com>)

排 版 星云光电图文制作工作室

印 刷 杭州浙大同济教育彩印有限公司

开 本 710mm×1000mm 1/16

印 张 13

字 数 255 千字

版 印 次 2010 年 11 月第 1 版 2010 年 11 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-308-08006-4

定 价 25.00 元

版权所有 翻印必究 印装差错 负责调换

浙江大学出版社发行部邮购电话 (0571)88925591

内容简介

本书主要从低维凝聚态物理、光学与技术、非线性物理、流体微流动、核物理等方向介绍一些关于当今物理学前沿发展的概况。低维物理主要涉及薄膜物理、量子霍尔效应、石墨烯(Graphene)与碳纳米管、导电发光塑料、超冷原子物理以及自旋电子学;光学方向主要阐述激光全息术、固体光学特征、三维传感与三维显示、飞秒超快光学、太赫兹电磁波、稀土发光材料、光纤布喇格光栅传感器;孤立子和混沌学作为非线性物理的主要内容来介绍;流体微流动的内容包含了渗流力学和微米尺度的流动。全书注重物理新现象、新规律、新方法的描述,尽量不出现复杂的数学公式,目的是体会研究物理学的方法和乐趣,激起读者学习物理学的兴趣。

本书可作为大学高年级学生的教材或参考书,也可作为物理低年级研究生了解相关领域发展的阅读材料,同时还可以供讲授有关课程的高等院校教师参考。

前 言

物理学是一门自然科学的基础性学科,它担负着探讨物质结构和运动基本规律的重要任务。随着科学技术的飞速发展,人们对物理现象和物理规律的研究探索不断深入,研究领域不断拓展,新的研究成果不断涌现。物理学与其他学科的交叉也显得尤为突出,诞生了诸多新兴的、交叉的、与物理学相关的学科,丰富了人们对物质世界物理运动基本规律的认识和掌握,促进了新科学技术的产生、成长和发展,改善了人们的生活质量。因此,物理学与我们的日常生活息息相关,物理学专业的学生更应该抢先掌握和了解这些新的物理现象和运动规律。那么,如何做到这一点呢?最好的方法还是走到物理学的前沿去看一看,百闻不如一见!但是,物理学前沿涉及的领域和内容实在太多,要想在短时间内看清楚物理学前沿的全貌还真有点难!如果你只想对物理学这一大片原野略知一二,可以透过物理学的某些分支学科和研究方向的进展这个窗口来了解;如果你想鸟瞰整个原野,不妨走出户外看看,细细品味这美好的景色。本书取名为《当今物理学前沿问题选讲》就是出于这样一种考虑而编写的。这里“当今”两字主要突现时代气息,意指近几年来在物理学中出现的新概念、新规律、新分支、新技术以及新成果等。比如,石墨烯(Graphene)中的无质量狄拉克费米子、自旋量子霍尔效应以及自旋电子学(Spintronics)等都是新的物理概念。激光全息术、太赫兹技术、导电发光塑料等都是新技术的增长点。《当今物理学前沿问题选讲》共分19讲,每一讲由一位教授或博士执笔,绝大部分的内容都取材于相关的前沿研究方向。主要从低维凝聚态物理、光学与技术、非线性物理、流体微流动、核物理等方向介绍一些关于现代物理学前沿发展的概况。这里的低维物理主要涉及薄膜物理、量子霍尔效应、石墨烯(Graphene)与碳纳米管、导电发光塑料、冷原子物理以及自旋电子学;光学方向主要阐述激光全息术、固体光学特征、三维传感与三维显示、飞秒超快光学、太赫兹电磁波、稀土发光材料、光纤布喇格光栅传感器;孤立子和混沌学作为非线性物理的主要内容来介绍;流体微流动的内容包含了渗流力学和微米尺度的流动。第1、2、3、4、6、7、10、11、12、13、14、15、16、17、18讲分别由浙江师范大学吴锋民教授、高先龙教授、李盛教授、邱宇博士、李画眉教授、郭海博士、王辉教授、李勇教授、黄仕华教授、彭保进教授、周卫东教授、宋付权教授、许友生教授、叶美盈教授、林机教授撰写,第19讲由湖州师范学院于少英教授撰写,第5、8和9讲由童

2 当今物理学前沿问题选讲

国平教授撰写。

在编写过程中主要基于对物理学前沿了解的考虑,没有给出较多的数学公式以及研究方法的细节,注重的是物理新现象、新规律、新方法的描述和研究的结果以及它的应用,这样做有利于学生不至于迷失方向。另一方面,由于取材的局限性和独立性,每一讲没有考虑内容前后的连贯性和逻辑性。因此,本书不追求主线的明晰性,大致上按照凝聚态物理、光学、流体力学、非线性物理和核物理学这样的模块来编排。

由于本人学识浅薄,再加上时间仓促,书中一定存在许多不妥或错误之处,恳请各位读者提出宝贵意见,以便以后修正。

最后,感谢浙江师范大学教务处和数理与信息工程学院对本书出版的大力支持;感谢“国家高等学校物理特色专业”的资助;感谢各位教授、博士对本书编写的关心、支持和帮助。

童国平

2010年8月于浙江师范大学丽泽花园

目 录

第 1 讲 薄膜物理	吴锋民 (1)
1.1 引 言	(1)
1.2 薄膜的生长过程	(2)
1.3 薄膜的生长模式	(3)
1.4 薄膜的制备方法	(4)
1.5 薄膜生长的计算机模拟	(7)
第 2 讲 超冷原子气与量子多体系统的模拟	高先龙 (11)
2.1 引 言	(11)
2.2 光晶格与 Hubbard 模型	(13)
2.3 光晶格与强关联系统	(14)
2.4 一维冷原子体系	(17)
2.5 展 望	(21)
第 3 讲 导电发光塑料	李 盛 (26)
3.1 导电塑料的发现	(26)
3.2 早已揭示的机理	(27)
3.3 模型的构建	(29)
3.4 导电塑料研究新进展及塑料芯片	(30)
3.5 发光塑料的发现	(31)
3.6 有机发光材料	(32)
第 4 讲 固体的光学特征	邱 宇 (34)
4.1 引 言	(34)
4.2 晶体结构	(34)
4.3 光学跃迁	(37)
4.4 结束语	(39)

2 当今物理学前沿问题选讲

第5讲 量子霍尔效应	童国平 (40)
5.1 经典霍尔效应	(40)
5.2 磁场中的电子能量	(42)
5.3 磁通量子化	(43)
5.4 量子霍尔效应	(44)
5.5 结束语	(50)
第6讲 玻色—爱因斯坦凝聚	李画眉 (51)
6.1 玻色—爱因斯坦凝聚(BEC)——新的物质状态	(51)
6.2 BEC 的形成条件	(52)
6.3 BEC 的实现及相关技术	(53)
6.4 BEC 研究的新进展	(56)
6.5 BEC 的应用前景	(57)
第7讲 稀土光功能材料	郭海 (60)
7.1 稀土的特性及其在新材料中的应用	(60)
7.2 稀土光功能材料	(61)
7.3 稀土离子发光原理	(62)
第8讲 石墨烯与碳纳米管	童国平 (67)
8.1 引言	(67)
8.2 石墨烯的结构	(68)
8.3 石墨烯的性质和应用	(68)
8.4 石墨烯的基础理论研究进展	(71)
8.5 碳纳米管及其应用	(72)
8.6 碳纳米管制备方法	(76)
8.7 结束语	(77)
第9讲 自旋电子学	童国平 (79)
9.1 引言	(79)
9.2 巨磁电阻	(80)
9.3 自旋电子学的发展简况	(83)
9.4 半导体自旋电子学	(85)
9.5 有机自旋电子学	(87)
9.6 结束语	(93)

第 10 讲 全息技术	王 辉 (95)
10.1 激光全息原理	(95)
10.2 全息应用	(98)
10.3 全息发展展望	(101)
第 11 讲 光学三维传感及三维显示	李 勇 (104)
11.1 光学三维传感概述	(104)
11.2 被动光学三维传感	(105)
11.3 主动光学三维传感	(106)
11.4 光学三维传感的发展趋势	(113)
11.5 三维显示技术概述	(114)
11.6 三维显示分类及其原理	(115)
第 12 讲 超短脉冲激光及超快过程的探测	黄仕华 (123)
12.1 短暂时间间隔测量的历史回顾	(123)
12.2 超短脉冲激光	(125)
12.3 自锁模钛宝石(Ti:Sapphire)激光器	(125)
12.4 超快过程的探测方法	(127)
12.5 飞秒技术及其应用	(131)
第 13 讲 光纤布喇格光栅在传感中的应用	彭保进 (134)
13.1 光纤布喇格光栅传感基础简介	(134)
13.2 FBG 的解调方法	(136)
13.3 复用技术	(138)
13.4 FBG 应用实例	(139)
第 14 讲 太赫兹技术	周卫东 (144)
14.1 太赫兹波的特性和优点	(144)
14.2 太赫兹波的产生	(145)
14.3 太赫兹辐射的探测	(147)
14.4 展 望	(147)
第 15 讲 微米尺度结构中的流动	宋付权 (149)
15.1 常规尺度下不可压缩流体的运动理论	(149)
15.2 微米尺度下液体流动的机理研究	(150)

4 当今物理学前沿问题选讲

15.3	微米尺度下液体流动的减阻机理研究	(153)
15.4	微流动研究和理论应用展望	(158)
 第 16 讲 渗流力学		
	许友生	(160)
16.1	多孔介质	(160)
16.2	渗流力学发展简史	(162)
16.3	渗流力学内容	(163)
16.4	达西渗流定律	(166)
16.5	渗流力学应用	(167)
 第 17 讲 混沌理论简介		
	叶美盈	(168)
17.1	混沌的定义	(168)
17.2	混沌的特征	(169)
17.3	混沌的定量刻画	(174)
17.4	通向混沌的道路	(178)
 第 18 讲 孤立子		
	林 机	(181)
18.1	孤立子的研究简史	(181)
18.2	可积性与潘勒韦 (Painlevé) 性质	(182)
 第 19 讲 原子核物理		
	于少英	(187)
19.1	引 言	(187)
19.2	近年来核物理的发展简介	(189)
19.3	结束语	(196)

第 1 讲 薄膜物理

吴锋民

1.1 引言

随着现代高科技产业,如集成电路、固体发光和激光器件、磁记录材料和器件等的迅速发展,薄膜科学与技术愈来愈受到重视。其原因是薄膜的研究和开发对这些产业的贡献日益增大,薄膜科学研究的成果转化为生产力的速度愈来愈快。这些产业的一个显著特点是要求工艺的控制精度达到纳米级水平,如半导体激光器件中广泛使用的量子阱和超晶格材料的单层厚度一般为 10nm,作为欧姆接触的金属硅化物的厚度为 45nm,而在磁头材料中引起广泛关注的巨磁电阻金属多层膜的单层厚度是 1nm 量级。

薄膜物理是研究薄膜制备技术、生长机理、控制方法和物理特性分析的物理学重要分支,是凝聚态物理学的重要组成部分,也是薄膜科学和技术及现代材料科学的重要基础。薄膜(特别是纳米尺度薄膜)的异乎寻常的结构和特性为发展新型功能材料开辟了宽广的途径,同时也为固体物理学及凝聚态物理学等开辟了一个新的研究领域。薄膜的生长过程,尤其是生长初期沉积原子的凝聚行为对薄膜器件的质量有重要的影响,它往往会直接影响到表面及界面的结构和器件的热学、电学、光学性质,因而在薄膜材料研制过程中,分析研究薄膜的生长模式、生长机理以及理论模型对分析新材料的微观结构、特殊性能和制备环境之间的关系有着十分重要的理论意义和应用价值。

从基础研究的角度来看,薄膜制备的质量及其物理特性与生长初期原子在亚单层(Submonolayer)的扩散和成岛的微观过程密切相关。对成核机理的研究涉及吸附原子之间及其与基底原子之间的相互作用等诸多表面科学的基本问题。此外,薄膜生长往往表现出一些特殊的动力学规律,如非平衡生长、非线性生长和各向异性生长等,这些动力学规律可用某种形式的标度理论来描述。在一定条件下,发展薄膜生长的动力学方程,已经引起了近 20 年来在固体物理和统计物理交叉领域的一系列重要发现和突破,同时也大大丰富了凝聚态物理学科的研究内容^[1~3]。

从技术应用角度来看,人造材料的力学、热学、电学、磁学和光学性质完全依赖于纳米微结构界面的理想程度。对各种制造工艺的控制和改进,极大地体现在对原子水平上薄膜生长中各种复杂原子过程(如原子沉积、扩散、成核、聚集、合并等微观过程)的了解和控制。因此,发展新型薄膜系统(包括基底类型和沉积原子种类、沉积手段、控制条件等)并在原子尺度上研究相关的物理现象,对理解薄膜的生长过程、控制生长条件、提高薄膜生长质量、掌握纳米结构的形成和稳定性规律、验证其对薄膜材料的物理和化学性质的影响,从而改善薄膜和低维结构以及微电子元器件等的制造工艺具有直接的应用价值,并将激发下一代微电子、光电子工业的技术革命^[3,4]。薄膜的研究和开发为微电子学、光电子学、磁电子学等新兴交叉学科的发展提供了材料基础。高质量的薄膜生产工艺、有关薄膜的组成、晶体的结构和物理性能成为这些新学科的重要组成部分。半导体异质结、量子阱和超晶格、量子点等,也为发现量子霍尔效应、量子尺寸效应、单电子隧穿效应等提供了材料基础。

1.2 薄膜的生长过程

薄膜的生长过程极为丰富和复杂,包括一系列热力学和动力学过程,它与沉积物质的组成元素、生长衬底的种类和结构、沉积原子的能量、沉积生长条件、衬底温度变化、辅助沉积与制备手段等一系列因素都密切相关。但从总体上说一般薄膜生长过程可以大致归结为粒子沉积、在基底表面上扩散、成核和聚集长大等过程^[5-6]。

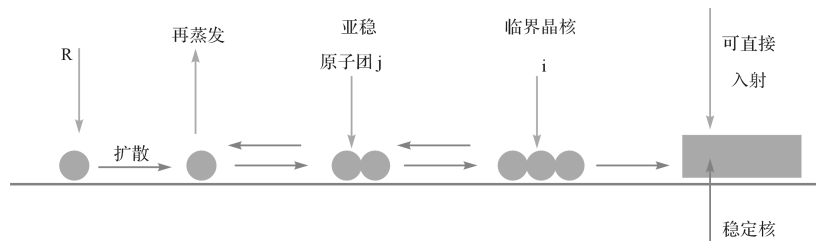


图 1-1 薄膜的生长过程

(1)沉积(Deposition)过程:原子通过某种方式沉积到基底表面上。实验上常用的有真空沉积、电解沉积、气相沉积、液相沉积、溅射沉积和分子束外延(MBE)等方式。

(2)扩散(Diffusion)过程:沉积原子或原子团在基底表面上扩散。通常情况作随机的布朗运动,但受基底表面结构或外场作用等因素的影响,扩散运动会表现出各向异性。具体表现为沉积单原子在基底上扩散、沉积原子沿着岛扩散、原子团的扩散等。

(3)成核(Nucleation)过程:沉积原子相互结合形成原子团、扩散原子被基底上

已存在的岛所俘获并在岛上成核。在成核过程中,当生长岛所包含的原子数大于某个临界值(称作临界岛尺寸, Critical Island Size)时,岛是稳定的。临界岛尺寸的大小受生长材料、表面温度及沉积通量等实验参数的影响。

(4)生长(growth)过程:新的原子不断加入到已经成核的原子团中,使它们稳定长大成更大的原子岛,岛之间的相互接合(Coalescence)形成连续的薄膜。在薄膜生长初期,薄膜的生长形貌主要有分形生长、枝晶生长和团状生长等,这些也与生长材料和生长条件密切相关。

此外,在实际的薄膜生长过程中,在不同的条件下,还会出现沉积原子从基底上再蒸发(Re-evaporation)、岛边缘的原子脱离岛(Deattachment)后再扩散和原子在岛之间扩散使表面发生弛豫达到平衡的熟化(Ostward Ripening)或粗化(Coarsening)等现象^[1,7]。

1.3 薄膜的生长模式

薄膜的生长过程十分复杂,其生长模式也不尽相同。通常存在三种主要的生长模式^[5,8](如图 1-2 所示),即:

(1)层状生长(Frank-van der Merwe,或 Layer-by-Layer Growth)模式:当被沉积物质与基底之间的浸润性较好时,吸附原子更多地倾向于与衬底原子成键结合,使薄膜生长从成核阶段即为二维扩展模式。晶核长大后联结成单原子层,铺满衬底后继续上述过程,一层层生长,也称二维生长模式。

(2)岛状生长(Volmer-Weber)模式:当吸附原子之间的相互作用强于与基底原子间的作用时,吸附原子倾向于自身相互键合起来时,会形成众多的岛,造成表面粗糙,也称三维生长模式。

(3)混合生长(Stranski-Krastanov)模式:介于上述两者之间,先层状生长后转变为岛状生长的生长模式。这种模式一般发生在二维生长后膜内出现应力的情况。

除了上述三类生长模式外,最近有人还提出再现的逐层生长(Reentrant Layer-by-Layer Growth)模式^[9,10]。

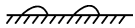
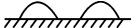
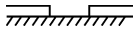
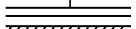
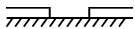
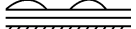
	$\theta < 1ML$	$1ML < \theta < 2ML$	$\theta > 2ML$
Volmer-Weber			
Frank-van der Merwe			
Stranski-Krastanov			

图 1-2 薄膜的三种生长模式

1.4 薄膜的制备方法

薄膜的制备分为气相、液相、固相三种,以气相沉积为主,包括物理气相沉积(PVD)和化学气相沉积(CVD)。物理气相沉积中只发生物理过程,化学气相沉积中包含了化学反应过程。常用的物理气相沉积方法是真空蒸发,包括热蒸发(常规的真空蒸发)、电子束蒸发、激光束熔蒸(激光脉冲熔蒸靶材中原子或分子到衬底,生长外延的氧化物单晶薄膜)、热壁生长、离子团束生长等。

热蒸发一般在高真空镀膜机内进行,试料直接由电阻加热丝或舟蒸发到衬底上,蒸发出的原子是自由、无碰撞的,沉积速度较快。分子束外延(MBE)一般在超高真空(10^{-8} Pa)装置内进行,高纯度的试料放置在特制的坩埚内蒸发,其速率可以通过调节温度进行精确控制,蒸发过程缓慢(沉积速率为 $0.1\sim 1\text{nm/s}$),可以有多个蒸发源,在装置内还带有原位检测部件,可以进行薄膜厚度监测、表面结构分析等,主要生长异质结化合物半导体薄膜。图 1-3 和图 1-4 分别为分子束外延装置的结构示意图和实物照片。

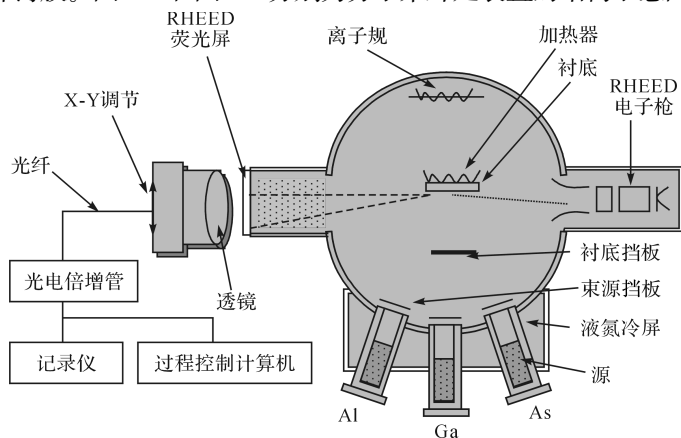


图 1-3 分子束外延装置



图 1-4 分子束外延装置

除了真空蒸发,最常用的物理气相沉积方法是溅射。溅射过程需要在真空系统中通入少量惰性气体(如氩气),使它放电产生离子,氩离子经偏压加速后轰击靶材,溅射出靶材原子到衬底上形成薄膜。溅射过程中还可以同时通入少量活性气体,使它和靶材原子在衬底上形成化合物薄膜,这就是反应溅射。溅射生长的主要特点:一是溅射粒子能量达到几个电子伏/原子,形成的薄膜比蒸发形成的薄膜牢固;二是离子能量、方向分布、质量不同,溅射速率不同;三是不同靶材的溅射率不同。溅射出的粒子包括一小部分离子——二次离子,可用来进行表面成分分析。溅射生长的不足之处是溅射效率不高,为提高溅射效率,通常增加氩离子速率、密度,但效果不明显。简单的溅射装置如图 1-5 所示。

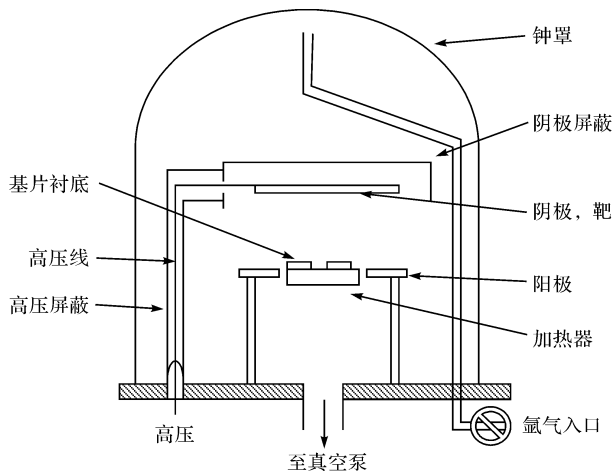


图 1-5 简单的溅射装置

为了提高溅射效率,通常在靶区加上平行于靶材的磁场,使电子产生回旋运动,二次电子被限制在靶周围的区域内,从而增加了气体原子的离化效率,可以大大提高速率,同时保持低温、低损伤,这就是磁控溅射。磁控溅射分为射频(RF)磁控溅射和直流(DC)磁控溅射两种,其示意图如图 1-6 所示。

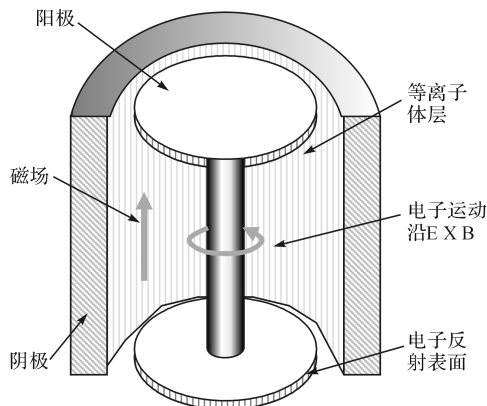


图 1-6 磁控溅射

化学气相沉积(Chemical Vapor Deposition, CVD)是用气相化合物分子携带所需原子在衬底上经过分解而沉积下来。用几种气相化合物分子可以携带几种原子在衬底上沉积形成掺有杂质的化合物薄膜。常规的 CVD 一般利用含氢和氯的化合物气相分子。CVD 一般包括表面吸附、配合基的热解或还原丢失和原子沉积等过程。利用专门的气相金属有机分子进行的 CVD 称为金属有机化学气相沉积(MOCVD)。通常用 MOCVD 方法将Ⅲ族、Ⅱ族元素的有机化合物和Ⅴ族、Ⅵ族的氢化物作为源材料,生长Ⅲ-V 族、Ⅱ-VI 族化合物等半导体薄膜。金属有机化学气相沉积方法的优点是易于通过精确控制多种气体流量来制备多组元化合物,易于掺杂,易于控制化合物的生长速度等。

此外,还有脉冲激光束熔蒸(Pulse Laser Ablation, PLA)方法,其装置与分子束外延有所不同,主要差别是前者用激光熔蒸替代了后者的原子束炉,如图 1-7 所示。用脉冲宽度为 10~20ms 的紫外激光束(193nm 的 ArF 激光和 248nm 的 KrF 激光)射向多晶靶,可以产生一系列复杂的过程,首先使靶急剧升温、蒸发,靶材上方产生高密度粒子流。靶材气体对光的增强的吸收,直至产生电离,形成稠密的等离子体。对后期激光脉冲的吸收,使等离子体加热、加速,产生冲击波,从而在衬底上形成薄膜。使用脉冲激光熔蒸方法的优点是:可以实现同组分沉积、高能等离子体沉积、能在气体中实现反应沉积,并达到多层外延异质结的生长。

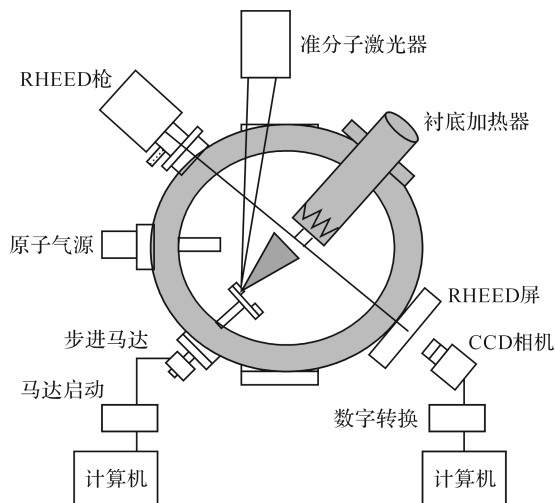


图 1-7 激光熔蒸分子束外延装置

当过饱和的液相和衬底接触后会在衬底表面沉积薄膜,沉积材料和衬底的晶格匹配时可以外生长单晶薄膜,这就是液相外延生长。若在衬底上先沉积非晶薄膜,再提高温度使非晶薄膜/单晶衬底界面上外延生成单晶薄膜,这就是固相外延生长。另外还有有机薄膜生长的 Langmuir-Blodgett 法、化学溶液涂层法(电镀、化学镀)、自组装单层膜(self-assembled Monolayer)生长法等。

1.5 薄膜生长的计算机模拟

除了运用先进的实验观测设备,如原子力显微镜(AFM)、扫描隧道显微术(STM)、热原子散射技术(TEAS)、低能衍射技术(LEED)和高能电子衍射(RHEED)等进行分析研究外,利用计算机在原子尺度上模拟原子、分子成膜的结构和行为,正逐渐成为一种有力的分析研究手段。常用的计算机模拟方法有:

(1)分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟^[12-14]:这种方法是按该体系内部的内禀动力学规律来计算并确定位型转变,即原子的运动与特定的轨道联系在一起。当核运动的量子效应可以忽略,以及绝热近似严格成立时,可以根据单个原子与周围原子受到的作用力,计算每个原子的运行轨迹,从而计算原子运动的位置等。分子动力学方法不存在任何随机因素,每个原子都服从经典的牛顿力学。由于要处理大量动态的原子计算,对计算机的性能和算法要求较高。在实际模拟中面临有限观测时间和有限系统大小的限制。

目前许多 MD 模型还是基于经验和半经验作用势,用于模拟小范围(1~50nm)原子团簇的生长。如:J.G.Yu 等用 MD 方法通过对 Cu(111)和 Ag(111)台阶边缘的原子沉积过程的模拟,研究金属(111)面上外延生长的短程吸引现象^[15];V.I.Ivashchenko 等用 MD 法研究 α -SiC 薄膜的原子和电子结构^[16];R.Ruberto 等研究 C₆₀/Cu 复合体的形成^[17];S.Y.Wang 等研究液态 Al_xGe_{1-x}合金的结构、动力学和电子特性^[18];T.K.Gu 等研究不同温度下 GaSb 合金的结构转变^[19];V.V.Hoaag 等研究超冷 Al₂O₃ 的动力学特性^[20];J.Ferron 等则用 MD 方法研究低温下 Cu(111)面上自扩散时的非随机行为^[21];H.Zhang 等研究 Si(100)表面 Al 团簇束沉积及生长行为^[22];T.Aoki 等则模拟了用不同尺寸 Ar 团簇轰击 Si 表面的动力学行为^[23];还有 S.C.Lee 等研究纳米尺度 Au 团簇在 Au(001)表面的沉积行为^[24],等等。

(2)动力学蒙特卡罗(kinetic Monte Carlo, kMC)模拟^[12,25]:该方法是将微观粒子动力学与 Monte Carlo 方法相结合,是将一个小的原子体系的能量计算,结合 MC 方法用于一个范围较大的原子随机过程。kMC 模拟结果依赖于模型的建立和邻近原子的作用势计算。因而,有针对性地选择原子之间的势函数、确定参数、原子间的作用对不同事件发生速率的影响关系的理论与计算方法,是保证 kMC 模型有效性的关键技术。

kMC 模型是一种综合的模型,已成为原子尺度研究薄膜生长的有力工具,显示出强大的生命力。如:B.Lehner 等用 kMC 方法研究 Xe 在 Pt(111)和 Pt(997)表面上的沉积及生长行为^[26];L.Gomez 等模拟了 Pb 作为表面剂时 Co/Cu(111)体系的生长问题^[27];D.Spisak 等模拟了 Cu(117)表面纳米 Fe 线的生长过程^[28];M.