

# 邻晶面外延生长机制的动力学 Monte Carlo 模拟<sup>\*</sup>

茅惠兵<sup>1)B)</sup> 景为平<sup>2)†</sup> 俞建国<sup>1)</sup> 王基庆<sup>1)</sup> 王力<sup>1)</sup> 戴宁<sup>3)</sup>

1) 华东师范大学信息科学技术学院, 上海 200062)

2) 南通大学江苏省专用集成电路设计重点实验室, 江苏南通 226007)

3) 中国科学院红外物理国家实验室, 上海 200083)

(2005 年 6 月 19 日收到, 2006 年 1 月 13 日收到修改稿)

用动力学 Monte Carlo 模拟方法研究了 GaAs(001) 邻晶面的外延生长机制. Ehrlich-Schwoebel 势垒对邻晶面外延机制有重要的影响. 模拟结果显示, 低温下 Ehrlich-Schwoebel 势垒几乎能完全阻止原子向下一台阶面的迁移, 高温下原子已能有效地克服势垒的影响并向下一台阶面迁移. 在外延生长初期, 原子几乎在台阶面上均匀分布. 当表面覆盖度达到一定数量后, 台阶成核开始. 而由于 Ehrlich-Schwoebel 势垒的存在, 在台阶的上侧台阶面上开始有原子的积累, 而如果没有 Ehrlich-Schwoebel 势垒, 台阶上侧台阶面上的原子也能被有效地耗尽. Ehrlich-Schwoebel 势垒对邻晶面上的外延生长模式有显著的影响, 将明显提高达到台阶生长模式的温度.

关键词: 外延生长模式, 动力学 Monte Carlo, Ehrlich-Schwoebel 势垒

PACC: 6855, 6845, 8160

## 1. 引 言

自从以分子束外延 (MBE) 为代表的超薄层外延生长技术出现以来, 半导体外延的生长模式始终是研究的焦点之一. 精确的生长模式控制是制备高质量外延材料的基础, 对生长模式的研究也有助于人们对半导体表面原子动力学过程的认识. 在各种外延生长模式中, 邻晶面上的二维生长模式和台阶生长模式又是研究的重点. 这两个生长模式可以通过生长条件的改变 (如升高或降低生长温度) 得到精确的控制, 又能用常规的测量技术 (如反射式高能电子衍射) 监测.

实验技术的进展促进了原子尺度上表面原子迁移过程的研究. 但原子尺度上的表面动力学又是一个非常复杂的课题, 表面原子的迁移过程受诸如生长温度、生长气氛和表面原子构型等多种因素的影响. 经过多年的研究, 目前人们对一系列复杂的表面过程已有较完整的认识, 并不断地深化. 由于台阶位置和平面位置原子构型的区别, 在台阶位置存在额

外的势垒, 即 Ehrlich-Schwoebel 势垒. 该势垒最早是 Ehrlich 在研究金属表面时提出的<sup>[1]</sup>, 并被 Schwoebel 所证实<sup>[2]</sup>. 近年围绕 Ehrlich-Schwoebel 势垒的影响, 人们对金属外延的生长机制, 特别是成核机制做了大量卓有成效的工作, 并确认 Ehrlich-Schwoebel 势垒在第二层 (及以后各层) 原子的成核中起了关键性的作用<sup>[3-5]</sup>. GaAs 等化合物半导体外延中有关 Ehrlich-Schwoebel 势垒的讨论则相对较晚. Johnson 等在 1994 年根据 AFM (原子力显微镜) 图像及模拟结果认为在 GaAs 外延生长过程中也存在 Ehrlich-Schwoebel 势垒<sup>[6]</sup>. Apostolopoulos 等在 2002 年报道了低温条件下 (210—260 °C) 的实验和模拟结果<sup>[7]</sup>, 该项工作中考虑了 Ehrlich-Schwoebel 势垒的影响, 并得到了和实验一致的表面图像. Malherbe 在 2003 年对 GaAs 和 InP 外延生长中的表面波纹进行了详尽的讨论<sup>[8]</sup>, 并指出了 Ehrlich-Schwoebel 势垒在波纹形成中的作用. Trofimov 等用速率方程讨论了 GaAs 邻晶面上的生长模式<sup>[9]</sup>, 该讨论中也考虑了 Ehrlich-Schwoebel 势垒的影响, 但没有考虑 Ga 原子在表面上的各向异性迁移.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金 (批准号: 60576059, 90407009), 江苏省专用集成电路设计重点实验室开放课题 (批准号: JSICK0401) 和中国科学院红外物理国家实验室开放课题 (批准号: 200401) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: jing.wp@ntu.edu.cn

本文将用动力学 Monte Carlo (KMC) 方法研究 GaAs (001) 的邻晶面上的表面原子迁移过程, 特别是 Ehrlich-Schwoebel 势垒对表面迁移的影响, 以及由此引起的外延生长模式的变化. 本文将详细分析在常规温度 (500—680 °C) 下 GaAs 邻晶面上的生长机制, 给出台阶面上原子分布的规律, 并分析由此导致的对生长模式的影响, 特别要分析在 GaAs 表面上 Ga 原子的各向异性迁移对生长机制的影响.

## 2. 模型与算法

本文用动力学 Monte Carlo (KMC) 模型<sup>[10—17]</sup>计算邻晶面 GaAs 衬底上的表面原子迁移过程. 为了简化讨论的问题, 假设所用的衬底是简立方晶格. 实际上在本文讨论范围内, 表面覆盖度不超过 1, 所以简立方晶格模型不影响本文的结果. 由于 GaAs 外延生长是在富 As 条件下进行的 (通常 As 和 Ga 的束流比不小于 10), 所以 As 在表面上的迁移以及 As 和 Ga 的反应过程对生长影响很小, 可以认为 GaAs 的外延生长只由 Ga 原子决定. 在上述条件下, Ga 原子的吸附系数接近 1, 所以模型中也不考虑 Ga 原子的解吸附过程. 这样在外延生长过程中, 只需考虑两类表面过程, 首先是 Ga 原子的随机淀积, 淀积速率  $h(0) = N_0 F$ , 其中  $N_0$  是总的格点数,  $F$  是生长速率. 其次是 Ga 原子的迁移, 表面原子的迁移由 Arrhenius 关系决定, 过程 ( $j > 0$ ) 发生的概率  $h(j) = v \exp(-E/kT)$ , 其中  $E$  是发生迁移过程  $j$  必须克服的势垒,  $k$  是 Boltzmann 常数,  $T$  是绝对温度,  $v$  是过程  $j$  的尝试概率, 一般取  $v = 2kT/h$ , 其中  $h$  是 Planck 常数. 表面 Ga 原子的迁移由其束缚能  $E$  决定. 束缚能可以这样表示:  $E = E_s + nE_n + E_{SCH}$ , 其中  $E_s$  为表面势垒,  $E_n$  为最近邻原子 Ga 原子之间的相互作用能,  $n$  为最近邻原子的数目,  $E_{SCH}$  为 Ehrlich-Schwoebel 势垒, 若在平面位置, 则该势垒为 0.

Shiraishi 的研究表明<sup>[18]</sup>, 在 As 稳定的  $2 \times 4$  再构的 GaAs (001) 面上 Ga 原子的迁移是各向异性的, Ga 原子沿  $[\bar{1}10]$  方向迁移的势垒比沿  $[110]$  方向约小 0.4 eV. 在 (001) 面的邻晶面外延中, 在 (001) 面的邻晶面外延中, 势垒  $E$  还与倾斜角的大小和方向有关, 但由此导致的不对称远小于由  $E_s$  的各向异性导致的不对称. 综合以上考虑, 表面势垒  $E_s$  可由其平均值  $E_0$  和不对称度  $\Delta_E$  决定, 其中  $\Delta_E = E_{[\bar{1}10]}/E_{[110]}$ , 并由此定义表面概率  $h$  的不对称度  $\Delta_h =$

$$h_{[\bar{1}10]}/h_{[110]}.$$

在 KMC 模型中, 过程  $j$  发生的相对概率  $u(j) = h(j)/R$ , 其中  $R$  是总的概率,  $R = N_0 F + \sum_1^n h(j)$ , 其中  $n$  是表面上可以自由迁移的原子总数. KMC 的具体算法可以总结如下: (1) 按可以迁移的原子的具体构形确定所有过程  $j$  的概率  $h(j)$ , 并计算  $R$ ; (2) 在 (0, 1) 范围内确定随机数  $r_1$ ; (3) 按下列条件找到整数  $p$ , 它满足  $\sum_0^{p-1} h(j) \leq r_1 R < \sum_0^p h(j)$ ; (4) 执行随机过程  $p$ . 如果  $p = 0$ , 则执行一次表面淀积过程, 原子淀积的具体位置也随机确定. 如果  $p > 0$ , 则执行一次表面迁移过程. 执行完过程 (4) 以后回到步骤 (1), 如此循环往复, 并根据表面覆盖度确定循环的结束.

为了深入探讨 Ehrlich-Schwoebel 势垒对 GaAs (001) 邻晶面上成核机制的影响, 本文将研究向  $[\bar{1}10]$  方向倾斜, 倾斜角为  $1.1^\circ$  的 GaAs (001) 邻晶面上的外延机制. 模拟采用的晶格为  $250 \times 250$ , 并采用周期性边界条件, 该晶格共有 5 个台阶, 即每个台阶的长度为 50. 本文只讨论偏向  $[\bar{1}10]$  的邻晶面, 因为 GaAs (001) 面上的 Ga 原子迁移的各向异性, 原子沿  $[110]$  方向的迁移很弱, 台阶的影响相对较小, 故讨论偏向  $[110]$  方向的临晶面没有更多的意义. 综合各相关文献<sup>[19—21]</sup>, 本文采用的参数为:  $E_0$  为 1.58 eV,  $E_n$  为 0.24 eV,  $E_{SCH}$  为 0.3 eV, 并分别就  $\Delta_h = 1$  和  $\Delta_h = 100$  两种情况进行了模拟, 模拟中生长速度取为典型值 1 层/秒. 由于 Monte Carlo 模拟的特点, 更有意义的参数是上述量及其与温度的比值<sup>[21]</sup>, 在此不再讨论. 考虑到模拟计算的随机性, 本文的全部结果都是 5 次独立模拟计算的平均值.

## 3. 结果与讨论

图 1 是本文讨论的邻晶面示意图. 在该邻晶面上, 沿台阶方向的原子迁移有 3 种类型. A 类和 B 类是沿邻晶面方向的自由迁移. C 类迁移是从上台阶面向下台阶面的迁移, 它必须克服 Ehrlich-Schwoebel 势垒, 是本文讨论的重点. 邻晶面上 Ga 原子的成核方式有两种. 第 1 种是台阶面上的生长. 由于邻晶面上有若干自然的台阶, 当 Ga 原子迁移到该位置时, Ga 原子就结合在这个位置, 这种生长方式称为台阶成核模式. 第 2 种是两个或两个以上未成核的 Ga 原

子在台阶面上的任意位置结合,由此产生一个成核中心,然后其他原子再与其结合生长.这种生长方式称为二维成核模式.在邻晶面上,这两种成核模式是互相竞争的.

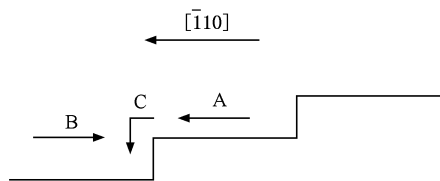


图1 邻晶面上原子迁移示意图

作为邻晶面外延中的主要生长模式,台阶生长模式的有效性依赖于台阶面上吸附原子的有效迁移.由图1可以看出,台阶生长模式中的原子来源于两个部分: B类迁移,它导致原子直接和台阶结合; C类迁移,它由上台阶面上的原子克服 Ehrlich-Schwoebel 势垒到达下台阶面,并成为台阶生长模式的一部分.若没有 Ehrlich-Schwoebel 势垒, A类迁移的原子将直接到达下个台阶面.考虑到迁移方向 A 与 B 的对称性,两类迁移将在生长模式中起同等重要的作用,而 Ehrlich-Schwoebel 势垒的存在,则打破了这种对称性.

图2是邻晶面上沿台阶方向从上台阶面向下一台阶面迁移(即C类迁移)的原子数目.图2显示,在低温下(773K),从上台阶面向下台阶面迁移的原子数目非常少,它表明在该温度下 Ehrlich-Schwoebel 势垒已有效地阻止了不同台阶面之间的原子输运.随着温度的升高,台阶面之间的原子输运显著增加,但直到873K,层间的原子输运还是显著地低于同温度下没有 Ehrlich-Schwoebel 势垒影响的情形.但随着温度的进一步上升,层间原子输运情况发生了根本的变化.在生长初期(表面覆盖度小于0.1),层间的原子输运能有效地进行,表现为层间原子迁移的数目随生长的进行同步增加,它表明在该温度下,原子能有效地克服 Ehrlich-Schwoebel 势垒.但随着生长的继续,台阶层间的原子输运几乎停止了.形成这种结果的原因是,当覆盖度达到0.1以上时,在上台阶面靠近台阶的位置已形成稳定的岛,因此上个台阶面上由A类迁移到达台阶位置的自由原子主要和这些岛结合,向下一个台阶面的输运当然就停止了.

图3(a)为  $\Delta_k = 100$ , 且温度为873K时具有不同表面覆盖度时原子沿台阶方向原子的分布情况,其中纵坐标表示平行于台阶方向的每列格点(在本文

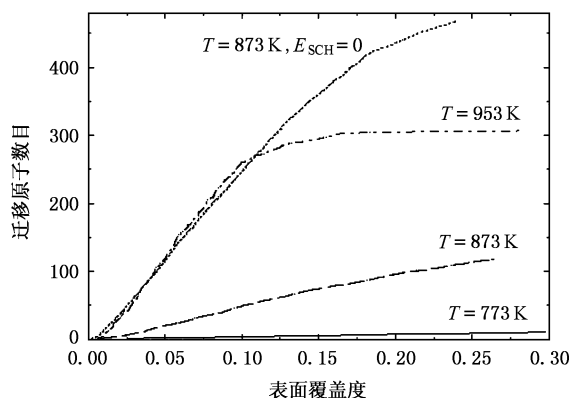


图2 邻晶面在模拟生长过程中C类迁移原子数目

中是250)被原子占据的比例.模拟结果显示,在生长初期(覆盖度为0.05和0.1),除了台阶处原子分布略多(台阶存在的结果)外,整个台阶面上的原子分布比较均匀,该结果表明邻晶面上成核还没有开始.当表面覆盖度达到0.2时,成核过程已经明显开始,在台阶处,已有1列完整的原子,在其外侧,明显表现出原子的耗尽,也即图中显示的格点位置45处的原子密度要明显小于台阶面上的原子密度(约为1/4).当覆盖度达到0.3时,上述结果进一步明显.在台阶的另一端,原子密度也发生了明显的变化.当表面覆盖度达到0.2以后,在靠近台阶处(格点位置8),原子密度明显高于其他位置,形成这种情况是由于 Ehrlich-Schwoebel 势垒的存在,原子开始在此成核积聚.

为深入研究 Ehrlich-Schwoebel 势垒的效应,图3(b)给出了不考虑 Ehrlich-Schwoebel 势垒(即  $E_{SCH} = 0$ , 其他参数同图3(a))时的模拟结果.结果显示,在生长初期,虽然靠近台阶的上侧台阶面上的原子被更多地耗尽,但总体上和图3(a)中的情况无显著差别.当表面覆盖度达到0.2时,图3(a)中原子只在格点位置小于10的部分被耗尽,而在  $E_{SCH} = 0$  时,格点位置小于20的原子都能被有效地耗尽.而在台阶面的另一侧,原子的耗尽程度反而变小.当表面覆盖度达到0.3时,这种情况也进一步明显.图3(c)直接把上述两种情况下表面覆盖度为0.3的模拟结果在同一图中表示出来.图3(c)明显地显示了两者的差别.可以认为在格点数小于20的两条曲线之间的部分就是由  $E_{SCH}$  的存在导致的台阶面上原子分布的变化,这部分原子也就是在台阶面另一侧台阶生长原子的变化.即,在无 Ehrlich-Schwoebel 势垒时更多的台阶成核原子是由上个台阶面上的原子直接迁移过

来的.

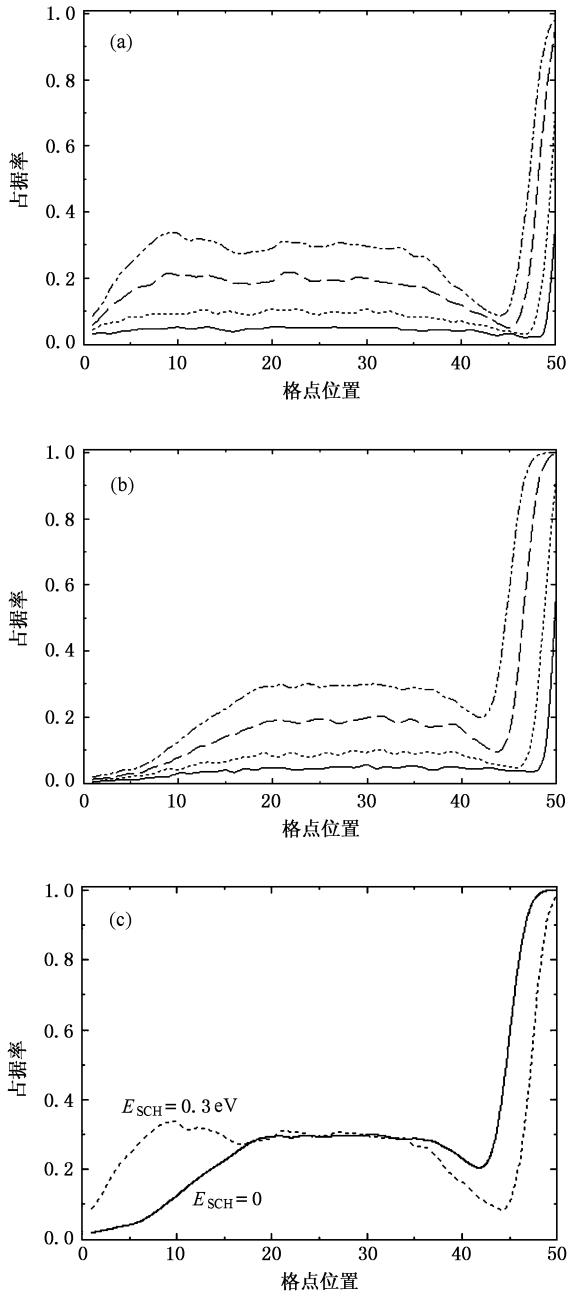


图3 873K时不同表面覆盖度时沿台阶面的原子分布 (a)  $E_{SCH}$  为 0.3 eV (b)  $E_{SCH}$  为 0 (c) 表面覆盖度为 0.3 时  $E_{SCH}$  为 0.3 eV 和 0 的结果比较. 在 (a) 和 (b) 中从下到上 4 条曲线的表面覆盖度分别为 0.05, 0.1, 0.2 和 0.3

图 4 是覆盖度为 0.3, 温度分别为 773, 873 和 953K 时的情况. 模拟结果显示, 在低温下 (773K), 由于原子的迁移能力很小, 除了极为靠近台阶位置以外, 在整个台阶面上原子均匀分布. 而在靠近台阶的位置, 由于 Ehrlich-Schwoebel 势垒的存在, 则存在原

子的积累. 在 873K 时, 台阶两侧 (实际为靠近台阶的上下侧) 的原子耗尽明显增大, 台阶上侧的台阶面上则有原子的积聚. 当温度进一步上升, 达到 953K 时, 情况发生了根本的变化. 由于表面原子迁移率的提高, 台阶两侧的耗尽范围和耗尽程度显著增大. 由于温度高, 表面原子有足够的概率越过台阶到达下台阶面, 而靠近台阶的上台阶面在 15 格点以内的原子都已被有效地耗尽, 同时在台阶上侧已无明显的原子积累.

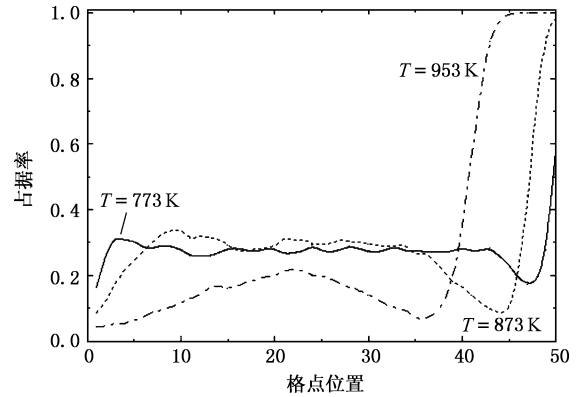


图4 表面覆盖度为 0.3 且温度分别为 773, 873 和 953K 时沿台阶方向的原子分布

表面迁移的各向异性对邻晶面上的成核过程有明显的影 响. 图 5 是不考虑各向异性迁移 (即  $\Delta_k = 1$ ) 不同温度时的模拟结果. 由于没有各向异性, 原子向四个等价方向的迁移概率相等, 使原子沿台阶方向的迁移降低, 使表面成核情况有较大的差别. 在较低温度下 (773K 和 873K), 台阶上侧台阶面上的耗尽区和原子积累区都更靠近台阶. 在高温下 (953K), 由于沿台阶方向的原子迁移降低, 在台阶面中部有更多的原子经二维成核生长, 由此使台阶面中部的原子密度明显高于存在表面迁移各向异性的情况, 同时, 由台阶生长模式生长的原子则明显减少.

图 4 和图 5 的模拟结果显示, 台阶模式生长的原子数目是随温度变化的. 温度越高, 台阶模式生长的原子数目也越多. 而图 3 的结果显示, 在模拟生长过程中, 随表面覆盖度的变化, 台阶模式生长的原子数也是变化的. 为了讨论问题的方便, 可以定义在整个生长过程中 (即表面覆盖度从 0 到 1) 台阶生长模式的原子占表面所有原子比例的最小值为参考值, 若最小值大于 0.5, 则认为在该条件下外延生长模

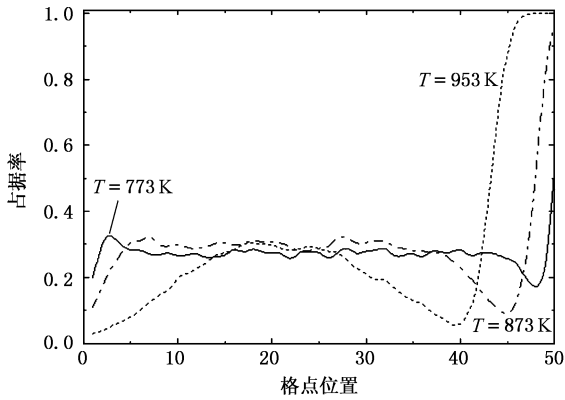


图5 不考虑表面迁移不对称(即  $\Delta_i = 1$ )时表面覆盖度为 0.3 时在 773 873 和 953K 时沿台阶方向的原子分布

式为台阶生长模式,否则就为二维生长模式.模拟结果显示在各向异性条件下,存在 Ehrlich-Schwoebel 势垒时,生长温度大于 943.5K 时,生长模式就为台阶生长模式,而不存在 Ehrlich-Schwoebel 势垒时,生长温度大于 899.0K 时,生长模式就已经是台阶生长模式了.若不考虑表面迁移的各向异性,存在 Ehrlich-Schwoebel 势垒时达到台阶生长模式的最低温度必须达到 970.0K.从上述不同条件下的转变温度可以看出,Ehrlich-Schwoebel 势垒对表面迁移有显著的遏制作用,而在向  $[110]$  方向倾斜的邻晶面上,表面迁移的各向异性也有助于沿台阶方向的原子迁移.

## 4. 结 论

本文用动力学 Monte Carlo 模拟方法研究了  $\text{GaAs}(001)$  邻晶面的外延生长机制. Ehrlich-Schwoebel 势垒对邻晶面外延机制有重要的影响.模拟结果显示,在 773K 的温度下,台阶势垒几乎能完全阻止原子向下一台阶面的迁移,在 873K 下,向下一台阶面迁移的原子还非常少.但在 953K 的温度下,在生长初期(表面覆盖度小于 0.1),原子已能有效地克服势垒的影响,并向下一个台阶面迁移,但在靠近台阶的上台阶面成核以后,向下台阶面的迁移也显著减小.在 873K 的中等温度下,在生长初期(即覆盖度小于 0.1),原子几乎在台阶面上均匀分布.当表面覆盖度大于 0.2 以后,台阶成核开始.而由于台阶势垒的存在,在台阶的上侧台阶面上开始有原子的积累,而如果没有 Ehrlich-Schwoebel 势垒,台阶上侧台阶面上的原子也能被有效地耗尽.表面迁移的各向异性也将有效地影响外延机制,并主要表现为沿台阶方向迁移率的变化.在各向异性条件下当温度大于 943.5K 时,邻晶面外延模式为台阶生长模式,若没有 Ehrlich-Schwoebel 势垒,则温度大于 899.0K 时已经是台阶生长模式了.如果邻晶面上的原子迁移是各向同性的,在 Ehrlich-Schwoebel 势垒的影响下,达到台阶生长模式的生长温度高达 970K.

- [ 1 ] Ehrlich G, Hudda H 1966 *J. Chem. Phys.* **44** 1039
- [ 2 ] Schwoebel R L 1969 *J. Appl. Phys.* **40** 614
- [ 3 ] Krug J, Politi P, Michely T 2000 *Phys. Rev. B* **61** 14037
- [ 4 ] Rottler J, Mass P 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3490
- [ 5 ] Heinrichs S, Rottler J, Mass P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 8338
- [ 6 ] Johnson M D, Orme C, Hunt A W, Graff D, Sudijono J, Sander L M, Orr B G 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 116
- [ 7 ] Apostolopoulos G, Boukos N, Herfor J, Travlos A, Plog K H 2002 *Mater. Sci. and Eng. B* **88** 205
- [ 8 ] Malherbe J B, 2003 *Nuclear Instrum. and Meth. Phys. Res. B* **212** 258
- [ 9 ] Trofimov V I, Park H S 2003 *Thin Solid Films* **428** 170
- [ 10 ] Kotrla M 1996 *Comp. Phys. Commun.* **97** 82
- [ 11 ] Rogowska J M, Maciejewski 2001 *Vacuum* **63** 91
- [ 12 ] Elsholz F, Meixner M, Scholl E 2003 *Nuclear Instrum. and Meth. in Phys. Res. B* **202** 249
- [ 13 ] Biehl M, Ahr M, Kinzel W, Much F 2003 *Thin Solid Films* **428** 52
- [ 14 ] Gill S P A, Spencer P E, Cocks A C F 2004 *Mater. Sci. and Eng. A* **365** 66
- [ 15 ] Wang X P, Xie F, Shi Q W, Zhao T X 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2699 (in Chinese) [ 王晓平、谢峰、石勤伟、赵特秀 2004 物理学报 **53** 2699 ]
- [ 16 ] Zhen X P, Zhang P F, Liu J, He D Y, Ma J T 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2687 (in Chinese) [ 郑小平、张佩峰、刘军、贺德行、马健泰 2004 物理学报 **53** 2687 ]
- [ 17 ] Wang P L, Ding T H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2109 (in Chinese) [ 王培林、丁天骅 2002 物理学报 **51** 2109 ]
- [ 18 ] Shirashi K 1992 *Appl. Phys. Lett.* **60** 1363
- [ 19 ] Trofimov V I, Mokerov V G 2002 *Mater. Sci. and Eng. B* **89** 420
- [ 20 ] Mao H B, Lu W, Ma Z H, Liu X Q, Shen S C 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 1118 (in Chinese) [ 茅惠兵、陆卫、马朝晖、刘兴权、沈学础 1994 物理学报 **43** 1118 ]
- [ 21 ] Mao H B, Lu W, Shen S C 1995 *J. Crystal Growth* **151** 31

# Kinetic Monte Carlo simulation of the epitaxial growth mechanism on the vicinal surface<sup>\*</sup>

Mao Hui-Bing<sup>1)B)</sup> Jing Wei-Ping<sup>2)†</sup> Yu Jian-Guo<sup>1)</sup> Wang Ji-Qing<sup>1)</sup> Wang Li<sup>1)</sup> Dai Ning<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> *Department of Electronic Science and Technology, East China Normal University, Shanghai 200062, China*

<sup>2)</sup> *Jiangsu Provincial Key Lab of IC Design, Nantong University, Nantong 226007, China*

<sup>3)</sup> *National Laboratory for Infrared Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*

( Received 19 June 2005 ; revised manuscript received 13 January 2006 )

## Abstract

In this paper the epitaxial growth mechanism on vicinal GaAs(001) surface is studied using the kinetic Monte Carlo simulation method. The Ehrlich-Schwoebel barrier has great influence on the growth mechanism of the vicinal surface. The simulation results show that the downward movement to a lower step of the adatoms can be inhibited by Ehrlich-Schwoebel barrier at low temperature, while the adatoms can move to the lower step at high temperature. At the beginning of growth, the adatoms are almost distributed uniformly on the steps. When the surface coverage reaches to certain value, the step nucleation begins. Meanwhile, the adatoms begin to accumulate at the upper step because of the Ehrlich-Schwoebel barrier. If there were no Ehrlich-Schwoebel barrier, the adatoms at the upper step could be depleted completely. The Ehrlich-Schwoebel barrier has great influence on the growth mode of the vicinal surface, and it will increase the temperature for onset of the step growth mode.

**Keywords :** Epitaxial growth mechanism, Kinetic Monte Carlo, Ehrlich-Schwoebel barrier

**PACC :** 6855, 6845, 8160

<sup>\*</sup> Project support by the National Natural Science Foundation( Grant Nos. 60576059, 90407009 ), Open Program of Jiangsu Provincial Key Lab of ASIC Design ( Grant No. JSICK0401 ) and Open Program of National Lab for Infrared Physics, CAS( Grant No. 200401 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : jing.wp@ntu.edu.cn