

# 晶格失配对异质外延超薄膜生长中成核特性的影响\*

王晓平<sup>1)2)</sup> 谢 峰<sup>1)</sup> 石勤伟<sup>2)</sup> 赵特秀<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>中国科学技术大学物理系,合肥 230026)

<sup>2)</sup>中国科学院结构分析重点实验室,合肥 230026)

(2003 年 8 月 18 日收到,2003 年 12 月 16 日收到修改稿)

利用动力学蒙特卡罗方法模拟了异质外延超薄膜生长中的成核过程.研究了薄膜与衬底的晶格失配对超薄膜生长中成核密度、平均核尺寸、标度关系及生长模式的影响.结果发现产生压(张)应变的晶格负(正)失配使生长过程更早(迟)从成核区进入过渡区,失配越大,这一效应越明显.在相同的沉积条件下,负失配导致超薄膜形成较低的成核密度与较大的平均核尺寸,而正失配则相反.成核密度满足标度关系  $N_s \approx (F/D)^\chi$ .随着失配度从 -0.04 增加到 0.02,标度系数  $\chi$  从 0.37 逐渐减小到 0.33,对应超薄膜生长过程从包含二聚体扩散模式转变到无二聚体扩散模式.此外,模拟结果还表明,核尺寸分布的标度关系理论在晶格失配的异质外延生长中仍是有效的.

关键词:薄膜生长,成核,晶格失配,蒙特卡罗模拟

PACC: 6855, 6845D, 7115Q

## 1. 引 言

薄膜沉积中生成的自组织有序纳米结构在新型激光器、高密度信息记录、量子计算等方面具有十分重要的应用,因此吸引了人们的广泛关注.一般而言,这类自组织纳米结构的形成是由薄膜与衬底间的晶格失配产生的应变引起的,应变的存在将影响纳米结构的形状、大小、分布等特点.例如,Cu/Ni(001)和 Cu/Pd(100)体系生长的薄膜因应变的不同会呈现明显的形貌和结构上的变化<sup>[1,2]</sup>.要实现可控的自组织纳米结构生长,首先就需要了解超薄膜在晶格失配条件下的成核特性,包括核的密度、大小、分布等参量.这些核可作为纳米结构进一步自组织生长的模版<sup>[3]</sup>,因此研究晶格失配对超薄膜成核特性的影响十分必要.

超薄膜生长主要包括核的形成、生长以及合并等过程,而这些过程又受到原子在表面的扩散势垒、扩散机制、衬底结构、温度以及沉积速率等因素的影响<sup>[4-9]</sup>.已有的研究表明,在成核数目基本饱和的覆盖度下,成核密度  $N_s$  满足如下的关系<sup>[10-13]</sup>:

$$N_s \approx (F/D)^\chi, \quad (1)$$

式中  $D$  是增原子在表面的扩散系数, $F$  是沉积速率

(单位为 ML/s), $\chi$  为标度系数.对临界核为  $i=1$  的致密生长情况,理论给出  $\chi = 1/3$ <sup>[14]</sup>.在温度不太低的情况下,若进一步考虑二聚体迁移和原子脱离核对成核的影响(更接近实际情况),则理论给出  $\chi = 2/5$ <sup>[15,16]</sup>.

在成核生长过程中,除了成核数目满足上述标度关系外,不同生长条件下所成核的尺寸分布也是自相似的,可以由以下方程描述<sup>[17,18]</sup>:

$$N_s \approx \frac{t}{S^2} f(s/S), \quad (2)$$

式中  $N_s$  是大小为  $s$  的核密度( $s$  是核或团簇包含的原子个数), $S = \sum_{s \geq 2} s N_s / \sum_{s \geq 2} N_s$  是所成核的平均尺寸, $t$  是沉积时间, $f(s/S)$  是分布函数,它仅依赖于薄膜沉积过程中成核模式的变化.

超薄膜生长过程可由原子的各种扩散机制决定<sup>[4]</sup>,而应变又可以明显改变原子的扩散势垒.例如,Brune 等<sup>[19]</sup>对 Ag/Pt(111)异质外延生长的扫描隧道显微镜(STM)观察表明,4.2%的压应变就会导致 Ag 在 Pt(111)表面的扩散势垒从 Ag 衬底上的 97 meV 降到 60 meV<sup>[19]</sup>,因此晶格失配对超薄膜生长初期成核特征的影响可以通过应变对原子扩散势垒的作用来加以研究,这正是本文将着重探讨的问题.

密度泛函理论(DFT)和有效介质理论(EMT)的

计算结果均表明:在晶格失配较小的情况下,失配产生的应变将导致增原子在衬底上的表面扩散势垒发生线性变化<sup>[20,21]</sup>.本文将基于这一结论,着重利用动力学蒙特卡罗(KMC)模拟方法研究晶格失配对超薄膜成核特性的影响.我们的模拟结果表明晶格失配对成核特性有很大的影响,正失配(产生张应变)导致较高的成核密度,负失配(产生压应变)导致较低的成核密度.随着失配度从-0.04增加到0.02,标度系数 $\chi$ 从0.37逐渐减小到0.33,对应的生长过程从包含二聚体扩散模式转变到无二聚体扩散模式.

## 2. 模型及模拟方法

模型中的衬底使用 $L \times L$  ( $L = 300$ )的具有周期性边界条件的方格.沉积到衬底上新的增原子同衬底上的增原子同时发生迁移,直到相遇形成一个二聚体,或是碰到一个团簇合并到这个团簇中(在模拟中假定一旦增原子碰到团簇,即合并到该团簇中).团簇边缘与团簇只有单配位数结合的原子既可以脱离团簇,重新成为一个增原子,也可以沿着团簇边缘迁移,直到它的原子配位数大于1.二聚体同样也可以在衬底上迁移,但本模型中原子数目 $s > 2$ 的团簇被认为是固定的.在沉积过程中,还允许新沉积原子可以落在已形成团簇的上面成为第二层,且该层上增原子的迁移特性与衬底上的增原子完全一样,当它迁移到底层团簇的边缘时,可以无任何限制地越过台阶落到下一层<sup>[16,22]</sup>(见图1).本模型中,每个原子占有一个格点位置,如果某一原子最近邻的四个位置中有其他原子,则表示它们是二聚体或属于同

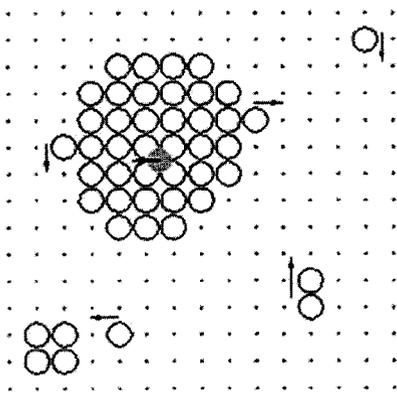


图1 薄膜生长模型示意图 其中小黑点表示衬底原子,白色球表示第一层沉积原子,灰色球表示第二层沉积原子,箭头表示原子或二聚体的扩散方向

一个团簇<sup>[11]</sup>.

KMC模拟中,每一研究对象扩散或迁移的概率由它的势垒决定<sup>[23]</sup>.设增原子的自由迁移概率为 $D_{dl}$ 、团簇边缘原子沿边扩散的概率为 $D_e$ 、团簇边缘原子脱离团簇的跃迁概率为 $D_{dis}$ 、二聚体迁移的概率为 $D_{d2}$ ,它们可以分别表示为

$$D_{dl} = \nu_0 \exp[-E_{dl}/k_B T], \quad (3)$$

$$D_e = \nu_0 \exp[-E_e/k_B T], \quad (4)$$

$$D_{dis} = \nu_0 \exp[-E_{dis}/k_B T], \quad (5)$$

$$D_{d2} = \nu_0 \exp[-E_{d2}/k_B T], \quad (6)$$

式中 $\nu_0$ 为原子振动频率, $T$ 是衬底温度, $k_B$ 是玻尔兹曼常数, $E_{dl}$ 、 $E_e$ 、 $E_{dis}$ 、 $E_{d2}$ 分别为各跃迁或迁移的势垒.

外延薄膜与衬底晶格的失配度定义为 $m = (a_s - a_e)/a_e$ ,其中 $a_s$ 是衬底的晶格常数, $a_e$ 是外延薄膜的晶格常数. $m > 0$ 称为正失配,反之为负失配.假定晶格失配导致的应变对各势垒的影响采用线性变化关系<sup>[21]</sup>,则上述势垒随失配度的变化可写成

$$E_{dl}(m) = E_{dl}(0)(1 + Am), \quad (7)$$

$$E_e(m) = E_e(0)(1 + Am), \quad (8)$$

$$E_{d2}(m) = E_{d2}(0)(1 + Am), \quad (9)$$

$$E_{dis}(m) = E_{dis}(0)(1 + Am), \quad (10)$$

式中 $E_i(0)$ 分别为零失配( $m = 0$ )时各过程对应的势垒, $A$ 是一可调整的系数.根据Brune等<sup>[20]</sup>在STM实验中观测到的结果,取 $A = 9.1$ .综合有关金属外延成核模拟的研究和有关团簇行走的研究<sup>[23-26]</sup>,模拟中其他参数的选择如下: $\nu_0 = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , $E_e(0) = E_{dl}(0) = 0.4 \text{ eV}$ , $E_{d2}(0) = 0.5 \text{ eV}$ , $E_{dis}(0) = 0.72 \text{ eV}$ ,生长温度 $T = 280 \text{ K}$ .

模拟是按照KMC方式进行的<sup>[23]</sup>.首先根据原子的位置统计出原子的跃迁概率与相应跃迁可能的数目 $N_i$ ,再随机选择第 $k$ 类跃迁,它的概率 $P_k$ 为

$$P_k = \frac{N_k D_k}{\sum_i N_i D_i + \nu_F}, \quad (11)$$

式中 $\nu_F = FL^2$ 是单位时间沉积下来的原子个数.选择沉积新的增原子的概率 $P_F$ 为

$$P_F = \frac{\nu_F}{\sum_i N_i D_i + \nu_F}. \quad (12)$$

每次模拟从零覆盖度的衬底表面开始,一直到所需要的覆盖度结束.在不同的覆盖度下记录所成核的数目、增原子数目、二聚体数目及相应的比例,

就可以进一步研究晶格失配对成核密度、团簇的平均尺寸及其标度律和分布函数的影响.

### 3. 结果与讨论

按照第 2 节的模型及模拟方法,可以研究不同

沉积速率和覆盖度下,晶格失配对成核特性的影响.图 2 显示了不同晶格失配时,超薄膜生长中沉积不同覆盖度  $\theta$  时薄膜形貌的变化.从中可见晶格失配导致的应变对薄膜形貌可以产生明显的影响,随着失配度从正到负,成核密度逐渐减小,而平均团簇尺寸逐渐增大(图 2 从左至右).

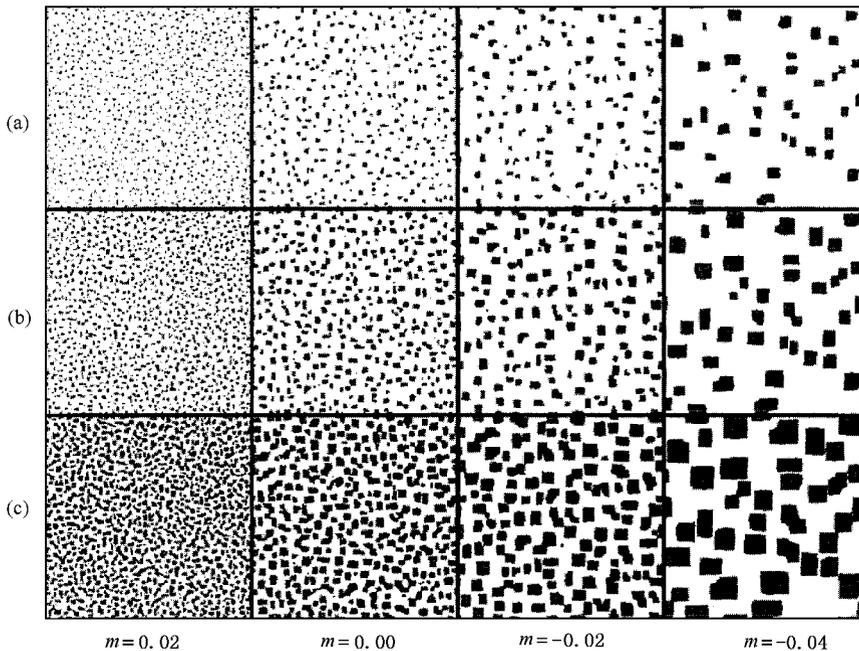


图 2 超薄膜生长中成核特征随晶格失配及覆盖度的变化.第一行(a)  $\theta = 0.1$  ML,第二行(b)  $\theta = 0.2$  ML,第三行(c)  $\theta = 0.4$  ML.每行从左至右失配度分别为  $m = 0.02, 0.00, -0.02$  和  $-0.04$ .模拟条件为  $T = 280$  K,  $F = 0.5$  ML/s

图 3 是沉积速率为  $F = 1$  ML/s 时,不同失配条件下团簇密度  $N_s$  ( $s \geq 2$ )、增原子密度与平均核大小  $S$  随覆盖度的变化.一般情况下,超薄膜生长包含三个阶段,即覆盖度很低时的成核阶段(成核数目随覆盖度的增加快速增长)、覆盖度适中时的过渡阶段(成核数目随覆盖度的增加缓慢变化)、覆盖度较大时的聚合阶段(成核数目随覆盖度的增加发生相互合并而减小)<sup>[16]</sup>.由图 3(a)可明显看到超薄膜生长的前两个阶段(如图 3(a)中箭头所示).此外还可发现晶格失配对薄膜生长有如下影响:(1)在成核的初期阶段,负的晶格失配使生长过程更早地从成核阶段进入到过渡阶段,而且失配度越大作用越明显.正失配则相反,它使成核阶段对应的覆盖度范围变大.(2)成核阶段中成核数目与覆盖度的关系基本满足标度关系  $N_s \approx \theta^\alpha$ ,标度系数  $\alpha$  约为 2.7(如图 3(a)中直线所示),且基本不随失配度变化,这与 Lee 等<sup>[16]</sup>报道的  $\alpha = 2.6$  比较接近.(3)若取过渡阶段中的团

簇密度为饱和成核数目,则正失配时有更大的成核密度.例如  $m = -0.04$  时的饱和成核密度约为  $6 \times 10^{-4}$ ,而  $m = 0.02$  时的饱和成核密度则约为  $10^{-2}$ ,这与图 2 的形貌观察结果一致.

从图 3(b)所示的增原子密度  $N_1$  在不同失配度下随覆盖度的变化可以看出:在低覆盖度的成核区,不同失配度的  $N_1$  值一致地随覆盖度单调增加,基本满足  $N_1 \approx \theta^\beta$ ,其中标度系数为  $\beta = 0.98$ (如图 3(b)中直线所示),与失配大小无依赖关系,非常接近理论预言  $\beta = 1.0$ <sup>[10]</sup>.当覆盖度增加到大于某一临界值  $\theta_c$  时,  $N_1$  转入单调减少,对应超薄膜生长进入过渡区<sup>[16]</sup>.负失配使  $\theta_c$  值变小,正失配使  $\theta_c$  变大,如图 3 中箭头和插图所示.随着失配度  $m$  从  $-0.04$  变化到  $0.02$ ,  $\theta_c$  将从  $2 \times 10^{-4}$  增加到  $1 \times 10^{-2}$ .从图 3 中还可看出:在过渡区正失配使增原子有更高的密度,负失配则相反.这是因为负失配使增原子的扩散势垒降低(见方程(7)),导致增原子扩散能力增强,

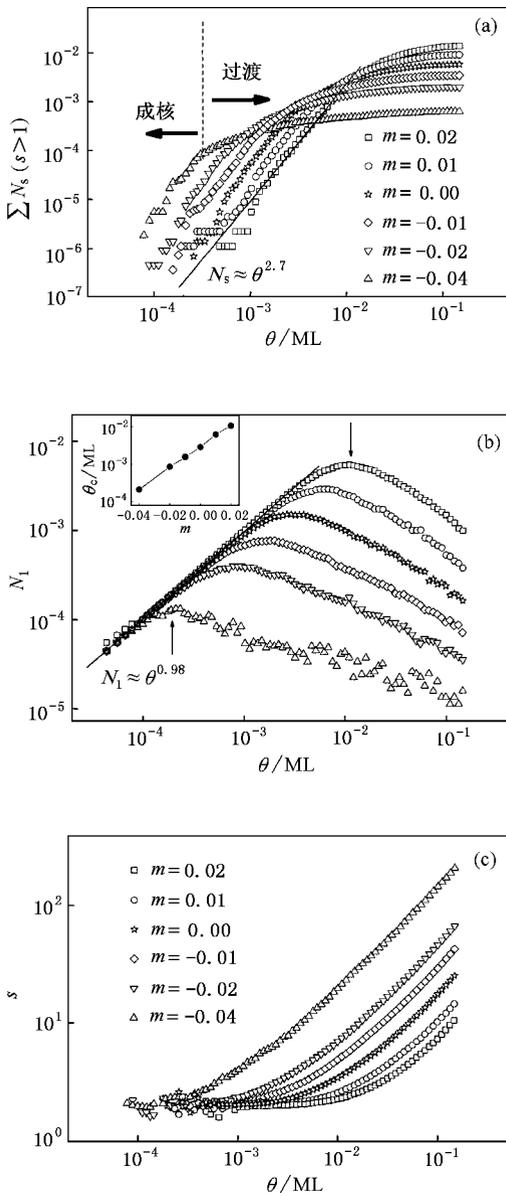


图3 不同失配度下成核密度 (a) 增原子密度 (b) 平均核大小 (c) 随覆盖度的变化 (b)图中插图为临界覆盖度随失配度的变化. 模拟条件为  $T = 280 \text{ K}$ ,  $F = 1 \text{ ML/s}$

在相同的时间内更容易被其他团簇俘获.

图 3(c) 给出了平均核大小  $s$  随覆盖度  $\theta$  的变化. 从中可看出, 在成核区不同失配情况对应的  $s$  基本都等于 2. 随着进入过渡区,  $s$  开始随着覆盖度的增加而增大. 其中负失配对应的核平均尺寸较大, 正失配对应的较小. 这与前面观察到的在相同覆盖度下, 负失配成核数较低、正失配成核数较多的结果相符 (图 3(a)).

根据薄膜生长理论, 增原子密度  $N_1$  的变化可表示为<sup>[12]</sup>

$$\frac{dN_1}{d\theta} = 1 - 2RN_1^2 - R \sum_{s \geq 2} s^{1/d_f} N_1 N_s, \quad (13)$$

式中  $R = D/F$ ,  $d_f$  是团簇分形维数. 上式等号右端第二项和第三项分别表示两个增原子结合成二聚体和增原子结合进入团簇导致增原子密度降低的效应.

由方程 (13) 可知, 开始时增原子密度随覆盖度  $\theta$  的增加而增加, 如图 3(b) 中  $\theta < \theta_c$  时的情况. 随着覆盖度逐渐增加,  $N_1$  和  $N_s$  进一步增大, 最后将导致  $\frac{dN_1}{d\theta} < 0$ , 即出现  $N_1$  开始随  $\theta$  的增加而递减. 因此从  $\frac{dN_1}{d\theta} = 0$  可估计饱和增原子密度  $N_{1c}$  和  $\theta_c$ . 根据方程 (7), 负失配度使增原子的扩散势垒降低, 从而扩散系数  $D$  变大. 因此在相同沉积条件下, 负失配对应的  $R$  较大, 从方程 (13) 可见对应的转变点  $N_{1c}$  和  $\theta_c$  均变小, 故在负失配衬底上的薄膜生长将在较小的覆盖度时就进入过渡区, 而正失配情况则相反 (见图 3(b)).

成核理论表明<sup>[10]</sup>: 当临界核为单个原子时 (即二聚体不能移动), 成核区中成核密度随覆盖度的变化可表示为  $N_s \approx R\theta^3$ , 而在过渡区则表示为  $N_s \approx R^{-1/3} \theta^{1/3}$ . 我们的模拟结果显示: 在成核区  $N_s$  对  $\theta$  满足标度关系, 且标度系数  $\alpha$  约为 2.7, 略低于理论预言  $\alpha = 3$ . 这一差异可归结为二聚体迁移造成的偏离<sup>[16]</sup>. 显然, 在相同的覆盖度下, 当二聚体可移动时得到的核密度数目将低于不能移动的情况. 此外, 由于负失配使原子扩散系数增大, 且  $R = D/F$ , 所以在相同的沉积速率下  $R$  较大. 由  $N_s \approx R\theta^3$  可知: 在相同的覆盖度下, 负失配导致成核区有更高的核密度  $N_s$ , 另一方面, 由  $N_s \approx R^{-1/3} \theta^{1/3}$  得到负失配在过渡区导致更低的团簇密度 (见图 3(a)).

由于在成核初期所成核大多为二聚体, 所以平均核大小  $s = 2$ . 进入过渡区后, 因为负失配对应应有较小的增原子密度 (图 3(b)) 和较小的核密度  $N_s$  (图 3(a)), 导致在相同的覆盖度情况下, 相应的平均核尺寸  $S = \frac{\theta - N_1}{N_s} L^2$  较大, 反之, 正失配对应的平均核尺寸较小 (见图 3(c)).

图 4 是温度为 280 K,  $\theta$  为 0.15 ML 时的成核密度随不同失配度及不同沉积速率的变化. 从中可见以下特征: 核密度  $N_s$  与沉积速率  $F$  满足关系  $N_s \approx F^\chi$ ,  $\chi$  值随失配度的不同在 0.33—0.37 范围内变化 (见图 4 插图). 正失配对应的  $\chi$  值比无失配时小,

负失配对应的  $\chi$  值比无失配时大,且负失配越大, $\chi$  值越大.以上结果表明在有应变的情况下,理论预言的  $N_s \approx (F/D)^{\chi}$  仍然成立.此外,由图 4 还可见,对于不同的沉积速率,负失配对应的成核密度总是低于相应正失配的情况,这与图 3(a) 的结果一致.

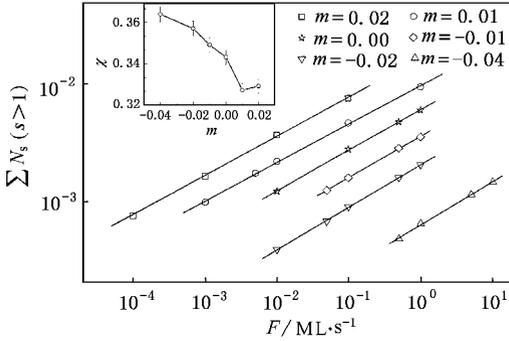


图 4 覆盖度为 0.15 ML 时,不同失配度下成核密度随沉积速率  $F$  的变化. 直线为按照  $N_s \approx (D/F)^{\chi}$  的拟合值,插图为标度系数  $\chi$  随失配度的变化.

晶格失配对标度系数  $\chi$  的影响可以理解为:晶格失配从负值增加到正值,二聚体的扩散势垒将逐渐增大,二聚体的扩散能力将受到更强的限制,使得  $\chi$  值从完全二聚体扩散模式的  $2/5$  降到无二聚体扩散模式的  $1/3$ <sup>[14]</sup>. 模拟结果显示,随着失配度从  $m = -0.04$  增加到  $m = 0.02$ , $\chi$  从 0.37 逐渐减小到 0.33. 这一结果表明,超薄膜生长过程随着  $m$  值的增加从包含二聚体扩散模式逐渐转变到无二聚体扩散模式<sup>[15,16]</sup>.

图 5 是不同晶格失配时所成核的尺寸分布的标度关系,其中实线与虚线分别为临界核为  $i = 1$  和  $i = 2$  的理论预期结果. 从中可见,虽然  $m = -0.04$  时的标度函数关系比  $m = 0$  时稍窄一些,但还没有达到  $i = 2$  的曲线,说明此负失配条件下的生长并非为完全二聚体扩散模式. 由于标度关系仅依赖于外延生长的动力学机制而与具体的沉积条件无关,我

们得到的不同失配下核尺寸分布的标度关系说明该标度理论对晶格失配的异质外延仍然是有效的<sup>[27]</sup>.

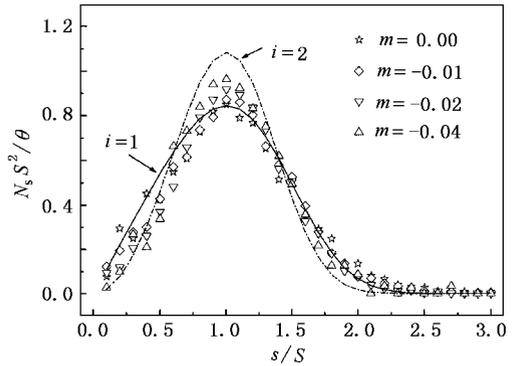


图 5 不同失配度下所成核的尺寸分布函数. 其中实线与虚线分别为临界核  $i$  为 1 和 2 的理论预期结果. 模拟条件为  $F = 1 \text{ ML/s}$ ,  $T = 280 \text{ K}$ .

## 4. 结 论

利用 KMC 方法模拟了异质外延的超薄膜生长,研究了薄膜与衬底的晶格失配对超薄膜生长成核特性的影响. 得到结论如下:

(1) 相对无失配情况,负晶格失配使超薄膜的生长过程更早地从成核区转入过渡区,而正失配将推迟这一转变. 失配越大,这一效应越明显.

(2) 在相同的沉积条件下,负晶格失配导致超薄膜形成较低的成核密度和较大的平均核尺寸,而正失配则相反.

(3) 成核密度满足标度关系  $N_s \approx (F/D)^{\chi}$ ,随着失配度从  $-0.04$  增加到  $0.02$ ,标度系数  $\chi$  则从 0.37 逐渐减小到 0.33,对应超薄膜生长过程从包含二聚体扩散模式转变到无二聚体扩散模式.

(4) 核尺寸分布的标度关系理论在晶格失配的异质外延生长中仍然成立.

[1] Hahn E et al 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1803  
 [2] Muller B et al 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2642  
 [3] Priester C., Lannoo M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 93  
 [4] Zhang Z Y, Lagally M G 1997 *Science* **276** 377  
 [5] Wang X P et al 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1412 (in Chinese) 【王晓平等 1999 物理学报 **48** 1412】  
 [6] Ye J S et al 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1108 (in Chinese) 【叶健松等 2002 物理学报 **51** 1108】

[7] Wei H L et al 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 791 (in Chinese) 【魏合林等 2000 物理学报 **49** 791】  
 [8] Yang N et al 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2225 (in Chinese) 【杨宁等 2000 物理学报 **49** 2225】  
 [9] Wu F M et al 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1555 (in Chinese) 【吴锋民等 2001 物理学报 **50** 1555】  
 [10] Amar J G, Family F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 8781

- [ 11 ] Bartelt M C , Evans J W 1992 *Phys. Rev. B* **46** 12675
- [ 12 ] Fichthorn K A , Weinberg W H 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 604
- [ 13 ] Mo Y W *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1998
- [ 14 ] Schroeder M , Wolf D E 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2062
- [ 15 ] Bartelt M C *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **53** 4099
- [ 16 ] Lee S B , Gupta B C 2000 *Phys. Rev. B* **62** 7545
- [ 17 ] Mullins W W 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 1341
- [ 18 ] Family F , Meakin P 1989 *Phys. Rev. A* **40** 3836 ; Family F , Meakin P 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 428
- [ 19 ] Brune H *et al* 1995 *Phys. Rev. B* **52** R14380
- [ 20 ] Brune H *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2997
- [ 21 ] Sabiryanov R F *et al* 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125412
- [ 22 ] Schwoebel R L , Shipsey E J 1966 *J. Appl. Phys.* **37** 3682
- [ 23 ] Xie F *et al* 2003 *Chin. Phys.* **12** 778
- [ 24 ] Liu S *et al* 1994 *Surf. Sci.* **321** 161
- [ 25 ] Feibelman P J *et al* 1992 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2766
- [ 26 ] Mill G *et al* 1999 *J. Chem. Phys.* **111** 8639
- [ 27 ] Ratsch C *et al* 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3194

## The effect of lattice mismatch on the nucleation process of heteroepitaxial growth of ultrathin film \*

Wang Xiao-Ping<sup>1)2)</sup> Xie Feng<sup>1)</sup> Shi Qin-Wei<sup>2)</sup> Zhao Te-Xiu<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>*Department of Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China )*

<sup>2)</sup>*Structure Research Laboratory , Chinese Academy of Sciences , Hefei 230026 , China )*

( Received 18 August 2003 ; revised manuscript received 16 December 2003 )

### Abstract

The effect of lattice mismatch between the substrate and the heteroepitaxial film on the initial process of ultra-thin film growth , such as the nuclear density , the average size of cluster , the scale behavior and the growth mode , is studied by the kinetic Monte-Carlo method. It is found that the negative ( positive ) mismatch , corresponding to the compressive ( tensile ) strain , can induce the growth process transferring from the nucleation stage to the intermediate one earlier ( later ). The larger the mismatch , the more apparent the above behavior. Under the same deposition condition , the negative mismatch can bring about lower nuclear density and larger average cluster size than the positive mismatch does. Furthermore , the nuclear density is found to follow the power law of  $N_s \approx ( F/D )^\chi$  , and  $\chi$  decreases from 0.37 to 0.33 while the mismatch changes from  $-0.04$  to  $0.02$ . This behavior indicates that the growth mode of the ultra-thin film changes from including dimer diffusion into excluding dimer diffusion. Additionally , the scale theory of the cluster size is found to be valid even for the heteroepitaxial growth.

**Keywords :** film growth , nucleation , lattice mismatch , Monte-Carlo simulation

**PACC :** 6855 , 6845D , 7115Q