

Referate

Die Frenkel-Kontorowamodel*

Jan H. van der Merwe
Departement Fisika, Universiteit van Pretoria

UITTREKSEL

Frenkel en Kontorowa het in 1938 'n model vir die meganisme van plastiese glip voorgestel. Die model behels belangrike insette deur Braunbeck, Prandtl en Dehlinger. Alhoewel Frenkel en Kontorowa dit nie so ingesien het nie, was die model uitnemend geskik vir die vertolking van 'n groot verskeidenheid eienskappe van kristalontwrigtings. Dit is ironies dat die outeurs die bestaan van ontwrigtings ernstig betwyfel het en dat hulle 'n foutiewe voorstelling gehad het van die rol van hulle model in plastiese vervorming. Hulle het egter daaropvolgende outeurs gestimuleer om die eienskappe van die model en variante daarvan, in besonder dié ten opsigte van ontwrigtings, verder te ontrafel. Dit het gevolglik grootliks bygedra tot die verwerwing van verdere kennis omtrent plastiese vervorming en epitaksie, sowel as faseoorgange in ultradun geadsorbeerde lagies. In hierdie oorsig word die model bekend gestel en sekere van die belangrike invloede daarvan kortliks uitgelig.

ABSTRACT

The Frenkel-Kontorowa model

In 1938 Frenkel and Kontorowa proposed a mechanism for plastic slip. The model incorporates important inputs by Braunbeck, Prandtl and Dehlinger. Although Frenkel and Kontorowa did not intend it to be so, the model was ideally suited for simulating a great variety of the properties of crystal dislocations. It is ironical that the authors seriously doubted the existence of crystal dislocations and had a false concept of the role of their model in plastic deformation. They did, however, stimulate subsequent authors to unravel the properties of their model in variations thereof, particularly concerning phenomena which can be interpreted in terms of dislocations. These investigations accordingly had a great impact on the understanding of plastic deformation and epitaxy, as well as phase transitions in ultra-thin absorbed layers. The model and some of its important consequences are briefly highlighted.

1. DIE MODEL IN TEORIE EN IN DIE LABORATORIUM

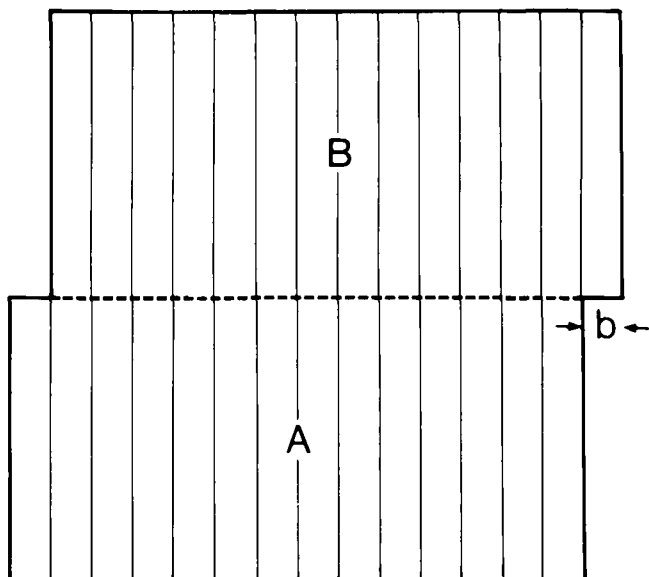
1.1 Die model van Frenkel en Kontorowa

Wat vandag in die literatuur¹ as die "Frenkel-Kontorowamodel" (FKM) bekend staan, bevat belangrike kwantitatiewe insette uit die werke van Prandtl² en Dehlinger.³ IN sy werk oor meganiese histerese het Prandtl² voorgestel dat die kristal gesien kan word as bestaande uit twee dele – sê A onder en B bo – en (i) dat daar vanuit die hele kristal A 'n krag op 'n B-atoom in die grensvlak uitgeoefen word wat dieselfde verplasingsperiodisiteit (langs die grensvlak) as A het, en (ii) dat die B-atoom elasties – die harmoniese benadering – aan sy naaste B-bure gekoppel is. Dehlinger³ het van die model gebruik gemaak in 'n kwantitatiewe beskrywing van sy "Verhakungen", wat hy (onsuksesvol) ingevoer het as 'n meganisme vir plastiese vervorming, of glip. Ook aanvaar hy 'n eenvoudige sinusvormige – die eerste harmoniese term in 'n Fouriervoorstelling – wisselwerking⁴ tussen die B-atoom en die kristal A. Frenkel en Kontorowa⁵ het Dehlinger se kwantifise-

ring gebruik om hul voorstel vir die "rusperagtige" meganisme van plastiese glip te analiseer. Hulle het naamlik voorgestel dat glip deur een atoomafstand b gesimuleer kan word deur die beweging van 'n rusper met een "tree", nadat die knak oor die volle lengte van sy loggaam voortbeweeg het (kyk fig. 1). Frenkel en Kontorowa se model kan in sy eendimensionele vorm wel ontwrigtings simuleer, maar die outeurs het in hulle siening van die model as 'n meganisme van plastiese glip en tweelingvorming voorgestel dat die knakke, wat nou die vorms van verdigtings aanneem, *onafhanklik* van mekaar langs ewewydige atoomrye voortgeplant word. Wat hulle in gedagte gehad het, kom dus in werklikheid ooreen met krodone, en nie ontwrigtings nie. Waarskynlik het dit gebruiklik geword om die model aan die name van Frenkel en Kontorowa te koppel, omdat hulle fisiese voorstelling meer sinvol was, altans in 'n eendimensionele stelsel, en omdat hulle 'n geskikte metode vir die hantering daarvan ingevoer het. Hieronder sal die FKM wel as 'n "ontwrigtingsmodel" beskou word.

Dit is ironies dat, alhoewel Frenkel en Kontorowa hier wesenlik 'n ontwrigtingsmodel opgestel het, hulle nogtans getwyfel het aan die bestaan van ontwrigtings; ek haal aan: "Taylor's theory (of slip) is however of a very formal character and does not help in elucidating the mechanism of plastic slip; besides,

*'n Referaat gelewer tydens die "Symposium on plastic deformation and other solid state phenomena" by the W.N.N.R. se Konferensiesentrum in Pretoria op 18 September 1981.



FIGUUR 1(a). Die plastiese glip van deel B van kristal deur een atoomafstand b met betrekking tot deel A.

the reality of 'dislocations' which form the basis of this theory, seems very doubtful".

In hulle model het Frenkel en Kontorowa⁵ die kristal B met 'n ketting van deeltjies en vere vervang (kyk fig. 2) en die natuurlike lengte b van die vere was

dieselfde as die periodisiteit a in die substraat A. Die totale potensiele energie van die ketting is dus van die vorm

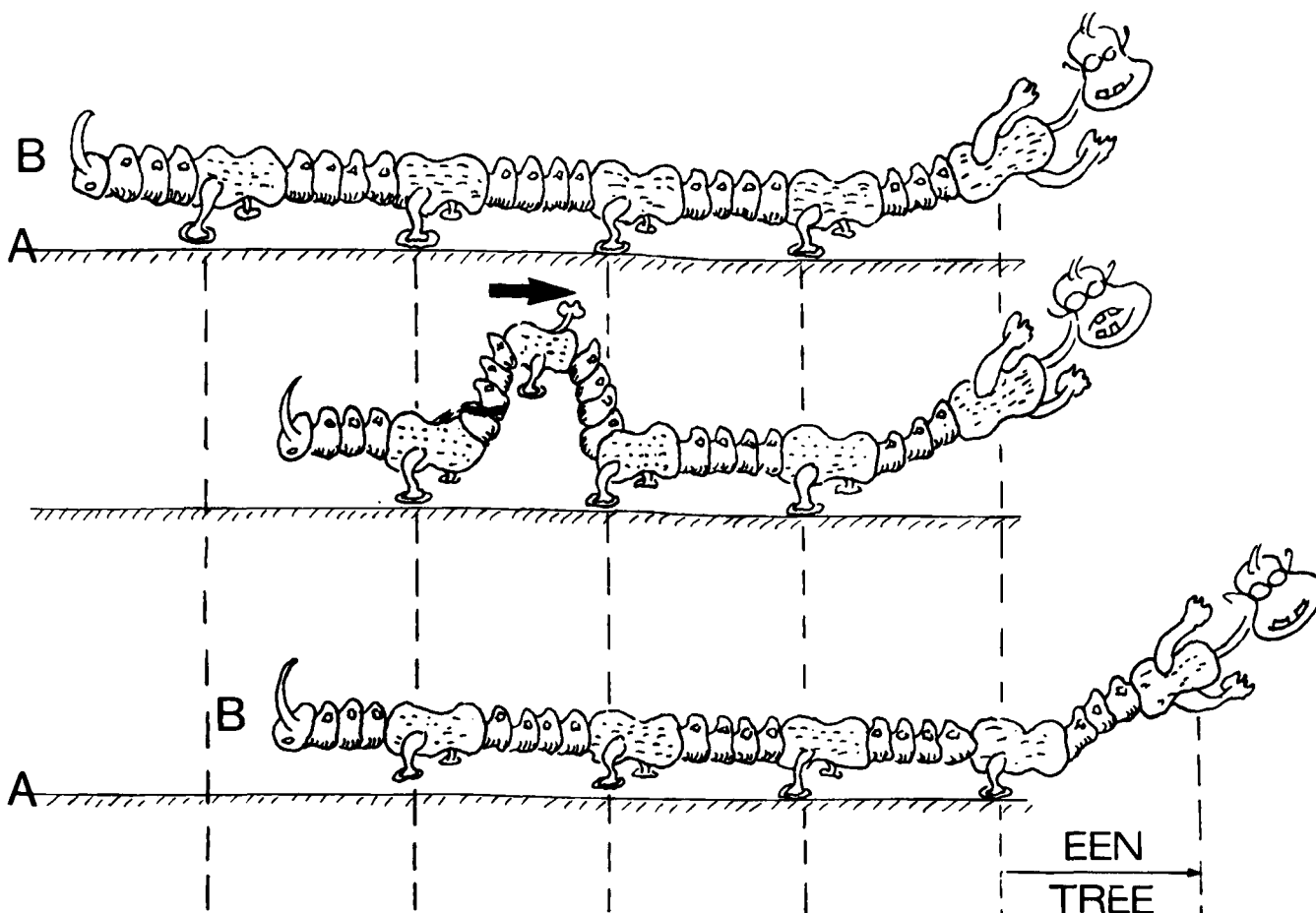
$$U = \sum_k [A(1 - \cos \frac{2\pi\psi_k}{a}) + \frac{1}{2}\alpha(\psi_{k+1} - \psi_k - b + a)^2],$$

$b = a$ (1)

waar k die atome, sowel as die potensiaalminima, aftel, en ψ_k die posisie van die atoom k , relatief tot die k -te potensiaalminimum is, α 'n elastisiteitskonstante en A die amplitude van die periodiese potensiaal.

1.2 'n Laboratoriummodel

Verskillende laboratoriummodelle is al gebou om die eienskappe van ontwrigtings te demonstree. Terwyl die bogenoemde teoretiese model kantontwrigtings in 'n eendimensionele model kan naboots, is die eenvoudigste laboratoriummodel dié van skroefontwrigtings. Die periodisiteit word in hierdie geval voorsien deur die golwinge van 'n gegolfde sinkplaat in die gravitasieveld (kyk fig. 3), terwyl die deeltjies deur silinders wat in 'n klaviersnaar – waarvan die styfheid die harmoniese kragte naboots – geryg is, gesimuleer word. As één deel van die ry rollers, soos in fig. 3, in een groef lê en die ander deel in die daaropvolgende groef, stel die konfigurasie 'n skroefontwrigting voor.



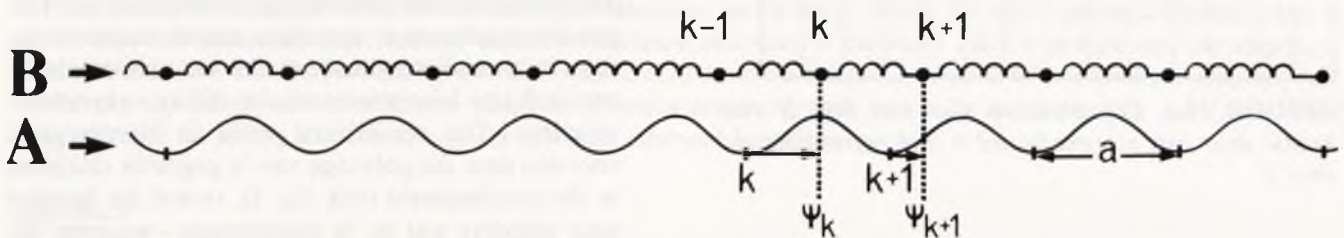
FIGUUR 1(b). Dit demonstreer die „rusperagtige” meganisme van Frenkel en Kontorowa vir plastiese glip; wanneer die knik van een end van die wurm se liggaam B tot die ander end beweeg het, het die wurm een tree vorentoe beweeg met betrekking tot die vlak A.

Met hierdie model kan die volgende eienskappe van ontwigtings gedemonstreer word:

- Die begrip van 'n ontwigting as meganisme vir glip.
- Die nabootsing van 'n skuifspanning deur die komponent – langs die vlak van die plaat – van die gravitasiekrag wat intree as die plaat gekantel word, en wat toeneem met die kantelhoek.
- 'n Groot meegeespanning vir afskuiwing in 'n foutlose kristal – dit is een met al die rollers in één groef.
- 'n Veel laer meegeespanning vir afskuiwing in 'n (werklike) ontwigte kristal, as gevolg van die beweglikheid van ontwigtings.
- Ontwigtings van dieselfde soort stoot mekaar af

en ongelyksoortige ontwigtings trek mekaar aan.

- Ontwigtings versnel onder die inwerking van „skuifspanning”.
- Ontwigtings wat tot voldoende groot snelhede versnel word, word by die vrye ente weerkaats en vermenigvuldig, aldus volgens die Frank-meganisme.⁷
- Die wydte van 'n ontwigting verkort met toeneemende spoed; kontinuumteoreties is dit 'n Lorentz-verkorting.⁸
- Kristaldefekte en interne spannings – versteurings van golfvorm – kan die beweging van ontwigtings versper.
- Die effek van oksiedlagies op die skepping of ontspanning van ontwigtings kan gesimuleer word.



FIGUUR 2. Die ketting van deeltjies en vere met natuurlike lengte $b = a$ modelleer die harmoniese benadering van deel B van kristal en die sinusvormige kromme met golflengte a die AB wisselwerkingspotensiaal van B-atome met die starre (substraat) deel A.



FIGUUR 3. 'n Laboratoriummodel vir skroefontwigtings. Die kettingrollers, geryg in 'n klaviersnaar, verteenwoordig die kristaldeel B. As die rollers oor die golwinge van die sinkplaat rol, beweeg hulle in 'n periodiese gravitasieveld wat die veld van die starre substraat A simuleer. Die oorgang van die ry van een golwing na die volgende simuleer 'n skroefontwigting in 'n adatoommonolaag.

1.3 Die teorie van Frenkel en Kontorowa

1.3.1 Beherende vergelykings

Die bewegingsvergelyking

$$m d^2 \psi_k / dt^2 + (2\pi A/a) \sin(2\pi \psi_k/a) - \alpha(\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1}) = 0 \quad (2)$$

van die k-te atoom, waar t die tyd en m die massa aandui, volg uit vgl. (1). Dit word aanvaar dat die verplasing ψ_k stadig met k verander, sodat die diskrete stelsel deur 'n kontinuüm

$$\psi_k(t) = \psi(k, t) \quad (3)$$

en die tweedeordeverskil deur 'n tweedeordedifferensiaal

$$\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1} = \partial^2 \psi / \partial k^2 \quad (4)$$

benader kan word.⁵

Word voorts 'n golfoplossing

$$\psi(k, t) = \psi(z), \quad z = ka - vt \quad (5)$$

met voortplantingsnelheid v veranderstel, reduceer die bewegingsvergelyking (2) tot

$$d^2 \psi / dz^2 = (2\pi A / \alpha a^3 \beta^2) \sin(2\pi \psi/a) \quad (6)$$

$$\beta^2 = 1 - v^2/c^2 \quad (7)$$

waar

$$c = a(\alpha/m)^{1/2} \quad (8)$$

die snelheid van "klank" in die vrye ($A=0$) ketting is.

1.3.2 Subsoniese ontwigtings

As daar veronderstel word dat daar slegs 'n enkele golf is, d.i.

$$\partial \psi / \partial z = 0 \text{ as } \psi = 0 \quad (9)$$

integreer vgl. (6) na

$$d\psi/dz = \pm (4A/\alpha\beta^2 a^2)^{1/2} \sin(\pi\psi/a) \quad (10)$$

$$\psi/a = (2/\pi) \arctan \exp\{\pm (\pi^2 A/\alpha\beta^2 a^4)^{1/2} (z - z_0)\} \quad (11)$$

wat 'n ontwigting voorstel mits $\beta^2 > 0$, d.i. $v < c$, en waar $z = z_0$ die "posisie" van die ontwigting ($\psi = a/2$) definieer.

Die z-afhanklikheid van die ontwigting word in fig. 4 geïllustreer. Die wydte⁸ $\ell(v)$ van die ontwigting – die effektiewe aantal atome wat uit pas is – soos gedefinieer deur

$$1/\ell = \partial(\psi/a)/\partial k \text{ by } \psi/a = 1/2 \quad (12)$$

vertoon 'n "Lorentzverkorting"

$$\ell(v) = \ell(0) (1 - v^2/c^2)^{1/2} \quad (13)$$

waar $\ell(0) = (\alpha a^2/4A)^{1/2}$ die statiese wydte is.

Die totale energie

$$E = \sum_k \{U_k + m(d\psi_k/dt)^2/2\} \quad (14)$$

word in die kontinuumbenadering (3) bereken deur vervanging van die som in (14) met 'n integraal. Dit lewer die resultaat

$$E(v) = E(0)/\beta \quad (15)$$

wat dieselfde snelheidsafhanklikheid het as die

energie van 'n deeltjie in die spesiale relatiwiteit. Die (statiese) rusenergie is nou

$$E(0) = 4a(\alpha A)^{1/2}/\pi \quad (16)$$

1.3.3 Supersoniese anti-ontwigtings

As die „golf" met supersoniese snelheid beweeg, is β^2 negatief

$$\beta^2 = -\beta_0^2 = -(v^2/c^2 - 1); \quad v > c, \quad \beta_0^2 > 0 \quad (17)$$

en reduceer die beherende vergelyking (6) tot

$$d^2 \psi / dz^2 = -(2\pi A / \alpha a^3 \beta_0^2) \sin(2\pi \psi/a) \quad (18)$$

Hierdie vergelyking het reële oplossings vir 'n enkele steuring, slegs met die randwaarde

$$d\psi/dz = 0 \text{ by } \psi/a = 1/2 \quad (19)$$

en integreer dan na⁸

$$\psi/a = 1/2 - (2/\pi) \arctan \exp\{(2A/\alpha\beta_0^2 a^2)^{1/2} (z - z_0)\}. \quad (20)$$

Dit regverdig die benaming *anti-ontwigting*,⁸ omdat dit 'n toestand daarstel waarin al die atome presies uit pas ($\psi = a/2$) is, uitgesonderd enkeles in die oorgangsgebied om $\psi = 0$. Klaarblyklik is dit 'n onstabiele toestand en dus nie van fisiese belang nie.

Van betekenis is egter die spesiale geval waarby $\psi/a \ll 1$ en die beherende vergelyking (18) reduceer tot

$$d^2 \psi / dz^2 + h^2 \psi = 0, \quad h^2 = (4A/\alpha)(2\pi/\beta_0 a^2)^2 \quad (21)$$

vir supersoniese, $v > c$, harmoniese golwe waarvan die golflengte λ en die frekwensie ν gegee word deur

$$\lambda = 2\pi/h, \quad \nu = v/\lambda. \quad (22)$$

1.3.4 Bespreking

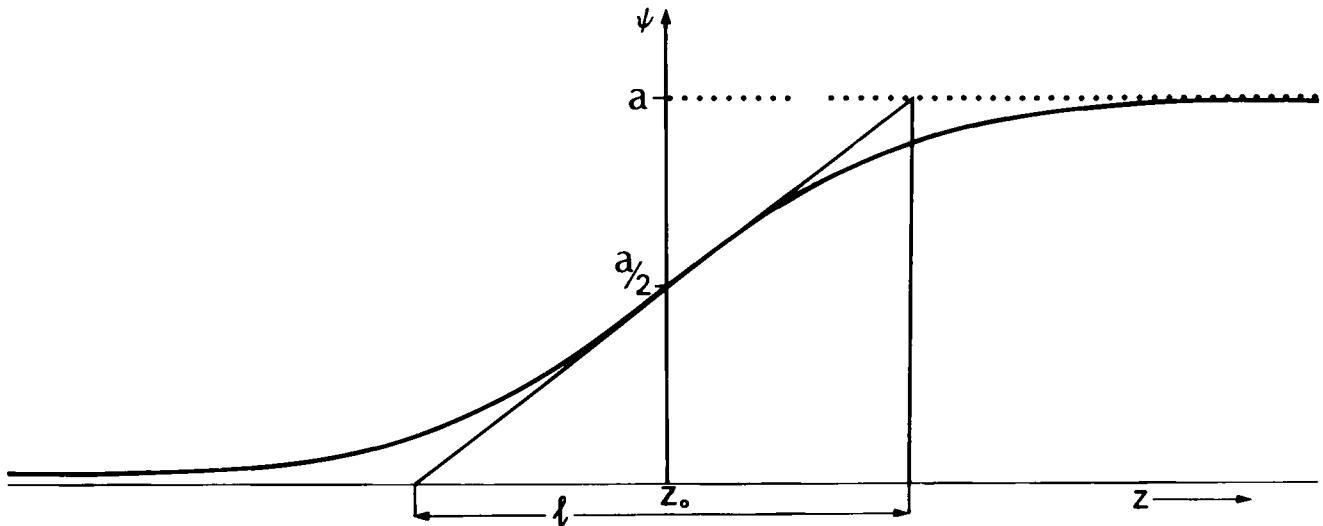
Die voorafgaande, tot en met vergelyking (16), verteenwoordig die resultate van Frenkel en Kontorowa. Hulle verwys wel na supersoniese voortplanting, maar ontleed dit nie. Die outeurs⁵ wys wel daarop dat weens die verband (15), die snelheid

$$v = c(1 - E_0/E)^{1/2}, \quad E \geq E_0 \quad (23)$$

van glipvoortplanting 'n bepaalde funksie van die energie E is en steeds kleiner is as die klanksnelheid c. In die huidige model met sy starre substraat sal die glipsnelheid behoue bly. In 'n werklike (harmoniese) kristal sal energie-oordrag na die omringende atome voorkom en sal (snelheidsafhanklike) demping plaasvind. Dit, tesame met die "rusperagtige" voortplanting van glip, verteenwoordig die essensies van Frenkel en Kontorowa se direkte bydrae. 'n Belangrike gevolg is die feit dat hierdie model, waartoe Prandtl² en Dehlinger³ belangrike basiese insette gemaak het, nie alleen gedien het as nuttige model vir die ontleding van ander eienskappe van ontwigtings nie, maar ook gedien het as grondslag – met en sonder veralgemenings – vir die beskrywing van ander verskynsels. Sommige hiervan word hieronder kortliks bespreek.

1.4 Variasies van die Frenkel-Kontorowamodel

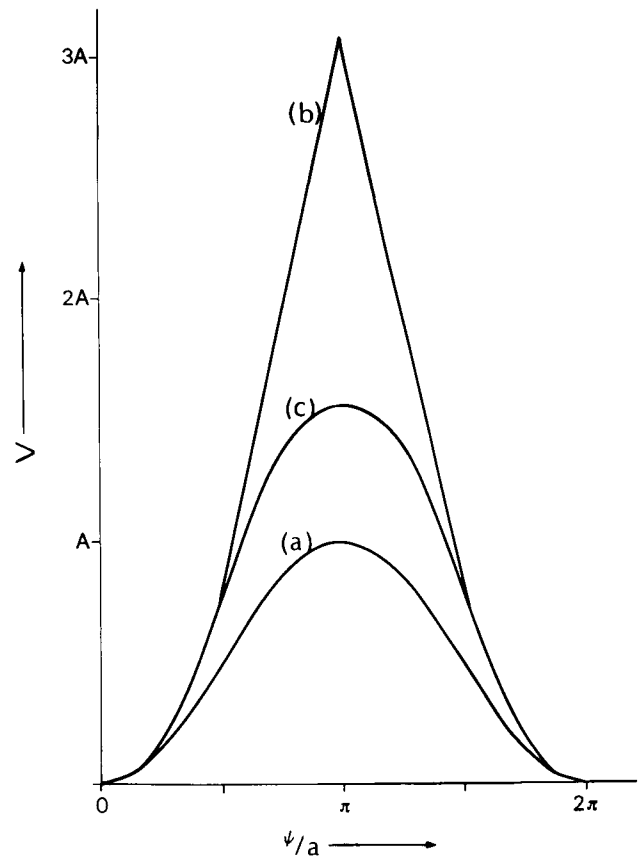
Die FKM word essensieel gekenmerk³ deur die har-



Figuur 4. Die diagram stel 'n enkele ontwrigting in die Frenkel-Kontorowamodel voor; slegs in 'n klein omgewing van z_0 , bevattende sowat l atome, is die atome uit pas met die substraatpotensiaalminima wat val by $\psi = 0$ en $\psi = a$.

moniese (elastiese) karakter van die interatoomkragte in die een kristal B, die starheid van die ander A, gelyke atoomspasiërings ($b = a$) in beide, sinusvormige (kyk kromme (a) in fig. 5) periodisiteit van die wisselwerking tussen die twee, eendimensionele afhanklikheid en die klassieke meganiese analise. Die variasies is in sommige opsigte vereenvoudigings, byvoorbeeld die vervanging van die sinusvormige potensiaal V met stuksgewyse paraboliese krommes,⁹⁻¹² waardeur die beherende vergelykings deur linearisering hanteerbaar gemaak word. In die eenvoudigste vorm kan dit voorgestel word¹⁰ deur kromme (b) in fig. 5, of meer algemeen deur (c). Earmme en Weiner¹² het die wysiging dan weer veralgemeen deur byvoeging van eksterne kragte met die oog op die ondersoek van die dinamiese gedrag van ontwrigtings onder inwerking van aangelegde skuifspannings. Verskeie outeurs het intussen die model uitgebrei na twee dimensies; Frank en Van der Merwe¹³ na tussenvlakke met reghoekige atoomrangskikkings en verskillende roosterkonstantes ($b \neq a$) vir die beskrywing van geadsorbeerde monolae en epitaksie, Van der Merwe¹⁴ na rombiese rangskikkings in (110) bsk (binnesentries kubies) substrate en Snyman en Snyman¹⁵ na rombiese rangskikkings in (111) vsk (vlaksentries kubies) substrate. Reiss¹⁶ en Van der Merwe¹⁷ het die tweedimensionele model vereenvoudig tot die starre model – 'n model waarin beide kristalle star is – en daarmee belangrike resultate afgelei oor die beweeglikheid^{16, 17} van eilandopgroeisels in ideale epitaksiale konfigurasies.¹⁷ Peierls¹⁸ het reeds in 1940 'n veralgemeende en meer realistiese model as dié van Frenkel en Kontorowa ingevoer vir die beskrywing van glip, deur beide kristalle met isotropiese elastiese (harmoniese) halfoneindige kontinua te vervang, maar die sinusvormige tussenvlakkige wisselwerking behou. Hierdie model het belangrike voorspellings¹⁹ gemaak, byvoorbeeld ten opsigte van die wydte en beweeglikheid (Peierlskrag) van ontwrigtings en is

ook veralgemeen vir die beskrywing²⁰ van die wanpas tussen twee fases van dieselfde stof, of die wanpas in epikristalle met verskillende roosterparameters, asook die wanpas by suiwer kantel- en wringingsgrense in kristalle. Terwyl die oorwegings in die voorafgaande die stabiliteit op minimum energiebeginsels



FIGUUR 5. Kromme (a) verteenwoordig die sinusvormige adatoomsuubstraatpotensiaal van Frenkel en Kontorowa, (b) 'n eenvoudige paraboliese voorstelling van die periodiese potensiaal, en (c) 'n meer realistiese paraboliese samestelling van 'n periodiese potensiaal. (Die krommes is so gekies dat hulle dieselfde kromming by die minima het.)

gegrond het en aldus 'n absolute nulpuntteorie daarstel, het veral die periodiese potensiaalvoorstelling van die substraat sy weg gevind na die beskrywing van faseoorgange^{21, 22} in geadsorbeerde monolae as 'n funksie van temperatuur en bedekkingsdigtheid.

Die bogenoemde variasies van die FKM sal hieronder onder die volgende hoofde kortliks bespreek word: die Peierlsmodel, epitaksie en wanpasakkommodasie, faseoorgange en die dinamika van ontwirtings.

2. DIE PEIERLSMODEL

2.1 'n Enkele ontwirting en glijp

2.1.1 Beherende vergelyking en sy oplossing

In die Peierlsmodel¹⁸ word die twee dele B en A van die kristal aan weerskante van die glijvlak deur isotropiese elastiese kontinua voorgestel, waarby die diskrete karakter van die kristal verteenwoordig word deur (i) die afstand d tussen die atoomvlakke aan weerskante van die glijvlak, en (ii) die aanname dat die tangensiaalkomponente van die kragte, wat oor die glijvlak bestaan, periodies is met 'n golflengte gelyk aan die spasiëring a ($a=b$) van atome in die relevante glijvlakrigting. Dit word ook uitgedruk in terme van die tangensiale relatiewe posisies ϕ van naastebure van weerskante van die glijvlak. In die beskouing waarin die ontwirting geskep word deur die invoeging van 'n addisionele atoomvlak by $x=0$ loodreg op die glijvlak $y=0$, sal die volgende verbande bestaan tussen die elastiese (relaksasie-) tangensiale verplasing u van atome aan weerskante van die glijvlak, as gevolg van die kragte wat nou tussen hulle optree:

$$\begin{aligned}\phi(x) &= -b/2 + 2u(x); x < 0 \\ &= b/2 + 2u(x); x > 0.\end{aligned}\quad (24)$$

Hierby is aanvaar¹⁸ dat $u(-x) = -u(x)$ en dat u by 'n bepaalde x , op die atoomvlakke aan weerskante van die glijvlak, gelyk en teenoorgesteld is. Die tangensiale krag, uitgedruk in terme van 'n skuifspanning p_{yx} , is dus van die vorm

$$p_{yx} = -\frac{\mu b}{2\pi d} \sin \frac{2\pi\phi}{b} = \frac{\mu b}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u}{b} \quad (25)$$

waarby die amplitude so gekies is dat Hooke se wet, met skyfmodulus μ , gehoorsaam word vir klein waardes van ϕ . Hierdie skuifspanning word gebalanseer deur skuifspannings wat in die glijvlak ontstaan as gevolg van die elastiese vervorming verbonde aan die ontwirting. In die beskouing waarin die Burgersvektor kontinu oor die glijvlak verdeel is, word hierdie skuifspanning gegee deur¹

$$p_{yx} = \frac{\mu}{\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du(x')}{dx'} \frac{dx'}{x'-x} \quad (26)$$

waarby die Cauchyhoofwaarde van die integraal ter sake is en ν Poisson se verhouding is.

Die oplossing^{1, 19} van die vergelyking, wat ontstaan deur die gelykstelling van skuifspannings in vgl. (25) en (26), is

$$u = -(b/2\pi) \arctan(x/\xi) \quad (27)$$

waar

$$2\xi = d/(1-\nu) \quad (28)$$

die „halfwydte” van die ontwirting heet; u verander oor hierdie interval met $b/2$.

Die tussenvlakkige skuifspanning in vgl. (25) impliseer 'n tussenvlakkige potensiele energiedigtheid

$$v(x) = (\mu b^2/4\pi^2 d) \{1 + \cos(4\pi u/b)\} \quad (29)$$

wat, as dit oor die glijvlak geïntegreer word, die wanpasenergie

$$E = \mu b^2/4\pi(1-\nu) \quad (30)$$

oplewer. Dit is interessant dat hierdie resultaat in werklikheid onafhanklik van die spesifieke vorm (25) van die kragwet is; essensieel is dat dit reduseer tot Hooke se wet.

2.1.2 Die Peierlskrag

Wanneer 'n ontwirting glijp, deurloop dit simmetriese atoomrangskikkings en ondervind dit aldus 'n periodiese krag wat hoofsaaklik sy oorsprong in die wanpasenergie het en in die kontinuumbenadering verdwyn. Dit kan egter afgeskat word deur in (29) na die diskrete stelsel oor te gaan en oor al die atome te sommeer. As die ontwirting in die posisie αb is, is die oplossing (27) van die vorm

$$u(x + \alpha b) = -(b/2\pi) \arctan \{(x + \alpha b)/\xi\} \quad (31)$$

waar x die posisies van atome, voor relaksasie en voor die verskuiwing αb , $-u(x) \equiv 0$ in vgl. (24) – aandui en geskryf kan word as

$$x_n = nb/2, n=0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \infty. \quad (32)$$

Die faktor $1/2$ bestaan omdat atome aan weerskante van die glijvlak getel moet word. Die totale wanpasenergie is aldus

$$E(\alpha) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[1 + \cos \left\{ 2 \arctan \frac{(\alpha + n/2)b}{\xi} \right\} \right]$$

wat gesommeer kan word,¹⁹ en dan benader kan word met

$$E(\alpha) \approx [\mu b^2/4\pi(1-\nu)] \{1 + 2e^{-4\pi\xi/b} \cos 4\pi\alpha\}.$$

Aldus is die krag per eenheidlengte van die ontwirting in 'n andersins volmaakte kristal

$$F = -\frac{1}{b} \frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{2b\mu}{1-\nu} \sin 4\pi\alpha \cdot e^{-4\pi\xi/b}. \quad (33)$$

Hierdie krag staan bekend as die Peierls- of wrywingskrag.

2.1.3 Samevatting

In die voorafgaande uiteensetting is enkele van die vernane voorspellings van die Peierlsmodel uitgelig. Die volgende aspekte regverdig verdere beklemtoning:

– Dit elimineer die singulariteit op die ontwirting, wat voorkom in die eenvoudiger Volterrateorie van ontwirtings.¹

– Dit maak 'n afskating van die halfwydte van die

ontwrigting in terme van die afstand d tussen die atoomvlakke aan weerskante van die glijvlak; dit dien weer as 'n belangrike kriterium by die seleksie van glijstelsels.

- Alhoewel dit andersins ook bekend is, is dit tog betekenisvol dat met vgl. (30) die feit beklemtoon word dat glijvektore, op grond van energie-oorwegings, liefs kort moet wees.
- Dit maak ook 'n afskating van die sogenaamde Peierlskrag, die krag wat nodig is om 'n ontwrigting in 'n foutlose kristal te beweeg. Dit is belangrik om te let op die halfwydte-afhanklikheid in vergelykings (28) en (33) van hierdie krag. Dit verklaar onder andere die feit²² dat ontwrigtings in halfgeleiers met 'n diamantstruktuur 'n lae beweeglikheid het, en dat die beweeglikheid sterk temperatuurafhanklik is. Dit is ook van groot belang in die demping van ontwrigtingsbeweging.

2.2 Wanpasgrense

2.2.1 Beherende vergelyking en sy oplossing

Die Peierlsmodel is mettertyd ook veralgemeen^{20, 24} vir die beskrywing van bikristalle wat by die grensvlak nie presies op mekaar pas nie ($b \neq a$), soos dit voorkom in epitaksiale en tweefasige bikristalle

waarvan beide helftes relatief dik is. Die beherende vergelyking, wat in hierdie geval die vorm

$$2\pi\left[\frac{d\psi}{dX} - \frac{1}{2\pi}\right] = -\frac{1}{2\pi\beta} \int_0^\pi [\sin 2\pi\psi(X+t) - \sin 2\pi\psi(X-t)] \cot(t/2) dt \tag{34}$$

aanneem, met

$$X = \frac{2\pi x}{p}, \beta = \frac{2\pi d\lambda}{\mu p}, p = \frac{b-a}{ab}, \frac{1}{\lambda} = \frac{1-\nu_a}{\mu_a} + \frac{1-\nu_b}{\mu_b} \tag{35}$$

het die oplossing

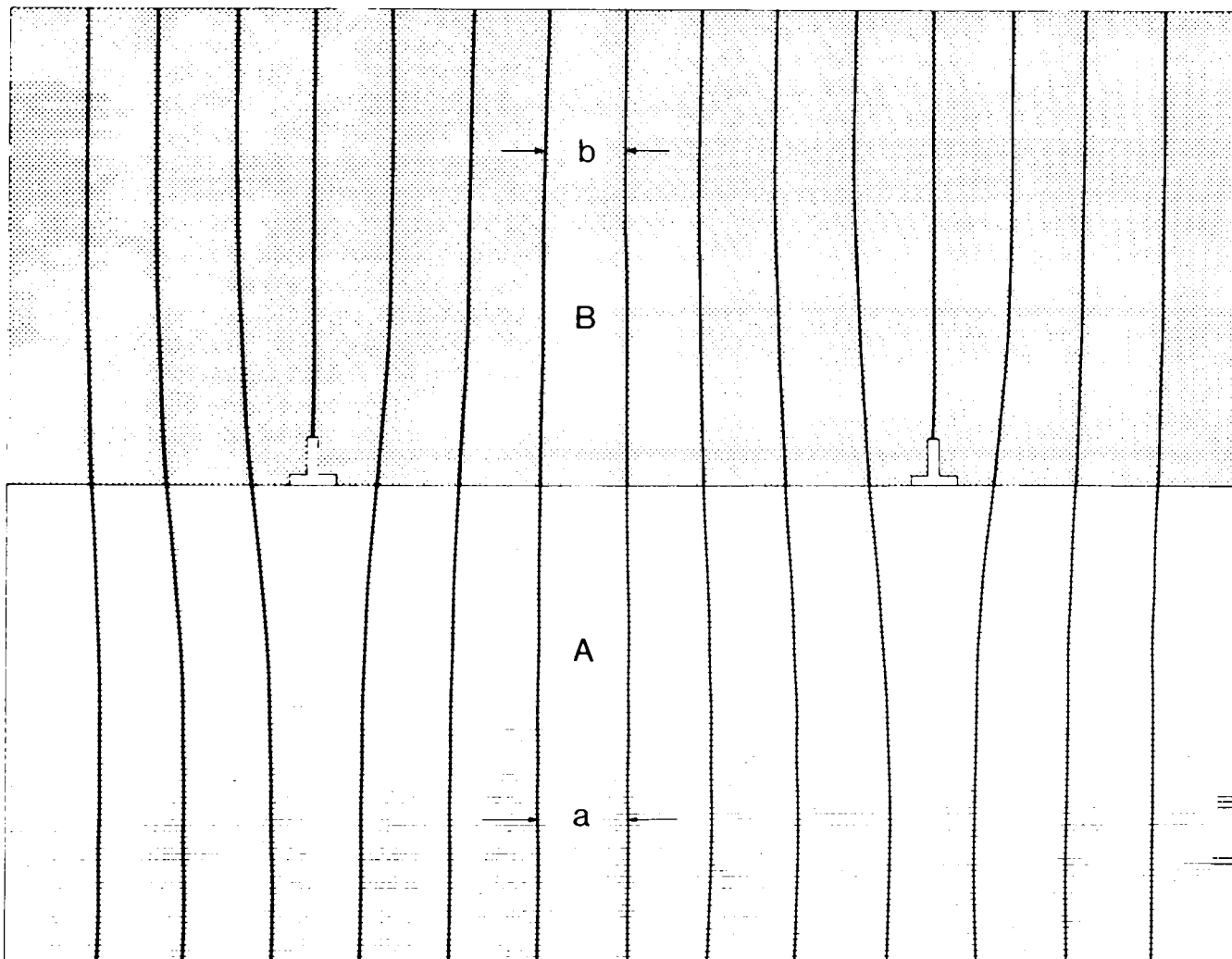
$$\psi(X) = \frac{1}{2} + \pi^{-1} \arctan \left[\left\{ (1 + \beta^{-2})^{1/2} + \beta^{-1} \right\} \tan(X/2) \right]. \tag{36}$$

Die hoeveelheid $c\psi$, waar

$$c = 2ab/(a + b) \tag{37}$$

meet die posisie van 'n tussenvlakkige B-atoom relatief tot die ooreenkomstige A-atoom en het, soos dit hoort, die periodisiteit p van die nonius vir spasiërings a en b . Die oplossing (36) kan geïnterpreteer word as 'n ry kantontwrigtings met 'n reëlmatige spasiëring p soos in fig. 6; hulle akkommodeer, sogenaamd, die wanpas

$$c/p = 2(b - a)/(b + a) \tag{38}$$



FIGUUR 6. Die diagram stel 'n ry egte wanpasontwrigtings voor wat geleë is in die tussenvlak van 'n bikristal bestaande uit helftes B en A met atoomspasiërings b en a respektiewelik.

tussen A en B en staan bekend as wanpasontwrigtings.

Die elastiese vervormingsenergie $E_e^b(h)$ in die gebied wat tot 'n hoogte h bokant die tussenvlak strek, sowel as die elastiese en wanpasenergie gesamentlik, naamlik E , word gegee deur

$$E_e^b(h) = -\frac{(1-\nu_b)c^2\lambda\mu\beta}{4\pi^2\mu_b d} \left\{ \ln \frac{1-A^2}{1-A^2e^{-2H}} + \frac{HA^2e^{-2H}(H-1+A^2e^{-2H})}{(1-\nu_b)(1-A^2e^{-2H})^2} \right\} \quad (39)$$

$$E = (\mu c^2/4\pi^2 d) \{1 - A - \beta \ln(1 - A^2)\} \quad (40)$$

waar

$$H = \frac{2\pi h}{p}, \quad A = (1 + \beta^2)^{1/2} - \beta \quad (41)$$

2.2.2 Samevatting

Die vernaamste gevolg van hierdie analyses^{20, 24} kan soos volg saamgevat word:

- Die ewewigsrangskikking van atome, wat ontstaan deur elastiese relaksasie onder inwerking van die (periodiese) bindingskragte (25) oor die tussenvlak, kan geïnterpreteer word in terme van die sogenaamde wanpasontwrigtings.
- Sowat 98% (kyk vgl. (39)) van die vervormingsenergie word geberg in die gebied wat strek tot afstande $h = p/2$ aan weerskante van die tussenvlak.
- Die spesifieke vervormings oorskry die limiete waarbinne Hooke se wet – en dus die analise – streng geld, in 'n gebied wat tot op 'n afstand van ongeveer $3a$ vanaf iedere ontwrigting strek.
- Met toenemende wanpas gaan die akkommodasie daarvan geleidelik oor vanaf 'n ontwrigtingstipe na 'n noniustipe en die energie E na die limietwaarde $\mu c^2/4\pi^2 d$.
- Die analise kan verder veralgemeen word vir die beskrywing van kantel- en korrelgrense.

3. EPITAKSIE EN WANPASAKKOMMODASIE

3.1 Model

Epitaksie^{22, 24} is die verskynsel waarvolgens 'n kristallyne substraat die oriëntasie voorskryf van 'n enkelkristal – gewoonlik van 'n ander stof – wat daarop groei. In teoretiese ondersoeke van epitaksie word veronderstel dat daar geen onsuiverhede teenwoordig is nie en dat die groeiproses onder ewewigsomstandighede plaasvind. Gevolglik sal die stabiele konfigurasies gekenmerk word deur 'n minimum vrye energie. In 'n belangrike deel van die ondersoeke is vrye energie met energie benader. Hierdie “absolute nulpuntteorie” was reeds baie suksesvol²² met berekenings wat gegrond is op minimalisering van die energie wat geassosieer word met die tussenvlak. In sulke berekenings moet die binding in die kristalle en oor die tussenvlak, die wanpas van die tussenvlakkige atoomrangskikkings, sowel as die omvang van die kristalle, byvoorbeeld die dikte van die epilagie, in ag geneem word.

In hierdie afdeling sal hoofsaaklik die geval van ultradun epilagies (lagies met 'n bedekking van ongeveer een monolaag) behandel word. Dit verg dan onmiddellik 'n uitbreiding van die FKM na twee dimensies op die substraatoppervlak, waarin die substraat deur 'n starre kristal met potensiaal $V(x, y)$ benader word. Vir die Fouriervoorstellings, wat die simmetrie van die atoomrangskikkings in die substraatoppervlak moet hê, is die volgende benaderings in gebruik geneem vir reghoekige,¹³ (110) bsk¹⁴ rombiese en (111) vsk¹⁵ rombiese simmetrie, respektiewelik:

$$V(\xi, \eta) = (W/2) \{2 - \cos 2\pi\xi - \cos 2\pi\eta\} \quad (42a)$$

$$V(\xi, \eta) = (W/3) \{3 - 1,2 \cos 2\pi\xi - 1,2 \cos 2\pi\eta - 0,36 \cos 2\pi(\xi - \eta) - 0,24 \cos 2\pi(\xi + \eta)\} \quad (42b)$$

$$V(\xi, \eta) = W \left[\left\{ \frac{3}{2} + \cos 2\pi(\xi + \frac{2}{3}) + \cos 2\pi(\eta + \frac{1}{3}) + \cos 2\pi(\xi - \eta + \frac{1}{3}) \right\} + \delta \left\{ \frac{3}{2} + \cos 2\pi(\xi + \frac{1}{3}) + \cos 2\pi(\eta + \frac{2}{3}) + \cos 2\pi(\xi - \eta - \frac{1}{3}) \right\} \right] \quad (42c)$$

waar $(a\xi, a\eta)$ die verplasing (gemeet langs die reghoekige/rombiese asse van die eenheidsel) van 'n adatoom met betrekking tot sy ooreenkomstige substraatpotensiaalminimum is. In gevalle (b) en (c) is die hoeke tussen die rombiese asse van die substraat respektiewelik $2\alpha = 2 \arctan 2^{1/2}$ (kyk fig. 7) en $2\alpha = 120^\circ$, terwyl 2β die hoek tussen die rombiese asse van die epilagie is. Die terme bevattende die faktor δ in (42c) maak voorsiening vir stapelfoute.¹⁵ Die hoeveelheid W kan uitgedruk¹⁷ word in terme van die aktiveringsenergie Q vir oppervlakdiffusie, en die desorpsie-energie Φ soos volg:

$$W = gQ = \rho\Phi, \quad (43)$$

waar g van orde een is en ρ , wat sterk bindingsafhanklik is, ongeveer tussen 0,3 en 0,03 lê.

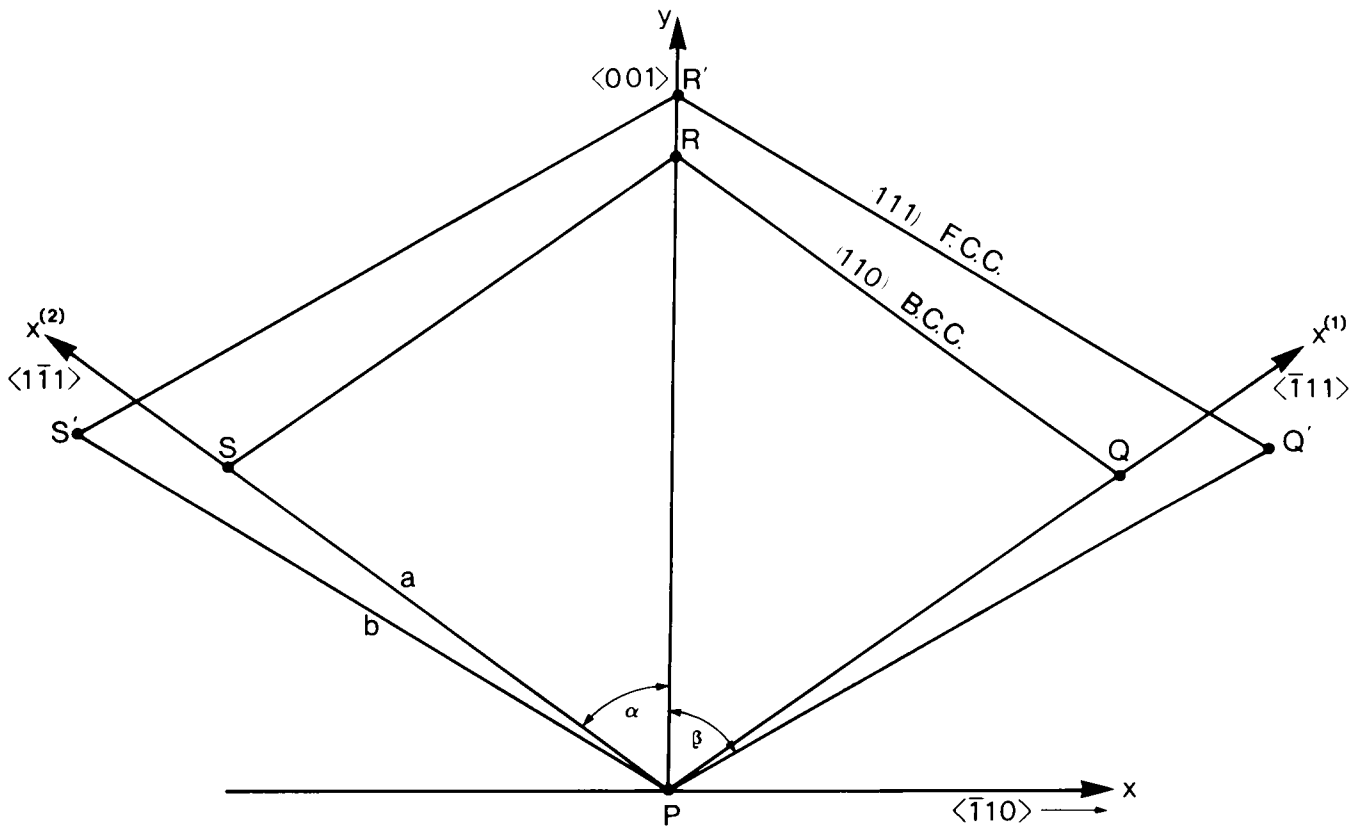
Die vervormingsenergie in die (anisotropiese) harmoniese benadering vir die adatoom-adatoomwisselwerking in die dun lagie met 'n vrye oppervlak is nou van die vorm¹⁷

$$\begin{aligned} \varepsilon &= W\ell^2 r^2 (e_x^2 + e_y^2 + 2Pe_x e_y + Re_{xy}^2) \\ P &= \frac{c_{12}}{c_{12} + c_{11}}, \quad R = \frac{c_{44}c_{11}}{c_{11}^2 - c_{12}^2}, \quad S = \frac{c_{11}^2 - c_{12}^2}{2c_{11}} \\ \ell^2 &= \frac{\Omega s}{W r^2}, \quad r = b/a \end{aligned} \quad (44)$$

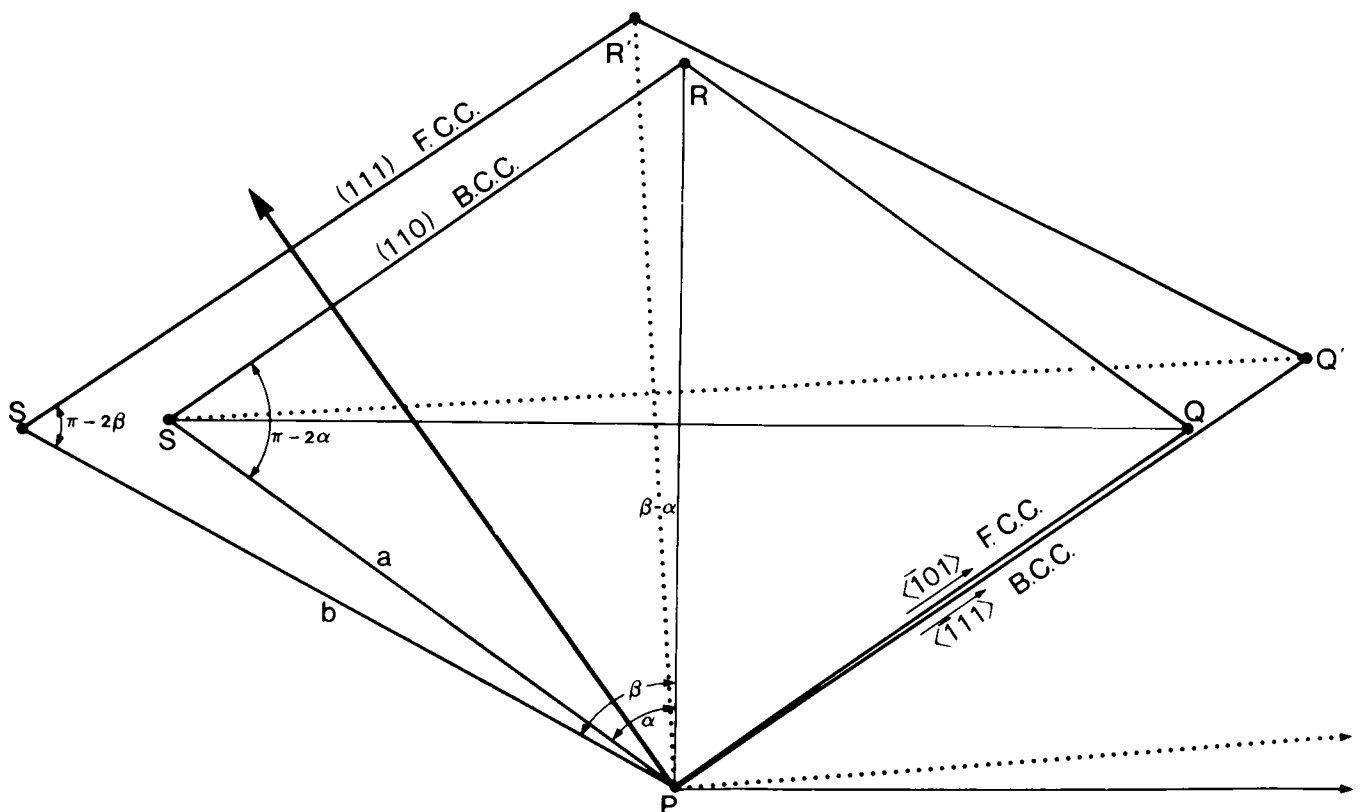
waar e_x , e_y en e_{xy} die spesifieke vervormings in terme van reghoekige asse is, c_{ij} die gewone elastiese konstantes vir kubiese kristalle en b en Ω respektiewelik die roosterparameter en volume per eenheidsel van die epilagie is. Die harmoniese benadering impliseer dat die atoomrangskikking by ewewig ($W=0$) bekend is. Totdat iets beters gevind word, word dit met dié in die makroskopiese kristal benader. Die voorwaarde vir isotropie is dat:

$$R = (1 - P)/2 \quad (45)$$

Die komponente van die (oppervlak) spanning in die epilagie word gegee deur:



FIGUUR 7(a). Dit vertoon respektiewelik die (111) vsk en (110) bsk rombiese atoomrangskikkings $PQR'S'$ en $PQRS$ in die Nishiyama-Wassermannorieëntasie.



FIGUUR 7(b). Soos in (a), maar in Kurdjumov-Sachsorieëntasie, waarby die vsk rooster deur 'n hoek $\beta - \alpha$ ten opsigte van dié in (a) gedraai is.

$$T_x = 2St(e_x + Pe_y), T_{xy} = 2SRt e_{xy} \quad (46)$$

Die volgende wanpasse^{14, 17} is ter sake:

$$f = r - 1, r = b/a$$

$$f_x = rs_\beta/s - 1 = r/r_x - 1, f_y = rc_\beta/c - 1 = r/r_y - 1 \quad (47a)$$

$$f_d = rc_\beta s_\beta / cs - 1 = r/r_d - 1, f_{an} = 2(\beta - \alpha)$$

waar

$$s = \sin \alpha, c = \cos \alpha, s_\beta = \sin \beta, c_\beta = \cos \beta \quad (47b)$$

en die wanpas f betrekking het op kwadratiese en gelyksoortige ($\beta = \alpha$) rombiese rangskikkings en die res op ongelyksoortige ($\beta \neq \alpha$) rombiese rangskikkings; f_x en f_y respektiewelik die wanpasse is oor die lang en kort diagonale in die oriëntasie (die sogenaamde Nishiyama-Wasserman (NW)-oriëntasie van fig. 7a), waarby die diagonale parallel is en f_d die wanpas van opeenvolgende sye in die oriëntasie van Fig. 7b; die Kurdjumov-Sachs(KS)-oriëntasie. Die wanpas f_{an} spreek vanself en speel as sulks 'n belangrike rol in die laasgenoemde oriëntasie.

Die beherende vergelykings van die tweedimensionele model, soos bo gedefinieer, reduceer tot eendimensionele probleme met Sine-Gordontipe (kyk vgl. (6)) behorende vergelykings deur die invoering van een van twee tipes voorwaardes: of 'n beperking tot eendimensionele vervorming in die NW oriëntasie, of 'n vrye laterale, Poissonagtige vervorming in een rigting, ooreenkomstig 'n vrye randvoorwaarde van die vorm:²⁵

$$\bar{T}_x = 2St(\bar{e}_x + P\bar{e}_y) = 0. \quad (48)$$

Laasgenoemde behels 'n noniusagtige wanpas-akkommodasie en is karakteristiek van wanpas tussen starre kristalle A en B. Dit word benader deur werklike kristalle met groot wanpas mits¹⁷

$$f\ell \geq 1,5. \quad (49)$$

Hierdie voorwaarde het, ooreenkomstig vgl. (44), ook belangrike bindingsinsette.

3.2 Die starre model

3.2.1 Ideale epitaksiale konfigurasies

Beskou 'n gegewe kristalkombinasie waarin atoomrangskikkings kwalitatief, maar nie kwantitatief nie, voorgeskryf is; daar is byvoorbeeld voorgeskryf dat beide atoomrangskikkings 'n rombiese struktuur het, maar nóg die verhouding $r = b/a$, nóg die hoeke β en α is gegee. Die vraag ontstaan nou vir welke waardes van r , α en β die energie van die bikristal 'n absolute minimum sal wees. Die *a priori*-aannames word gemaak dat hierdie ideale epitaksiale konfigurasies dié van die starre model is.

Die probleem van ideale epitaksiale konfigurasies is gevolglik analities oplosbaar aangesien die totale wisselwerkingsenergie – ook tussenvlakenergie genoem – deur eenvoudige sommasie van V in vgl. (42) berekenbaar is. Die som bestaan uit terme van die vorm:¹⁷

$$K(M;p,q) \cos 2\pi\xi_0 \\ = - \frac{\sin(2M+1)p \sin(2M+1)q}{\sin p \sin q} \cos 2\pi\xi_0 \quad (50)$$

waar die epifunksie K soortgelyk is aan die funksies van die diffrakteorie. In vgl. (50) is ξ_0 'n translasië-koördinaat $2M+1$ 'n maatstaf vir die „grootte” van die epilagie – in die geval van reghoekige simmetrie is daar $(2M+1)^2$ atome en by rombiese simmetrie $G = (2M+1)^2 + (2M)^2$ atome – en p en q parameters wat r , α , β en θ synde die oriëntasie van die epilagie met betrekking tot 'n „parallele” oriëntasie, soos byvoorbeeld die NW een in fig. 7. Die variasie van die gemiddelde energie per atoom V_G/G , as funksie van r en θ , word geïllustreer deur die perspektief-diagram in fig. 8.

Die analitiese voorwaardes vir epitaksie het 'n eenvoudige geometriese interpretasie¹⁷ wat sy oorsprong het in die simmetrieë wat met vgl. (42) en (44) in die model ingebou is. Die teorie voorspel dat ideale epitaksiale konfigurasies bestaan vir alle gevalle waar opeenvolgende atoomrye in die epilagie pas op 'n reeks ewewydige – nie noodwendig opeenvolgende – substraatatoomrye. Hierdie beginsel van „rypassing” impliseer in die geval van dik epilae – waarin die onderskeiding tussen substraat en epilagie nie meer sinvol is nie – die stabiliteit van koïnsidensiegrense. In terme van die definisies in vgl. (47) word eenvoudige maar belangrike ideale epitaksiale konfigurasies geïdentifiseer as diesulkes waarvoor een van die wanpasse f , f_x , f_y en f_d nul is en wat respektieflik geskied by (r,θ) gelyk aan $(1,0)$, $(r_x,0)$, $(r_y,0)$ en $(r_d,0)$ in fig. 8 die NW oriëntasie en $(r_d,0)$ die KS oriëntasie.

Samevattend is dus

$f = 0$ by $r = 1$, vir kwadratiese en rombiese ($\beta = \alpha$) simmetrie

$f_x = 0$ by $r = r_x$ of $f_y = 0$ by $r = r_y$ in NW ($\theta = 0$) oriëntasie met $\beta \neq \alpha$ (51)

$f_d = 0$ by $r = r_d$ in KS ($\theta = \beta - \alpha$) oriëntasie met $\beta \neq \alpha$.

Op grond van die energieoorwegings kan die diepte van die minima van V_G/G as 'n maatstaf vir die „sterkte” – die neiging tot epitaksie – van die ooreenkomstige ideale konfigurasie beskou word. Terwyl die posisies van die ideale punte deur geometrie bepaal word, word die sterkte van 'n ideale punt deur 'n spesifieke Fourierkoeffisiënt bepaal; byvoorbeeld in die geval van (42b) vir 'n (110) bsk substraat is die sterktes per epilagie-atoom $(W/3)(1,2 + 1,2 + 0,36 + 0,24) = W$ en $0,12W$, $0,08W$ en $0,4W$ respektieflik vir die ideale punte by $r = 1$, r_x , r_y en r_d .

3.2.2 Beweglikheid van epilagies

'n Belangrike gevolgtrekking,¹⁷ wat ook deur Reiss¹⁶ gemaak is, omtrent die beweeglikheid van epilagies wat aan die starheidsvoorwaarde (49) voldoen, volg uit die gesamentlike effek van die faktore K en $\cos 2\pi\xi_0$ in vgl. (50). In die ideale konfigurasies val die translasiëkoördinate (ξ_0, η_0) van die sentrale

atoom saam met die minima van V in (42). In 'n gegewe epistelsel is K vas. As die lagie transleer, sal $\cos 2\pi\xi_0$ tussen $+1$ en -1 ossilleer. As hierdie feit met die aard van fig. 8 in verband gebring word, volg dit dat 'n ideale lagie in translasië energieversperrings van die orde $GW \approx GQ$ sal ondervind, terwyl dié wat ver van ideaal is, slegs versperrings van die orde Q sal ondervind. Soortgelyke stellings kan gemaak word wat starre rotasies betref.

3.3 Die harmoniese model en wanpasakkommodasie

3.3.1 Beherende vergelykings

Met die oog op die afleiding van die beherende vergelykings is dit nodig dat die spesifieke vervormings in ε van vgl. (44) uitgedruk word in terme van die koördinate $(a\xi_{mn}, a\eta_{mn})$ van die (m,n) -te atoom ten opsigte van die (m,n) -te potensiaalminimum. In die geval van reghoekige atoomrangskikkings word dit gedoen^{13,24} in terme van die relatiewe verplasings van die atome (m,n) , $(m+1,n)$ en $(n+1,m)$ op 'n epilagie eenheidsel; of te wel die vervormings van die eenheidselsy wat by (m,n) begin:

$$\begin{aligned} e_x &= (a + a\xi_{m+1,n} - a\xi_{mn} - b)/b \\ &= (\xi_{m+1,n} - \xi_{mn} - f)/r, \\ e_y &= (\eta_{m,n+1} - \eta_{mn} - f)/r, \\ e_{xy} &= (\xi_{m,n+1} - \xi_{mn} + \eta_{m+1,n} - \eta_{mn})/r \end{aligned} \quad (52)$$

In die geval van rombiese simmetrie word dit uitgedruk¹⁴ in terme van die koördinate van al vier hoekpunte (m,n) , $(m+1,n)$, $(m,n+1)$ en $(m+1,n+1)$ van die eenheidsrombus.

Die totale energie kan nou in terme van die ξ 's en η 's uitgedruk word

$$E = \Sigma \{V(\xi_{mn}, \eta_{mn}) + \varepsilon(\xi_{mn}, \eta_{mn})\} \quad (53)$$

en die ewewigsposisie van die (m,n) -te atoom gevind word deur energieminimalisering

$$\partial E / \partial \xi_{mn} = 0, \quad \partial E / \partial \eta_{mn} = 0. \quad (54)$$

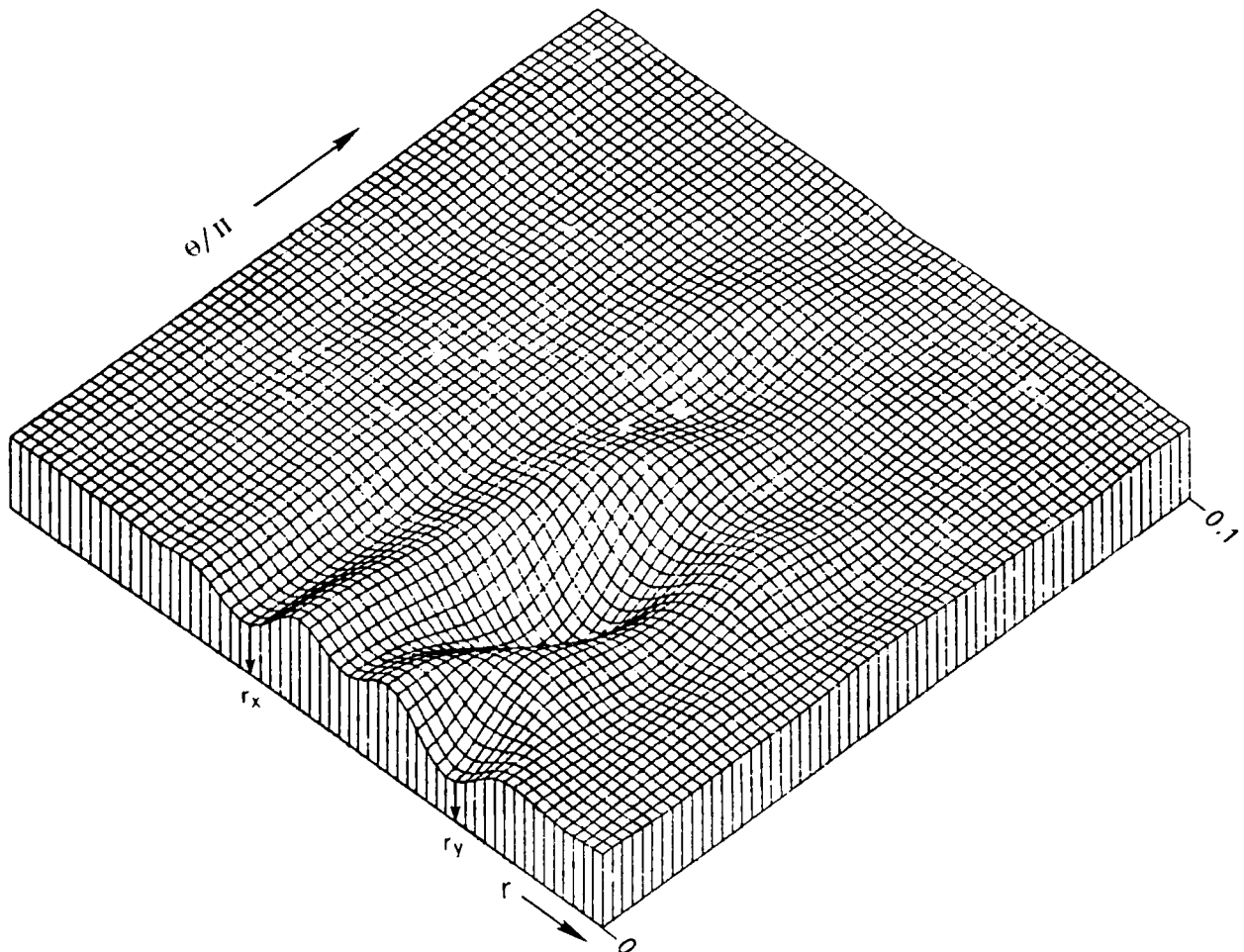
Deur nou oor te gaan na 'n kontinuumbenadering (kyk ook vgl. (3))

$$\xi_{mn} = \xi(m,n), \quad \eta_{mn} = \eta(m,n) \quad (55)$$

op grond van die aanname dat die verplasings stadig verander van atoom tot atoom, reduseer die verskilvergelykings (54) tot gelyktydige nie-lineêre tweede-orde partiële differensiaalvergelykings. In die geval van reghoekige atoomrangskikkings met die potensiaal (42a) is die vergelykings direk skeibaar en reduseer tot Sine-Gordonvergelykings van die vorm:²⁴

$$d^2\xi/dm^2 = (\pi/2l^2) \sin 2\pi\xi. \quad (56)$$

In die geval van rombiese simmetrie reduseer²⁵



FIGUUR 8. 'n Perspektiefdiagram van die energie per atoom in die (r,θ) vlak van 'n (111) vsk „starre” atoomrangskikking op 'n (110) bsk starre substraat, waar $r = b/a$ en θ die wanoriëntasie met betrekking tot die Nishiyama-Wassermannoriëntasie is.

vgl. (54) slegs tot gewone differensiaalvergelykings van die vorm (56), as boonop die verplasing beperk word tot δf (i) 'n enkele diagonaalrigting δf (ii) beide diagonaalrigtings, waarvan een van die Poissonagtige soort (kyk vgl. (48)) is, δf (iii) 'n gewone verplasing loodreg op een van die rombusse en 'n Poissonagtige verplasing loodreg op eersgenoemde. Gevalle (i) en (ii) geld vir die NW en (iii) vir die KS oriëntasie. In geval (i) is die vergelyking buitendien 'n veralgemeende Sine-Gordonvergelyking wat ook nog die tweede harmoniese term bevat,¹⁹ en aldus 'n veralgemeening²⁶ van die FKM daarstel.

Die algemene oplossing van (56) is van die vorm^{13, 24}

$$d\xi/dm = \pm(1 - \kappa^2 \cos^2 \pi\xi)^{1/2} / \kappa \ell \quad (57)$$

$$\pi n / \kappa \ell = \pm F\{\kappa, \pi(\xi - 1/2)\} \quad (58)$$

waar F 'n onvolledige elliptiese integraal modulus κ en die *boonste/onderste* tekens betrekking het op *positiewe/negatiewe* ontwigtings. Terwyl die oplossing (11) van die Sine-Gordonvergelyking 'n enkele ontwigting daarstel, verteenwoordig vgl. (58) 'n ry van kanttipe-ontwigtings met

$$\bar{P} = 2\ell \kappa K(\kappa) / \pi \quad (59)$$

atome per ontwigting, waar $K(\kappa)$ 'n volledige elliptiese integraal van die Eerste Soort is.

Omdat hierdie ontwigtings 'n gedeelte

$$\bar{f} = \pm 1/\bar{P} \quad (60)$$

van die wanpas f akkommodeer, heet dit wanpasontwigtings.

'n Gedeelte van die wanpas f sal deur (homogene) wanpasvervorming \bar{e} opgeneem word, wat in terme van die definisies (47) die volgende vergelyking bevredig:

$$r\bar{e} = \bar{f} - f \quad (61)$$

3.3.2 Energie en stabiliteit

In die kontinuumbenadering (55) gaan die verskille in vgl. (52) oor in differensiale en die som in vgl. (53) oor in 'n integraal. Deurvoering van die integrasie oor 'n area bevattende $\bar{P} \times \bar{P}$ atome en deling deur \bar{P}^2 – by kwadratiese simmetrie is daar nou ook in die loodregte rigting \bar{P} atome per ontwigting – lewer dan, vir die gemiddelde energie per atoom, die resultaat:

$$\bar{\epsilon} = 2W\{4E(\kappa)\ell \bar{f} / \pi \kappa - 2\ell^2 \bar{f}f + \ell^2 f^2 + 1 - \kappa^{-2} + 2P\ell^2(\bar{f} - f)^2\} \quad (62)$$

waar $E(\kappa)$ 'n volledige elliptiese integraal van die Tweede Soort is.

Ten einde die mees stabiele van al die ewewigskonfigurاسies te bepaal kan nou $\bar{\epsilon}$ met betrekking tot \bar{e} geminimaliseer word, waarby die κ -afhanklikheid van \bar{e} , soos weerspieël in vgl. (59)–(61), in ag geneem moet word. Dié weg impliseer onder andere die differensiasie van elliptiese ingtegrale. 'n Veel eenvoudiger minimaliserings prosedures bestaan as gevolg van die feit dat verandering in \bar{e} die invoering

van ontwigtings impliseer. Dit is dus slegs nodig om te bepaal of (positiewe) arbeid nodig is vir die skeping van 'n ontwigting, deur die verplasing van die vrye kant van die epilagie deur 'n afstand gelyk aan die betrokke atoomspasiëring in die substraat, byvoorbeeld a in die kwadratiese geval. Hierdie arbeid word gegee deur

$$\omega = \int_0^1 T_x dx \quad (63)$$

vir die vrye kant loodreg op die x -as. Die bogenoemde vereenvoudiging bestaan daarin dat in die integraal die parameter κ 'n konstante is op grond van die bykomstige veronderstelling dat die epilagie 'n groot laterale uitgestrektheid het. Indien daar ontwigtings in 'n loodregte rigting bestaan, moet vir T_x sy gemiddelde \bar{T}_x langs die vrye kant geneem word. Deur instellings uit vgl. (46) en (52) ontstaan, in die kontinuumbenadering, 'n deurvoerbare integraal. Die voorwaarde $\omega = 0$ vir stabiliteit reduceer uiteindeelik tot die vergelyking

$$6 \bar{f} = 1 \pm \frac{2}{\pi \ell \kappa (1 + P)} [E(\kappa) + \frac{P \pi^2}{4K(\kappa)}] \quad (64)$$

Hierdie resultaat gaan oor na die kritieke waarde

$$r_c = 1 \pm 2/\pi \ell (1 + P) \quad (65)$$

in die limiet van koherensie ($\kappa = 1$) en impliseer, soos afgelei kan word uit vgl. (47a), kritieke wanpasse

$$f_c = \pm 2/\pi \ell (1 + P) \quad (66)$$

In die interval $f_c^- < f < f_c^+$ van wanpas sal 'n stelsel met kwadratiese simmetrie dus koherent groei, en daarbuite sal die wanpas deur wanpasontwigtings en wanpasvervorming geakkommodeer word.

3.4 Veralgemenings

3.4.1 Rombiese simmetrie

Die voorafgaande behandeling het hoofsaaklik betrekking op epitaksie met reghoekige of kwadratiese simmetrie en dien in verskillende opsigte veralgemeen te word. Van besondere belang is die veralgemeening tot rombiese simmetrie. Die analise²⁵ verloop op analoë wyse, maar verg beperkings op die vryheidsgrade, wat dus ook die geldigheid dienooreenkomstig beperk. Die berekening is heelwat ingewikkelder en daar bestaan ook veel meer moontlikhede, soos weerspieël word deur die ideale epitaksiale konfigurasies, waarvan die vernaamstes in vgl. (51) gelys word. Op grond van die benaderde analises²⁵ wat hierbo vermeld is, en andere wat elders¹⁷ deurgevoer is, is „fasediagramme” in die (r, ℓ) -vlak gekonstrueer, wat die aard van wanpasakkommodasie en die relevante oriëntasies karakteriseer. Ook is die relevante parameters afgeskat¹⁷ waar die nodige data beskikbaar was. Bemoedigende korrelasie¹⁷ met eksperimentele waarnemings op ultradun²⁷ en dik²⁸ epilagies is gevind.

3.4.2 Eindige epilagies

In die bogemelde oorweging is stilswyend aanvaar dat die epilagie van groot laterale omvang is, byvoor-

beeld in die minimaliseringsproses met die berekening in vgl. (63), en dat die kontinuummetode akkuraat genoeg is. Die eienskappe van eindige lagies is in die kontinuummodel ondersoek deur Niedermeyer²⁹ en Jesser en Van der Merwe³⁰ en in die diskrete vorm deur Snyman en Van der Merwe.³¹ In laasgenoemde geval is die verskilvergelykings direk opgelos met behulp van numeriese metodes. Die vernaamste resultate kan soos volg saamgevat word:

- (i) Die reguit kante van 'n epilagie word effens gegolf by die invoering van wanpasontwrigtings weens die Poissonverskynsel,
- (ii) die kontinuumbenadering maak baie akkurate voorspellings van die wanpasafhanklikheid van stabiliteit,
- (iii) die kromme van die gemiddelde energie per atoom as funksie van die epilagiegrootte is gesegmenteer, waarby iedere segment ooreenkom met die invoering van 'n addisionele wanpasontwrigting, en
- (iv) dat die (gemiddelde) wanpasvorming op 'n saagtandagtige wyse – 'n „tand” vir iedere bykomende ontwrigting – met die epilagiegrootte verander.

3.4.3 Beweeglikheid van epilagies

Terwyl die starre model veel insig gebring het^{16, 17} oor die beweeglikheid van epilagies wat aan die model se vereistes voldoen, en die eksperimentele ondersoek van epilagiebeweeglikheid veel aandag³² geniet het, het 'n ondersoek van die effek van elastiese relaksasie (wanpasontwrigtings) op epilagiebeweeglikheid aktueel geword. Sodanige ondersoek is deur Markov en Karaivanov³³ numeries deurgevoer aan die hand van die FKM en sy paraboliese variant. Die essensies van hul resultate, wat 'n treffende ooreenkoms toon met dié van die starre model, is soos volg: die aktiveringsenergie E_a vir (translasie-) „oppervlakdiffusie” van die epilagie is van die orde van die aktiveringsenergie Q vir atomiese oppervlakdiffusie as die wanpas groot is – groter as die kritieke wanpas f_k waarby wanpasontwrigtings spontaan ontstaan. As $f < f_k$ sal E_a eers afneem met die epilagiegrootte en 'n minimum bereik by 'n grootte waar, soos vereis vir stabiliteit, die eerste ontwrigting verskyn. Daarna neem dit monotoon toe, benader volgens 'n eweredige verband. Hierdie gevolgtrekkings toon 'n duidelike korrelasie met dié van §3.2.2, wat afgelei is vir starre epilagies.

3.4.4 Dikteafhanklikheid

Van groot belang is die vraag na die dikteafhanklikheid van wanpasakkommodasie. Ooreenkomstig vgl. (44) sal ℓ met die dikte t toeneem soos $t^{1/2}$. Dit impliseer dat die geldigheidsgebied van die starheidsvoorwaarde in (49), met toenemende dikte, genader en mettertyd betree sal word. Dit behels weer dat die ideale punte skerper gedefinieer word. Andersyds verskyn die parameter ℓ ook in al die voorspellings, byvoorbeeld vgl. (62)-(66), van die harmoeniese model. Byvoorbeeld, 'n epilagie, wat as monolaag volgens vgl. (66) subkritiek is – $f < f_c(1)$ – sal kritiek

word by gegewe dikte sodra

$$f_c(t) < f \quad (67)$$

waar t die aantal atoomlae in die lagie is. Die uitspraak (67) en die dikteafhanklikheid van r in (64) het natuurlik slegs kwalitatiewe betekenis, omdat dit gegrond is op 'n starre substraat en 'n epilagievorming wat oor die dikte van die lagie nie verander nie. Beide benaderings is nog redelik³⁴ by epilagies bestaande uit twee monolae, maar nie daarna nie. 'n Realistiese teorie vir die dikteafhanklikheid van wanpasakkommodasie vir lagies in die oorgangsgebied van dun na dik is nog nie ontwikkel nie, nie vir 'n veralgemeende FKM of ander model nie.²⁴ Die Volterra-model is wel nuttig deur Matthews²² toegepas oor die hele diktegebied, deur gebruik te maak van die „afsnitbenadering”, waarin die spanningsveld buite 'n silinder van straal R om die ontwrigting verwaarloos word, en waar

$$\left. \begin{aligned} R &= p/2p \text{ as } h \geq p/2 \\ &= h \text{ as } h < p/2. \end{aligned} \right\} \quad (67)$$

Die noukeurigheid²⁴ van die benadering by lagies waarvan die dikte h groter is as die helfte van die wanpasontwrigtingspasiëring word gesteun deur vgl. (39) om redes soos verduidelik in die samevatting daaronder. Hierdie ondersteuning verloor klaarblyklik betekenis as h van dieselfde orde as b is.

3.4.5 Groeimorfologie

In die voorafgaande oorwegings is stilswyend aanvaar dat die epilagie ongeveer 'n monolaag is, of minstens 'n eenvormige dikte het, en aldus in 'n proses van tweedimensionele groei tot stand gekom het. Die sogenaamde groeimorfologie kan ook aanvanklik 'n driedimensionele karakter hê. In die literatuur³⁵ is twee- en driedimensionele groei ook onderskeidelik as die Frank-Van der Merwe- en Wolmer-Weber-groeimeganismes bekend. Bauer³⁶ het aange- toon dat twee- en drie- dimensionele groei verkry word namate

$$\sigma_B + \sigma_I - \sigma_A \leq 0 \quad (68)$$

waar σ_B , σ_A en σ_I onderskeidelik die spesifieke vrye oppervlakenergie van die epilagie, substraat en tussenvlak is. Hierdie voorwaarde kan benader³⁷ word met

$$E_{BA} - E_{BB} \leq 0 \quad (69)$$

waar E_{BA} die adhesie-energie tussen epilagie B en substraat A is en E_{BB} die kohesie-energie in B. Vergelyking (69) formuleer dus die morfologiekriterium in terme van „bindingsterktes”. Die bogenoemde eksperimentele data³² oor die beweeglikheid van sogenaamde (epitaksiale) eilandjies het betrekking op driedimensionele groei.

3.4.6 Dinamiese effekte

'n Nuwe terminologie⁴¹ het gedurende die afgelope dekade ontstaan met betrekking tot die atoomrangskikkings in ultradun geadsorbeerde lagies, naamlik die terme ekwimatig (commensurate = C) en nie-

ekwimatig (incommensurate = I) vir koherente en nie-koherente lagies onderskeidelik, terwyl na (wanpas-) ontwrigtings verwys word as statiese vervormingsgolwe (static distortion waves) of walle of solitons; laasgenoemde veral vir bewegende ontwrigtings. Daar word ook na die verskillende rangskikkings as „fases” verwys, terwyl die oorgang van die ekwimatige na die nie-ekwimatige fase die C-I-oorgange genoem word.

Novaco en McTague⁴² het 'n FKM model gebruik, waarin die periodiese substraatpotensiaal deur 'n magreeks – prakties 'n paraboliese afhanklikheid – voorgestel word, om aan te toon dat die oriëntasie van die lagierooster van 'n nie-ekwimatige lagie met betrekking tot dié van die substraat ietwat sal afwyk van die ewewydige oriëntasie, as gevolg van die invloed van transversale klankgolwe in die lagie, onafhanklik van lagiedeursnit. Hulle beraam dat, op die (0001)-vlak van grafiet, die afwykings vir argon en neon respektieflik ongeveer $3,5^\circ$ en 18° sal wees. Villian⁴¹ het aan die hand van 'n pseudoharmoniese model – dit is anharmonies op die walle – aangetoon dat die rotasie plaasvind by die C-I-oorgang en dat dit slegs sal geskied as die longitudinale snelheid van klank in die „vrye” geadsorbeerde lagie meer as tweekeer so groot as die transversale snelheid is.

4. FASEOORGANGE

Terwyl die voorafgaande uiteensetting betrekking gehad het op berekeninge by $T=0$, is in hierdie paragraaf juis die temperatuurafhanklikheid van die eienskappe van die geabsorbeerde lagies van belang. Veral van belang is die kritieke temperatuur T_c vir die C-I-oorgang en die orde daarvan; of dit 'n eerste- of tweedeorde-oorgang is. Die teoretiese modelle wat gebruik word, is feitlik sonder uitsondering van die FK-tipe.^{21, 22} Waar 'n een- of tweedimensionele Fourierbenadering vir die adatoomsuubstraatwisselwerking gebruik is het dit gebruiklik geword²¹ om ook daarna te verwys as een- of tweedimensionele Sine-Gordonstelsels. Die primêre taak in probleme van hierdie aard is om die toestandsom te vind, gewoonlik met behulp van kwantumeganiese tegnieke. Dit lê buite die bestek van hierdie oorsig om hierdie tegnieke weer te gee. Uit die toestandsom word dan die gevraagde eienskappe deur eenvoudige differensiasie-operasies gevind.

Hierdie studieveld het in die afgelope dekade, beide teoreties en eksperimenteel, intensiewe aandag geniet. Die oogmerk van hierdie bydrae is slegs om die aandag op die aktiwiteit te vestig. (Verdere verwysings kan uit die publikasies van Okwamoto²¹ en Schultz²² verkry word.) Die veralgemening tot die temperatuurgebied $T>0$ toon duidelike korrelasies, waar toepaslik, met die eienskappe soos voorspel vir $T=0$. As die wanpas groot is, het die periodiese adatoomsuubstraatwisselwerking weinig invloed en gee dit aanleiding tot 'n “vrye veld”-gedrag²² van die lagie. Dit is die ekwivalent van wat vroeër as die noniusfase (kyk vgl. (49)) bestempel is. Namate die wanpas afneem, ontstaan dan ekwimatige gebiede van toenemende oppervlaktes, wat deur walle van

mekaar geskei word. Die korrelasie met die fase waarby die wanpas deur ontwrigtings en homogene vervorming geakkommodeer word, is duidelik. By 'n kritieke, temperatuurafhanklike wanpas $f_c(T)$ kom die C-I-oorgang dan voor. Aan die bokant van f_c vertoon die stelsel kritieke gedrag, byvoorbeeld in die hittekapasiteit, wat toegeskryf word aan „ossillasies” van die walle. Schulz⁴⁰ het in 'n direkte numeriese analise van die tweedimensionele Sine-Gordonstelsel met kwadratiese simmetrie aangetoon dat dit of 'n enkele eersteorde-C-I-oorgang ondergaan, of 'n tweedeorde-oorgang gevolg deur 'n eersteorde-oorgang. Dit is ook interessant dat die ekwimatige fases, wat Schultz⁴⁰ in hierdie geval voorspel, voldoen aan die epikriterium van rypassing, soos bespreek in § 3.2.1.

5. DINAMIKA VAN ONTWRIGTINGS

In afdeling I is daar reeds ingegaan op die werk van Frenkel en Kontorowa⁵ ten opsigte van die beweging van ontwrigtings met behoud van vorm. Alhoewel dit voor-die-hand-liggend was, het hulle nie gewys op die relativistiese karakter van die resultate, soos vervat in die ontwrigtingsenergie en -wydte in vgl. (13) en (15) onderskeidelik, nie. Hierdie eienskappe, sowel as dié van supersoniese anti-ontwrigtings en infinitesimale golwe, is eerste deur Frank en Van der Merwe⁸ erken. Hulle het die teorie ook uitgebrei na rye van opeenvolgende ontwrigtings en anti-ontwrigtings.

Al bogenoemde oorwegings was gebaseer op die kontinuumbenadering en 'n starre substraat. Frenkel en Kontorowa⁵ self het reeds opgemerk dat die starheidsbenadering die moontlikheid van 'n snelheidsafhanklike demping deur die „uitstraling” van „klankgolwe” in die substraat uitsluit. Die paraboliese variant van die FKM is die eerste deur Atkinson en Cabrera¹¹ aangewend om beide die invloed van die diskrete karakter en van aangelegde spannings op die dinamika van ontwrigtings te ondersoek. Earmme en Weiner¹² het daarop verbeter deur beide op die aanvaarde paraboliese vorm van die substraatpotensiaal te verbeter (kyk fig. 5) en die *a priori*-aanname van relmatige ontwrigtingsbeweging te laat vaar. Twee voorspellings van hul analise verdien spesiale vermelding: daar bestaan 'n ontwrigtingspoed v_B , kleiner as klankspoed c , waarby die reëlmatige ontwrigtingsbeweging ineenstort, en dat vir lae kritieke spannings 'n bewegingsmode met hoë spoed bestaan, waarin geen klankgolwe in die lagierooster opgewek word nie en wat voortbestaan sonder die aanwesigheid van 'n aangelegde spanning.

6. SLOTOPMERKINGS

Met hierdie kort oorsig is daar beoog, eerstens, om die sogenaamde Frenkel-Kontorowamodel bekend te stel; tweedens, om aan te toon dat die model as sulks eintlik reeds bestaan het en dat dit later heel suksesvol as kristalontwrigtingsmodel aangewend is, alhoewel Frenkel en Kontorowa self die bestaan van kristalontwrigtings betwyfel het; en, derdens, om aan te toon dat die model en sy variante mildelik bygedra

het tot ons kennis van verskynsels wat in terme van kristalontwrigtings beskryf kan word.

Frenkel en Kontorowa se eie bydrae bestaan waarskynlik hoofsaaklik daarin dat hulle aangetoon het hoe so 'n model analities hanteer kan word in terme van die Sine-Gordonvergelyking. So het hulle die weg gebaan vir verdere teoretiese ondersoeke. Hierdie ondersoeke kan in drie kategorieë verdeel word, naamlik, glip, epitaksie, en faseoorgange. Ten opsigte van glip het dit (i) gelei tot die besef dat „klanksnelheid” in die kristal 'n boonste perk stel aan die voortplantingsnelheid van glip, en (ii) 'n aanduiding verskaf vir die grootte van die krag wat nodig is om 'n ontwrigting in 'n foutlose kristal te beweeg, asook van die rol van kristalparameters in hierdie krag. In die ontleding van wanpasakkommodasie in epitaksiale kristalle, wat so 'n belangrike rol speel in die mikrotegnologie, was dit onontbeerlik. Die aanduidings is dat dit 'n ewe groot invloed gaan hê op die studie van faseoorgange in ultradun geadsorbeerde lagies.

VERWYSINGS

1. Nabarro, F.R.N. (1967). *Theory of Crystal Dislocations* (Clarendon Press, Oxford) pp. 120-187.
2. Prandtl, L. (1928). *Z. angew. Math. Mech.*, 8, 85.
3. Dehlinger, U. (1929). *Annln Phys.*, 2, 749.
4. Braunbeck, W. (1926). *Z. Phys.*, 38, 549.
5. Frenkel, J. en Kontorowa, T. (1938). *Phys. Z. Sowjun.*, 13, 1.
6. Taylor, G.I. (1934). *Proc. R. Soc.*, A 145, 362.
7. Frank, F.C. (1948). In *Strength of Solids* (The Physical Society, London) p. 46.
8. Frank, F.C. en Van der Merwe, J.H. (1950). *Proc. R. Soc.*, A 201, 261.
9. Van der Merwe, J.H. (1949). *Disc. Daraday Soc.*, 5, 201.
10. Van der Merwe, J.H. (1965). *J. Appl. Phys.*, 34, 117, 123.
11. Atkinson, W. en Cabrera, N. (1965). *Phys. Rev.*, 138, A763.
12. Earmme, Y.Y. en Weiner, J.H. (1977). *J. Appl. Phys.*, 48, 3317.
13. Frank, F.C. en Van der Merwe, J.H. (1949). *Proc. R. Soc.*, A 198, 216.
14. Van der Merwe, J.H. (1980). *Thin solid films*, 74, 129.
15. Snyman, J.A. en Snyman, H.C. (1981). *Surface Sci.*, 105, 357.
16. Reiss, H. (1968). *J. Appl. Phys.*, 39, 5045.
17. Van der Merwe, J.H. (1981). *Phil. Mag.*, A45, 127.
18. Peierls, R.E. (1940). *Proc. Phys. Soc. London*, 52, 34.
19. Nabarro, F.R.N. (1947). *Proc. Phys. Soc. London*, 59, 256.
20. Van der Merwe, J.H. *Proc. Phys. Soc. London*, A63, 616.
21. Okwamoto, Y. (1980). *J. Phys. Soc. Japan*, 49, 8.
22. Schulz, H.J. (1980). *Phys. Rev.*, B 22, 5274.
23. Matthews, J.W. (1975). In *Epitaxial Growth*, Part B, Matthews, J.W. red. (Academic Press, New York) hfst 8.
24. Van der Merwe, J.H. (1972). In *Treatise of material science and technology* Herman, H. red. (Academic Press) p. 1.
25. Stoop, L.C.A. en Van der Merwe, J.H. (1982). *Thin solid films*, 91, 257.
26. Frank, F.C. en Van der Merwe, J.H. (1949). *Proc. R. Soc.*, A200, 125.
27. Bauer, E. (1981). In *The chemical physics of solid surfaces and heterogeneous catalysis* King, D.A. en Woodruff, D.P. reds. (Elsevier, Amsterdam) (ter perse).
28. Bruce, L.A. en Jaeger, H. (1978). *Phil. Mag.*, A38, 223.
29. Niedermayer, R. (1968). *Thin Solid Films*, 1, 25.
30. Jesser, W.A. en Van der Merwe, J.H. (1971). *Phil. Mag.*, 24, 295.
31. Snyman, J.A. en Van der Merwe, J.H. (1974). *Surface Sci.*, 45, 619.
32. Kern, A., le Lay, G. en Metois, J.J. (1979). In *Current topics in materials science* Kaldis, E. red. (North Holland, Amsterdam) hfst. 3.
33. Markov, I. en Karaivanov, V.D. (1980). *Thin solid films*, 65, 361.
34. Ball, C.A.B. (1970). *Phys. Status Solidi*, 42, 357.
35. Bauer, E. en Hoppa, H. (1972). *Thin solid films*, 12, 167.
36. Bauer, E. (1958). *Z. Kristallogr.*, 110, 423.
37. Van der Merwe, J.H. (1977). In *Chemistry and physics of solid surfaces*, Vanselow, R. red. (C.R.C. Press, Boca Raton) p. 129.
38. Villain, J. (1978). *Phys. Rev. Lett.*, 41, 36.
39. Novaco, A.D. en McTague, J.P. (1977). *Phys. Rev. Lett.*, 22, 1286.
40. Schulz, H.J. (1981). Private mededeling.