

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РОСТА, ПОЛЕЙ ДЕФОРМАЦИИ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР

УДК 538.951

ДВУМЕРНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕФОРМАЦИИ В УПРУГОАНИЗОТРОПНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

А. В. Ненашев^{1,2}, А. А. Кошкарев², А. В. Двуреченский^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13

²Новосибирский государственный университет,
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2
E-mail: nenashev@isp.nsc.ru

Рассматривается двумерное распределение упругой деформации в полупроводниковых гетероструктурах — квантовых проволоках, характеризующихся анизотропией упругих свойств. Причиной возникновения деформации является несовпадение параметров решёток материала квантовой проволоки и окружающей его среды (матрицы). Такие деформации влияют на положение энергетических зон, поэтому их учёт необходим при расчёте электронных состояний. Показано, что распределение деформации в анизотропной среде является линейной комбинацией двух аналогичных распределений, относящихся к «растянутым» в поперечных направлениях модификациям исходной квантовой проволоки.

Ключевые слова: гетероструктуры, квантовые проволоки, упругая деформация, анизотропия.

Введение. В настоящее время широко исследуются гетероструктуры, состоящие из компонент с различными значениями постоянной решётки, такие как Si-Ge, InAs-GaAs и др. Эффекты самоорганизации в процессе эпитаксиального роста этих гетероструктур приводят к формированию структур пониженной размерности, в частности квантовых точек [1]. Встроенные поля упругой деформации, возникающие из-за рассогласования параметров решёток двух материалов, играют при этом двойную роль. Во-первых, они являются движущей силой процессов самоорганизации на стадии роста. Во-вторых, они во многом определяют электронные свойства полученных гетероструктур. Например, локализация электронов в системе Ge/Si с квантовыми точками оказывается возможной благодаря наличию потенциальных ям для электронов в кремнии, образующихся из-за неоднородного распределения деформации [2].

Как правило, теоретический анализ электронных состояний в упругонапряжённых гетеросистемах начинается с вычисления пространственного распределения тензора деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$. Помимо численных методов конечных разностей и конечных элементов существуют аналитические методы расчёта распределения деформации, применимые для таких структур, как включения в виде эллипсоида [3] или многогранника [4–6]. Обзор аналитических методов дан в [7]. Следует подчеркнуть, что большинство аналитических результатов относится к приближению изотропной среды, в то время как на самом деле полупроводники обладают заметной анизотропией упругих свойств. Например, модуль Юнга в кремнии равен 130 ГПа для направления [100] и 189 ГПа для направления [111] (см., например, [8]). Среди публикаций, посвящённых анизотропной упругой задаче, отметим [9–11]. К сожалению, полученные в этих работах аналитические выражения являются весьма громоздкими и охватывают меньший круг задач по сравнению с более простым изотропным приближением.

Идея сведения анизотропной упругой задачи к аналогичной изотропной упругой задаче высказывалась в [5] применительно к гексагональной кристаллической структуре. Упругие свойства гексагональных кристаллов характеризуются аксиальной симметрией, которая позволяет добиться точного решения задачи сведения трёхмерного распределения деформации в анизотропной среде к аналогичному изотропному распределению.

В предлагаемой работе исследуется возможность использования изотропной упругой задачи в качестве промежуточного этапа при решении анизотропной задачи для кристаллов кубической системы (Si, Ge, GaAs). Мы ограничились случаем плоских упругих деформаций, который может быть применён для рассмотрения квантовых проволок, а также квантовых точек в форме *hut*-кластеров.

1. Задача нахождения распределения упругой деформации в кубическом кристалле с включением. Данная задача заключается в решении уравнений равновесия

$$\partial\sigma_{ik}/\partial x_k = 0, \quad (1)$$

где тензор напряжений σ_{ik} связан с тензором деформации ε_{ik} следующим образом:

$$\sigma_{xx} = c_{11}\varepsilon_{xx} + c_{12}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}); \quad \sigma_{xy} = 2c_{44}\varepsilon_{xy} \quad (2)$$

(выражения для остальных компонент аналогичны с точностью до перестановки индексов). Здесь c_{11} , c_{12} , c_{44} — константы, характеризующие упругие свойства среды. Тензор деформации определяется вектором смещения \mathbf{u} , а также собственными деформациями, связанными с рассогласованием кристаллических решёток двух материалов — матрицы (А) и включения (В):

$$\varepsilon_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) - \delta_{ik}\varepsilon_0 C(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где $\varepsilon_0 = (a_B - a_A)/a_A$ — относительная величина рассогласования параметров решёток a_A и a_B ; $C(\mathbf{r})$ — концентрация (доля) материала В; δ_{ik} — символ Кронекера.

В данной работе рассматривается случай плоской деформации, когда $u_z = 0$, а оставшиеся компоненты u_x, u_y и концентрация C не зависят от z . (Ось Z здесь — одна из кристаллографических осей.) Будем также считать, что упругие модули c_{11} , c_{12} , c_{44} не зависят от концентрации, кристалл бесконечен, а область на плоскости XY , в которой концентрация $C(\mathbf{r})$ отлична от нуля, конечна. Тогда уравнения равновесия (1) примут следующий вид:

$$c_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + c_{44} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + (c_{12} + c_{44}) \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} = \frac{\partial \chi}{\partial x}, \quad (4)$$

$$c_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + c_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + (c_{12} + c_{44}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} = \frac{\partial \chi}{\partial y}, \quad (5)$$

где

$$\chi(x, y) = (c_{11} + 2c_{12})\varepsilon_0 C(x, y). \quad (6)$$

В качестве граничных условий примем затухание вектора смещения на бесконечности: $\mathbf{u}(x, y) \rightarrow 0$ при $r = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty$.

Преобразование Фурье переводит систему дифференциальных уравнений (4), (5) в систему алгебраических уравнений для фурье-образа $\hat{\mathbf{u}}(k_x, k_y)$ вектора смещения:

$$\begin{aligned} -(c_{11}k_x^2 + c_{44}k_y^2)\hat{u}_x - (c_{12} + c_{44})k_xk_y\hat{u}_y &= ik_x\hat{\chi}; \\ -(c_{11}k_y^2 + c_{44}k_x^2)\hat{u}_y - (c_{12} + c_{44})k_xk_y\hat{u}_x &= ik_y\hat{\chi}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\hat{\chi}(k_x, k_y)$ — фурье-образ функции $\chi(x, y)$. Решение этой системы обозначим через $\hat{\mathbf{u}}^{\text{anis}}(k_x, k_y)$, так как оно представляет собой фурье-образ вектора смещения в анизотропной среде. Запишем в явном виде его x -компоненту:

$$\hat{u}_x^{\text{anis}} = -ik_x \frac{c_{44}(k_x^2 + k_y^2) + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})k_y^2}{c_{11}c_{44}(k_x^2 + k_y^2)^2 + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})k_x^2k_y^2} \hat{\chi}. \quad (8)$$

Выражение для y -компоненты отличается от (8) только перестановкой индексов $x \leftrightarrow y$.

Если коэффициент c_{44} положить равным $(c_{11} - c_{12})/2$, то мы получим упругоизотропную среду с модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона σ :

$$E = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11} + c_{12}}; \quad \sigma = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}. \quad (9)$$

Для этой изотропной среды выражение (8) приобретает более простой вид:

$$\hat{u}_x^{\text{is}} = -ik_x \frac{1}{c_{11}(k_x^2 + k_y^2)} \hat{\chi}. \quad (10)$$

Упростим теперь выражение (8), представив его в виде суммы слагаемых, аналогичных (10). Для этого воспользуемся методом разложения рациональной дроби на простейшие дроби. Как известно, для любой рациональной функции от x вида

$$\frac{ax + b}{(x - \xi_1)(x - \xi_2)}$$

можно подобрать такие коэффициенты A и B , при которых

$$\frac{ax + b}{(x - \xi_1)(x - \xi_2)} = \frac{A}{(x - \xi_1)} + \frac{B}{(x - \xi_2)}. \quad (11)$$

Этот же принцип можно использовать и для разложения рациональной функции от двух переменных (k_x^2 и k_y^2 в нашем случае), если числитель и знаменатель являются однородными многочленами. Чтобы применить схему (11) к выражению (8), разложим знаменатель дроби в (8) на множители, представив его в виде

$$c_{11}c_{44}(k_x^2 + \xi_1k_y^2)(k_x^2 + \xi_2k_y^2). \quad (12)$$

Легко видеть, что для этого ξ_1 и ξ_2 должны быть корнями уравнения

$$c_{11}c_{44}\xi^2 - [2c_{11}c_{44} + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})]\xi + c_{11}c_{44} = 0, \quad (13)$$

причём $\xi_1\xi_2 = 1$.

Дальнейшие шаги зависят от знака величины $c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$, которую можно рассматривать как меру анизотропии среды.

2. Случай $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} \geq 0$. Этот случай характерен для соединений с ионной связью, таких как галогениды щелочных металлов. Корни уравнения (13) ξ_1 и ξ_2 в данном

случае вещественны. Введём обозначение $\lambda = \sqrt{\xi_1}$ (ξ_1 — больший из двух корней):

$$\lambda = \sqrt{1 + \alpha + \sqrt{(1 + \alpha)^2 - 1}}, \quad (14)$$

где $\alpha = \frac{(c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})}{2c_{11}c_{44}}$. Тогда формула (8) примет вид

$$\hat{u}_x^{\text{anis}} = -ik_x \frac{c_{44}(k_x^2 + k_y^2) + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})k_y^2}{c_{11}c_{44}\lambda^2[(k_x/\lambda)^2 + k_y^2][k_x^2 + (k_y/\lambda)^2]} \hat{\chi}. \quad (15)$$

Теперь её можно разложить на простейшие дроби, приведя к следующему виду:

$$\hat{u}_x^{\text{anis}} = \frac{-ik_x}{c_{11}} \left(\frac{A}{(k_x/\lambda)^2 + k_y^2} + \frac{B}{k_x^2 + (k_y/\lambda)^2} \right) \hat{\chi}. \quad (16)$$

Безразмерные величины A и B в (16) могут быть найдены методом неопределённых коэффициентов:

$$A = \frac{\lambda^2 + 1 - (c_{11} - c_{12})/c_{44}}{\lambda^4 - 1}, \quad (17)$$

$$B = \frac{\lambda^2(c_{11} - c_{12})/c_{44} - (\lambda^2 + 1)}{\lambda^4 - 1}. \quad (18)$$

В предельном случае изотропной среды ($c_{11} - c_{12} - 2c_{44} \rightarrow 0$) величина λ стремится к 1, а A и B — к 1/2.

Каждое из слагаемых в (16) представляет собой решение некоторой задачи теории упругости для изотропной среды. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим распределения концентраций $C_1(x, y)$ и $C_2(x, y)$, «растянутые» в λ раз по отношению к исходному распределению $C(x, y)$ вдоль осей X и Y соответственно:

$$C_1(\lambda x, y) = C(x, y), \quad (19)$$

$$C_2(x, \lambda y) = C(x, y). \quad (20)$$

Например, если $C(x, y)$ отлично от нуля внутри круга радиусом r , то $C_1(x, y)$ будет отлично от нуля внутри эллипса с полуосями λr (вдоль X) и r (вдоль Y), а $C_2(x, y)$ — внутри эллипса с полуосями r (вдоль X) и λr (вдоль Y).

Пусть $\mathbf{u}^{\text{is}, 1}(x, y)$ — вектор смещения, соответствующий растянутому распределению концентрации $C_1(x, y)$ в изотропной среде с модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона σ , заданными согласно (9). По аналогии с (10) x -компонента фурье-образа вектора смещения

$$\hat{u}_x^{\text{is}, 1}(k_x, k_y) = \frac{-ik_x}{c_{11}(k_x^2 + k_y^2)} \hat{\chi}_1(k_x, k_y), \quad (21)$$

где $\hat{\chi}_1$ — фурье-образ функции $\chi_1(x, y) = (c_{11} + 2c_{12})\varepsilon_0 C_1(x, y)$. Так как $\chi_1(\lambda x, y) = \chi(x, y)$, то

$$\hat{\chi}_1(k_x, k_y) = \lambda \hat{\chi}(\lambda k_x, k_y). \quad (22)$$

Подставим это равенство в (21):

$$\hat{u}_x^{\text{is},1}(k_x, k_y) = \frac{-i}{c_{11}} \frac{\lambda k_x}{k_x^2 + k_y^2} \hat{\chi}(\lambda k_x, k_y). \quad (23)$$

Аналогично определив $\mathbf{u}^{\text{is},2}(x, y)$ как вектор смещения, соответствующий распределению концентрации $C_2(x, y)$ в изотропной среде, найдём

$$\hat{u}_x^{\text{is},2}(k_x, k_y) = \frac{-i}{c_{11}} \frac{\lambda k_x}{k_x^2 + k_y^2} \hat{\chi}(k_x, \lambda k_y). \quad (24)$$

Сравнивая (16) с (23) и (24), легко видеть, что

$$\hat{u}_x^{\text{anis}}(k_x, k_y) = A \hat{u}_x^{\text{is},1}(k_x/\lambda, k_y) + B \lambda^{-1} \hat{u}_x^{\text{is},2}(k_x, k_y/\lambda). \quad (25)$$

Выполнив обратное преобразование Фурье равенства (25), получим искомую связь между вектором смещения в анизотропной среде $\mathbf{u}^{\text{anis}}(x, y)$ для распределения концентрации $C(x, y)$ и векторами смещения в изотропной среде $\mathbf{u}^{\text{is},1}(x, y)$ и $\mathbf{u}^{\text{is},2}(x, y)$ для распределения концентраций $C_1(x, y)$ и $C_2(x, y)$:

$$u_x^{\text{anis}}(x, y) = A \lambda u_x^{\text{is},1}(\lambda x, y) + B u_x^{\text{is},2}(x, \lambda y), \quad (26)$$

$$u_y^{\text{anis}}(x, y) = B u_y^{\text{is},1}(\lambda x, y) + A \lambda u_y^{\text{is},2}(x, \lambda y). \quad (27)$$

(Формулу для y -компоненты легко получить из формулы для x -компоненты, учитывая симметрию среды.)

Связь (26), (27) между векторами смещений \mathbf{u}^{anis} , $\mathbf{u}^{\text{is},1}$ и $\mathbf{u}^{\text{is},2}$ означает также и связь между соответствующими тензорами деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}$, $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}$. Её, однако, удобно выразить не в терминах тензора деформации $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$, определённого согласно (3), а в терминах тензора

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \equiv \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}) + \delta_{ik} \varepsilon_0 C(\mathbf{r}). \quad (28)$$

Дифференцируя формулы (26) и (27) по x и y соответственно, найдём

$$u_{xx}^{\text{anis}}(x, y) = A \lambda^2 u_{xx}^{\text{is},1}(\lambda x, y) + B u_{xx}^{\text{is},2}(x, \lambda y), \quad (29)$$

$$u_{yy}^{\text{anis}}(x, y) = B u_{yy}^{\text{is},1}(\lambda x, y) + A \lambda^2 u_{yy}^{\text{is},2}(x, \lambda y). \quad (30)$$

Чтобы получить выражение для u_{xy}^{anis} , сложим производные по y от (26) и по x от (27) и воспользуемся тем известным фактом, что для включения в изотропной среде

$$\partial u_x^{\text{is}} / \partial y = \partial u_y^{\text{is}} / \partial x.$$

В результате будем иметь

$$u_{xy}^{\text{anis}}(x, y) = \lambda \frac{A+B}{2} [u_{xy}^{\text{is},1}(\lambda x, y) + u_{xy}^{\text{is},2}(x, \lambda y)]. \quad (31)$$

Подставляя в (29)–(31) связь (28) между u_{ik} и ε_{ik} , получим искомое выражение анизотропного тензора деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ через изотропные тензоры деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$.

На рис. 1, 2 показан пример вычисления тензора деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ в бесконечной анизотропной среде с помощью формул (29)–(31). В качестве среды был выбран NaCl: $c_{11} = 48,7$ ГПа, $c_{12} = 12,4$ ГПа, $c_{44} = 12,6$ ГПа. Коэффициенты λ, A, B вычислены по формулам (14), (17), (18): $\lambda = 1,655$, $A = 0,132$, $B = 0,638$. Рассматривалось включение в форме бесконечной призмы, вытянутой вдоль оси Z (одной из кристаллографических осей), и имеющее форму трапеции в сечении плоскостью XY , как показано на рис. 1, a . Отношение высоты трапеции к длине основания взято $1 : 3$, угол наклона боковых граней 45° . Концентрация $C(x, y)$ равна 1 внутри включения и 0 снаружи. Рассогласование решёток ε_0 принято 0,01.

Процедура вычисления $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ состояла из двух этапов. Первый заключался в решении двух вспомогательных задач теории упругости для бесконечной изотропной среды. Это — задачи нахождения распределений деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$, создаваемых включениями, отличающимися от исходного включения (см. рис. 1, a) масштабированием в λ раз вдоль оси X (рис. 1, b) и вдоль оси Y (рис. 1, c). Коэффициент Пуассона изотропной среды σ принят $c_{12}/(c_{11} + c_{12}) = 0,203$ согласно (9). Эти задачи решались аналитическим методом, описанным в [6]. На рис. 2, a, b приведены полученные распределения $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$.

На втором этапе функции $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ использовались для нахождения $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ по формулам (29)–(31). В эти формулы подставлялись тензоры

$$u_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r}) + \varepsilon_0 \delta_{ik} C_1(\mathbf{r}); \quad u_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r}) + \varepsilon_0 \delta_{ik} C_2(\mathbf{r}), \quad (31a)$$

где распределения концентраций $C_1(\mathbf{r})$ и $C_2(\mathbf{r})$ соответствуют формам включений на

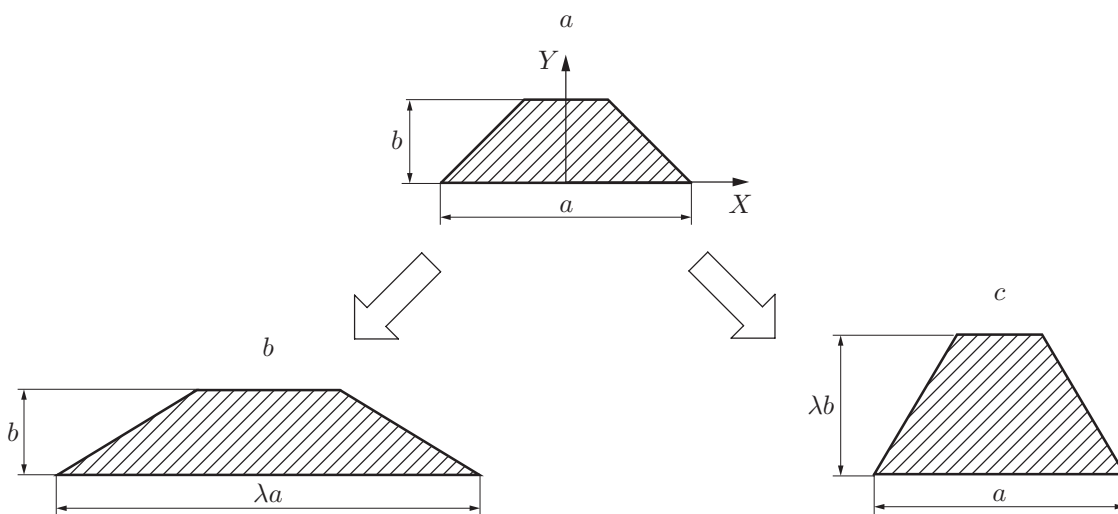


Рис. 1. Пример построения вспомогательных включений для решения задачи теории упругости в анизотропной среде в случае $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} > 0$: a — исходное включение, соответствующее распределению концентрации $C(\mathbf{r})$; b — включение, растянутое вдоль оси X (распределение концентрации $C_1(\mathbf{r})$); c — включение, растянутое вдоль оси Y (распределение концентрации $C_2(\mathbf{r})$)

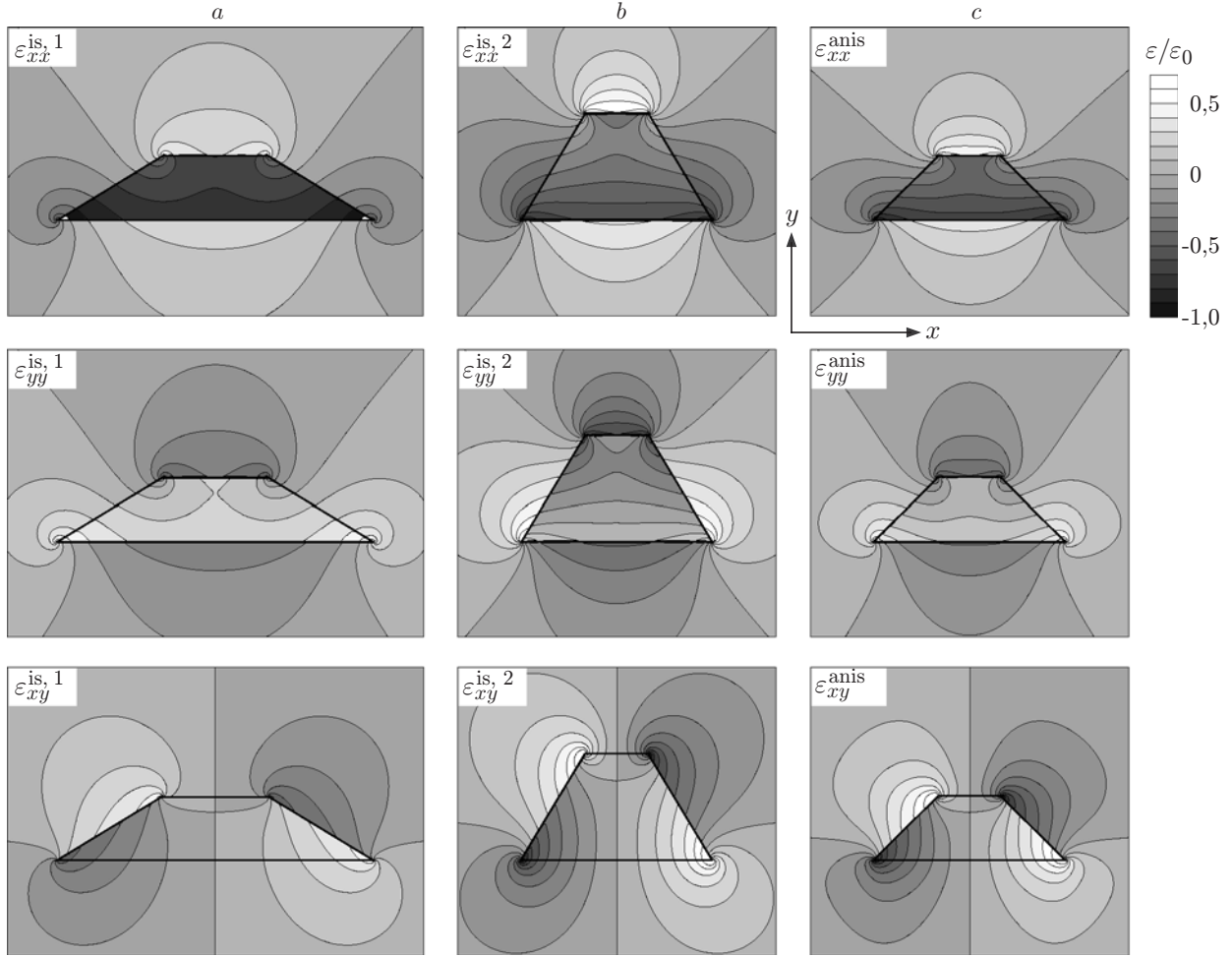


Рис. 2. Пример вычисления тензора деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ в анизотропной среде с включением в форме призмы для случая $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} > 0$: *a* — компоненты вспомогательного тензора деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$, вычисленного для включения в изотропной среде (см. рис. 1, *b*); *b* — компоненты вспомогательного тензора $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ для включения в изотропной среде (см. рис. 1, *c*); *c* — компоненты искомого тензора $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$

рис. 1, *b, c*: концентрация равна 1 внутри соответствующего включения и 0 снаружи. Затем $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}$ было найдено как

$$\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r}) = u_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r}) - \varepsilon_0 \delta_{ik} C(\mathbf{r}). \quad (316)$$

Полученное распределение деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ показано на рис. 2, *c*.

Результаты тестового расчёта использованы для проверки корректности предлагаемого в данной работе метода. Для этого сделано следующее:

1) по формулам (2) вычислен тензор напряжений $\sigma_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ и проверено численно, что он удовлетворяет уравнениям равновесия (1);

2) численно проверены граничные условия на границе включения: непрерывность компонент $u_{\tau\tau}^{\text{anis}}$, $u_{\tau n}^{\text{anis}}$ и $\sigma_{nn}^{\text{anis}}$, где индексы τ и n обозначают тангенциальную и нормальную компоненты;

3) численно проверено условие совместности Сен-Венана

$$\frac{\partial^2 u_{xx}^{\text{anis}}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_{yy}^{\text{anis}}}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 u_{xy}^{\text{anis}}}{\partial x \partial y} = 0, \quad (31\text{в})$$

которое гарантирует, что тензор $u_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ можно выразить согласно (28) через производные некоторой функции $\mathbf{u}(\mathbf{r})$.

Тем самым показано, что найденная функция $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ действительно является решением задачи нахождения распределения деформации в анизотропной среде с включением.

3. Случай $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} < 0$. В данном случае «параметр растяжения» λ , определённый согласно (14), может оказаться комплексным числом, что делает формулы (29)–(31) непригодными для практического использования. В частности, величина λ комплексна почти для всех кубических полупроводников.

Легко видеть, что этот случай сводится к предыдущему путём поворота системы координат в плоскости $X'Y'$. Рассмотрим координаты

$$x' = (x + y)/\sqrt{2}; \quad y' = (y - x)/\sqrt{2}, \quad (32)$$

повёрнутые на 45° по отношению к координатам x, y , отсчитываемым вдоль кристаллографических осей. Преобразование (32) переводит систему уравнений (4), (5) в такую же систему, отличающуюся только заменой коэффициентов c_{11}, c_{12}, c_{44} величинами $\tilde{c}_{11}, \tilde{c}_{12}, \tilde{c}_{44}$:

$$\tilde{c}_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{2} + c_{44}; \quad \tilde{c}_{12} = \frac{c_{11} + c_{12}}{2} - c_{44}; \quad \tilde{c}_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}. \quad (33)$$

Заметим, что

$$\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12} - 2\tilde{c}_{44} = -(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}). \quad (34)$$

Таким образом, величина $\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12} - 2\tilde{c}_{44}$ положительна, а значит, в штрихованной системе координат можно повторить все выкладки из разд. 2. В результате получим следующие соотношения для x' - и y' -компонент векторов смещения $\mathbf{u}^{\text{anis}}, \mathbf{u}^{\text{is},1}$ и $\mathbf{u}^{\text{is},2}$:

$$u_x^{\text{anis}}(x', y') = \tilde{A} \tilde{\lambda} u_x^{\text{is},1}(\tilde{\lambda} x', y') + \tilde{B} u_x^{\text{is},2}(x', \tilde{\lambda} y'), \quad (35)$$

$$u_y^{\text{anis}}(x', y') = \tilde{B} u_y^{\text{is},1}(\tilde{\lambda} x', y') + \tilde{A} \tilde{\lambda} u_y^{\text{is},2}(x', \tilde{\lambda} y'). \quad (36)$$

Здесь векторы смещения $\mathbf{u}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{u}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ взяты для значений модуля Юнга E и коэффициента Пуассона σ из (9) и распределений концентрации $C_1(\mathbf{r})$ и $C_2(\mathbf{r})$, растянутых вдоль осей X' и Y' относительно $C(\mathbf{r})$:

$$C_1(\tilde{\lambda} x', y') = C(x', y'); \quad C_2(x', \tilde{\lambda} y') = C(x', y'). \quad (37)$$

Параметр растяжения $\tilde{\lambda}$ выражается через $\tilde{c}_{11}, \tilde{c}_{12}$ и \tilde{c}_{44} аналогично формуле (14):

$$\tilde{\lambda} = \sqrt{1 + \tilde{\alpha} + \sqrt{(1 + \tilde{\alpha})^2 - 1}}, \quad (38)$$

где

$$\tilde{\alpha} = \frac{(\tilde{c}_{11} + \tilde{c}_{12})(\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12} - 2\tilde{c}_{44})}{2\tilde{c}_{11}\tilde{c}_{44}}.$$

Выражения для коэффициентов \tilde{A} и \tilde{B} также аналогичны формулам (17) и (18):

$$\tilde{A} = \frac{c_{11}}{\tilde{c}_{11}} \frac{\tilde{\lambda}^2 + 1 - (\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12})/\tilde{c}_{44}}{\tilde{\lambda}^4 - 1}, \quad (39)$$

$$\tilde{B} = \frac{c_{11}}{\tilde{c}_{11}} \frac{\tilde{\lambda}^2(\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12})/\tilde{c}_{44} - (\tilde{\lambda}^2 + 1)}{\tilde{\lambda}^4 - 1}. \quad (40)$$

(Множитель c_{11}/\tilde{c}_{11} в (39) и (40) учитывает то, что знаменатели выражений (23), (24) для $\hat{\mathbf{u}}^{\text{is},1}$ и $\hat{\mathbf{u}}^{\text{is},2}$ содержат коэффициент c_{11} , а не \tilde{c}_{11} .)

Приводя равенства (35) и (36) к исходной системе координат x, y , получим

$$u_x^{\text{anis}}(x, y) = \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda} + \tilde{B}}{2} [u_x^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_x^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda} - \tilde{B}}{2} [u_y^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) - u_y^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)], \quad (41)$$

$$u_y^{\text{anis}}(x, y) = \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda} + \tilde{B}}{2} [u_y^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_y^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda} - \tilde{B}}{2} [u_x^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) - u_x^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)], \quad (42)$$

где

$$\mathbf{r}_1 = \left(\frac{(\tilde{\lambda} + 1)x + (\tilde{\lambda} - 1)y}{2}, \frac{(\tilde{\lambda} + 1)y + (\tilde{\lambda} - 1)x}{2} \right), \quad (43)$$

$$\mathbf{r}_2 = \left(\frac{(\tilde{\lambda} + 1)x - (\tilde{\lambda} - 1)y}{2}, \frac{(\tilde{\lambda} + 1)y - (\tilde{\lambda} - 1)x}{2} \right). \quad (44)$$

Дифференцируя равенства (35) и (36) по координатам x', y' , будем иметь формулы, связывающие штрихованные компоненты $u_{ik}'^{\text{anis}}$, $u_{ik}^{\text{is},1}$ и $u_{ik}^{\text{is},2}$. Эти формулы отличаются от (29)–(31) только заменой $\lambda \rightarrow \tilde{\lambda}$, $A \rightarrow \tilde{A}$, $B \rightarrow \tilde{B}$, $x \rightarrow x'$, $y \rightarrow y'$. Приводя их к исходным координатам x, y , получим

$$u_{xx}^{\text{anis}}(x, y) = \gamma_1 [u_{xx}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_{xx}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \gamma_2 [u_{yy}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_{yy}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \gamma_3 [u_{xy}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) - u_{xy}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)], \quad (45)$$

$$u_{yy}^{\text{anis}}(x, y) = \gamma_1 [u_{yy}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_{yy}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \gamma_2 [u_{xx}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_{xx}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)] + \gamma_3 [u_{xy}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) - u_{xy}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)], \quad (46)$$

$$u_{xy}^{\text{anis}}(x, y) = \gamma_4 [u_{xy}^{\text{is},1}(\mathbf{r}_1) + u_{xy}^{\text{is},2}(\mathbf{r}_2)], \quad (47)$$

где коэффициенты

$$\gamma_1 = \frac{(\tilde{A}\tilde{\lambda} + \tilde{B})(\tilde{\lambda} + 1)}{4}; \quad \gamma_2 = \frac{(\tilde{A}\tilde{\lambda} - \tilde{B})(\tilde{\lambda} - 1)}{4}; \quad \gamma_3 = \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda}^2 - \tilde{B}}{2}; \quad \gamma_4 = \frac{\tilde{A}\tilde{\lambda}^2 + \tilde{B}}{2}. \quad (48)$$

Формулы (45)–(47) дают с учётом (28) искомую связь между тензорами $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ с одной стороны и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ с другой стороны.

Рис. 3, 4 демонстрируют пример использования формул (45)–(47) для вычисления тензора деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$. В качестве среды с $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} < 0$ был взят кремний:

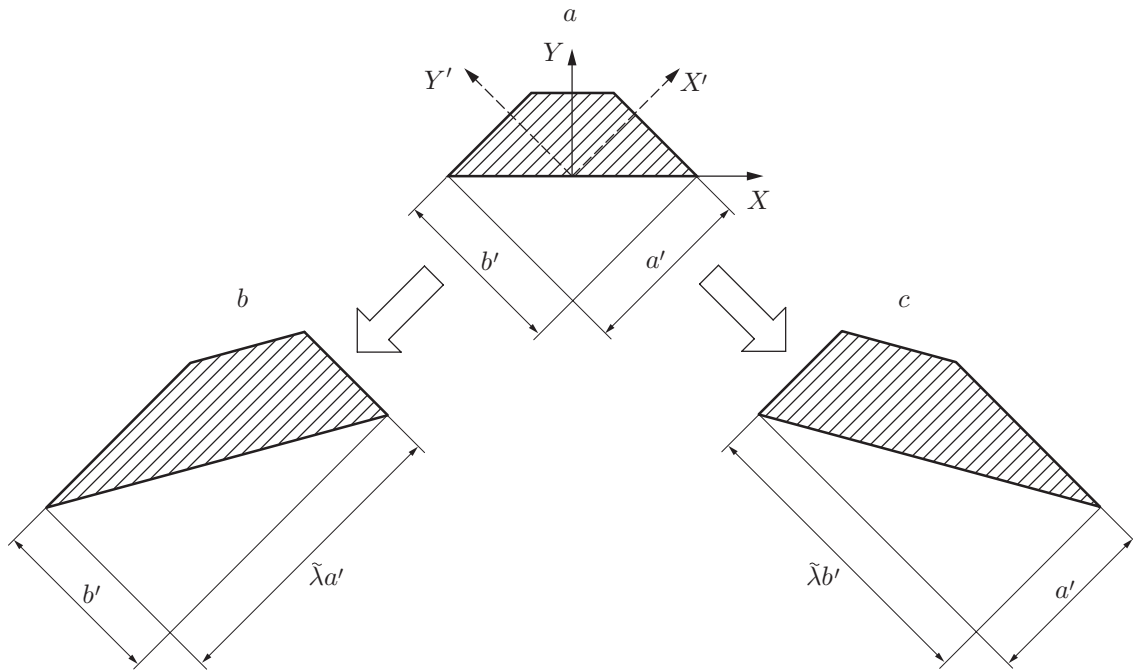


Рис. 3. Пример построения вспомогательных включений в случае $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} < 0$: a — исходное включение (распределение концентрации $C(\mathbf{r})$); b — включение, растянутое в направлении X' (распределение концентрации $C_1(\mathbf{r})$); c — включение, растянутое в направлении Y' (распределение концентрации $C_2(\mathbf{r})$). Внутри каждого включения концентрация равна 1, снаружи — 0

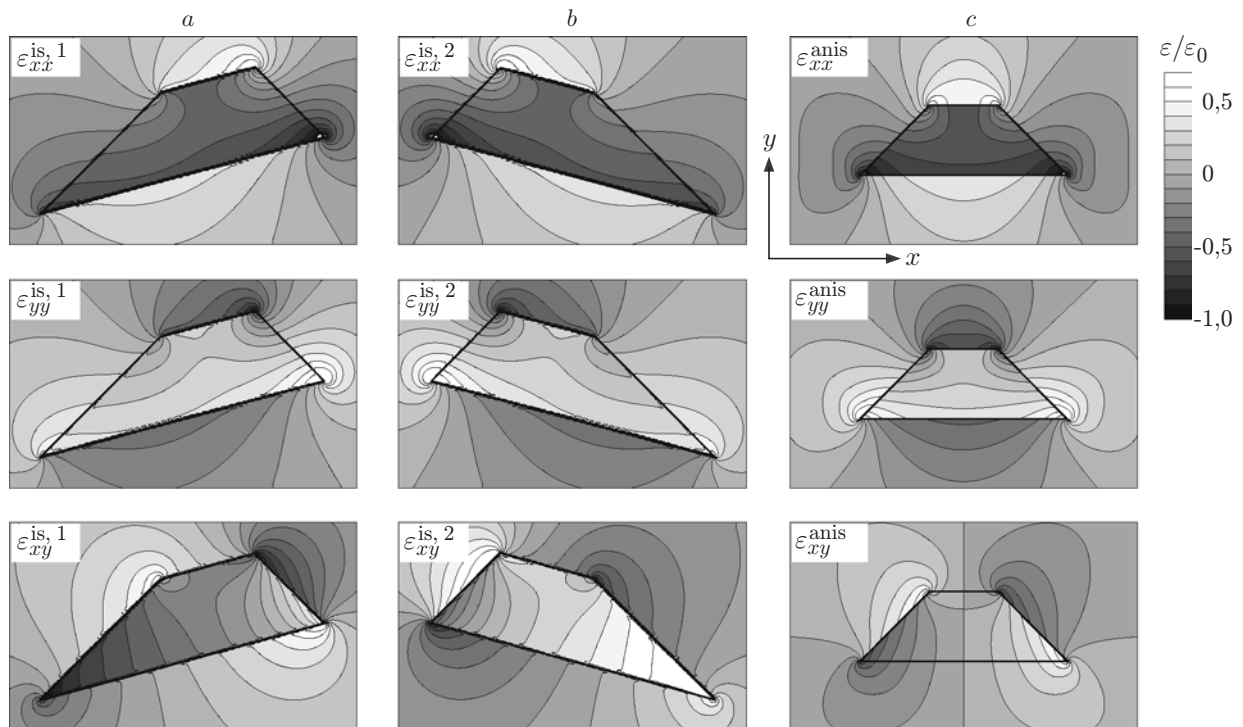


Рис. 4. Пример вычисления тензора деформации $\epsilon_{ik}^{anis}(\mathbf{r})$ в анизотропной среде с включением в форме призмы для случая $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} < 0$: a — компоненты вспомогательного тензора деформации $\epsilon_{ik}^{is,1}(\mathbf{r})$, вычисленного для включения в изотропной среде (см. рис. 3, b); b — компоненты вспомогательного тензора $\epsilon_{ik}^{is,2}(\mathbf{r})$ для включения в изотропной среде (см. рис. 3, c); c — компоненты искомого тензора $\epsilon_{ik}^{anis}(\mathbf{r})$

$c_{11} = 166$ ГПа, $c_{12} = 63,9$ ГПа, $c_{44} = 79,6$ ГПа. Рассогласование решёток ε_0 равно 0,01. Форма включения (рис. 3, *a*) выбрана такая же, как на рис. 1, *a*.

Вспомогательные включения, показанные на рис. 3, *b, c*, были построены путём масштабирования исходного включения в $\tilde{\lambda}$ раз вдоль направлений X' и Y' (под углом 45° к кристаллографическим осям X, Y). Форма этих включений соответствует распределениям концентраций $C_1(\mathbf{r})$ и $C_2(\mathbf{r})$ согласно (37). Параметр $\tilde{\lambda}$ найден по формуле (38): $\tilde{\lambda} = 1,728$.

Для вспомогательных включений получены распределения деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ в изотропной среде с коэффициентом Пуассона $\sigma = c_{12}/(c_{11} + c_{12}) = 0,278$ методом, изложенным в [6]. Результаты этих расчётов приведены на рис. 4, *a, b*.

Затем величины $\varepsilon_{ik}^{\text{is},1}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ik}^{\text{is},2}(\mathbf{r})$ использовались для вычисления искомого тензора деформации в анизотропной среде $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ по формулам (45)–(47). Коэффициенты $\gamma_1 \dots \gamma_4$, входящие в эти формулы, были найдены согласно (48): $\gamma_1 = 0,502$, $\gamma_2 = -0,075$, $\gamma_3 = -0,147$, $\gamma_4 = 0,427$. Связь между тензорами ε_{ik} и u_{ik} даётся равенствами (31а), (31б). Полученное распределение деформации $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ показано на рис. 4, *c*.

По результатам данного расчёта была выполнена численная проверка найденного распределения деформации такая же, как и в разд. 2. А именно проверено, что тензор $\varepsilon_{ik}^{\text{anis}}(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнениям равновесия (1), граничным условиям на границе включения и условию совместности Сен-Венана (31в). Результаты проверки подтвердили корректность предлагаемого здесь метода расчёта распределения деформации в анизотропной среде.

Заключение. Результатом данной работы является метод нахождения двумерного распределения упругой деформации в системе «матрица—включение», обладающей кубической анизотропией упругих свойств. Метод состоит в следующем. Сначала задаётся геометрия двух вспомогательных включений путём растяжения исходного включения вдоль направлений $[100]$ и $[010]$ (см. рис. 1) или $[110]$ и $[\bar{1}10]$ (см. рис. 3) в зависимости от знака величины $c_{11} - c_{12} - 2c_{44}$. Параметр растяжения определяется формулами (14) и (38). Следующий этап заключается в решении задачи теории упругости для вспомогательных включений в изотропной среде. Последний этап состоит в использовании равенств (29)–(31) для случая $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} > 0$ или равенств (45)–(47) для случая $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} < 0$. Эти равенства и позволяют получить искомое решение $u_{ik}^{\text{anis}}(x, y)$ анизотропной упругой задачи.

Развитый здесь метод расширяет класс задач теории упругости, допускающих аналитическое решение. Например, для случая квантовой проволоки с сечением в виде многогранника и постоянным градиентом состава существует аналитическое решение в изотропном приближении [5], в то время как для анизотропного случая аналогичная задача не была решена. Применение нашего метода позволяет обобщить существующее аналитическое решение упругоизотропной задачи на случай кубической анизотропии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Алферов Ж. И.** История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. **32**, № 1. С. 3–18.
2. **Dvurechenskii A. V., Nenashev A. V., Yakimov A. I.** Electronic structure of Ge/Si quantum dots // Nanotechnology. 2002. **13**, N 1. P. 75–80.
3. **Mura T.** Micromechanics of Defects in Solids. Dordrecht: Kluwer, 1987. 601 p.
4. **Nozaki H., Taya M.** Elastic fields in a polyhedral inclusion with uniform eigenstrains and related problems // Journ. Appl. Mech. 2001. **68**, N 3. P. 441–452.
5. **Kuvshinov B. N.** Elastic and piezoelectric fields due to polyhedral inclusions // Intern. Journ. Sol. Struct. 2008. **45**, N 5. P. 1352–1384.

6. **Nenashev A. V., Dvurechenskii A. V.** Strain distribution in quantum dot of arbitrary polyhedral shape: Analytical solution // Journ. Appl. Phys. 2010. **107**, N 6. 064322.
7. **Овидько И. А., Шейнерман А. Г.** Механика нанопроволок и наноструктурных плёнок. С.-Пб.: Экслибрис-Норд, 2011. 181 с.
8. **Dargys A., Kundrotas J.** Handbook on the Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP. Vilnius, Lithuania: Science and Encyclopedia Publishers, 1994. 262 p.
9. **Ting T. C. T.** Anisotropic Elasticity. Theory and Applications. New York — Oxford: Oxford University Press, 1996. 570 p.
10. **Jiang X., Pan E.** Exact solution for 2D polygonal inclusion problem in anisotropic magnetoelastic full-, half-, and bimaterial-planes // Intern. Journ. Sol. Struct. 2004. **41**, N 16–17. P. 4361–4382.
11. **Wang C.-Y., Denda M., Pan E.** Analysis of quantum-dot-induced strain and electric fields in piezoelectric semiconductors of general anisotropy // Intern. Journ. Sol. Struct. 2006. **43**, N 25–26. P. 7593–7608.

Поступила в редакцию 24 июня 2013 г.
