

## Розрахункова модель пружної енергії деформації шару з включеннями типу квантових точок

Петро Литвин<sup>1</sup>, Галина Мороз<sup>2</sup>, Віктор Стрельчук<sup>3</sup>, Ігор Прокопенко<sup>4</sup>, Євген Чапля<sup>5</sup>

<sup>1</sup> к. ф.-м. н., с. н. с., Інститут фізики напівпровідників НАН України, просп. Науки, 41, Київ, 03028

<sup>2</sup> к. ф.-м. н., Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: moros@cmm.lviv.ua

<sup>3</sup> д. ф.-м. н., Інститут фізики напівпровідників НАН України, просп. Науки, 41, Київ, 03028

<sup>4</sup> д. ф.-м. н., професор, Інститут фізики напівпровідників НАН України, просп. Науки, 41, Київ, 03028

<sup>5</sup> д. ф.-м. н., Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua

*Запропоновано математичну модель для розрахунку напружено-деформованого стану кристалічних шарів напівпровідникової наноструктури, зумовленого наявністю квантових точок, як сторонніх включень в основній матриці ізотропного матеріалу. Одержано та кількісно проаналізовано розв'язок задачі пружності для окремого включення, пари та ансамблю включень залежно від їх розміру, взаємного розташування, товщини покриваючого шару, пружних характеристик матеріалу тощо. Показано, що побудована модель якісно добре описує закономірності розподілу енергії пружної деформації на поверхні верхнього шару. Проілюстровано, зокрема, що розподіл енергії пружної деформації у покриваючому шарі сприяє формуванню великих квантових точок над великими, а малі квантові точки на цей процес практично не впливають (так званий фільтраційний ефект).*

**Ключові слова:** ізотропний пружний шар, квантова точка, енергія пружної деформації.

**Вступ.** При формуванні багат шарових напівпровідникових наноструктур часто спостерігають певне самовпорядкування розташування квантових точок (КТ) та уніфікацію їхніх розмірів. Це зумовлено характером напружено-деформованого стану шарів. Зазвичай приймають, що такий стан розглядуваного шару спричинений наявністю КТ у попередніх шарах [1, 2]. При цьому нові КТ виникають у місцях мінімуму енергії пружної деформації на поверхні шару, а їхні розміри пов'язані з глибиною цього мінімуму [1, 2]. Такий характер формування наносистем відкриває перспективи для створення масивів КТ, які уніфіковані за розмірами та певним чином упорядковані у просторі.

Метою даної роботи є побудова розрахункової схеми для визначення пружної енергії деформації на вільній поверхні шару, де відбувається формування нових КТ, яка обумовлена вже існуючими КТ на його іншій поверхні; проведення аналізу залежності її поверхневого розподілу від глибини знаходження, форми і геометричних параметрів окремої КТ, а також від відносних розмірів і взаємного розташування у випадку пари та системи КТ.

В основу побудови згаданої розрахункової схеми визначення пружної енергії деформації вибрано підхід, запропонований у роботі [3], який полягає у розбитті півпростору з поодиноким включенням (моделюється зосередженою силою) на шар і півпростір так, що сила діє на границі їхнього контакту. Такий підхід дозволяє визначити також напружено-деформований стан, коли механічні характеристики шару і півпростору різні. Оскільки конкретні вирази для пружної енергії деформації у [3] не наведені, то нижче розглядається вихідна постановка задачі для згаданого розбиття ізотропного півпростору, зокрема, досліджується її залежність, коли КТ є кубом і моделюється системою шести взаємозв'язаних самозрівноважених сил.

Зазначимо, що дещо іншим способом напружено-деформований стан ізотропного півпростору з точковим джерелом визначено в [4].

### 1. Постановка задачі

Розглянемо ізотропний шар товщини  $d$  (область (1)), який лежить на півпросторі з такого ж матеріалу (область (2)), за дії на межі їх контакту локальної сили  $\vec{f}$  (рис. 1). Система координат  $(x_1, x_2, x_3)$  вибрана таким чином, що осі  $Ox_1, Ox_2$  належать поверхні шару, а вісь  $Ox_3$  скерована вглиб півпростору. Силу  $\vec{f} = \vec{f}_0 \delta(x_1) \delta(x_2)$  прикладено в точці  $(0, 0, d)$ , де  $\vec{f}_0$  — сталий вектор.

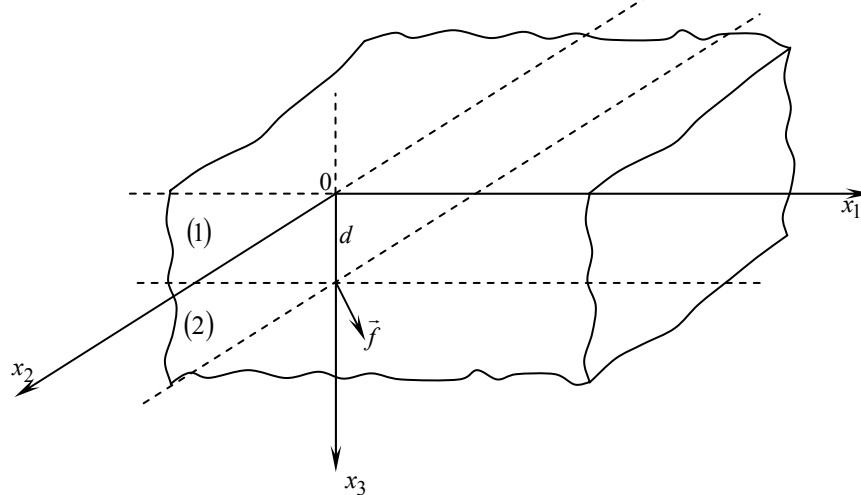


Рис. 1. Геометрія досліджуваного об'єкта

Шар і півпростір перебувають в умовах статичної рівноваги [5], зовнішня поверхня шару вільна від навантажень, а на границі  $x_3 = d$  контакту шару та півпростору задаються умови ідеального контакту, тобто розглядаємо крайову задачу

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial x_1^2} + \mu \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial x_3^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial x_1 \partial x_2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_3^{(k)}}{\partial x_1 \partial x_3} = 0,$$

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial x_1^2} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial x_3^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial x_1 \partial x_2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_3^{(k)}}{\partial x_2 \partial x_3} &= 0, \\ \mu \frac{\partial^2 u_3^{(k)}}{\partial x_1^2} + \mu \frac{\partial^2 u_3^{(k)}}{\partial x_2^2} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_3^{(k)}}{\partial x_3^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial x_1 \partial x_3} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial x_2 \partial x_3} &= 0, \end{aligned} \quad (1.1)$$

за таких граничних умов на поверхні  $x_3 = 0$

$$\vec{\sigma}^{(1)} = 0 \text{ або } \sigma_{13}^{(1)} = 0, \sigma_{23}^{(1)} = 0, \sigma_{33}^{(1)} = 0, \quad (1.2)$$

умов контакту на поверхні  $x_3 = d$

$$\vec{u}^{(1)} = \vec{u}^{(2)}, \quad \vec{\sigma}^{(1)} = \vec{\sigma}^{(2)} + \delta(x_1) \delta(x_2) \vec{f}_0 \quad (1.3)$$

та умов на безмежності  $x_3 \rightarrow \infty$

$$e_{st}^{(2)} \rightarrow 0. \quad (1.4)$$

Тут  $u_l^{(k)}$  — компоненти вектора переміщення  $\vec{u}^{(k)}$  ( $l = \overline{1,3}; k = 1,2$ );  $\vec{\sigma}^{(k)} = \vec{n} \cdot \hat{\sigma}^{(k)}$ ,  $\hat{\sigma}^{(k)} = \lambda e^{(k)} \hat{I} + 2\mu \hat{e}^{(k)}$  — тензор напруження Коші;  $\lambda, \mu$  — сталі Ляме;  $\vec{n}$  — зовнішня нормаль до поверхні, на якій діє сила;  $e^{(k)} \equiv \text{Sp } \hat{e}^{(k)}$  — перший інваріант тензора деформації  $\hat{e}^{(k)}$ ;  $\hat{I}$  — одиничний тензор;  $e_{st}^{(k)}$  — компоненти тензора деформацій  $\hat{e}^{(k)} = \left( \vec{\nabla} \otimes \vec{u}^{(k)} + \left( \vec{\nabla} \otimes \vec{u}^{(k)} \right)^T \right) / 2$ ; індекс « $T$ » позначає транспонований тензор; символ « $\otimes$ » — тензорний добуток двох векторів. Тут і надалі індексами  $k=1$  та  $k=2$  будемо позначати відповідні характеристики шару та півпростору.

Зазначимо, що в даному випадку основною ціллю є аналітичне визначення потенціальної енергії деформації на поверхні  $x_3 = 0$

$$\begin{aligned} w(x_1, x_2, 0) = & -\frac{2\mu(\lambda + \mu)}{\lambda + 2\mu} \left[ e_{11}^2(x_1, x_2, 0) + e_{22}^2(x_1, x_2, 0) \right] - \\ & - \frac{2\lambda\mu}{\lambda + 2\mu} e_{11}(x_1, x_2, 0) e_{22}(x_1, x_2, 0) - \mu e_{12}^2(x_1, x_2, 0), \end{aligned} \quad (1.5)$$

тобто отримання виразів для компонент деформацій  $e_{11}, e_{22}, e_{12}$ .

## 2. Побудова розв'язку задачі

До системи рівнянь (1.1)-(1.4) застосуємо перетворення Фур'є за змінними  $x_1, x_2$ , тобто

$$\tilde{u}_l^{(k)}(y_1, y_2, x_3) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_l^{(k)}(x_1, x_2, x_3) \exp i(x_1 y_1 + x_2 y_2) dx_1 dx_2.$$

Тоді система (1.1)-(1.4) набуде вигляду

$$\left[ (\lambda + 2\mu) y_1^2 + \mu y_2^2 \right] \tilde{u}_1^{(k)} + (\lambda + \mu) y_1 y_2 \tilde{u}_2^{(k)} + i(\lambda + \mu) y_1 \frac{d\tilde{u}_3^{(k)}}{dx_3} - \mu \frac{d^2 \tilde{u}_1^{(k)}}{dx_3^2} = 0,$$

$$\left[ \mu y_1^2 + (\lambda + 2\mu) y_2^2 \right] \tilde{u}_2^{(k)} + (\lambda + \mu) y_1 y_2 \tilde{u}_1^{(k)} + i(\lambda + \mu) y_2 \frac{d\tilde{u}_3^{(k)}}{dx_3} - \mu \frac{d^2 \tilde{u}_2^{(k)}}{dx_3^2} = 0,$$

$$\mu (y_1^2 + y_2^2) \tilde{u}_3^{(k)} + i(\lambda + \mu) \left( y_1 \frac{d\tilde{u}_1^{(k)}}{dx_3} + y_2 \frac{d\tilde{u}_2^{(k)}}{dx_3} \right) - (\lambda + 2\mu) \frac{d^2 \tilde{u}_3^{(k)}}{dx_3^2} = 0; k=1,2 \quad (2.1)$$

$$\tilde{\sigma}_{13}^{(1)} = 0, \tilde{\sigma}_{23}^{(1)} = 0, \tilde{\sigma}_{33}^{(1)} = 0 \text{ при } x_3 = 0; \quad (2.2)$$

$$\tilde{u}_1^{(1)} = \tilde{u}_1^{(2)}, \tilde{u}_2^{(1)} = \tilde{u}_2^{(2)}, \tilde{u}_3^{(1)} = \tilde{u}_3^{(2)},$$

$$\tilde{\sigma}_{13}^{(1)} = \tilde{\sigma}_{13}^{(2)} + f_1, \tilde{\sigma}_{23}^{(1)} = \tilde{\sigma}_{23}^{(2)} + f_2, \tilde{\sigma}_{33}^{(1)} = \tilde{\sigma}_{33}^{(2)} + f_3 \text{ при } x_3 = d; \quad (2.3)$$

$$\tilde{\epsilon}_{st}^{(2)} \rightarrow 0 \text{ при } x_3 \rightarrow \infty. \quad (2.4)$$

Тут  $f_s$  ( $s = \overline{1,3}$ ) — компоненти сили  $\vec{f}$  у системі координат  $(x_1, x_2, x_3)$ .

Розв'язок задачі (2.1)-(2.4) шукаємо у вигляді

$$\vec{\tilde{u}}^{(k)} = (\tilde{u}_1^{(k)}, \tilde{u}_2^{(k)}, \tilde{u}_3^{(k)}) = \vec{a} e^{ipx_3}, \quad (2.5)$$

де  $\vec{a}$  — власний вектор,  $p$  — власне число.

Шляхом підстановки (2.5) у рівняння (2.1) приходимо до задачі на визначення власних значень  $p$  та власних векторів  $\vec{a}$  характеристичної матриці системи (2.1):  $\det(\Lambda - p\mathbf{I}) = 0$ , де  $\Lambda$  — матриця коефіцієнтів системи рівнянь,  $\mathbf{I}$  — одинична матриця.

У підсумку отримуємо загальні розв'язки системи рівнянь (2.1) у вигляді: для шару  $0 \leq x_3 < d$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_1^{(1)} &= \exp(x_3 p)(x_3 C_1 + C_2) + \exp(-x_3 p)(x_3 C_4 + C_5), \\ \tilde{u}_2^{(1)} &= \exp(x_3 p) \left( \frac{y_2}{y_1} x_3 C_1 + C_3 \right) + \exp(-x_3 p) \left( \frac{y_2}{y_1} x_3 C_4 + C_6 \right), \\ \tilde{u}_3^{(1)} &= i \exp(x_3 p) \left( \frac{p}{y_1} x_3 C_1 + \frac{y_1}{p} C_2 + \frac{y_2}{p} C_3 - \frac{1}{y_1} \frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu} C_1 \right) + \\ &+ i \exp(-x_3 p) \left( -\frac{p}{y_1} x_3 C_4 - \frac{y_1}{p} C_5 - \frac{y_2}{p} C_6 - \frac{1}{y_1} \frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu} C_4 \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

та півпростору  $x_3 > d$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_1^{(2)} &= \exp(-x_3 p)(x_3 g_4 + g_5), \\ \tilde{u}_2^{(2)} &= \exp(-x_3 p) \left( \frac{y_2}{y_1} x_3 g_4 + g_6 \right), \\ \tilde{u}_3^{(2)} &= i \exp(-x_3 p) \left( -\frac{p}{y_1} x_3 g_4 - \frac{y_1}{p} g_5 - \frac{y_2}{p} g_6 - \frac{1}{y_1} \frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu} g_4 \right), \end{aligned} \quad (2.7)$$

де  $p = \sqrt{y_1^2 + y_2^2}$ .

Коефіцієнти  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, g_4, g_5, g_6$  співвідношень (2.6), (2.7) визначимо із матричного рівняння

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{F}, \quad (2.8)$$

яке отримуємо з лінійної системи рівнянь (2.2), (2.3) шляхом підстановки в неї розв'язків (2.6) і (2.7). Тут  $\mathbf{X}^T = [C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, g_4, g_5, g_6]$ ,  $\mathbf{F}^T = [0, 0, 0, 0, 0, 0, \frac{f_1}{\mu}, \frac{f_2}{\mu}, -\frac{if_3}{\lambda + 2\mu}]$ .

Після визначення з матричного рівняння (2.8) коефіцієнтів  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, g_4, g_5, g_6$  і їх підстановки в розв'язки (2.6), (2.7), застосуємо до знайдених функцій  $\tilde{u}_l^{(k)}$  зворотне перетворення Фур'є, яке подається формулою

$$u_l^{(k)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}_l^{(k)}(y_1, y_2, x_3) \exp i(-x_1 y_1 - x_2 y_2) dy_1 dy_2. \quad (2.9)$$

При зворотному перетворенні Фур'є здійснюємо перехід від декартових координат  $(y_1, y_2)$  до циліндричних  $(p, \varphi)$ , де  $0 \leq p < \infty$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ .

На основі знайдених за формулою (2.9) перемішень  $u_l^{(k)}(x_1, x_2, x_3)$  деформації  $e_{11}(x_1, x_2, 0)$ ,  $e_{22}(x_1, x_2, 0)$  і  $e_{12}(x_1, x_2, 0)$  на поверхні  $x_3 = 0$  визначаються так

$$e_{11}(x_1, x_2, 0) = \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{D^2} \left[ -\frac{1}{\mu} f_1 \cos \varphi + \frac{\lambda \cos^2 \varphi}{2\mu(\lambda + \mu)} (f_1 \cos \varphi + f_2 \sin \varphi) + \frac{i \cos^2 \varphi}{2(\lambda + \mu)} f_3 \right] + \frac{1}{D^3} \left[ \frac{d}{\mu} (f_1 \cos \varphi + \cos^2 \varphi (f_2 \sin \varphi + if_3)) \right] \right\} d\varphi, \quad (2.10)$$

$$e_{22}(x_1, x_2, 0) = \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{D^2} \left[ \frac{\lambda \cos \varphi \sin \varphi}{2\mu(\lambda + \mu)} (f_1 \sin \varphi - f_2 \cos \varphi) - \frac{(\lambda + 2\mu) \sin \varphi}{2\mu(\lambda + \mu)} f_2 + \frac{i \sin^2 \varphi}{2(\lambda + \mu)} f_3 \right] + \frac{1}{D^3} \left[ \frac{d}{\mu} \sin^2 \varphi (f_1 \cos \varphi + f_2 \sin \varphi + if_3) \right] \right\} d\varphi, \quad (2.11)$$

$$e_{12}(x_1, x_2, 0) = \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{D^2} \left[ \frac{\lambda \cos^2 \varphi}{2\mu(\lambda + \mu)} (f_1 \sin \varphi - f_2 \cos \varphi) - \frac{\sin \varphi}{2\mu} f_1 - \frac{\cos \varphi}{2(\lambda + \mu)} (f_2 - if_3 \sin \varphi) \right] + \frac{1}{D^3} \left[ \frac{d}{\mu} \cos \varphi \sin \varphi (f_1 \cos \varphi + f_2 \sin \varphi + if_3) \right] \right\} d\varphi, \quad (2.12)$$

де  $D = d + i(x_1 \cos \varphi + x_2 \sin \varphi)$ .

Підставляючи вирази (2.10)-(2.12) у формулу (1.5), потенціальну енергію на поверхні  $x_3 = 0$  запишемо через дійсні частини компонент деформацій у вигляді

$$w(x_1, x_2, 0) = -\frac{2\mu(\lambda + \mu)}{\lambda + 2\mu} \left\{ [\operatorname{Re} e_{11}(x_1, x_2, 0)]^2 + [\operatorname{Re} e_{22}(x_1, x_2, 0)]^2 \right\} - \frac{2\lambda\mu}{\lambda + 2\mu} \operatorname{Re} e_{11}(x_1, x_2, 0) \operatorname{Re} e_{22}(x_1, x_2, 0) - \mu [\operatorname{Re} e_{12}(x_1, x_2, 0)]^2. \quad (2.13)$$

### 3. Модель включення. Система включень

Визначимо напружено-деформований стан у півпросторі, який містить об'ємне включення у вигляді куба зі стороною  $a$  (рис. 2).

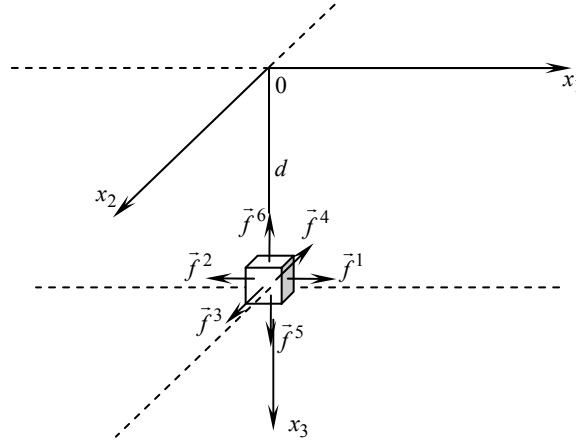


Рис. 2. Об'ємне включення у вигляді куба

Оскільки сформульована задача теорії пружності розв'язується у лінійній постановці, то деформації (напруження) на поверхні  $x_3 = 0$  для задачі з КТ у формі кубика моделюємо суперпозицією шести розв'язків задач з точковою силовою дією у центрі кожної з граней куба. Отже, на поверхні  $x_3 = 0$  маємо

$$e_{11}(x_1, x_2, 0) = \sum_{k=1}^6 e_{11}^m(x_1, x_2, 0), \quad e_{22}(x_1, x_2, 0) = \sum_{k=1}^6 e_{22}^m(x_1, x_2, 0), \quad (3.1)$$

$$e_{12}(x_1, x_2, 0) = \sum_{k=1}^6 e_{12}^m(x_1, x_2, 0).$$

Тут  $e_{11}^m$ ,  $e_{22}^m$ ,  $e_{12}^m$  — компоненти тензора деформації на поверхні  $x_3 = 0$ , зумовлені дією сили  $\vec{f}_m$  в точці  $A_m$  ( $m = \overline{1,6}$ ), де  $\vec{f}_1 = (f_1, 0, 0)$ ,  $\vec{f}_2 = (-f_1, 0, 0)$ ,  $\vec{f}_3 = (0, f_2, 0)$ ,  $\vec{f}_4 = (0, -f_2, 0)$ ,  $\vec{f}_5 = (0, 0, f_3)$ ,  $\vec{f}_6 = (0, 0, -f_3)$ ;  $A_1 = (a/2, 0, d)$ ,  $A_2 = (-a/2, 0, d)$ ,  $A_3 = (0, a/2, d)$ ,  $A_4 = (0, -a/2, d)$ ,  $A_5 = (0, 0, d + a/2)$ ,  $A_6 = (0, 0, d - a/2)$ .

З урахуванням формул (2.10)-(2.12) модельної задачі визначасмо компоненти тензорів деформацій  $e_{11}^m, e_{22}^m, e_{12}^m$  для кожного ( $m = \overline{1,6}$ ), спричинені системою сил  $\vec{f}_m$ . Пружну енергію деформації на поверхні  $x_3 = 0$  обчислюємо за формулою (2.13).

Надалі розглянемо систему включень, латерально-розподілених у проміжному шарі. Розв'язок просторової задачі пружності будуємо як суперпозицію розв'язків, одержаних для кожного включення. Розв'язок задачі для окремого включення записуємо на основі раніше знайденого розв'язку для локальної сили з урахуванням положення відповідної точки.

#### 4. Аналіз отриманих результатів

**4.1. Поодинокі включення.** Проведено дослідження розподілу деформацій, напружень та енергії пружної деформації на поверхні  $x_3 = 0$  півпростору залежно від розмірів включення, його віддалі від поверхні, значення пружних сталих матеріалу та невідповідності ґраток включення та основного матеріалу (величини сил, які діють на гранях куба). При цьому позитивне значення сили  $\vec{f}$  відповідає випадкові, коли період ґратки основного матеріалу менший від періоду ґратки включення, а від'ємне значення сили — коли період ґратки основного матеріалу більший від періоду ґратки включення.

Відзначимо, що реальні значення  $e_{st}^{(p)}, \sigma_{st}^{(p)}, w^{(p)}$  ( $s, t = \overline{1,3}$ ) деформацій, напружень та енергії пружної деформації визначаються через їхні безрозмірні значення  $e_{st}, \sigma_{st}, w$  за формулами

$$e_{st}^{(p)} = \frac{f_0}{d_0^2 \mu_0} e_{st}, \quad \sigma_{st}^{(p)} = \frac{f_0}{d_0^2} \sigma_{st}, \quad w^{(p)} = \frac{f_0}{d_0^4 \mu_0} w,$$

де  $f_0 = 10^{-10}$  Н,  $d_0 = 10^{-7}$  м,  $\mu_0 = 10^9$  Па.

На рис. 3 показано розподіл приведеної компоненти  $e_{22}$  тензора деформації вздовж координати  $x_2$  залежно від розмірів куба (рис. 3 а: суцільні, пунктирні та штрихові лінії відповідають довжинам ребра куба  $a = 0,25; 0,3; 0,35$ ) та віддалі включення до поверхні  $x_3 = 0$  (рис. 3 б: суцільні, пунктирні та штрихові лінії відповідають віддалям  $d = 1; 1,2; 1,4$ ). Бачимо, що більшим включенням, а також меншим їхнім віддалям до поверхні відповідають вищі рівні деформацій. При цьому зі зростанням віддалі  $d$ , а також параметра  $a$  розміру включення, дещо збільшується область суттєвої зміни величини деформацій. Характерним для розподілу деформацій є зміна знаку зі збільшенням віддалі від центрального екстремуму. Це буде впливати на характер утворення КТ при напиленні на поверхню  $x_3 = 0$  нового шару відповідного напівпровідникового матеріалу. Для прикладу, якщо основним матеріалом є GaAs, (період ґратки  $a_2 = 5,65359 \text{ \AA}$  [3]),

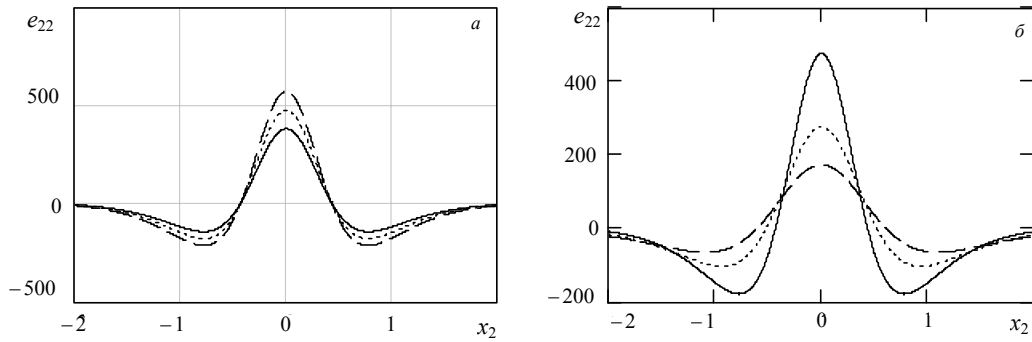


Рис. 3

а КТ формуються з InAs (період ґратки  $a_1 = 6,0583 \text{ \AA}$  [3]), то в цьому випадку включення спричинюють в основному матеріалі деформації розтягу (рис. 3 а). Внаслідок цих деформацій віддалі між атомами основного матеріалу збільшується (ефективне  $a_2$  зростає). При напиленні шару InAs на поверхню  $x_3 = 0$  в областях, де невідповідність ґраток менша, напруження будуть меншими. В областях, де деформації змінили знак (стали деформаціями стиску), збільшується різниця періодів ґраток і зростають напруження стиску. Отже на поверхні існує зона, в якій зародження КТ буде найвигіднішим. Ця зона оточена сильнодеформованою областю, де зародження КТ малоімовірне. Матеріал для формування нової КТ є в околі точки  $(0, 0, 0)$ . Над великою КТ, зарощеною у попередньому шарі, діаметр такої області більший. Відтак створюються передумови для зародження більшої КТ. Цьому також буде сприяти більша величина градієнта деформацій в околі точки  $(0, 0, 0)$ , що внаслідок поверхневої дифузії спричинить більший потік маси InAs до новостворюваної КТ.

На рис. 4 показано розподіл компоненти  $\sigma_{22}$  напруження на поверхні  $x_3 = 0$  залежно від величини сталої Ляме (суцільні, пунктирні та штрихові лінії відповідають безрозмірним значенням  $\lambda = 3; 3,5; 4$ ). Бачимо, що вплив величини пружної сталої Ляме не є суттєвим.

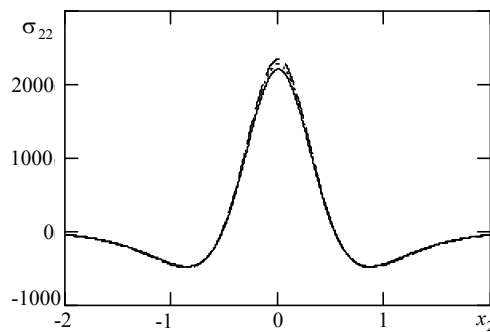


Рис. 4



На рис. 5 і 6 показано розподіли пружної енергії деформації на поверхні  $x_3 = 0$  залежно від параметра  $a$  розміру включення (лінії 1, 2, 3, 4 та 5 відповідають значенням довжини грані куба  $a = 0,1; 0,14; 0,18; 0,22; 0,26$ ).

Бачимо, що зі збільшенням параметра  $a$  величина енергії суттєво збільшується за абсолютним значенням, а область суттєвих змін енергії розширюється. У зв'язку з цим виникають передумови росту великих точок саме над великими КТ у попередньому шарі.

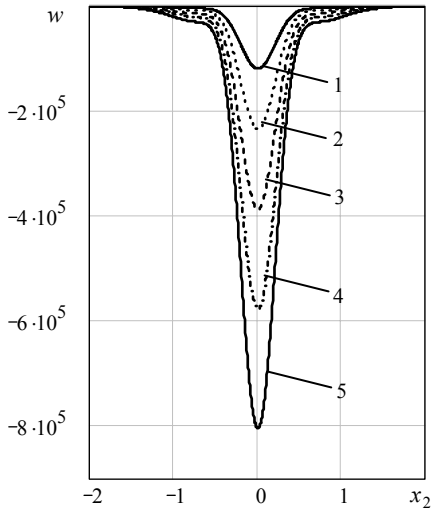


Рис. 5

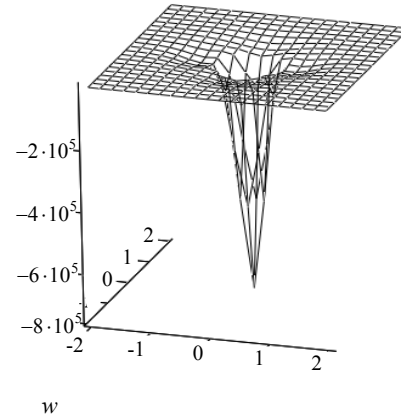


Рис. 6

Залежність пружної енергії деформації на поверхні  $x_3 = 0$  в околі точки  $(0,0,0)$  від розмірів включення та віддалі від поверхні ілюструють криві на рис. 7, 8. Більшим розмірам включення та меншій віддалі від поверхні відповідає більше абсолютне значення енергії.

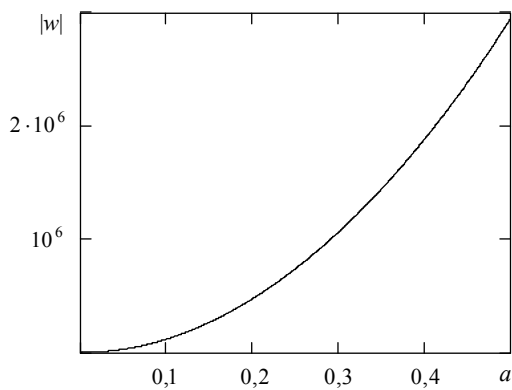


Рис. 7

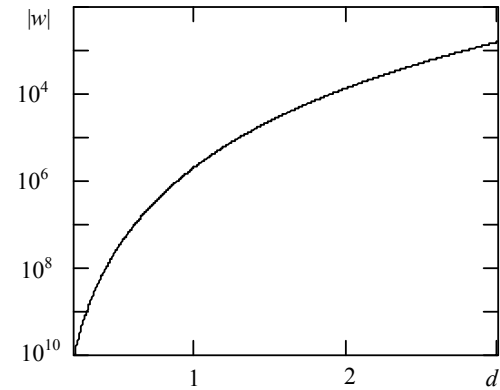


Рис. 8

**4.2. Взаємодія двох включень.** На прикладі системи з двома КТ досліджувались вплив на розподіл енергії пружної деформації взаємодії цих точок, віддалі між ними, а також їх розмірів.

На рис. 9, 10 показано розподіл енергії на поверхні  $x_3 = 0$  при взаємодії двох КТ однакового розміру з довжиною грані  $a = 0.3$ , які розташовані близько одна від одної (центри точок  $(0, 0, 1)$  та  $(0, 4; 0; 1)$  відповідно).

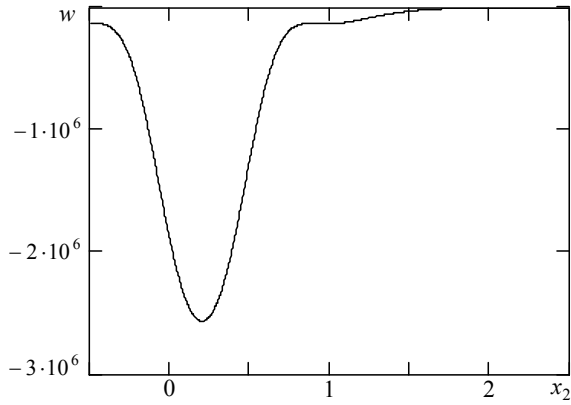


Рис. 9

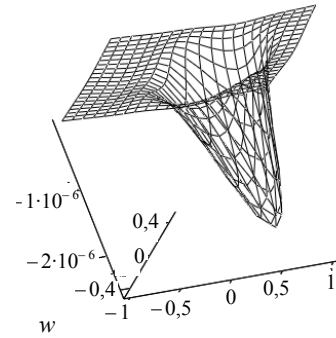


Рис. 10

Бачимо, що внаслідок взаємодії цих точок утворюється один чіткий мінімум, який зміщений відносно обидвох точок до середини віддалі між ними (рис. 10). Така взаємодія зумовлює утворення в цій точці в наступному шарі однієї КТ.

Зі збільшенням віддалі між включеннями їх взаємний вплив на енергію пружної деформації буде слабшати, що ілюструє рис. 11. Тут показано розподіл енергії в результаті взаємодії двох КТ з довжиною грані  $a = 0,3$ , центри яких розташовані в точках  $(0, 0, 1)$  та  $(1, 0, 1)$  відповідно. Бачимо, що тут уже спостерігається два мінімуми енергії, які розташовані строго над центрами точок. Отже в

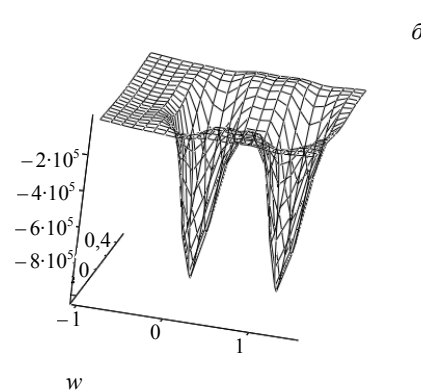
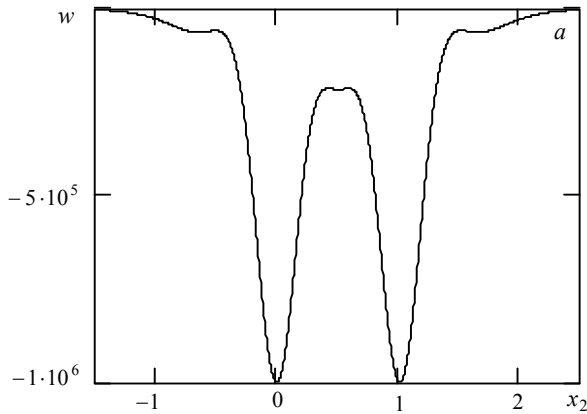


Рис. 11

наступному шарі КТ є передумови для формування двох однакових точок вертикально над попередніми.

Дещо іншою є ситуація за взаємодії двох точок різних розмірів. На рис. 12 показано розподіл пружної енергії на поверхні  $x_3 = 0$ , зумовленої наявністю двох КТ з довжинами граней  $a = 0,25; 0,3$  та центрами в точках  $(0,0,1)$  та  $(1,0,1)$  відповідно. Бачимо, що над більшою точкою енергія має глибший і ширший мінімум, а тому саме над нею в наступному шарі утвориться більша КТ.

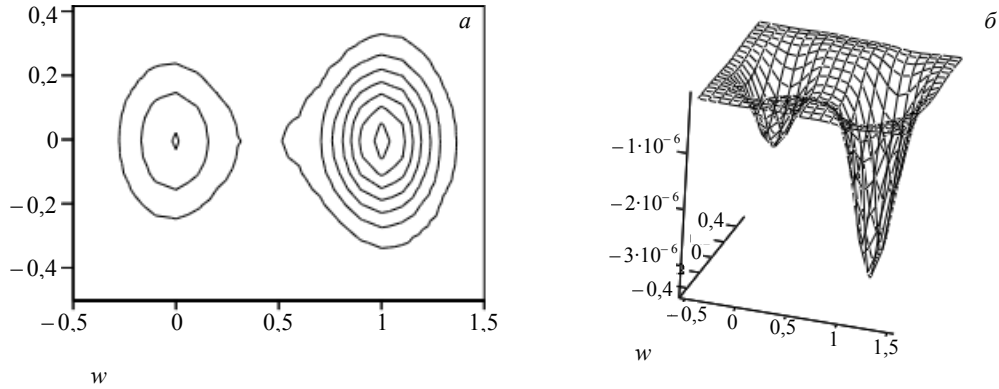


Рис. 12

**4.3. Фільтраційний ефект.** На рис. 15 зображено розподіл пружної енергії деформації на поверхні  $x_3 = 0$ , зумовленої взаємодією трьох різних КТ зі сторонами  $a = 0,3; 0,1; 0,5$  з центрами в  $(0; 0; 0,7)$ ,  $(1; 0; 0,9)$ ,  $(2; 0; 0,5)$  відповідно.

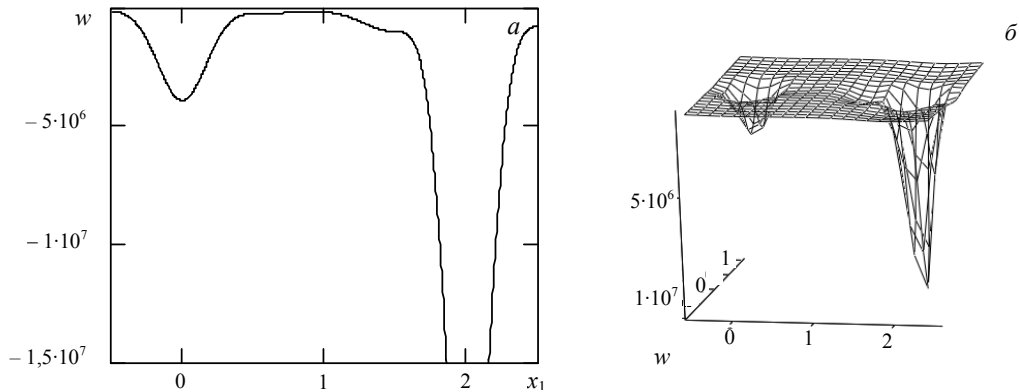


Рис. 13

Бачимо, що внаслідок такої взаємодії енергія деформації має два чітко виражені мінімуми, які утворюються над двома більшими точками. Саме в цих точках у наступному шарі будуть формуватися нові КТ. Вплив малих точок при цьому не є істотним. У цьому і полягає фільтраційний ефект.

На рис. 16 зображено розподіл енергії, зумовленої взаємодією п'яти точок, які розташовані в двох шарах. У першому шарі три точки зі сторонами  $a = 0,3; 0,1; 0,5$  та центрами  $(0; 0; 1,7)$ ,  $(1; 0; 1,9)$ ,  $(2; 0; 1,5)$ , а в другому — дві точки зі сторонами  $a = 0,35; 0,55$  та центрами  $(0; 0; 0,65)$ ,  $(2; 0; 0,45)$ .

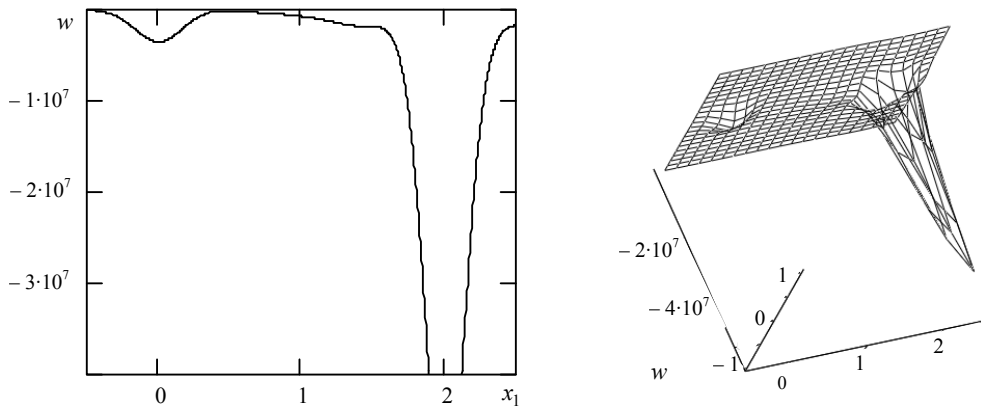


Рис.14

Бачимо, що на поверхні другого шару на розподіл енергії пружної деформації суттєвим залишається лише вплив найбільшої КТ.

**Висновки.** Побудовано математичну модель для визначення напружено-деформованого стану ізотропних проміжних шарів напівпровідникової наноструктури, спричиненого наявністю окремої КТ або їх системи.

У результаті проведеного кількісного аналізу побудованих розв'язків задач теорії пружності для окремої, пари та множини КТ виявлено такі закономірності.

Встановлено, що для окремої КТ мінімум енергії пружної деформації (точка екстремуму деформації) на поверхні шару досягається строго над відповідною КТ. Глибина екстремуму деформації та енергії пружної деформації зростає зі зменшенням віддалі точки від поверхні шару та збільшенням її геометричних розмірів.

Показано, що взаємодія близькорозташованих КТ може призводити до утворення одного мінімуму енергії пружної деформації, який досягається поміж областями розташування цих КТ.

Проведений аналіз розподілу енергії пружної деформації системи КТ різних розмірів показав, що більші КТ мають більший вплив на формування нових точок, вплив малих КТ нівелюється зі зростанням кількості проміжних шарів (фільтраційний ефект).

Запропонована методика побудови базового розв'язку просторової задачі теорії пружності для ізотропного півбезмежного тіла може бути застосована, зокрема, при побудові відповідного розв'язку для анізотропного тіла.

## Література

- [1] *Springholz G., Pinczolits M., Holy V., Zerlauth S., Vavra I., Bauer G.* Vertical and lateral ordering in self-organized quantum dot superlattices // *Physica E*. — 2001. — Vol. 9. — P. 149-163.
- [2] *Quck S. S. and Liu G. R.* Effects of elastic anisotropy on the self-organized ordering of quantum dot superlattices // *Institute of Physics Publishing*, 7 May 2003. — P. 752-764.
- [3] *Pan E., Yuan F. G.* Three-dimensional Green's functions in anisotropic bimetals // *International Journal of Solids and Structures*. — 2000. — Vol. 37. — P. 5329-5351.
- [4] *Mindlin R. D.* Force at a point in the interior of a semi-infinite solid // *Physics*. — 1936. — Vol. 7. — P. 195-202.
- [5] *Лурье А. И.* Нелинейная теория упругости. — М.: Наука, 1980. — 512 с.

## Elastic Strain Energy Calculation Model of Layer with Inclusions of Quantum Dots Type

Petro Lytvyn, Halyna Moroz, Viktor Strelchuk, Igor Prokopenko, Yevgen Chaplia

*The mathematical model for calculating the stress-strained state of semiconductor nanostructure crystal layers, which induced by quantum dots as foreign inclusions in main isotropic material, is proposed. Solutions of elastic problems for unique inclusion, pair and ensemble of inclusions are received and quantitative analyzed according to inclusions size, their reciprocal disposition, thickness of overlying layer, material elastic constants etc. It is shown that received model qualitatively describe regularity of elastic strain energy distribution on the overlay surface. It is illustrated, in particular, that elastic strain energy distribution in overlay conduces generating big quantum dots over big ones and that small quantum dots don't impact practically on this process (so-called filtration effect).*

## Расчетная модель упругой энергии деформации слоя с включениями типа квантовых точек

Петр Литвин, Галина Мороз, Виктор Стрельчук, Игорь Прокопенко, Евгений Чапля

*Предложена математическая модель для расчета напряженно-деформированного состояния кристаллических слоев полупроводниковой наноструктуры, обусловленного наличием квантовых точек, как сторонних включений в основной матрице изотропного материала. Получены и количественно проанализированы решения задач упругости для отдельного включения, пары и ансамбля включений в зависимости от их размера, взаимного размещения, толщины покрывающего слоя, упругих характеристик материала и т. д. Показано, что полученная модель качественно хорошо описывает закономерности распределения энергии упругой деформации на поверхности верхнего слоя. Проиллюстрировано, в частности, что распределение энергии упругой деформации в покрывающем слое способствует формированию больших квантовых точек над большими, а малые квантовые точки на этот процесс практически не влияют (так называемый фильтрационный эффект).*

Отримано 09.09.06