

УДК 539.3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОСТРУКТУР, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНОМ РОСТЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК

© 2011 г.

*П.С. Шушпанников*

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва

shushpan@ipmnet.ru

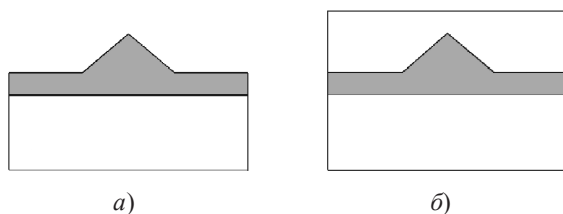
Поступила в редакцию 24.08.2011

Приводится обзор полученных автором результатов, относящихся к моделированию напряженно-деформированного состояния, возникающего внутри и вне трехмерных наноструктур, образующихся при гетероэпитаксиальном росте тонких пленок. При решении соответствующих задач рассматриваются два альтернативных подхода: метод мультипольных разложений и метод конечных элементов.

*Ключевые слова:* теория упругости, наноструктуры, квантовые точки, метод мультипольных разложений.

### Постановка задачи

Схематические изображения гетероструктуры, содержащей наноразмерный островок в отсутствие покрывающего слоя или под покрывающим слоем, представлены на рис. 1а, б соответственно.



Деформирование гетероструктуры предполагается связанным с различием физико-механических свойств ее компонентов: параметров кристаллических решеток и коэффициентов теплового расширения (компоненты, имеющие одинаковые свойства, выделены на рис. 1 серым цветом). Это различие приводит к возникновению в смачивающем слое и островке собственных неупругих деформаций  $e_m$ , приводящих к деформированию гетероструктуры [1]:

$$e_m = (a_s - a_i) / a_s + (\alpha_s - \alpha_i)(T_2 - T_1), \quad (1)$$

где  $T_2, T_1$  – начальная и конечная температуры;  $a_s, a_i$  – параметры решеток;  $\alpha_s, \alpha_i$  – коэффициенты теплового расширения. Индекс  $s$  относится к подложке и покрывающему слою, а индекс  $i$  – к смачивающему слою и островку.

Считается что гетероструктура – изотропное

линейно-упругое тело, занимающее упругое полупространство. Цель работы – моделирование напряженно-деформированного состояния, возникающего вследствие деформаций несоответствия  $e_m$ . Более подробное изложение постановки рассматриваемой здесь задачи представлено в [2].

### Метод мультипольных разложений

Будем считать, что компоненты гетероструктуры имеют одинаковые упругие свойства. Данное предположение позволяет упростить исходную задачу и рассматривать влияние деформаций  $e_m$  в смачивающем слое и островке на деформирование гетероструктуры независимым образом (см. [2]). Остановимся здесь на моделировании напряженно-деформированного состояния, возникающего вследствие деформаций несоответствия  $e_m$  в островке. Для моделирования используем аналитико-численный метод мультипольных разложений, развитый в [3]. При этом деформации  $e_m$  моделируются набором мультиполей (сингулярных решений задачи теории упругости), распределенных по основанию (в случае, представленном на рис. 1а) или поверхности (в случае, представленном на рис. 1б) островка. При этом интенсивности мультиполей выбираются исходя из граничных условий на свободной поверхности гетероструктуры. Преимуществом данного подхода является возможность получить точное или приближенное решение задачи в аналитическом виде. Более подробно метод мультипольных разложений рассматривается в [2, 3].

### Результаты моделирования

С использованием метода мультипольных разложений в настоящем исследовании получены приближенные аналитические решения ряда задач о деформировании гетероструктур, содержащих островки различной формы, в отсутствие покрывающего слоя. При этом рассмотренные формы островков соответствуют формам, наблюдаемым экспериментально при росте на подложках кремния различной ориентации. На рис. 2 представлен пример моделирования компоненты деформаций  $e_{11}$  на свободной поверхности гетероструктуры (на рисунке показана четверть всей гетероструктуры). Островок в данном случае имеет пирамидальную форму с основанием в форме квадрата. Отметим, что деформации при этом существенно неоднородны в окрестности островка и имеют сингулярный характер поведения на его гранях. Примеры моделирования островков других форм, а также результаты применения метода конечных элементов к задачам данного типа представлены в [2].

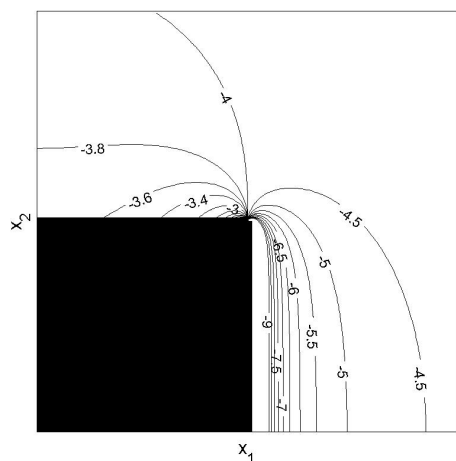


Рис. 2

В рамках рассматриваемой постановки задача о моделировании гетероструктуры, содержащей островок под покрывающим слоем, сводится к задаче о включении, претерпевающем собственную неупругую деформацию  $e_m$ . При этом

для островков пирамидальной формы (островки данного типа наблюдаются экспериментально) метод мультипольных разложений позволяет получить точное аналитическое решение рассматриваемой задачи [4]. Пример моделирования компоненты деформаций  $e_{11}$  для островка в форме прямоугольной пирамиды представлен на рис. 3. Примеры моделирования островков других форм представлены в [5].

В заключение отметим, что полученные в настоящем исследовании результаты использованы для объяснения ряда явлений, наблюдаемых экспериментально при гетероэпитаксиальном росте. Описание данных явлений и их объяснение представлены в [6, 7].

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №09-01-92004-ННС\_а.*

### Список литературы

1. Freund L.B., Suresh S. Thin Film Materials. Stress, Defect Formation and Evolution. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003. 820 p.
2. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Шушпанников П.С. Моделирование напряженно-деформированного состояния в кремний-германиевых островковых гетероструктурах // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2010. №3. С. 7–21.
3. Goldstein R.V., Shushpannikov P.S. Application of the method of multipole expansions in 3D-elasticity problem for a medium with ordered system of spherical pores // ZAMM. 2009. V. 89, No 6. P. 504–510.
4. Glas F. Elastic relaxation of truncated pyramidal quantum dots and quantum wires in a half space: An analytical calculation // J. Appl. Phys. 2001. V. 90, No 7. P. 3232–3241.
5. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Шушпанников П.С. О моделировании механического поведения гетероструктур с «квантовыми точками» // Изв. вузов. Физика. 2009. №11. С. 58–66.
6. Lee C.-H. et al. SiGe quantum rings by ultra-high vacuum chemical vapor deposition // ECS Transactions. 2008. V. 16. P. 647–657.
7. Chang H.T. et al. Strain relaxation during formation of Ge nanolens stacks // Electrochem. Solid-State Lett. 2010. V. 13, No 5. P. K43–K45.

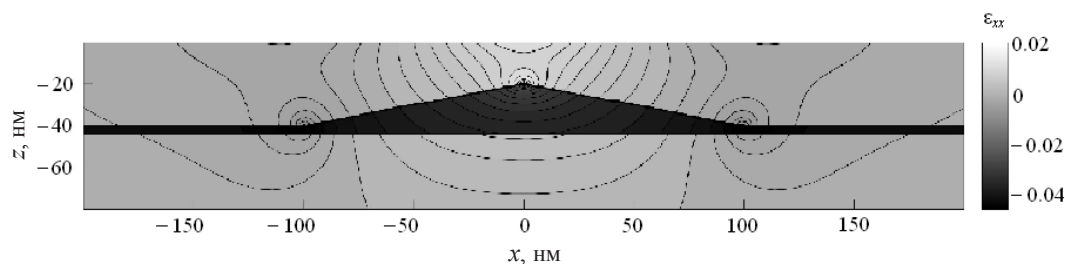


Рис. 3

---

**MECHANICAL MODELING OF THE NANOSTRUCTURES  
FORMED DURING HETEROEPITAXY OF THIN FILMS**

*P.S. Shushpannikov*

A review of the results obtained by the author and related to modeling of the stress-strain state inside and outside 3D heterostructures formed during heteroepitaxial growth of thin films is given. Two alternative approaches for solving the corresponding problems are considered: the multipole expansion method and the finite element method.

*Keywords:* elasticity, nanostructures, quantum dots, multipole expansion method.