

В.В. КУРИЛЮК

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601; e-mail: kuryluk@univ.kiev.ua)

ПРУЖНІ ДЕФОРМАЦІЇ В SiGe-ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ НЕОДНОРІДНОГО СКЛАДУ

УДК 538.95

Методом скінченних елементів розраховано розподіли пружних деформацій в гетероструктурах SiGe з квантовими точками. Досліджено вплив неоднорідного розподілу германію всередині наноострівців на просторові залежності та величину пружних полів. Показано, що квантові точки сталого складу характеризуються більшими напруженнями порівняно з неоднорідними наноострівцями.

Ключові слова: квантова точка, гетероструктура, деформація, механізм росту Странського–Крастанова, функції Гріна, метод скінченних елементів, змочуючий шар, тензор механічних напружень, тензор модулів пружності.

1. Вступ

Унікальні електронні та оптичні властивості кремній-германієвих гетероструктур з самоорганізованими квантовими точками (наноострівцями) створюють передумови для їх практичного застосування як перспективних матеріалів сучасної нано- та оптоелектроніки [1]. Зокрема, великий коефіцієнт поглинання таких гетероструктур в діапазоні енергій, менших, ніж ширина забороненої зони германію, успішно використовується під час виготовлення детекторів інфрачервоного випромінювання нового покоління [2]. Крім того, кремній-германієві структури можуть слугувати активними елементами сонячних батарей [3], світловипромінюючих пристроїв [4], приборів спінтроніки [5].

Властивості кремнієвих гетероструктур з квантовими точками $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (x – частка германію в сполуці), що отримані за механізмом росту Странського–Крастанова, тісно пов'язані з пружними деформаціями та супутніми механічними полями всередині структур. Саме пружні поля, які

виникають в результаті невідповідності ґраток матеріалів, відіграють ключову роль в процесі вирощування гетероструктур, зумовлюючи просторове впорядкування наноострівців та їх форму [6]. Більше того, пружні деформації суттєво впливають на зонну структуру (конфайнмент-потенціал для носіїв заряду), рухливість, ефективну масу електронів та дірок, зумовлюючи зміни властивостей гетероструктур у цілому [7]. Тому важливим завданням фізики і технології нанорозмірних напівпровідникових структур являється розробка методів визначення та контролю полів пружних деформацій і керування за їх допомогою фізичними характеристиками гетероструктур.

Експериментальні дослідження механічних напружень в низькорозмірних гетероструктурах ґрунтуються на методиці комбінаційного розсіювання світла [8, 9]. Зокрема, її використання дозволяє встановити особливості кристалічної структури напружених наноострівців германію в кремнієвій матриці [10] чи їх морфологію [11]. Проте, аналіз спектрів комбінаційного розсіювання дозволяє оцінити лише усереднені значення деформацій і не дає інформації про їх розподіл всередині і поблизу острівців. Зважаючи на це, ефективним

© В.В. КУРИЛЮК, 2013

інструментом для дослідження наносистем, зокрема, кремній-германієвих гетероструктур, є методи комп'ютерного моделювання.

На сьогодні відома значна кількість робіт, присвячених вивченню полів пружних деформацій та їх впливу на властивості $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -гетероструктур з квантовими точками [12–14]. Існує декілька підходів для розрахунку пружно-деформованого стану структур з наноострівцями, що використовують методи молекулярної динаміки, функцій Гріна чи скінченних елементів [15–17]. Недоліком першого методу є значні затрати комп'ютерного часу навіть при розрахунках невеликих за об'ємом об'єктів. Метод функцій Гріна частіше використовується під час аналізу структур у наближенні нескінченної чи напівнескінченної підкладки, але не завжди його вдається застосувати для обмежених систем. Найбільшого поширення набув метод скінченних елементів, що дозволяє проводити розрахунки для об'єктів складної геометрії не потребуючи значних обчислювальних ресурсів.

В більшості відомих на сьогодні робіт, присвячених дослідженням властивостей гетероструктур, пов'язаних з наявністю пружних полів, аналіз результатів проводиться в припущенні про однорідний склад наноострівців. Проте, в процесі високотемпературної епітаксії германію на кремнієвій підкладці відбувається часткове перемішування компонентів, внаслідок чого їх вміст змінюється по об'єму квантової точки. Як показано в роботі [18], перерозподіл концентрації кремнію та германію в наноострівках зумовлює зниження енергії системи, тому він є енергетично вигідним. При цьому розподіл частки германію (кремнію) зв'язаний із формою квантових точок та співвідношенням частки Si і Ge в них. Зважаючи на те, що градієнт концентрації може бути досить значним, врахування неоднорідності складу острівців є важливим етапом при дослідженнях властивостей, котрі визначаються електронною структурою квантових точок, адже остання є чутливою до деформацій в гетероструктурах.

У даній роботі з використанням методу скінченних елементів виконано розрахунки полів деформацій в кремнієвих гетероструктурах з квантовими точками германію в моделі пружного континууму. Проведено порівняльний аналіз отриманих результатів для наноострівців з однорідним та неоднорідним розподілом германію по їх об'єму. Про-

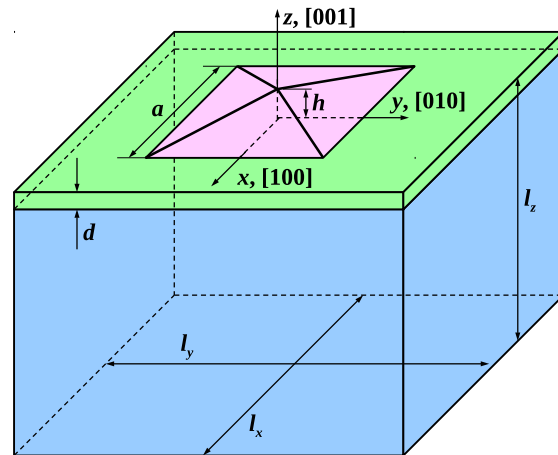


Рис. 1. Геометрія досліджуваної SiGe-гетероструктури

аналізовано також вплив неоднорідності на зонну структуру квантових точок $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

2. Методика розрахунку деформацій в SiGe-гетероструктурах

Самоорганізовані квантові точки германію на поверхні кремнію розглядатимемо як впорядкований масив острівців однакового розміру. В таких гетероструктурах характерний період (відстань між сусідніми наноострівками) дорівнює кілька десятків нанометрів. Тому для розрахунку пружних деформацій в системі підкладка – квантова точка германію обмежимося розглядом однієї модельної комірки, що складається з квантової точки в формі правильної чотирикутної піраміди, розміщеної на підкладці з поперечними розмірами $l_x \times l_y$ та товщиною l_z (рис. 1). Між Si-підкладкою та квантовою точкою германію розміщений змочуючий шар Ge товщиною d . Висота і довжина основи піраміди дорівнюють h та a відповідно. Початок координатної системи в модельній комірці суміщений з центром основи піраміди, а осі x , y , z спрямовані вздовж кристалографічних напрямків [100], [010], [001] відповідно.

Дослідження полів деформацій у гетероструктурах з квантовими точками виконуватимемо в наближенні пружного континууму за допомогою стандартних рівнянь теорії пружності:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} [\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{0kl}], \quad (2)$$

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right), \quad (3)$$

де σ_{ij} , ε_{kl} та C_{ijkl} – тензори механічних напружень, пружних деформацій та модулів пружності відповідно, u_k – вектор пружних зміщень. Через ε_{0kl} в (2) позначено початкові деформації, спричинені невідповідністю параметрів ґратки матеріалу підкладки та нанострівців (деформації невідповідності):

$$\varepsilon_{0ij} = \frac{a_s - a_i}{a_s} \delta_{ij}, \quad (4)$$

де a_s і a_i – сталі ґратки матеріалу підкладки та квантової точки відповідно, δ_{ij} – символ Кронекера. Оскільки для кремнію величина $a_s = 5,430$, а для германію – $a_i = 5,646$, то абсолютне значення ε_{0ij} становить близько 4%. При розрахунках початкова деформація вважається ненульовою лише в межах квантової точки, а подальша релаксація структури приводить до появи деформацій і в підкладці.

Відзначимо, що невідповідність ґраток є не єдиним джерелом механічних напружень. Оскільки гетероструктури вирощуються при температурах епітаксії, то за їх подальшого охолодження можуть виникати напруження, пов’язані з різницею $\Delta\alpha$ коефіцієнтів термічного розширення. Відповідні деформації ε_{TE} в структурі можна оцінити зі співвідношення:

$$\varepsilon_{TE} = \Delta\alpha\Delta T, \quad (5)$$

де ΔT – зміна температури. Оскільки деформації в гетероструктурах цікаві зазвичай при кімнатних температурах ($\Delta T \simeq 500$ °C), а також враховуючи те, що для гетеропари Si–Ge $\Delta\alpha = 3,3 \cdot 10^{-6}$ C⁻¹, отримуємо значення $\varepsilon_{TE} \approx 0,2\%$. Зважаючи на те, що величина ε_{TE} на порядок менша, ніж деформації ε_{0ij} , надалі розглядатимемо лише механічні поля, пов’язані саме з невідповідністю ґраток матеріалів підкладки та нанострівців.

Для повноти розв’язку рівняння (1)–(3) необхідно доповнити граничними умовами відносно невідомих компонент вектора зміщень. Зокрема, для врахування періодичності гетероструктури на протилежних гранях $x = \pm l_x/2$ та $y = \pm l_y/2$ модельної комірки фіксувались нормальні складові вектора u_k :

$$u_x \left(x = \pm \frac{l_x}{2} \right) = u_y \left(y = \pm \frac{l_y}{2} \right) = 0. \quad (6)$$

Оскільки товщина шару поблизу квантової точки, де розглядаються поля деформацій, набагато менша, ніж товщина підкладки, то на нижній грані підкладки $z = -l_z$ накладаються “жорсткі” граничні умови:

$$u_i (z = -l_z) = 0, \quad i = x, y, z. \quad (7)$$

Крім того, на всіх зовнішніх поверхнях, включаючи відкриті поверхні германієвих нанострівців та кремнієвої підкладки припускається відсутність механічних напружень.

Сформульована задача не має аналітичного розв’язку, тому пошук пружних полів у кремній-германієвих гетероструктурах у даній роботі проводився за допомогою методу скінчених елементів. Використовувався авторський програмний код, написаний на мові Fortran з процедурами математичної бібліотеки Intel MKL. При цьому модельна комірка, що містить квантову точку на підкладці кремнію розбивалась на сітку тетрадральних елементів, кожен з яких містить 10 вузлів. У межах кожного елемента невідомі компоненти вектора пружних зміщень апроксимувались лінійною комбінацією так званих функцій форми $\xi(x, y, z)$ [16]:

$$u_k(x, y, z) = \sum_{i=1}^{10} \nu_{ik} \xi_i(x, y, z), \quad (8)$$

де ν_{ik} – невідомі коефіцієнти, що являють собою значення u_k у вузлах сітки. Застосування методу Гальоркіна [19] дозволяє трансформувати диференціальні рівняння (1)–(3) з відповідними граничними умовами в систему алгебраїчних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів ν_{ik} :

$$[K][\nu] = [f], \quad (9)$$

де компоненти матриць $[K]$ та $[f]$ визначаються співвідношеннями:

$$K = \int_{Ve} B^T C B dV, \quad (10)$$

$$f = \int_{Ve} B^T C \varepsilon_0 dV. \quad (11)$$

Інтегрування в (10), (11) виконується по об’єму Ve елемента, верхній індекс “ T ” означає транспонування, а через B^T позначено оператор такого

вигляду:

$$B^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial \xi}{\partial z} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ 0 & \frac{\partial \xi}{\partial y} & 0 & \frac{\partial \xi}{\partial z} & 0 & \frac{\partial \xi}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial \xi}{\partial z} & \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \xi}{\partial x} & 0 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

На основі отриманих із розв'язку рівнянь (9) коефіцієнтів ν_{ik} розраховувались компоненти вектора пружних зміщень u_k , після чого за співвідношенням (3) виконувались розрахунки компонент тензора деформацій.

3. Результати та їх обговорення

Розрахунки пружних деформацій у гетероструктурах виконувались з використанням таких параметрів наноострівців: довжина основи $a = 30$ нм, висота $h = 4,5$ нм, товщина змочуючого шару $d = 0,5$ нм. Розміри модельної комірки вибирались рівними середній відстані між квантовими точками в реальних структурах: $l_x = l_y = 60$ нм. Для виключення впливу нижньої грані підкладки, розмір l_z вибирався в 10 разів більшим, ніж висота наноострівців: $l_z = 10h = 45$ нм.

У розрахунках, пов'язаних з неоднорідним вмістом германію в квантових точках, використовувався розподіл концентрації Ge, профіль якого зображено на рис. 2. Наведена залежність аналогічна до тієї, що була отримана раніше в роботі [18] для пірамідальних наноострівців. Максимальний вміст германію ($x \approx 1$) виявляється поблизу вершини острівців, а мінімальний ($x \approx 0,3$) – в околі вершин при основі. При цьому середнє значення частки германію по всьому об'єму квантової точки становить близько 0,7. Тому результати, отримані в гетероструктурах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ з неоднорідними наноострівцями, порівнювались з даними розрахунків для острівців сталого складу $\text{Si}_{0,3}\text{Ge}_{0,7}$. Значення компонент тензора пружних сталей для чистих кремнію $C_{ij}(\text{Si})$ та германію $C_{ij}(\text{Ge})$ запозичені з роботи [20], а для сполуки $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ використовувалась лінійна апроксимація:

$$C_{ij}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x) = [C_{ij}(\text{Ge}) - C_{ij}(\text{Si})]x + C_{ij}(\text{Si}). \quad (13)$$

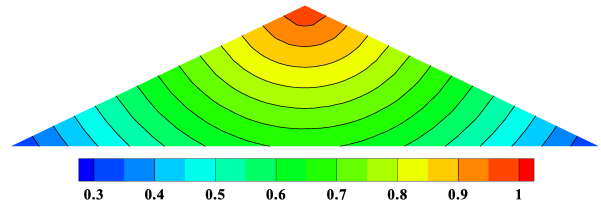


Рис. 2. Неоднорідний розподіл вмісту x германію в пірамідальній квантовій точці $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, використаний для розрахунків пружних полів

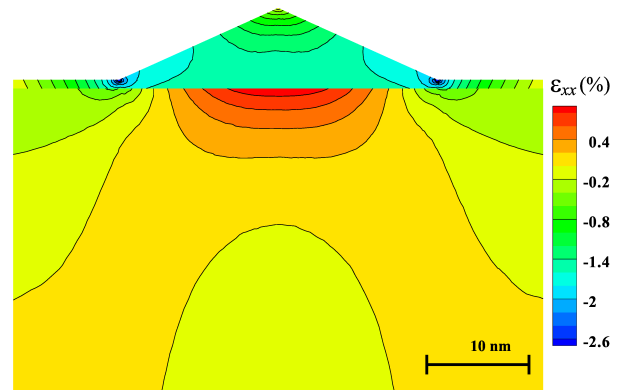


Рис. 3. Просторова залежність компоненти деформації ε_{xx} в xz -площині для гетероструктури з неоднорідними наноострівцями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

На рис. 3 наведено розрахований розподіл компоненти тензора деформацій ε_{xx} в гетероструктурі з наноострівцями неоднорідного складу. Всередині квантової точки та поблизу її основи величина ε_{xx} суттєво неоднорідна, тому в цих ділянках гетероструктури спостерігається високий градієнт деформацій. Видно, що в кремнієвій підкладці переважають деформації розтягу вздовж гетеропереходу $\text{Si}-\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ з максимальним значенням $\varepsilon_{xx} = 0,6\%$ поблизу основи острівців. Всередині ж квантової точки компонента ε_{xx} змінює знак і ця частина гетероструктури зазнає деформацій стиснення вздовж гетеропереходу з максимумом $2,5\%$ поблизу вершин при основі. Величина стискуєчих деформацій поступово зменшується при переході від основи до вершини піраміди. Оскільки складова ε_{yy} тензора деформацій має аналогічну залежність, її розподіли на рисунках не показані.

У пружній області деформації співвідношення поздовжнього та поперечного видовження однаков-

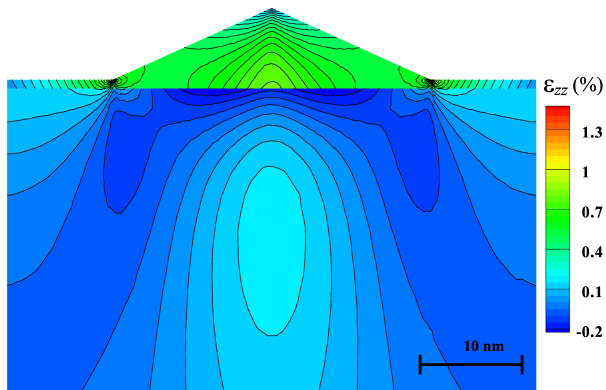


Рис. 4. Просторова залежність компоненти деформації ε_{zz} в xz -площині для гетероструктури з неоднорідними наноострівцями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

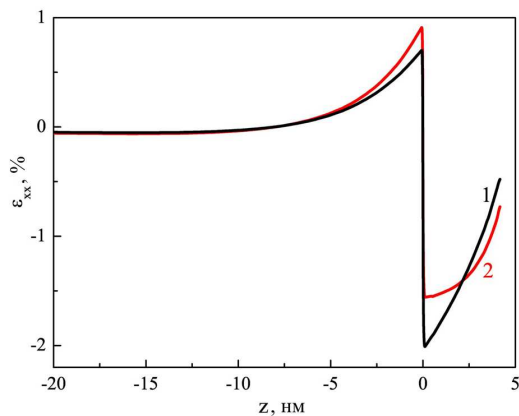


Рис. 5. Розподіл деформацій ε_{xx} вздовж осі Oz у гетероструктурі з наноострівцями однорідного (крива 1) та неоднорідного (крива 2) складу

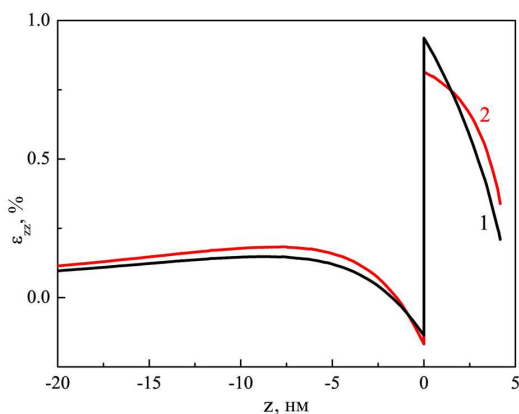


Рис. 6. Розподіл деформацій ε_{zz} вздовж осі Oz у гетероструктурі з наноострівцями однорідного (крива 1) та неоднорідного (крива 2) складу

ве (ефект Пуассона), тому компонента деформації ε_{zz} має протилежний знак (рис. 4): підкладка поблизу гетеропереходу зазнає деформації стиснення в напрямку росту гетероструктури, а наноострівці – деформації розтягу. Крім того, складова ε_{zz} змінює свій знак при заглибленні в підкладку. На відстані порядку висоти острівців спостерігаються деформації розтягу з максимальним значенням $\varepsilon_{zz} \approx 0,17\%$, що поступово зменшуються вглибину підкладки.

Якісно залежності ε_{xx} (ε_{yy}) та ε_{zz} в гетероструктурах з острівцями сталого складу мають такі самі особливості, що й в розглянутому вище випадку. Для кількісного з'ясування впливу неоднорідності на величину і розподіл пружних полів у гетероструктурах, розглянемо залежності компонент тензора ε_{ii} вздовж осі Oz (рис. 5, 6).

Як видно з рис. 5, в нижній частині ($z < h/2$) неоднорідних квантових точок стискуєчі деформації ε_{xx} менші за абсолютною величиною від деформацій в острівцях сталого складу. Максимальна різниця спостерігається біля основи піраміди і дорівнює $\Delta\varepsilon_{xx} \approx 0,45\%$. Приблизно на середині висоти квантової точки компонента ε_{xx} в острівцях обох типів однакова і дорівнює $\varepsilon_{xx} \approx 1,4\%$. У верхній частині квантової точки ($z > h/2$) наноострівці з неоднорідним вмістом германію виявляються більш деформованими, причому різниця досягає максимуму поблизу вершини піраміди і дорівнює $\Delta\varepsilon_{xx} \approx 0,25\%$.

У кремнієвій підкладці неоднорідність складу острівців приводить до збільшення деформацій розтягу ε_{xx} порівняно з острівцями сталого складу на максимальну величину $\Delta\varepsilon_{xx} \approx 0,2\%$ поблизу гетеропереходу. На відстанях $z \sim h$ вглиб підкладки ця різниця практично дорівнює нулю.

Подібним чином вплив неоднорідності проявляється і в залежностях складової тензора деформації ε_{zz} (рис. 6). Зокрема, в нижній третині висоти квантової точки ($z < h/3$) деформації розтягу в острівцях сталого складу виявляються більшими за відповідну величину в неоднорідних квантових точках з максимальною різницею $\Delta\varepsilon_{zz} \approx 0,13\%$ поблизу основи. В верхній частині наноострівців спостерігається зворотне співвідношення: більших деформацій розтягу зазнають неоднорідні острівці з максимальним відхиленням $\Delta\varepsilon_{zz} \approx 0,14\%$ поблизу вершини. На відміну від ε_{xx} (ε_{yy}), різниця між складовими ε_{zz} вглибині підкладки для обох типів

квантових точок зберігається на відстанях, близьких до $z \sim 4h$.

З отриманих просторових залежностей $\varepsilon_{ii}(x, y, z)$ ($i = x, y, z$) у роботі оцінювались середні значення деформацій по об'єму квантової точки V_{QD} :

$$\langle \varepsilon_{ii} \rangle = \int_{V_{\text{QD}}} \varepsilon_{ii}(x, y, z) dV. \quad (14)$$

За цими оцінками, нанострівці сталого складу виявляються більш напруженими порівняно з неоднорідними: середні значення деформацій в них відповідно дорівнюють: $\langle \varepsilon_{zz} \rangle \approx 0,66\%$, $\langle \varepsilon_{xx} \rangle \approx -1,4\%$ та $\langle \varepsilon_{zz} \rangle \approx 0,63\%$, $\langle \varepsilon_{xx} \rangle \approx -1,1\%$. Причиною таких відмінностей є менші локальні деформації в неоднорідних квантових точках поблизу їх основи, які й дають основний внесок при усередненні.

Як зазначалось вище, деформації можуть спричинювати зміну енергетичних зон у гетероструктурах. Отримані в роботі результати вказують на те, що основні відмінності між пружно-деформованим станом однорідних і неоднорідних за складом нанострівців спостерігаються саме в їх об'ємі. Тому, найбільших змін енергетичної структури варто очікувати всередині квантових точок. Оскільки в гетеропереходах 2-го типу, яким є перехід Si-Ge (див. вставку на рис. 7), всередині квантових точок локалізовані дірки, то в цій області неоднорідність матиме домінуючий вплив на дно валентної зони. Для підтвердження цього було проведено розрахунки енергетичних зон досліджуваної гетероструктури в наближенні деформаційного потенціалу. Зміна енергії дна валентної зони, зумовлена деформаціями, розраховувалась за співвідношенням:

$$\delta E_V = aS_h - \frac{bS_b}{2} + \frac{\Delta_0}{3}, \quad (15)$$

де a, b – константи деформаційного потенціалу для валентної зони, Δ_0 – спин-орбітальне розщеплення, S_h, S_b – відповідно гідростатична та біаксіальна деформації, що визначаються як:

$$S_h = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}, \quad (16)$$

$$S_b = 2\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}. \quad (17)$$

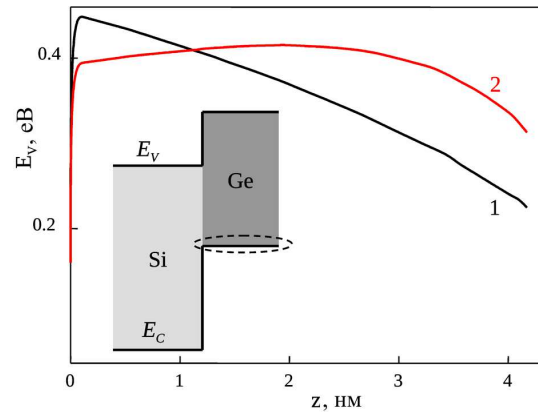


Рис. 7. Залежність енергії дна валентної зони $E_V(z)$ всередині нанострівців однорідного (крива 1) та неоднорідного (крива 2) складу. На вставці – зонна схема гетеропереходу Si-Ge (пунктиром обведено область, що наведена на рис. 7)

Отримані результати свідчать (рис. 7), що в однорідних за вмістом германію нанострівцях деформації невідповідності спричинюють збільшення енергії дна валентної зони поблизу гетеропереходу Si-Si_{1-x}Ge_x (крива 1). Тому максимум діркової густини в таких квантових точках спостерігатиметься біля основи пірамідальних острівців. В неоднорідних нанострівцях максимум E_V лежить приблизно на середині їх висоти (крива 2). Отже, в квантових точках неоднорідного складу варто очікувати перерозподіл діркової густини зі зміщенням її максимуму в напрямку від основи піраміди до вершини. Крім того, зміна залежності $E_V(x, y, z)$ внаслідок неоднорідності зумовлюватиме і зміни енергетичного спектра носіїв заряду, що вноситиме свій внесок у формування властивостей гетероструктур.

4. Висновки

Таким чином, у роботі проведено розрахунки полів пружних деформацій в SiGe-гетероструктурах з квантовими точками, синтезованими за механізмом росту Странського-Крастанова. Виявлено відмінність пружно-деформованого стану нанострівців сталого компонентного складу та квантових точок зі змінним вмістом кремнію і германію по їх об'єму. Виконані розрахунки свідчать, що неоднорідний компонентний склад крім змін просторового розподілу компонент тензора деформації, приводить також до зменшення їх величини в

квантовых точек. На прикладі зміни енергії дна валентної зони продемонстровано вплив перерозподілу германію в нанострівцях на властивості SiGe-гетероструктур.

Робота виконана за кошти, надані Державним фондом фундаментальних досліджень в рамках проекту Ф44 (гранти Президента України для підтримки наукових досліджень молодих учених на 2012 рік).

1. K.L. Wang, D. Cha, J. Liu, and C. Chen, Proceedings of the IEEE **95**, 1866 (2007).
2. E. Finkman, N. Shuall, A. Vardi, V. Le Thanh, and S.E. Schacham, J. Appl. Phys. **103**, 093114 (2008).
3. M.L. Lee, G. Dezsi, and R. Venkatasubramanian, Thin Solid Films **518**, S76 (2010).
4. D.J. Lockwood and L. Tsybeskov, Phys. Stat. Sol. (c) **8**, 2870 (2011).
5. F. Lipps, F. Pezzoli, M. Stoffel *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 125312 (2010).
6. Л.В. Арапкина, В.А. Юрьев, УФН **180**, 289 (2010).
7. M.O. Baykan, S.E. Thompson, and T. Nishida, J. Appl. Phys. **108**, 093716 (2010).
8. M.I. Alonso, M. de la Calle, J.O. Osso, M. Garriga, and A.R. Goni, J. Appl. Phys. **98**, 033530 (2005).
9. M.Ya. Valakh, V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan, O.S. Lytvyn, A.G. Milekhin, A.I. Nikiforon, O.P. Pchelyakov, F. Alsina, and J. Pascual, Nanotechnology, **16**, 1464 (2005).
10. V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan, A.M. Yaremko, and M.Ya. Valakh, Eur. Phys. J. B **74**, 409 (2010).
11. M.Ya. Valakh, P.M. Lytvyn, A.S. Nikolenko, V.V. Strelchuk, Z.F. Krasnik, and A.N. Novikov, Appl. Phys. Lett., **96**, 141909 (2010).
12. G. Schmidt and K. Eberl, Phys. Rev. B **61**, 13721 (2000).
13. M.H. Liao, C.-H. Lee, T.A. Hung, and C.W. Liu, J. Appl. Phys. **102**, 053520 (2007).
14. V. Kuryliuk, O. Korotchenkov and A. Cantarero, Phys. Rev. B **85**, 075406 (2012).
15. E. Melezhik, and O. Korotchenkov, J. Appl. Phys. **105**, 023525 (2009).
16. Y. Kikuchi, H. Sugii, and K. Shintani, J. Appl. Phys. **89**, 1191 (2001).
17. G.R. Liu, and S.S. Quek Jerry, Semicond. Sci. Technol. **17**, 630 (2002).
18. N.V. Medhekar, V. Hegadekatte, and V.B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. **100**, 106104 (2008).
19. O. Zienkiewicz and R. Taylor, *The Finite Element Method* (McGraw-Hill, London, 1989), Vol. 1.
20. B.A. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids* (Wiley, New York, 1973).

Одержано 16.11.12

В.В. Курилюк

УПРУГИЕ ДЕФОРМАЦИИ В SiGe-ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ НЕОДНОРОДНОГО СОСТАВА

Резюме

Методом конечных элементов рассчитаны распределения упругих деформаций в гетероструктурах SiGe с квантовыми точками. Исследовано влияние неоднородного распределения германия внутри наностроек на пространственные зависимости и величину упругих полей. Показано, что квантовые точки постоянного состава характеризуются большими напряжениями по сравнению с неоднородными наностройками.

V. V. Kuryliuk

ELASTIC STRAINS IN SiGe HETEROSTRUCTURES WITH NON-UNIFORM QUANTUM DOTS

Summary

Elastic strain distributions in SiGe heterostructures with quantum dots have been simulated with the use of the finite element method. The effect of a non-uniform germanium distribution in the nanoislands on the spatial dependence and the magnitude of elastic fields was studied. It is shown that quantum dots with a uniform component content are more strained in comparison with non-uniform nanoislands.