# Упругое поведение сферического включения с заданной одноосной дилатацией

#### © Н.А. Берт, А.Л. Колесникова\*, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия \* Институт проблем машиноведения Российской академии наук, 199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: aer@mail.ioffe.ru

#### (Поступила в Редакцию 22 января 2002 г.)

Рассматривается упругое поведение сферического включения с одноосной дилатацией. В качестве примера наблюдения подобных включений приведены данные по обнаружению напряженных наноразмерных кластеров в легированных полупроводниках (AS-Sb-кластеры в GaAs). Найдены поля смещений, упругих деформаций и напряжений сферических включений с одноосной дилатацией, выявлены их особенности. Рассчитана упругая энергия одноосного сфероида. Проведено сравнение с трехосным сфероидом. Рассмотрены механизмы релаксации упругого поля включения за счет образования призматических дислокационных петель.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований (№ 98-02-17617) и INTAS (№ 97-30930), а также программами "Физика твердотельных наноструктур" и "Фуллерены и атомные кластеры" Минпрома России.

Проблема определения упругих напряжений, создаваемых включением другой фазы, является классической как для физики, так и для механики твердого тела [1-4]. С одной стороны, некоторая выделенная область твердого тела может претерпевать изменение формы, что приведет к возникновению упругих деформаций и напряжений как в самой области, так и в окружающей ее матрице. Изменение формы может быть вызвано локальной пластической деформацией (например, двойникованием), выделением новой химической фазы (например, преципитатов), фазовым превращением в уже имеющемся материале (например, мартенситное превращение), неоднородным термическим расширением и т.д. С другой стороны, наличие неоднородности материала модифицирует уже имеющиеся поля деформаций и напряжений, создаваемые внешними источниками. В этом случае неоднородность является концентратором напряжений. Простейшими примерами таких неоднородностей являются пора или область материала с измененными упругими модулями.

В общем случае включение может иметь произвольную форму и объем. Однако для многих приложений достаточно исследовать включение простейшей сферической или эллипсоидальной формы. Решения для таких включений имеют практическую ценность (как было показано в классических работах [2,3]), отличаются простотой и могут быть найдены в замкнутом аналитическом виде. В частности, доказано, что для эллипсоидального включения, материал которого испытывает однородную собственную деформацию, упругие деформации и напряжения внутри включения оказываются постоянными [2]. Упругие поля вне включений имеют более сложный вид, зависящий от характера превращения материала во включении. В настоящее время теория упругих включений находит новое применение при описании свойств наноразмерных кластеров — квантовых точек в полупроводниковых материалах [5–9]. Моделируя квантовые точки включениями с заданным изменением объема, можно, например, оценить влияние упругих полей, генерируемых кластерами, на электронные свойства материала внутри и в непосредственной окрестности квантовой точки [6,10–12]. Кроме того, упругое взаимодействие между квантовыми точками приводит к их вертикальному упорядочению (вдоль направления роста) [5,13,14], а взаимодействие со сторонними источниками упругих напряжений может дать упорядочение и в горизонтальной плоскости (параллельной поверхности роста) [15].

Важным примером наноразмерных включений в кристаллической полупроводниковой матрице являются кластеры мышьяка в слоях арсенида галлия, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низкой температуре (LT-GaAs) и подвергнутых послеростовому отжигу [16,17]. Оказалось, что такой материал обладает ультракоротким временем жизни носителей заряда и высоким удельным сопротивлением, что чрезвычайно привлекательно для целого ряда сверхбыстродействующих электронных, оптических и оптоэлектронных приборных приложений [18]. В результате проведенных в последние годы исследований была определена атомная структура кластеров As в матрице GaAs и разработаны методы управления размером, концентрацией и пространственным расположением кластеров [19]. Было установлено, что кластеры As создают относительно слабые анизотропные деформации в окружающей матрице GaAs, так что решетка LT-GaAs оказывается кристаллически совершенной, не содержит протяженных дефектов (дислокаций, дефектов упаковки и пр.), а ее



**Рис. 1.** Светлопольные ТЕМ-изображения *LT*-GaAs-пленки, δ-легированной сурьмой и отожженной при 600°С. Большие включения демонстрируют картину Муара и ассоциированы с дислокационными петлями. Дифракционный вектор **g** направлен вдоль [220] (*a*) и вдоль [220] (*b*).

 $g = [2\overline{2}0]$ 

параметр близок к величине, характерной для обычного арсенида галлия, не содержащего кластеров [17,20–22].

g = [220]

Недавно было обнаружено, что в матрице GaAs могут быть созданы кластеры сплава As–Sb с достаточно большим (20–30 at.%) содержанием сурьмы [23]. Такие кластеры в отличие от кластеров чистого As создают сильные деформации в окружающей матрице GaAs и характеризуются высокой скоростью роста [23,24]. Для использования таких кластеров в нанотехнологиях необходимо выяснить происхождение и механизмы релаксации механических напряжений, индуцированных кластерами. Весьма интересным представляется вопрос о возможности использования локальных механических напряжений для самоорганизации системы кластеров.

В настоящей работе исследуются упругие поля сферического включения, претерпевающего однородную деформацию вдоль диаметра сферы (одноосная дилатация). Случай дилатации вдоль трех взаимно перпендикулярных диаметров (трехосная дилатация) отвечает хорошо известному случаю сферического включения с заданным изменением объема [25]. Рассмотрение включения с одноосной дилатацией было мотивировано упомянутыми выше данными по наблюдению напряженных кластеров в легированных полупроводниках. В связи с этим в разделе 1 приводятся экспериментальные результаты по обнаружению включений с одноосной дилатацией. В разделе 2 рассматривается формальная процедура образования упругого включения с одноосной дилатацией и определяется пластическая дисторсия такого включения. В разделе 3 приводятся результаты расчета упругих полей и энергии включения с одноосной дилатацией, в разделе 4 обсуждаются полученные результаты и возможность их использования при моделировании релаксационных процессов вблизи нанокластеров в легированных полупроводниках.

50 nm

# Экспериментальное наблюдение сферических включений с одноосной пластической дилатацией в легированном сурьмой арсениде галлия

Кластеры сферической формы, имеющие одноосную дилатацию (пластическую дисторсию), были обнаружены при изучении микроструктуры пленок GaAs, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией при низкой температуре (200°С) (*LT*-GaAs),  $\delta$ -легированных сурьмой и отожженных при 500–600°С (более подробно технология изготовления таких пленок изложена в работах [23,24]). В отличие от хорошо известных Аs-кластеров [17,21,22] As–Sb-кластеры, зарождающиеся в  $\delta$ -слоях сурьмы, вызывали сильные локальные упругие напряжения в окружающей матрице [23,24]. На рис. 1 представлены светлопольные трансмиссионно-электронно-микроскопические (TEM) изображения *LT*-GaAs-пленки,  $\delta$ -легированной сурьмой и отожженной при 600°С.

Микроструктура кластера была определена как ромбоэдрическая, которую обычно описывают как гексагональную с осью *с* вдоль одного из направлений (111) в GaAs-матрице [21,22]. Сфероиды с большими диаметрами  $(D_{sp} > 8 \text{ nm})$  демонстрировали ярко выраженную картину Муара с полосами, перпендикулярными дифракционному вектору (рис. 1). Тщательное исследование изображений кластеров показало, что картина Муара возникает из-за двойной электронной дифракции от атомных плоскостей (210) кластеров и плоскостей (220) матрицы, которые параллельны друг другу. Период картины Муара составлял порядка 4 nm. Эта величина значительно больше, чем у Аs-кластеров в обыкновенном *LT*-GaAs [21,22]. Очевидно, что легирование сурьмой приводит к увеличению расстояний между плоскостями (210) сфероидов и приближению

обыкновенном LT-GaAs [21,22]. Очевидно, что легирование сурьмой приводит к увеличению расстояний между плоскостями (210) сфероидов и приближению их к расстояниям между плоскостями (220) матрицы. Поскольку атомы Sb больше, чем атомы As и взаимная растворимость Sb-As неограниченна, это увеличение может быть связано с Sb-сегрегацией в Аs-кластерах. Содержание сурьмы в кластерах было оценено по правилу Вегарда как 20-30 at.%, в то время как ее содержание в GaAs-матрице составляло 1 at.%. Введение сурьмы улучшает условия соответствия между плоскостями (210) включения и плоскостями (220) матрицы, но увеличивает несоответствие в перпендикулярном направлении, т.е. вдоль с-оси сфероида и вдоль направления [111] в матрице. В результате эти сфероиды обладают сильно анизотропными напряжениями, которые тем больше, чем больше размер кластера. Для расчета упругих полей таких сфероидов и была выбрана модель с одноосной пластической деформацией.

Вблизи сфероидов с диаметром, бо́льшим 7–8 nm, наблюдались дислокационные петли. Петли касались кластеров, их диаметр зависел от диаметра сопровождаемого кластера (рис. 1). Следует заметить, что такие дислокационные петли прежде никогда не наблюдались в свободном от сурьмы *LT*-GaAs [17,21,22]. Все петли лежали на плоскостях (001), т.е. вдоль  $\delta$ -слоев. Центры петель всегда были расположены в одном из двух ортогональных  $\langle 110 \rangle$  направлений по отношению к кластерам, с которыми они были ассоциированы. Никакой выраженной корреляции между двумя взаимными ориентациями петля—кластер и двумя возможными проекциями *с*-оси кластера на плоскость (001) не наблюдалось.

Ориентация вектора Бюргерса дислокационной петли была определена с помощью анализа ТЕМ-изображений при двухлучевых дифракционных условиях. Две ТЕМмикрографии на рис. 1, а и b были получены для одних и тех же петель, но для различных дифракционных векторов  $\mathbf{g}_1 = [220]$  и  $\mathbf{g}_2 = [2\overline{2}0]$ . В обоих случаях контраст, связанный с петлей, частично исчезал, когда дифракционный вектор был параллелен плоскости петли. Принимая во внимание правило пропадания контраста  $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ ,  $\mathbf{g} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{l}) = 0$  (вектор l ориентирован вдоль дислокационной линии) [26], можно заключить, что вектор Бюргерса дислокационной петли должен быть перпендикулярен обоим дифракционным векторам g<sub>1</sub> и  $\mathbf{g}_2$ , т. е. вектор Бюргерса должен быть перпендикулярен плоскости петли и направлен вдоль оси [001]. Таким образом, было выяснено, что наблюдаемые петли призматические. Использование ±g-светло-темнопольного метода изображения показало, что эти петли межузельного



**Рис. 2.** Схематическое изображение призматической дислокационной петли, ассоциированной со сферическим кластером. Направление одноосной дилатации (Oz) в As–Sb-кластере совпадает с его гексагональной осью *с* и лежит вдоль направления [111] структуры цинковой обманки GaAs. Вектор Бюргерса петли перпендикулярен ее плоскости (001).

типа. Ориентационное взаимоотношение между сфероидом и дислокационной петлей представлено на рис. 2.

Пороговый диаметр кластера для образования петель составлял 7–8 nm. Корреляция между диаметром кластера и диаметром петли была исследована в работе [23]. Отметим, что изменение температуры отжига не влияло на пороговое значение диаметра кластера и на нелинейное поведение зависимости диаметр петли (d)-диаметр кластера  $(D_{\rm sp})$ . Очевидный эффект в повышении температуры отжига заключался в увеличении размера и уменьшении плотности как кластеров, так и петель.

Поскольку корреляция размеров кластера и петли (по крайней мере для различных условий отжига) очевидна и воспроизводима, можно предположить, что кластер и дислокационная петля находятся в равновесии на каждой стадии укрупнения и что взаимодействие между кластером и петлей играет определенную роль. Само появление петли вблизи кластера является, по-видимому, способом уменьшения локализованных вблизи кластера упругих напряжений и упругой энергии системы в целом. Отметим, что петли, свободные от кластеров, в этих материалах не наблюдались.

Таким образом, можно заключить, что в легированных Sb матрицах GaAs наблюдаются наноразмерные кластеры с одноосной дилатацией вдоль направлений (111) в GaAs. Эти кластеры обладают значительными упругими полями, которые при релаксации могут приводить к образованию дислокационных петель.

## Процедура Эшелби для сферического дефекта с одноосной дилатацией

Сначала рассмотрим общий принцип задания произвольного объемного дефекта с данной пластической дисторсией (т.е. формоизменением) на примере сферического дефекта [2]. В упругом материале сделаем сферический разрез, разделим нижний и верхний берега





**Рис. 3.** Модель образования сферического включения с одноосной пластической дилатацией. *a* — процедура Эшелби образования сферического включения; *b* — процедура Вольтерра образования призматической дислокационной петли, *c* — образование сферического включения как суммы призматических петель.

разреза, пластически деформируем получившийся шар (т.е. вставим (или удалим) по выбранному нами правилу материал шара или сдвинем берега разреза). Таким образом зададим пластическую дисторсию  $\beta_{ij}^*$  внутри шара. Затем с помощью приложения поверхностных нагрузок упруго деформируем полученный из шара объект до придания ему первоначальной формы и вставим в исходную сферическую полость. Наконец, склеим берега разреза и устраним приложенные поверхностные нагрузки. В результате процедуры (которая может быть названа процедурой Эшелби [2,3]) получим сферический дефект радиуса  $R_{\rm sp}$ , обладающий упругим полем. Это поле можно рассчитать на основании заданной пластической дисторсии. Классическим примером такого дефекта является сферический центр дилатации [25].

Реализация вышеописанной процедуры для сферического включения, обладающего одноосной дилатацией, представлена схематически на рис. 3, *а*. В данном случае в результате одноосной пластической дисторсии (деформации) исходная сфера трансформируется в одноосный сфероид (эллипсоид), один из диаметров которого оказывается больше двух других. В свою очередь эти два диаметра остаются неизменными, т. е. равными диаметру исходной сферы.

Такой дефект можно смоделировать непрерывным распределением по сфере дислокационных круговых призматических петель, что позволит рассчитать пластическую дисторсию объемного дефекта и на этой основе определить его упругие поля. Проведем процедуру Вольтерра [27] (которая служит аналогом процедуры Эшелби в случае линейного дефекта) для одиночной призматической дислокационной петли (рис. 3, b) и определим ее пластическую дисторсию. В общем виде процедура образования линейного дефекта (дислокации, дисклинации, дислокации Сомилианы) выглядит так: сделаем разрез по поверхносит  $S_i$ , ограниченной линией дефекта, сместим верхний берег разреза  $S_i^+$ относительно нижнего  $S_i^-$  на величину  $[u_i]$ , добавим (извлечем) материал для устранения образовавшихся несплошностей (перекрытий). Последующая склейка берегов разреза приводит к появлению линейного дефекта с дисторсией [4,27]

$$\beta_{ij}^* = \delta_i(S)[u_j],\tag{1}$$

где  $\delta_i(S) = \int_{S_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \, dS'_i$ ;  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  — трехмерная дельта-функция; нормаль к поверхности разреза  $\mathbf{n}_i$  связана правилом правого винта с вектором линии дефекта **I**,

который задается произвольно. Пластическая дисторсия одиночной дислокационной призматической петли с бесконечно малым вектором Бюргерса  $d\mathbf{b} = -db \cdot \mathbf{e}_z$  и радиусом *a*, залегающей в плоскости с нормалью  $\mathbf{n}_z$  и координатой  $z_0$  (рис. 3, *b*), равна [4,28]

$$\beta_{zz}^*(z_0) = dbH\left(1 - \frac{r}{a}\right)\delta(z - z_0),\tag{2}$$

где индекс *zz* показывает, что пластическая дисторсия задана на площадке с нормалью  $\mathbf{n}_z$  в направлении оси Oz; функция Хевисайда  $H(1-\frac{r}{a}) = \begin{cases} 1, r \leq a, \\ 0, r > a; \end{cases}$  $\delta(z - z_0)$  — дельта-функция Дирака. Тогда, полагая, что радиус дислокационных петель, распределенных по сфере, равен  $a = \sqrt{R_{\rm sp}^2 - z_0^2}$  ( $R_{\rm sp}$  — радиус сферы), а плотность распределения  $\rho(z_0)$  в общем случае произвольная, находим пластическую дисторсию сферического дефекта (рис. 3, *c*)

$$\beta_{zz}^{*} = \int_{-R_{\rm sp}}^{R_{\rm sp}} db \rho(z_{0}) H\left(1 - \frac{r}{\sqrt{R_{\rm sp}^{2} - z_{0}^{2}}}\right) \delta(z - z_{0}) dz_{0}$$
  
$$= db \rho(z) H\left(1 - \frac{r}{\sqrt{R_{\rm sp}^{2} - z^{2}}}\right) H\left(1 - \frac{|z|}{R_{\rm sp}}\right)$$
  
$$= db \rho(z) H\left(1 - \frac{R}{R_{\rm sp}}\right), \qquad (3)$$

где *R* — радиальная сферическая координата.

Полагаем, что плотность распределения петель постоянна  $\rho(z) = \rho$ . Обозначим безразмерную величину  $db \rho$  символом  $\varepsilon^*$  и перепишем получившуюся пластическую дисторсию сфероида в следующем виде:

$$\beta_{zz}^* = \begin{cases} \varepsilon^*, R \le R_{\rm sp}, \\ 0, R > R_{\rm sp}. \end{cases}$$
(4)

Для определения физического смысла параметра  $\varepsilon^*$  выразим для простоты плотность  $\rho$  в рамках дискретной

модели как  $\rho = \frac{N}{D_{sp}}$  (число петель N на протяженности диаметра сферы  $D_{sp} = 2R_{sp}$ ). Тогда  $\varepsilon^* = \frac{dbN}{2R_{sp}} = \frac{\Delta R_{sp}}{R_{sp}}$ . Таким образом, получаем, что  $\varepsilon^*$  есть относительная пластическая деформация, т.е. линейная дилатация, заданная внутри сфероида радиуса  $R_{sp}$  и направленная вдоль оси Oz на площадке с нормалью  $\mathbf{n}_z$ . Такой дефект назовем одноосным сфероидом дилатационного типа.

## 3. Упругие поля и энергия одноосного сфероида дилатационного типа

Для определения упругих полей сфероида воспользуемся соотношениями, связывающими пластическую дисторсию дефекта с его полем полных смещений в декартовой системе координат [4],

$$u_{m}^{t}(x, y, z) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi_{l} C_{jikl} L_{mk} \hat{\beta}_{ij}^{*} \\ \times \exp\left[i(\xi_{x}x + \xi_{y}y + \xi_{z}z)\right] d\xi_{x} d\xi_{y} d\xi_{z}, \quad (5)$$

где  $L_{mk}$  и  $\hat{\beta}_{ij}^*$  — фурье-образы функции Грина среды  $G_{mk}$  и пластической дисторсии  $\beta_{ij}^*$  соответственно,  $C_{jikl}$  — упругие модули среды, (x, y, z) и  $(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$  — декартовы координаты в прямом и фурье-пространствах. Для изотропной среды  $L_{mk} = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \frac{2(1-\nu)\xi^2\delta_{mk}-\xi_m\xi_k}{2(1-\nu)G\xi^4}$ ,  $C_{jikl} = \frac{2G\nu}{1-2\nu} \delta_{ji}\delta_{kl} + G(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ , G — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\delta_{mk}$  — символ Кронекера,  $\xi^2 = \xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2$ .

Вычислим фурье-образ пластической дисторсии дефекта (4) и на его основе по известной формуле (5) определим компоненты поля полных смещений. Найдем упругие дисторсии, упругие деформации и напряжения, использовав общие соотношения теории упругости и теории дефектов. В декартовой системе координат фурье-образ пластической дисторсии имеет вид

$$\hat{\beta}_{zz}^* = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \beta_{zz}^*(x, y, z)$$
$$\times \exp\left[i(\xi_x x + \xi_y y + \xi_z z)\right] dx \, dy \, dz. \tag{6}$$

Используя соотношение (4) и переходя к сферическим координатам, получаем

$$\hat{\beta}_{zz}^{*} = \frac{\varepsilon^{*}}{(\sqrt{2\pi})^{3}} \int_{0}^{R_{sp}} R^{2} dR \int_{0}^{\pi} \sin\theta \exp\left[-iR\xi_{R}\cos\theta\cos\xi_{\theta}\right] d\theta$$
$$\times \int_{0}^{2\pi} \exp\left[-iR\xi_{R}\sin\theta\sin\xi_{\theta}(\cos\varphi\cos\xi_{\varphi}+\sin\varphi\sin\xi_{\varphi})\right] d\varphi.$$
(7)

Здесь  $(R, \theta, \phi)$  и  $(\xi_R, \xi_{\theta}, \xi_{\phi})$  — сферические координаты в прямом и обратном пространстве соответственно. Окончательно фурье-образ пластической дисторсии имеет вид

$$\hat{\beta}_{zz}^{*} = \frac{4\pi\varepsilon^{*}}{(\sqrt{2\pi})^{3}} \frac{1}{\xi_{R}^{3}} \Big[ \sin(R_{\rm sp}\xi_{R}) - R_{\rm sp}\xi_{R}\cos(R_{\rm sp}\xi_{R}) \Big], \quad (8)$$

где  $\varepsilon^*$  — относительная пластическая дилатация,  $R_{\rm sp}$  — радиус сфероида.

На основании выражений (5), (8) в рамках изотропной теории упругости находим поле полных смещений дефекта  $u_k^t$ .

1) В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$ (рис. 3, *c*) вне включения (верхний индекс (out))

$$u_r^{t(\text{out})} = \frac{\varepsilon^* R_{\text{sp}} \tilde{r}}{30(1-\nu)\tilde{R}^7} \left(3\tilde{r}^2 - 5\tilde{r}^4 + 10\nu\tilde{r}^4 + 5\tilde{r}^2\tilde{z}^2 + 20\nu\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 12\tilde{z}^2 + 10\tilde{z}^4 + 10\nu\tilde{z}^4\right),$$
$$u_{\varphi}^{t(\text{out})} = 0,$$
$$u_z^{t(\text{out})} = \frac{\varepsilon^* R_{\text{sp}}\tilde{z}}{30(1-\nu)\tilde{R}^7} \left(9\tilde{r}^2 + 5\tilde{r}^4 - 10\nu\tilde{r}^4 + 25\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 20\nu\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 6\tilde{z}^2 + 20\tilde{z}^4 - 10\nu\tilde{z}^4\right),$$
(9a)

внутри включения (верхний индекс (in))

$$u_{r}^{t(\text{in})} = \frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}} \tilde{r}}{15(1-\nu)} (5\nu - 1),$$
$$u_{\varphi}^{t(\text{in})} = 0,$$
$$u_{z}^{t(\text{in})} = \frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}} \tilde{z}}{15(1-\nu)} (7-5\nu),$$
(9b)

где  $\tilde{r} = \frac{r}{R_{\rm sp}}, \, \tilde{z} = \frac{z}{R_{\rm sp}}, \, \tilde{R} = \frac{R}{R_{\rm sp}}, \, R^2 = r^2 + z^2, \, R_{\rm sp}$  — радиус сферы.

2) В сферической системе координат  $(R, \theta, \varphi)$  $(0 \le \theta \le \pi)$  (рис. 3, c) вне включения

$$u_{R}^{t(\text{out})} = \frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}}}{60(1-\nu)\tilde{R}^{4}} \\ \times \left[ -3 + 15\tilde{R}^{2} - (9 - 25\tilde{R}^{2} + 20\nu\tilde{R}^{2})\cos 2\theta \right], \\ u_{\theta}^{t(\text{out})} = \frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}}}{30(1-\nu)\tilde{R}^{4}} \left[ -3 - 5\tilde{R}^{2} + 10\nu\tilde{R}^{2} \right] \sin 2\theta, \\ u_{\phi}^{t(\text{out})} = 0, \qquad (10a)$$

внутри включения

$$u_{R}^{t(\text{in})} = \frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}} \tilde{R}}{15(1-\nu)} \Big[ 3 + (4-5\nu) \cos 2\theta \Big],$$
$$u_{\theta}^{t(\text{in})} = -\frac{\varepsilon^{*} R_{\text{sp}} \tilde{R}}{15(1-\nu)} (4-5\nu) \sin 2\theta,$$
$$u_{\phi}^{t(\text{in})} = 0.$$
(10b)

Здесь обозначения те же, что и в формулах (9). Очевидно, что компоненты полных смещений независимо от системы координат непрерывны при переходе через границу дефекта  $R = R_{sp}$ .

Поле упругих дисторсий  $\beta_{pq}$  найдем как разность полной дисторсии и заданной пластической дисторсии (4)

$$\beta_{pq} = \beta_{pq}^t - \beta_{pq}^*, \tag{11}$$

где полная дисторсия определена как  $\beta_{pq}^{t} = \frac{\partial u_{q}^{t}}{\partial p}$  (p, q = x, y, z) в декартовой системе координат и

$$eta_{rr}^t = rac{\partial u_r^t}{\partial r}, \qquad eta_{r arphi}^t = rac{\partial u_{arphi}^t}{\partial r}, \qquad eta_{rz}^t = rac{\partial u_z^t}{\partial r},$$
 $eta_{r arphi}^t = rac{\partial u_{arphi}^t}{\partial arphi}, \qquad eta_{rz}^t = rac{\partial u_z^t}{\partial r},$ 

$$\beta_{\varphi z}^{t} = \frac{\partial u_{z}^{t}}{\partial \varphi} \frac{1}{r}, \quad \beta_{zz}^{t} = \frac{\partial u_{z}^{t}}{\partial z}, \quad \beta_{zr}^{t} = \frac{\partial u_{r}^{t}}{\partial z}, \quad \beta_{z\varphi}^{t} = \frac{\partial u_{\varphi}^{t}}{\partial z}$$

в цилиндрической системе координат. Отметим тот факт, что в случае объемного дефекта с пластической дисторсией, не зависящей от координат, не только дисторсию, но и полные смещения можно разделить на упругую и пластическую части  $u_k^t = u_k + u_k^*$  (для линейных дефектов этого сделать нельзя [27]). Симметризация тензора упругих дисторсий дает поле упругих деформаций включения  $\varepsilon_{ij}$ .

1) В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$  вне включения

$$\varepsilon_{rr}^{(\text{out})} = \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)\tilde{R}^9} \left( -12\tilde{r}^4 + 10\tilde{r}^6 - 20\nu\tilde{r}^6 - 45\tilde{r}^4\tilde{z}^2 - 30\nu\tilde{r}^4\tilde{z}^2 + 81\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 45\tilde{r}^2\tilde{z}^4 - 12\tilde{z}^4 + 10\tilde{z}^6 + 10\nu\tilde{z}^6 \right),$$

$$\begin{split} \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(\text{out})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)\tilde{R}^7} \big( 3\tilde{r}^2 - 5\tilde{r}^4 + 10\nu\tilde{r}^4 + 5\tilde{r}^2\tilde{z}^2 \\ &+ 20\nu\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 12\tilde{z}^2 + 10\tilde{z}^4 + 10\nu\tilde{z}^4 \big), \end{split}$$

$$\varepsilon_{zz}^{(\text{out})} = \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)\tilde{R}^9} (9\tilde{r}^4 + 5\tilde{r}^6 - 10\nu\tilde{r}^6 + 45\tilde{r}^4\tilde{z}^2 - 72\tilde{r}^2\tilde{z}^2 + 30\nu\tilde{r}^2\tilde{z}^4 + 24\tilde{z}^4 - 40\tilde{z}^6 + 20\nu\tilde{z}^6),$$

$$\varepsilon_{rz}^{(\text{out})} = \frac{\varepsilon^*}{2(1-\nu)\tilde{R}^9} \,\tilde{r}\tilde{z} \left(-3\tilde{r}^2 + \tilde{r}^4 - 3\tilde{r}^2\tilde{z}^2 + 4\tilde{z}^2 - 4\tilde{z}^4\right),$$

$$\varepsilon_{r\varphi}^{(\text{out})} = \varepsilon_{z\varphi}^{(\text{out})} = 0,$$
 (12a)

внутри включения

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr}^{(in)} &= \frac{\varepsilon^*}{15(1-\nu)} (5\nu - 1), \\ \varepsilon_{\varphi\varphi\varphi}^{(in)} &= \frac{\varepsilon^*}{15(1-\nu)} (5\nu - 1), \\ \varepsilon_{zz}^{(in)} &= \frac{2\varepsilon^*}{15(1-\nu)} (5\nu - 4), \\ \varepsilon_{rz}^{(in)} &= \varepsilon_{r\varphi}^{(in)} = \varepsilon_{z\varphi}^{(in)} = 0. \end{aligned}$$
(12b)

2) В сферической системе координат  $(R, \theta, \varphi)$  вне включения

$$\begin{split} \varepsilon_{RR}^{(\text{out})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)\tilde{R}^5} \left[ 6 - 15\tilde{R}^2 + (18 - 25\tilde{R}^2 + 20\nu\tilde{R}^2)\cos 2\theta \right], \\ \varepsilon_{\theta\theta}^{(\text{out})} &= \frac{\varepsilon^*}{60(1-\nu)\tilde{R}^5} \left[ -3 + 15\tilde{R}^2 - (21 - 5\tilde{R}^2 - 20\nu\tilde{R}^2)\cos 2\theta \right], \\ \varepsilon_{\varphi\phi}^{(\text{out})} &= \frac{\varepsilon^*}{60(1-\nu)\tilde{R}^5} \left[ -9 + 5\tilde{R}^2 + 20\nu\tilde{R}^2 + 15(-1+\tilde{R}^2)\cos 2\theta \right], \\ \varepsilon_{R\theta}^{(\text{out})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)\tilde{R}^5} \left( 12 - 5\tilde{R}^2 - 5\nu\tilde{R}^2 \right) \sin 2\theta, \\ \varepsilon_{R\phi}^{(\text{out})} &= \varepsilon_{\theta\phi}^{(\text{out})} = 0, \end{split}$$
(13a)

внутри включения

$$\begin{split} \varepsilon_{RR}^{(\mathrm{in})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)} \left[ -9 + 15\nu - (7-5\nu)\cos 2\theta \right], \\ \varepsilon_{\theta\theta}^{(\mathrm{in})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)} \left[ -9 + 15\nu + (7-5\nu)\cos 2\theta \right], \\ \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(\mathrm{in})} &= \frac{\varepsilon^*}{15(1-\nu)} \left( 5\nu - 1 \right), \\ \varepsilon_{R\theta}^{(\mathrm{in})} &= \frac{\varepsilon^*}{30(1-\nu)} \left( 7 - 5\nu \right)\sin 2\theta, \\ \varepsilon_{R\varphi}^{(\mathrm{in})} &= \varepsilon_{\theta\varphi}^{(\mathrm{in})} = 0. \end{split}$$
(13b)

Поле упругих напряжений в рамках изотропной теории упругости имеет следующий вид.

1) В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$  вне включения

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^{(\text{out})} &= \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)\tilde{R}^9} \left( -12\tilde{r}^4 + 10\tilde{r}^6 - 10\nu\tilde{r}^6 \right. \\ &+ 81\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 45\tilde{r}^4\tilde{z}^2 - 30\nu\tilde{r}^4\tilde{z}^2 - 12\tilde{z}^4 \\ &+ 10\tilde{z}^6 - 10\nu\tilde{z}^6 - 45\tilde{z}^4\tilde{r}^2 - 30\nu\tilde{z}^4\tilde{r}^2 \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi\varphi}^{(\text{out})} &= \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)\tilde{R}^7} \big( 3\tilde{r}^2 - 5\tilde{r}^4 + 20\nu\tilde{r}^4 + 5\tilde{r}^2\tilde{z}^2 \\ &+ 10\nu\tilde{r}^2\tilde{z}^2 - 12\tilde{z}^2 + 10\tilde{z}^4 - 10\nu\tilde{z}^4 \big), \\ \sigma_{zz}^{(\text{out})} &= \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)\tilde{R}^9} \big( 9\tilde{r}^4 + 5\tilde{r}^6 - 72\tilde{r}^2\tilde{z}^2 \\ &+ 45\tilde{r}^4\tilde{z}^2 + 24\tilde{z}^4 - 40\tilde{z}^6 \big), \\ \sigma_{rz}^{(\text{out})} &= \frac{G\varepsilon^*}{5(1-\nu)\tilde{R}^9} \tilde{r}\tilde{z} \big( -3\tilde{r}^2 + \tilde{r}^4 - 3\tilde{r}^2\tilde{z}^2 + 4\tilde{z}^2 - 4\tilde{z}^4 \big), \\ \sigma_{r\varphi}^{(\text{out})} &= \sigma_{z\varphi}^{(\text{out})} = 0, \end{aligned}$$
(14a)

внутри включения

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^{(in)} &= -\frac{2G\varepsilon^{*}}{15(1-\nu)} (5\nu+1), \\ \sigma_{\varphi\varphi}^{(in)} &= -\frac{2G\varepsilon^{*}}{15(1-\nu)} (5\nu+1), \\ \sigma_{zz}^{(in)} &= -\frac{16G\varepsilon^{*}}{15(1-\nu)}, \\ \sigma_{rz}^{(in)} &= \sigma_{r\varphi}^{(in)} = \sigma_{z\varphi}^{(in)} = 0. \end{aligned}$$
(14b)

2) В сферической системе координат  $(R, \theta, \varphi)$  вне включения

$$\sigma_{RR}^{(\text{out})} = \frac{G\varepsilon^{*}}{15(1-\nu)\tilde{R}^{5}} \Big[ 6 - 15\tilde{R}^{2} - 5\nu\tilde{R}^{2} \\ + (18 - 25\tilde{R}^{2} + 5\nu\tilde{R}^{2})\cos 2\theta \Big], \\ \sigma_{\theta\theta}^{(\text{out})} = \frac{G\varepsilon^{*}}{30(1-\nu)\tilde{R}^{5}} \Big[ -3 + 15\tilde{R}^{2} - 10\nu\tilde{R}^{2} \\ - (21 - 5\tilde{R}^{2} + 10\nu\tilde{R}^{2})\cos 2\theta \Big], \\ \sigma_{\varphi\phi}^{(\text{out})} = \frac{G\varepsilon^{*}}{30(1-\nu)\tilde{R}^{5}} \Big[ -9 + 5\tilde{R}^{2} + 10\nu\tilde{R}^{2} \\ - 15(1-\tilde{R}^{2} + 2\nu\tilde{R}^{2})\cos 2\theta \Big], \\ \sigma_{R\theta}^{(\text{out})} = \frac{G\varepsilon^{*}}{15(1-\nu)\tilde{R}^{5}} \Big[ 12 - 5\tilde{R}^{2} - 5\nu\tilde{R}^{2} \Big] \sin 2\theta, \\ \sigma_{R\phi}^{(\text{out})} = \sigma_{\theta\phi}^{(\text{out})} = 0, \quad (15a)$$

внутри включения

$$\sigma_{RR}^{(in)} = \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)} \left[ -9 - 5\nu - (7 - 5\nu)\cos 2\theta \right],$$
  

$$\sigma_{\theta\theta}^{(in)} = \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)} \left[ -9 - 5\nu + (7 - 5\nu)\cos 2\theta \right],$$
  

$$\sigma_{\varphi\phi}^{(in)} = -\frac{2G\varepsilon^*}{15(1-\nu)} (5\nu + 1),$$
  

$$\sigma_{R\theta}^{(in)} = \frac{G\varepsilon^*}{15(1-\nu)} (7 - 5\nu)\sin 2\theta,$$
  

$$\sigma_{R\phi}^{(in)} = \sigma_{\theta\phi}^{(in)} = 0.$$
 (15b)



**Рис. 4.** Карты изолиний напряжения  $\sigma_{RR}(a)$  и  $\sigma_{\theta\theta}(b)$  вблизи сфероида с одноосной пластической дисторсией. Напряжения выражены в единицах  $\varepsilon^*G$ :  $\varepsilon^*$  — относительная одноосная дилатация, G — модуль сдвига.  $R_{\rm sp}$  — радиус сферы. Коэффициент Пуассона  $\nu = 0.3$ .

Обозначения в (14), (15) те же, что в (9), (10). Отметим, что приведенные выше поля одноосного сфероида удовлетворяют условиям равновесия и нормальные к поверхности сфероида компоненты напряжений  $\sigma_{RR}$ ,  $\sigma_{R\theta}$  непрерывны:

$$\sigma_{RR}^{(\text{out})}\Big|_{R=R_{\text{sp}}} = \sigma_{RR}^{(\text{in})}\Big|_{R=R_{\text{sp}}}, \qquad \sigma_{R\theta}^{(\text{out})}\Big|_{R=R_{\text{sp}}} = \sigma_{R\theta}^{(\text{in})}\Big|_{R=R_{\text{sp}}}.$$

Простым суммированием полей трех одноосных сфероидов с пластическими дисторсиями  $\beta_{xx}^*$ ,  $\beta_{yy}^*$ ,  $\beta_{zz}^*$  получим поле трехосного сфероида или сферического центра дилатации, полностью совпадающее с известными формулами (см., например, [25]):

поле полных смещений

$$u_{R}^{t(\text{out})} = \frac{\varepsilon^{*}(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{R_{\text{sp}}}{\tilde{R}^{2}},$$
$$u_{R}^{t(\text{in})} = \frac{\varepsilon^{*}(1+\nu)}{3(1-\nu)} R_{\text{sp}}\tilde{R},$$
(16)

поле упругих смещений сфероида

$$u_{R}^{(\text{out})} = \frac{\varepsilon^{*}(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{R_{\text{sp}}}{\tilde{R}^{2}},$$
$$u_{R}^{(\text{in})} = -\frac{2\varepsilon^{*}(1-2\nu)}{3(1-\nu)} R_{\text{sp}}\tilde{R},$$
(17)

поле упругих деформаций

$$\varepsilon_{RR}^{(\text{out})} = -\frac{2\varepsilon^*(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{1}{\tilde{R}^3},$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(\text{out})} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(\text{out})} = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{1}{\tilde{R}^3},$$

$$\varepsilon_{RR}^{(\text{in})} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(\text{in})} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(\text{in})} = -\frac{2\varepsilon^*(1-2\nu)}{3(1-\nu)},$$
(18)

поле упругих напряжений

 $\sigma$ 

$$\sigma_{RR}^{(\text{out})} = -\frac{4G\varepsilon^*(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{1}{\tilde{R}^3},$$
  
$$\sigma_{\varphi\varphi}^{(\text{out})} = \sigma_{\theta\theta}^{(\text{out})} = \frac{2G\varepsilon^*(1+\nu)}{3(1-\nu)} \frac{1}{\tilde{R}^3},$$
  
$$\sigma_{RR}^{(\text{in})} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(\text{in})} = \sigma_{\theta\theta}^{(\text{in})} = -\frac{4G\varepsilon^*(1+\nu)}{3(1-\nu)}.$$
 (19)

На рис. 4 приведены карты распределения компонент  $\sigma_{RR}$  и  $\sigma_{\theta\theta}$  напряжений одноосного сфероида в плоскости, проходящей через ось  $O_z$  (очевидно, в силу симметрии задачи упругие поля в плоскостях, проходящих через ось  $O_z$ , одинаковы). Напряжения заданы в единицах  $G\varepsilon^*$ , коэффициент Пуассона  $\nu = 0.3$ . Очевидно, что распределение напряжений одноосного сфероида имеет характерные особенности: наличие областей напряжений различных знаков вне сфероида; зависимость величины напряжений от угла наклона к оси пластической дилатации  $O_z$  внутри и вне сфероида; центр сфероида представляет собой точку неопределенности напряжений.

Представляет интерес сравнить собственные упругие энергии одноосного и трехосного сфероидов. Используя выражение для энергии объемного дефекта  $E = -\frac{1}{2} \int\limits_{V_{def}} \beta_{ij}^* \sigma_{ij}^{(in)} dV' (V_{def} - - объем дефекта) [4], находим упругую энергию одноосного (индекс I)$ 

$$E^{\rm I} = \frac{32\pi}{45(1-\nu)} \, G\varepsilon^{*2} R_{\rm sp}^3 \tag{20}$$

и трехосного (индекс III) сфероида

$$E^{\rm III} = \frac{8\pi (1+\nu)}{3(1-\nu)} G \varepsilon^{*2} R_{\rm sp}^3.$$
(21)

Оценка энергий при  $\nu = 0.3$  дает  $E^{\rm I} = 3.19G\varepsilon^{*2}R_{\rm sp}^3$  и  $E^{\rm III} = 15.56G\varepsilon^{*2}R_{\rm sp}^3$ . При одинаковых заданных параметрах упругая энергия включения с одноосной дилатацией меньше, чем энергия включения с трехосной (всесторонней дилатацией), однако сопоставима с ней.

### Релаксация упругих полей напряженного сфероида

Полученные результаты для упругих полей и энергий для включений с одноосной дилатацией могут быть использованы при анализе релаксационных процессов, имеющих место вблизи напряженных кластеров в легированных полупроводниках [23]. Далее кратко обсудим модель зарождения дислокационной петли вблизи кластера в геометрии, показанной на рис. 2. В данном случае координатная ось  $O_z$  лежит вдоль гексагональной оси c (т.е. в направлении одноосной дилатации).

Упругая энергия E системы сфероид-петля включает следующие компоненты: собственную упругую энергию кластера  $E^{I}$  (20), собственную энергию петли  $E_{l}$  и энергию их взаимодействия W

$$E = E^{\mathrm{I}} + E_l + W. \tag{22}$$

Собственная энергия призматической петли равна [29]

$$E_l = \frac{Gb^2d}{4(1-\nu)} \left( \ln \frac{4d}{R_{\text{core}}} - 2 \right), \qquad (23)$$

где *b* — величина вектора Бюргерса, *d* и *R*<sub>соге</sub> — диаметр и радиус ядра петли.

Энергия взаимодействия может быть найдена как интеграл по площади дислокационной петли S<sub>1</sub>

$$W = -b \int_{S_l} \sigma_{bb}(r, \varphi, z) \, dS, \qquad (24)$$

где  $\sigma_{bb}$  — напряжения, действующие в плоскости петли в направлении нормали к ней. Напряжение  $\sigma_{bb}$  имеет сложную пространственную зависимость, в него вносят вклад практически все компоненты, задаваемые соотношениями (15а). Однако для качественного анализа можем рассмотреть только напряжение  $\sigma_{\theta\theta}^{(out)}$  (рис. 4, *b*), которое совпадает с  $\sigma_{bb}$  при условии  $\varphi = 0$ . Очевидно, что вне включения имеется область с растягивающими напряжениями  $\sigma_{\theta\theta}^{(out)} > 0$ , в которой энергетически выгодно образование призматической дислокационной петли. В частности, эта область захватывает и плоскость (001), в которой залегают дислокационные петли, наблюдаемые экспериментально (рис. 1 и 2).

Рассмотрим изменение энергии системы при введении петли  $\Delta E = E_l + W$  при неизменной энергии кластера  $E^1$  = const. Анализ показывает [23], что в том случае, когда призматическая дислокационная петля касается наклоненного включения с одномерной дисторсией, существует критическая величина диаметра петли, ниже которой уменьшение энергии очевидно. Критический диаметр определяется из условий  $\Delta E(d_c) = 0$ . Другая важная величина — оптимальный диаметр дислокационной петли  $d_0$  — может быть найдена из условия максимума уменьшения энергии  $\Delta E(d_0) = \Delta E_{\min} < 0.3$ ависимости  $d_c$  и  $d_0$  от диаметра кластера  $D_{\rm sp}$  согласуются с экспериментальными данными для следующих модельных параметров:  $b = \frac{1}{2} a_{\text{GaAs}} = 0.28 \text{ nm}, v = 0.3,$  $\varepsilon^* = 0.5$  [23]. Очевидно, что найденное значение одноосной дилатации є<sup>\*</sup> является явно завышенным. Для значений  $\varepsilon^* \leq 0.05$  энергия взаимодействия W не играет решающей роли в энергетическом балансе системы сфероид-петля. В этом случае необходимо учитывать изменение собственной энергии кластера при зарождении дислокационной петли. Мы рассмотрим этот вопрос в отдельной публикации.

В любом случае выигрыш в энергии является необходимым условием для зарождения внешних дислокационных петель, однако этот процесс происходит только благодаря сильному пересыщению внедренными атомами мышьяка. Экстремально высокая концентрация их в  $\delta$ -легированных Sb пленках *LT*-GaAs недавно была подтверждена на основе анализа повышенной смешиваемости Sb–As [30]. Эти точечные дефекты также важны для высокой скорости увеличения размера и уменьшения плотности As–Sb-кластеров. Таким образом, As-внедрения, так же как и As-замещения и Ga-вакансии, играют ключевую роль во всех структурных превращениях *LT*-GaAs. Скорость роста больших As–Sb-кластеров может дополнительно возрастать за счет путей быстрой диффузии вдоль дислокационных линий.

Изучение дислокационных петель, образованных на включениях фосфора в кристаллах Ge [31,32], выявило эмпирическую взаимосвязь между диаметрами кластера  $(D_{cl})$  и петли  $(d_l)$ , которая была основана на законе сохранения вещества в системе кластер-петля

$$d_l = \sqrt{\frac{2}{3} \frac{D_{\rm cl}^3}{b} \frac{\Delta V}{V}},\tag{25}$$

где  $\frac{\Delta V}{V}$  — относительное изменение атомных объемов во включении и матрице, **b** — вектор Бюргерса петли.

Очевидно, что соотношение, подобное (25), необходимо использовать как дополнительное при анализе энергетического баланса в системе сфероид-петля.

Еше одним каналом релаксации упругой энергии в системе кластеров с одноосной дилатацией может служить их ориентационное упорядочение, когда реализуется корреляция в ориентации *z*-осей кластеров. Оценка энергии взаимодействия двух кластеров показывает, однако, что такое взаимодействие существенно, если расстояние между кластерами не превышает их среднего диаметра. На практике кластеры всегда располагаются на большем расстоянии, что позволяет пренебречь их взаимодействием.

Таким образом, в настоящей работе экспериментально показано, что наноразмерные кластеры в LT-GaAs, легированном сурьмой, обладают существенными упругими полями. Эти кластеры содержат до 30 at.% Sb и обладают дилатацией вдоль оси с трансформированной гексагональной решетки. Адекватной моделью для таких кластеров служит включение с одноосной дилатацией. Построена модель включения с одноосной дилатацией и найдена пластическая дисторсия такого включения. Аналитически вычислены смещения, упругие деформации и напряжения как внутри, так и вне включения с одноосной дилатацией. Приведены карты упругих напряжений вблизи включения. Найдена упругая энергия включения с одноосной дилатацией, которая оказывается сопоставимой с энергией включения с трехосной дилатацией. Рассмотрены релаксационные процессы, связанные с зарождением дислокационных петель вблизи напряженных кластеров (включений) в легированных полупроводниках.

Проведенное исследование позволяет сформулировать следующие выводы.

1) Упругие поля и энергии включения с одноосной дилатацией в изотропной среде могут быть определены в замкнутой аналитической форме, включающей только элементарные функции.

2) В релаксации запасенной упругой энергии включения путем образования сопутствующей призматической дислокационной петли важную роль должно играть изменение собственной энергии включения.

3) Энергия взаимодействия упругих включений с одноосной дилатацией друг с другом не может служить причиной их упорядочения для наблюдаемых экспериментально (например, в *LT*-GaAs) расстояний между наноразмерными кластерами.

#### Список литературы

- [1] E. Kroner. Acta Mater. 2, 301 (1954).
- [2] J.D. Eshelby. Proc. Roy. Soc. Lond. A221, 376 (1957).
- [3] J.D. Eshelby. Proc. Roy. Soc. Lond. A252, 561 (1959).
- [4] T. Mura. Micromechanics of defects in solids. Martinus Nijhoff, Boston (1987). 587 p.
- [5] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsev. MRS Bull. 23, 31 (1998).

- [6] J.H. Davis. J. Appl. Phys. 84, 1358 (1998).
- [7] A.D. Andreev, J.R. Downes, D.A. Faux, E.P.O'Reilly. J. Appl. Phys. 86, 297 (1999).
- [8] G.S. Pearson, D.A. Faux. J. Appl. Phys. 88, 730 (2000).
- [9] A.E. Romanov, G.E. Beltz, W.T. Fisher, P.M. Petroff, J.S. Speck. J. Appl. Phys. 89, 4523 (2001).
- [10] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. Phys. Rev. B52, 11969 (1995).
- [11] J.A. Barker, E.P.O'Reilly. Phys. Rev. B61, 13840 (2000).
- [12] О.В. Константинов, Е.Ю. Котельников, А.В. Матвеенцев, А.Е. Романов. Письма в ЖТФ **27**, *16*, 40 (2001).
- [13] J. Tersoff, C. Teichert, M.G. Lagally. Phys. Rev. Lett. 76, 1675 (1996).
- [14] V.A. Shchukin, D. Bimberg, V.G. Malyshkin, N.N. Ledentsov. Phys. Rev. B57, 12 262 (1998).
- [15] A.E. Romanov, P.M. Petroff, J.S. Speck. Appl. Phys. Lett. 57, 1531 (1990).
- [16] M.R. Melloch, N. Otsuka, J.M. Woodall, A.C. Warren, J.L. Freeouf. Appl. Phys. Lett. 57, 1531 (1990).
- [17] Н.А. Берт, А.И. Вейнгер, М.Д. Вилисова, С.И. Голощапов, И.В. Ивонин, С.В. Козырев, А.Е. Куницын, Л.Г. Лаврентьева, Д.И. Лубышев, В.В. Преображенский, Б.Р. Семягин, В.В. Третьяков, В.В. Чалдышев, М.П. Якубеня. ФТТ 35, 2609 (1993).
- [18] D.D. Nolte. J. Appl. Phys. 85, 6259 (1999).
- [19] V.V. Chaldyshev. Mater. Sci. Eng. B. To be published (2002).
- [20] X. Liu, A. Prasad, J. Nishio, E.R. Weber, Z. Liliental-Weber, W. Walukiewicz. Appl. Phys. Lett. 67, 279 (1995).
- [21] Z. Liliental-Weber, A. Claverie, J. Washburn, F.W. Smith, A.R. Calawa. Appl. Phys. Lett. A: Solids Surf. 53, 141 (1991).
- [22] Н.А. Берт, В.В. Чалдышев. ФТП **30**, 1889 (1996).
- [23] V.V. Chaldyshev, N.A. Bert, A.E. Romanov, A.A. Suvorova, A.L. Kolesnikova, V.V. Preobrazhenskii, M.A. Putyato, B.R. Semyagin, P. Werner, N.D. Zakharov, A. Claverie. Appl. Phys. Lett. 80, 377 (2002).
- [24] N.A. Bert, V.V. Chaldyshev, A.A. Suvorova, V.V. Preobrazhenskii, M.A. Putyato, B.R. Semyagin, P. Werner. Appl. Phys. Lett. 74, 1588 (1999).
- [25] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985). 352 с.
- [26] S. Nakahara, S.N. Chu, R.A. Stall. Phil. Mag. A53, 403 (1986).
- [27] Р. де Вит. Континуальная теория дисклинаций. Мир, М. (1977). 208 с.
- [28] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, № 1019. Л. (1986). 62 с.
- [29] J. Dundurs, N.J. Salamon. Phys. Stat. Sol. (b) 50, 125 (1972).
- [30] V.V. Chaldyshev, N.A. Bert, Yu.G. Musikhin, A.A. Suvorova, V.V. Preobrazhenskii, M.A. Putyato, B.R. Semyagin, P. Werner, U. Gosele. Appl. Phys. Lett. 79, 1294 (2001).
- [31] Н.Д. Захаров, В.Н. Рожанский, Р.Л. Корчажкина. ФТТ 16, 1444 (1974).
- [32] Н.Д. Захаров, В. Нойман, В.Н. Рожанский. ФТТ 16, 2775 (1974).