

08,07

## Упругое взаимодействие точечных дефектов в кубических и гексагональных кристаллах

© С.А. Кукушкин<sup>1-4</sup>, А.В. Осипов<sup>1-3</sup>, Р.С. Телятник<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский академический университет,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет  
информационных технологий, механики и оптики,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: statphys@ya.ru

(Поступила в Редакцию 18 августа 2015 г.)

В окончательной редакции 24 сентября 2015 г.)

Исследовано упругое взаимодействие двух точечных дефектов в кубических и гексагональных кристаллах. На основе точного выражения тензорной функции Грина упругого поля, полученного Лифшицем–Розенцвейгом для гексагональной среды, выведена точная формула для энергии взаимодействия пары точечных дефектов. Решение представлено в зависимости от угла их взаимного расположения на примере таких полупроводников, как III-нитриды и  $\alpha$ -SiC. Для кубической среды найдено решение на основе исправленного Остапчуком тензора Грина Лифшица–Розенцвейга, полученного в приближении слабой анизотропии. Доказано, что расчет энергии взаимодействия по оригинальному тензору Грина Лифшица–Розенцвейга приводит к противоположному знаку энергии. На примере кристалла кремния приближенные решения сравниваются с численным решением, которое представлено в форме аппроксимации рядом сферических функций. Масштаб применимости континуального подхода оценивается из квантово-химического расчета решеточной функции Грина.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-22-00018) с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН.

### 1. Введение

Хорошо известно, что образующиеся в процессе синтеза кристаллов различного рода примеси и дефекты оказывают существенное влияние на прочностные, структурные, магнитные, электрические и другие свойства материалов. При облучении материалов, в частности полупроводников, возникают не только межузельные атомы и вакансии, но комплексы дефектов [1], поскольку дефекты могут взаимодействовать между собой. Дефекты могут взаимодействовать не только друг с другом, но и с примесями, образовавшимися в процессе синтеза кристалла, образуя устойчивые комплексы. Комплексы дефектов могут проявлять так называемое метастабильное и бистабильное поведение [2]. Например, бистабильные дефекты могут переходить из одного состояния в другое, обратимо изменяя свою пространственную и электронную структуру, что может быть использовано при изготовлении различного рода электронных приборов.

Большинство дефектов, оказывающих влияние на электрические свойства кристаллов, образуются из простейших точечных дефектов, а именно — собственных точечных дефектов кристаллической структуры (вакансий и межузельных атомов) или изолированных атомов примеси. Взаимодействие дефектов может существенно

влиять на оптические характеристики кристаллов, что будет проявляться в появлении дополнительных спектральных полос поглощения. Влияет взаимодействие дефектов и на их диффузию. Энергия активации диффузии взаимодействующих дефектов может быть совершенно иной, чем энергия активации одиночных дефектов. Выстраиваясь вдоль определенных кристаллографических направлений, дефекты могут образовывать одномерные цепочки. Данные цепочки могут проявить коллективное взаимодействие, приводя к ускоренному кооперативному перемещению целой группы атомов [3]. Так, в работе [4] была обнаружена анизотропия поверхностной диффузии атомов азота (N) по поверхности (100) Fe, связанная с коллективным воздействием соседних атомов N на диффундирующий атом азота.

Отметим, что атомы водорода являются весьма нежелательной примесью в металлах, поскольку приводят к их охрупчиванию, а также могут проявлять коллективное поведение при диффузии. Причиной подобного коллективного поведения могут быть разного рода взаимодействия. В данной работе мы рассмотрим упругое взаимодействие точечных дефектов в кубических и гексагональных кристаллах, считая, что отсутствуют не опосредованные упругим откликом решетки силы, например, прямое кулоновское взаимодействие между заряженными дефектами.

## 2. Энергия взаимодействия точечных дефектов в выражении через тензор Грина

Для оценки энергии взаимодействия точечных дефектов, то есть таких дефектов, расстояние между которыми много больше их размеров, мы исходим из континуальной теории дефектов в кристаллах [5–8]. Энергию взаимодействия двух точечных дефектов в твердом теле можно представить через взаимодействие дефекта с полем упругих напряжений, создаваемых другим дефектом. Точечный дефект можно рассматривать как малое сферическое включение в полость неограниченной среды, что впервые было предложено Биттером [9]. При этом разность естественных объемов включения и полости моделирует гидростатическое напряжение, определяемое модулем объемного сжатия  $K$  и величиной изменения объема кристалла  $\Delta V$ , вызванного внедрением дефекта. В анизотропном случае поле объемных сил, вызываемых точечным дефектом, находящимся в начале координат, можно описать так называемым тензором дилатации  $\Omega_{ik}$ , шпур которого равен  $\Omega_{ii} = 3\Delta V$ , и градиентом дельта-функции (суммирование по повторяющимся индексам) [10]

$$f_i(\mathbf{r}) = -K\Omega_{ik}\nabla_k\delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Для сферически симметричного поля сил  $\Omega_{ik} = \Delta V \delta_{ik}$ , где  $\delta_{ik}$  — символ Кронекера. В этом смысле часто употребляется термин „сферический дефект“, который, однако, не является тождественным для сферического включения в анизотропную среду.

Поле смещений, порождаемое распределением сил (1), можно найти на основе функции Грина, то есть фундаментального решения упругой задачи для точечной силы (запятая, разделяющая индексы, обозначает дифференцирование)

$$u_i(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f_j(\mathbf{r}')d(\mathbf{r}') = -K\Omega_{jk}G_{ij,k}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Тензор Грина  $G_{ij}(\mathbf{r})$  представляет собой  $i$ -компоненту смещения в точке  $\mathbf{r}$ , вызванного единичной точечной силой, приложенной в начале координат и действующей в  $j$ -направлении.

Тензор малой деформации находится согласно определению

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right). \quad (3)$$

Пусть упругая среда, описываемая законом Гука  $\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}$ , включает в себя локальную упругую неоднородность в точке  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  нахождения дефекта [10]

$$c'_{ijkl} = c_{ijkl} + \Delta_{ijkl}v_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4)$$

Здесь  $\Delta_{ijkl}$  — тензорная характеристика жесткости дефекта в сравнении с жесткостью среды, а  $v_0$  — характерный объем точечного дефекта (например, объем приходящийся на атом в кристалле). Тогда энергия

взаимодействия дефекта с упругим полем другого дефекта, располагающегося в начале координат, принимает вид [10]

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}) = -K\Omega_{ij}^I\varepsilon_{ij}^{\text{II}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}v_0\Delta_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{\text{II}}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{\text{II}}(\mathbf{r}) \\ \approx -K\Omega_{ij}^I\varepsilon_{ij}^{\text{II}}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Обычно в связи с малостью  $v_0$  и малостью деформаций на дальних расстояниях упругой неоднородностью пренебрегают, однако для жестких дефектов на близких расстояниях она может служить противовесом (с максимальной силой, задаваемой диффузионным барьером для атомных дефектов), который определяет равновесное расстояние между взаимодействующими дефектами и частоту их колебаний.

Для дефектов со сферическими дилатациями  $\Omega_{ik}^I = \Delta V^I\delta_{ik}$  и  $\Omega_{ik}^{\text{II}} = \Delta V^{\text{II}}\delta_{ik}$  из формул (2), (3), (5) получаем в итоге следующее выражение для энергии взаимодействия в бесконечной среде

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}) = K^2\Delta V^I\Delta V^{\text{II}}G_{ij,ij}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Если среда, в которой находятся точечные дефекты, изотропна и бесконечна, то энергия их взаимодействия равна нулю, что связано с образованием чисто сдвигового упругого поля, при котором  $\varepsilon_{ii} = 0$ . Взаимодействие центров дилатации в изотропной среде возникает вблизи поверхности ограниченного тела.

Впервые функция Грина для бесконечной изотропной среды была найдена в явном виде Томпсоном (лордом Кельвином) [11] (см. также задачу к параграфу 8 в книге [12]). Для изотропного полупространства тензор Грина был найден Миндлиным [13]. Из решения Миндлина вытекают следующие выводы. Если линия, соединяющая вакансию с  $\Delta V^I < 0$  и атом примеси с  $\Delta V^{\text{II}} > 0$ , перпендикулярна поверхности тела, то вакансия и атом отталкиваются друг от друга. Если вакансия и атом примеси лежат вдоль поверхности тела, то они притягиваются друг к другу. По аналогии с задачей Миндлина были рассчитаны функции Грина для многослойных систем [14], что востребовано, например, в механике тонких пленок.

Помимо изотропного случая получить точное аналитическое решение для функции Грина методом Фредгольма [15] возможно лишь для материалов гексагональной (трансверсально-изотропной) симметрии. Это решение впервые удалось найти Лифшицу и Розенцвейгу [16] для определенного диапазона соотношений между упругими константами. В дальнейшем, в работе [17] были получены функции Грина для остальных соотношений между упругими константами гексагональных кристаллов. Независимо от Лифшица–Розенцвейга, но на несколько лет позже, Крёнер [18] также получил функцию Грина для гексагональных кристаллов с недочетом во внешнем множителе [19]. Удобный подход развили Пан и Чоу [20], применив его для выражения

тензора Грина двух гексагональных полупространств, граничащих вдоль базальной плоскости изотропии [21]. Однако, несмотря на то что результат Пан–Чоу часто упоминается (в монографии Муры [7] приведен с опечаткой в коэффициенте  $D$  в формуле (5.38)), нетрудно заметить, что их решение для компонент смещений, вызванных силой, параллельной плоскости изотропии ( $x, y$ ), неверно и расходится на отрицательной оси  $z$ , поскольку выражения (27) из статьи [20] не удовлетворяют условиям (25) из той же статьи.

Для кристаллов, обладающих кубической или другой симметрией, в настоящий момент получены лишь приближенные решения. Эти решения обычно ищутся либо в форме разложения по сферическим функциям  $Y_{lm}$  (с четными по  $l$  компонентами), что впервые предложил Бюргерс [22], либо в форме разложения по малому параметру анизотропии по теории возмущений, что впервые для кубического случая также осуществили Лифшиц и Розенцвейг [16]. Однако, как недавно было показано Остапчуком [23], Лифшиц и Розенцвейг упустили при выводе некоторые члены разложения.

Влияние конечности размеров кристалла или границ раздела в кристалле можно учесть, например, используя разложение по векторным сферическим функциям, включающим помимо угловых еще и радиальные компоненты. Эти вычисления для слабоанизотропного кубического кристалла со сферической поверхностью выполнили Хирсекорн и Симс [24].

На малых расстояниях, когда приближение сплошной среды не годится и упругая неоднородность велика, из межатомного взаимодействия находят решеточные функции Грина, то есть смещения атомов в узлах решетки. Решеточные функции Грина являются статическим случаем фононных функций Грина [25]. Расчет локальной неоднородности по теории возмущений при этом приобретает вид уравнения Дайсона в теории поля. На рис. 1 показано различие непрерывной и решеточной функции Грина, полученной из квантово-химического (*ab initio*) расчета в пакете Abinit [26] при малом смещении (на 3% параметра решетки) атома Al в гексагональном кристалле AlN типа вюрцита. Расчет проводился методом DFT LDA с использованием псевдопотенциалов Трулье–Мартинса в суперячейке из 300 атомов. Как видно из рисунка, непрерывное решение на примере компоненты  $G_{22}$  оказывается завышенным на расстоянии меньшем  $7 \text{ \AA}$  (порядка двух параметров решетки). Для больших смещений атомов вокруг дефектов решетки непрерывный предел наступает гораздо дальше.

Величины  $\Delta V^I$  и  $\Delta V^{II}$ , входящие в выражение (6), могут быть связаны с разностью объемов включения и полости [5,6] или рассчитаны методом конечных элементов, если эти объемы известны (например, в термической задаче для включений с известным тепловым расширением). Для точечных дефектов атомного масштаба для расчета  $\Delta V$  используют вычислительные методы молекулярного моделирования (квантово-химические, полумэмпирические) или находят полуаналитически из ре-

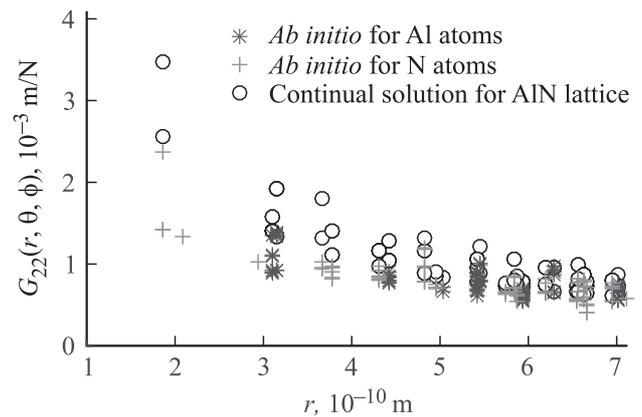


Рис. 1. Различие на малых расстояниях решеточной функции Грина, рассчитанной *ab initio*, от непрерывной функции на примере гексагонального кристалла AlN.

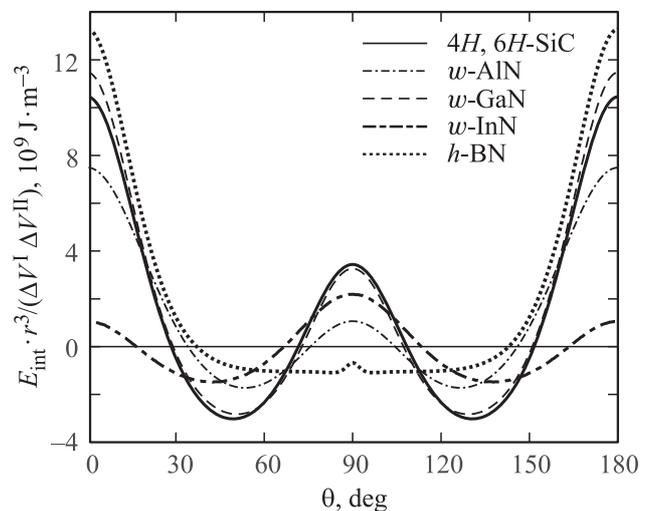


Рис. 2. Энергия взаимодействия дефектов в зависимости от угла расположения в полупроводниковых кристаллах гексагональной структуры.

шеточной функции Грина [25]. Например, наш расчет в Abinit дает  $\Delta V \sim 4.7 \text{ \AA}^3$  при замещении металлического атома в полупроводниках AlN и GaN атомом Mg — легирующей примеси, обеспечивающей  $p$ -проводимость. Стоит отметить, что для атомных вакансий не всегда  $\Delta V < 0$ , например, для вакансий атомов Al и Ga в указанных полупроводниках  $\Delta V > 0$  [27].

Модуль всестороннего сжатия  $K$  для кубической и гексагональной сред будем выражать через соответствующие коэффициенты жесткостей в матричной записи Фойгта [19]

$$K^{\text{cubic}} = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3};$$

$$K^{\text{hexagonal}} = c_{33} - \frac{2(c_{13} - c_{33})^2}{c_{11} + c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33}}. \quad (7)$$

Для удобства напомним, что закон Гука для данных сред со стандартной ориентацией координат в матричной за-

писи имеет вид [28]

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

Кубическая симметрия:  
 $c_{23} = c_{13} = c_{12}, c_{66} = c_{44}, c_{33} = c_{11}.$   
 Гексагональная симметрия:  
 $c_{23} = c_{13}, c_{66} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2},$   
 $1, 2, 3, 4, 5, 6 \leftrightarrow xx, yy, zz, yz, xz, xy.$

Дифференцирование тензорной функций Грина в (6) осуществлялось нами при помощи символьных вычислений MuPAD в составе пакета Matlab, а для случая кубических кристаллов дополнительно вручную. Полученные результаты сверялись с численным дифференцированием через конечные разности.

### 3. Случай гексагонального кристалла

Для записи тензора Грина Лифшица–Розенцвейга в гексагональной среде и точного решения, полученного на его основе, введем упрощающие обозначения упругих констант квадратичной размерности

$$\begin{aligned} b_{1,2} &= b_6 \pm b_3, \quad b_3 = \sqrt{b_6^2 + 4b_5b_4}, \quad b_4 = c_{11}c_{44}, \\ b_5 &= b_6 + c_{11}c_{44} - c_{33}c_{44}, \\ b_6 &= c_{11}c_{33} - 2c_{11}c_{44} - c_{13}^2 - 2c_{13}c_{44}. \end{aligned} \quad (9)$$

Также введем функции от угла  $\theta$  соответствующей  $b_i$  размерности

$$\begin{aligned} q(\theta) &= 2(b_4 + b_6 \sin^2(\theta) - b_5 \sin^4(\theta)) \\ q_i(\theta) &= (2b_4 + 2b_6 - 2b_5 \sin^2(\theta) - b_i \cos^2(\theta)) \sin^2(\theta); \\ p(\theta) &= b_6 - 2b_5 \sin^2(\theta); \\ p_i(\theta) &= 2b_4 + b_i \sin^2(\theta); \\ h(\theta) &= 2b_5 + 3p^2(\theta)/q(\theta); \\ h_i(\theta) &= -2p(\theta) - p_i(\theta) + b_i \cos^2(\theta). \end{aligned} \quad (10)$$

А также безразмерные функции угла

$$\begin{aligned} A_i(\theta) &= \frac{1}{c_{66}} \left( \frac{c_{44}(c_{11} + c_{12})}{2} \frac{1}{\sqrt{1p_i(\theta)}} \right. \\ &+ \left. \frac{b_6 + (2 - c_{44}/c_{66})b_4 - c_{66}c_{33}}{A(\theta)p_i(\theta) - q(\theta)} \sqrt{p_i(\theta)} \sin^2(\theta) \right), \quad i = 1, 2 \\ A(\theta) &= \cos^2(\theta) + c_{44}/c_{66} \sin^2(\theta). \end{aligned} \quad (11)$$

Функция Грина Лифшица–Розенцвейга для гексагонального кристалла в сферических координатах (для нагляд-

ности) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} G_{\alpha j}(\mathbf{r}) &= 4\pi r \sin^2(\theta) \\ &= - \left\{ \frac{\cos^2(\theta)}{c_{44}\sqrt{A(\theta)}} + \frac{\sqrt{q(\theta)}}{b_3} \sum_{i=1}^2 (-1)^i A_i(\theta) \right\} \delta_{\alpha j} \\ &+ \left\{ \frac{A(\theta) + \cos^2(\theta)}{c_{44}\sqrt{A(\theta)}} + \frac{1}{b_3\sqrt{q(\theta)}} \sum_{i=1}^2 (-1)^i A_i(\theta) (q(\theta) \right. \\ &+ \left. p_i(\theta) \cos^2(\theta)) \right\} (\cos(\varphi)d_{1\alpha} + \sin(\varphi)\delta_{2\alpha})(\cos(\varphi)\delta_{1j} \\ &+ \sin(\varphi)\delta_{2j}) - \frac{c_{13} + c_{44}}{b_3\sqrt{q(\theta)}} \cos(\theta) \sin(\theta) (\cos(\varphi)\delta_{1\alpha} \\ &+ \sin(\varphi)\delta_{2\alpha})\delta_{3j} \sum_{i=1}^2 (-1)^i \sqrt{p_i(\theta)}, \quad \alpha = 1, 2. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} G_{3j}(\mathbf{r}) &= 4\pi r \sin^2(\theta) = - \frac{1}{b_3\sqrt{a(\theta)}} \\ &\times \left\{ (c_{13} + c_{44}) \cos(\theta) \sin(\theta) (\cos(\varphi)\delta_{1j} + \sin(\varphi)\delta_{2j}) \right. \\ &\times \sum_{i=1}^2 (-1)^i \sqrt{p_i(\theta)} + \left[ (c_{44} \sin^2(\theta) + c_{11} \cos^2(\theta)) \right. \\ &\times \left. \sum_{i=1}^2 (-1)^i \sqrt{p_i(\theta)} - c_{11}q(\theta) \sum_{i=1}^2 \frac{(-1)^i}{\sqrt{p_i(\theta)}} \right] \delta_{3j} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

В силу трансверсальной изотропности гексагональной среды, то есть неизменности вида закона упругости (5) при повороте на любой угол  $\varphi$ , ответ оказывается не зависящим от  $\varphi$  и коэффициента жесткости  $c_{12}(c_{xxyy})$

$$\begin{aligned} E_{\text{int}}^{\text{hex}}(\mathbf{r}) &= -K^2 \Delta V^I \Delta V^{II} \frac{1}{4\pi r^3} \frac{1}{b_3 q(\theta)^{3/2}} [F_1(\theta) - F_2(\theta)], \\ F_i(\theta) &= \frac{1}{p_i(\theta)^{3/2}} (c_{11}S_1^{(i)}(\theta) + c_{13}S_2^{(i)}(\theta) \\ &+ c_{33}S_3^{(i)}(\theta) + c_{44}S_4^{(i)}(\theta)), \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (14)$$

Выражения для функций  $S_j^{(i)}(\theta)$ , выделенных при внешних факторах коэффициентов жесткостей, но зависящих

Таблица 1. Упругие константы полупроводников (GPa)

	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{33}$	$c_{44}$	Ссылки
4H, 6H-SiC	501	111	52	553	163	[30]
w-AlN	410	140	100	390	120	[31]
w-GaN	370	145	110	390	90	[31]
w-InN	225	109	108	265	55	[32]
h-BN	811	169	0	27	7.7	[33]
Si	165.7	63.9			79.6	[34]

при этом от всей совокупности упругих констант, приведены в приложении с учетом определений в (10). Ранее М.Н. Уоо в работе [29] вывел формулу для энергии взаимодействия точечных дефектов в гексагональной среде в ином виде (но численно тождественном) на основе тензора Грина Крёнера на примерах Cd, Mg, Zn, Zr и графита.

Графики  $E_{\text{int}}(\theta)$ , построенные по формуле (14) для III-нитридных полупроводниковых кристаллов, а также гексагонального политапа карбида кремния, представлены на рис. 2 на основе упругих констант из табл. 1 [30–34]. Кривая  $E_{\text{int}}(\theta)$  для SiC, AlN, GaN имеет глобальный максимум на оси кристаллической симметрии при  $\theta = 0$ , локальный в плоскости изотропии при  $\theta = 90^\circ$ , и минимум (то есть к равновесное положение дефектов) при  $\theta$ , лежащем приблизительно в интервале от  $30^\circ$  до  $70^\circ$  и симметричном ему интервале от  $110^\circ$  до  $150^\circ$ . У InN локальный и глобальный максимумы меняются ролями. У BN в графитовой структуре локальный максимум почти исчезает, уходя в отрицательную область, что приводит к слиянию равновесных областей в один интервал от  $37^\circ$  до  $143^\circ$ . Вообще, небольшое уменьшение величин  $c_{11}$  и  $c_{33}$  или значительное увеличение коэффициентов  $c_{13}$  и  $c_{44}$  по отношению к остальным может сменить знак зависимости  $E_{\text{int}}(\theta)$  на всем интервале углов.

#### 4. Случай кубического кристалла

Впервые энергию взаимодействие двух точечных дефектов в кубическом кристалле вычислил Эшелби [5], решая уравнение упругого равновесия методом последовательных приближений, исходя из разложения  $c_{ij} = \bar{c}_{ij} + \delta c_{ij}$ , где  $\bar{c}_{ij}$  — изотропные упругие константы, удовлетворяющие условию изотропии на примере усредненных по Лейбфриду констант. Дедерихс и Поллманн [35,36] этим же методом нашли высшие порядки разложения по параметру анизотропии  $\eta = \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{44}}{c_{44}}$  и указали на систематическую опечатку в знаке энергии в работах Эшелби. Иным способом энергия взаимодействия точечных дефектов была вычислена Кокориным [37], который использовал для расчета метод концентрационных плоских волн Кривоглаза [38] и также получил знак, отличный от работы Эшелби, на которую повсеместно ссылаются без комментариев. Но

это весьма важный момент, поскольку в зависимости от значения знака во внешнем множителе энергии взаимодействия дефекты будут либо притягиваться друг к другу, либо отталкиваться вдоль определенных кристаллографических направлений.

Однако в дальнейшем, в работах [39] и [40] была вычислена энергия взаимодействия двух точечных дефектов на основе тензора Грина Лифшица–Розенцвейга [16] для слабой анизотропии  $|\eta| \ll 1$ , при этом знак энергии совпал со знаком в оригинальной работе Эшелби. Оказывается, как недавно обнаружил Остапчук [23], Лифшиц и Розенцвейг упустили целый ряд членов в своем решении. Мы выяснили, что несмотря на их небольшой вклад в сам тензор Грина, после двойного дифференцирования и суммирования в (6) они приводят к смене знака энергии взаимодействия точечных дефектов. Тензор Грина Лифшица–Розенцвейга с поправкой Остапчука [23] имеет вид

$$G_{ij}^{\text{cubic}}(\mathbf{r}) = G_{ij}^0(\mathbf{r}) + G_{ij}^1(\mathbf{r}),$$

$$G_{ij}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi r} \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{44}(c_{12} + 2c_{44})} \left[ \frac{c_{12} + 3c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \delta_{ij} + n_i n_j \right],$$

$$G_{ij}^1(\mathbf{r}) = -\frac{\eta}{64\pi r} \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{44}(c_{12} + 2c_{44})} \times \left[ 4c_{44} \frac{c_{12} + 3c_{44}}{c_{12} + c_{44}} (1 - n_i^2) \delta_{ij} + (7c_{12} + 19c_{44}) n_i n_j - 2(c_{12} + 4c_{44}) n_i n_j (n_i^2 + c_j^2) + (c_{12} + c_{44}) \times \left( 1 + \sum_{k=1}^3 n_k^4 \right) \delta_{ij} - 5(c_{12} + c_{44}) n_i n_j \sum_{k=1}^3 n_k^4 \right],$$

$$\eta = \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{44}}{c_{44}}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (15)$$

где  $G_{ij}^0(\mathbf{r})$  — изотропная составляющая функции Грина, а  $G_{ij}^1(\mathbf{r})$  — анизотропная составляющая функции Грина. В энергию взаимодействия (6) дает вклад только  $G_{ij}^1(\mathbf{r})$ . При этом первый член анизотропной составляющей дает положительный вклад, второй член дает нулевой вклад, третий член входит со знаком минус, четвертый вносит положительное значение, наконец, последний член дает нулевой вклад. В результате, суммарная величина отличается знаком от результата работ [39] и [40], полученного из функции Лифшица–Розенцвейга:

$$E_{\text{int}}^{\text{cubic}}(\mathbf{r}) = \frac{15}{8\pi r^3} K_{\text{cub}}^2 \Delta V^I \Delta V^{II} \eta \Delta \Gamma(\mathbf{n}),$$

$$\Delta \Gamma(\mathbf{n}) = n_1^4 + n_2^4 + n_3^4 - \frac{3}{5},$$

$$A^{\text{LR}} = -\frac{c_{12}}{c_{44}(c_{12} + 2c_{44})}; \quad A^{\text{O}} = \frac{c_{44}}{(c_{12} + 2c_{44})^2};$$

$$A^{\text{DP}} = \frac{c_{44}}{\bar{c}_{11}^2}, \quad \bar{c}_{11} = \frac{1}{5} (3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}). \quad (16)$$

**Таблица 2.** Аппроксимированные к численному решению амплитуды ( $10^{-16}$  м/Н) при сферических функциях в разложении тензора Грина для кремния. Для  $G_{11}$ ,  $G_{22}$ ,  $G_{33}$ ,  $G_{13}$  все  $a_{ij} = 0$  при  $j < 0$ , а для  $G_{12}$ ,  $G_{23}$  все  $a_{ij} = 0$  при  $j \geq 0$

$i$	$G_{11}$						$G_{22}$					
	0	2	4	6	8	10	0	2	4	6	8	10
$a_{i0}$	33382	-1130	-297	77	15	-4	33382	-1130	-297	77	15	-4
$a_{i1}$		0	-0	0	-0	-0		-0	0	0	-0	-0
$a_{i2}$		1957	598	-54	-22	3		-1957	-598	54	22	-3
$a_{i3}$			-0	0	-0	-0			0	-0	-0	0
$a_{i4}$			-704	-47	15	0			-704	-47	15	0
$a_{i5}$				0	-0	-0				0	-0	-0
$a_{i6}$				-80	-14	0				80	14	-0
$a_{i7}$					-0	-0					0	0
$a_{i8}$					31	2					31	2
$a_{i9}$						-0						-0
$a_{i10}$						4						-4
$i$	$G_{33}$						$G_{13}$					
	0	2	4	6	8	10	0	2	4	6	8	10
$a_{i0}$	33382	2259	-967	-79	45	3	-0	0	0	0	0	-0
$a_{i1}$		-0	0	0	-0	-0		-4577	130	158	-8	-7
$a_{i2}$		-0	-0	0	-0	-0		0	0	-0	-0	0
$a_{i3}$			-0	0	0	0			343	-37	-10	3
$a_{i4}$			88	-106	10	5			-0	-0	-0	0
$a_{i5}$				0	0	-0				73	7	-3
$a_{i6}$				-0	-0	-0				0	-0	-0
$a_{i7}$					0	-0					-9	-0
$a_{i8}$					-2	2					0	-0
$a_{i9}$						-0						-3
$a_{i10}$						-0						-0
$i$	$G_{12}$						$G_{23}$					
	0	2	4	6	8	10	0	2	4	6	8	10
$a_{i,-1}$		0	-0	-0	0	-0		-4577	130	158	-8	-7
$a_{i,-2}$		4577	367	-69	-7	3		0	-0	0	-0	0
$a_{i,-3}$			-0	-0	-0	0			-343	37	10	-3
$a_{i,-4}$			0	0	0	0			0	-0	0	0
$a_{i,-5}$				-0	0	0				73	7	-3
$a_{i,-6}$				-164	-15	2				-0	-0	0
$a_{i,-7}$					0	0					9	0
$a_{i,-8}$					-0	0					0	-0
$a_{i,-9}$						0						-3
$a_{i,-10}$						8						0

Как упоминалось ранее, знак энергии взаимодействия точечных дефектов может поменяться из-за большой упругой неоднородности  $\Lambda_{ijkl}$  (4) или при их близком расположении (в сравнении с объемом дефектов  $v_0$ ), то есть когда они в сущности перестают быть точечными. Так, в работе [41] при помощи конечно-элементного комплекса ANSYS было смоделировано в кубической среде взаимодействие довольно близко расположенных сферических полостей с внутренним давлением, которые сохраняли свою форму (большая жесткость дефекта  $\Lambda_{ijkl}$ , пропорциональная усилию изменить форму) или не сохраняли (отрицательная жесткость  $\Lambda_{ijkl}$  поло-

сти по отношению к среде). Но результаты работы [41] были некорректно истолкованы в рамках линейного приближения взаимодействия дефектов, основываясь на неверном знаке в (16) при расчете из тензора Грина Лифшица-Розенцвейга.

Функция  $\Gamma(\mathbf{n})$  имеет максимум в направлении  $\langle 100 \rangle$ , равный 0.4, минимум в направлении  $\langle 111 \rangle$ , равный  $-0.27$ , и седловую точку  $-0.1$  в направлении  $\langle 110 \rangle$ . Перепишем выражение для  $\Gamma(\mathbf{n})$  в общей для кубической и гексагональной сред сферической системе координат, в которой угол  $\theta$  отсчитывается от гексагональной оси симметрии 6-го порядка [0001] (в кристаллографических

индексах Миллера–Бравэ), вдоль которой лежит кубическая диагональная ось 3-го порядка [111], а угол  $\varphi$  отсчитывается от гексагональной оси [0110], вдоль которой выровнена кубическая ось [112] — это одна из обычных сопряженных ориентаций при выращивании эпитаксиальных пленок гексагональных кристаллов на кубических и наоборот

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{30} (20\sqrt{2} \sin(3\varphi) \sin^3 \theta \cos \theta - 35 \cos^4 \theta + 30 \cos^2 \theta - 3). \quad (17)$$

Дедерихс и Поллманн [35,36] рассчитали энергию взаимодействия точечных дефектов в кубическом материале до 3-го порядка по  $\eta$ , и, как показывает численный расчет по схеме Барнетта [6,42], этого вполне достаточно для таких кубических кристаллов, как кремний с параметром анизотропии  $\eta = -0.72$ . Однако для сред с  $|\eta| > 1$  подобные разложения не имеют сходимости, и для них требуется иной подход.

### 5. Аппроксимация функций Грина сферическими функциями

Тензор Грина произвольной анизотропной среды можно разложить по базису сферических функций следующим образом [7,37]:

$$G_{ij}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \sum_{l=0,2,4,\dots}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm}^{(ij)} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (18)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{lm}(\cos(\theta)) \times \begin{cases} \cos(m\varphi), & m > 0 \\ \sin(-m\varphi), & m < 0 \\ 1/\sqrt{2}, & m = 0 \end{cases}, \quad (19)$$

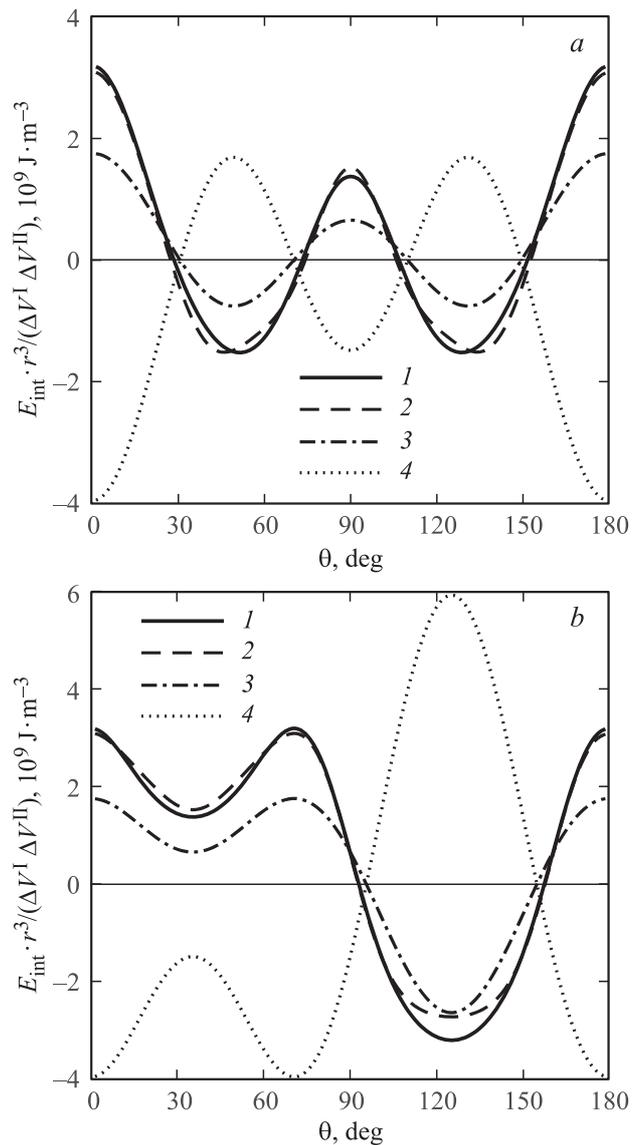
где определены присоединенные полиномы Лежандра

$$P_{lm}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l, \quad 0 \leq m \leq l,$$

$$P_{l,-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{l,m}(x), \quad 0 \leq m \leq l. \quad (20)$$

В табл. 2 для кремния с упругими константами из табл. 1 приведены коэффициенты  $a_{lm}$ , полученные нами аппроксимацией до порядка  $l = 10$  (методом наименьших квадратов) численного решения тензора Грина по Барнетту [42]. Результаты сверялись с аналогичной аппроксимацией интерполированного на единичной сфере конечно-элементного решения для тензора Грина в программе ANSYS.

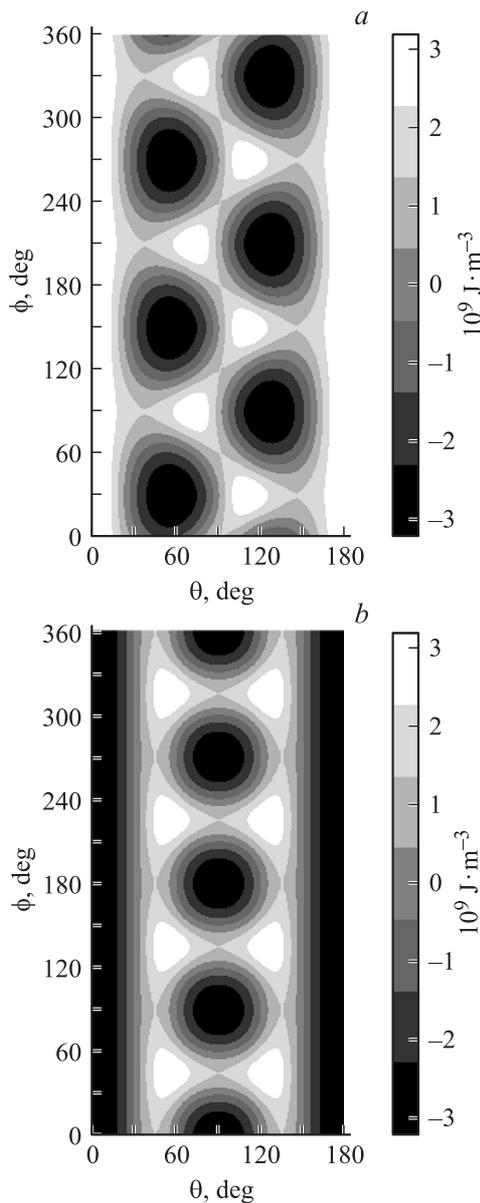
На рис. 3 и 4, *a, b* показаны угловые зависимости энергии взаимодействия двух точечных дефектов в кремнии и отличие приближенных и аппроксимированных выражений от численного решения.



**Рис. 3.** Зависимость энергии взаимодействия точечных дефектов в кремнии от угла  $\theta$  в системе координат  $Oz \parallel [111]$ ,  $Ox \parallel [112]$  при: *a*)  $\varphi = 0^\circ$ , *b*)  $\varphi = 90^\circ$ . 1 — Дедерихс–Поллманн, 3-й порядок разложения по параметру анизотропии (визуально совпадает с численным решением по схеме Барнетта). 2 — Отклонения при расчете из тензора Грина, аппроксимированного сферическими функциями до 10-го порядка. 3 — Расчет из тензора Грина Лифшица–Розенцвейга (1-й порядок по параметру анизотропии) с поправкой Остапчука. 4 — Расчет из оригинального тензора Грина Лифшица–Розенцвейга.

### 6. Обсуждение результатов

1. На основе точных, приближенных и численных решений для тензоров Грина исследовано упругое взаимодействие точечных дефектов в кубических и гексагональных (трансверсально-изотропных) средах. Показано, что тензор Грина Лифшица–Розенцвейга для слабо анизотропных ( $|\eta| \ll 1$ ) кубических кристаллов без поправки Остапчука [23] приводит к неверному знаку энергии. Для



**Рис. 4.** Контурная карта численного решения энергии взаимодействия  $E_{\text{int}} r^3 / (\Delta V^I \Delta V^{\text{II}}) \text{ J} \cdot \text{m}^{-3}$  двух точечных дефектов в Si в зависимости от сферических углов в системе координат а)  $Oz \parallel [111]$ ,  $Ox \parallel [112]$ , б)  $Oz \parallel [001]$ ,  $Ox \parallel [100]$ .

кристаллов с параметром анизотропии  $|\eta| < 1$ , таких как кремний, достаточно 3-го порядка разложения по  $\eta$  Дедерихса–Поллманна [36]. Для сильно анизотропных кристаллов произвольной упругой симметрии удобно использовать численную схему Барнетта [42]. Приведена аппроксимация рядом сферических функций 10-го порядка численного решения тензора Грина для кремния.

2. Неточность в тензоре Грина Лифшица–Розенцвейга приводит к необходимости пересмотреть результаты по взаимодействию внедренного в кремний атома углерода и кремниевой вакансии при синтезе пленок SiC на Si, представленные в работах [39–41,44]. Эти результаты основывались на оценке знака и величины  $\Delta V$  внедрен-

ного углерода из соотношения радиусов атомов Si и C, однако, как свидетельствует квантово-химический расчет в Abinit, при внедрении атома C в разные межузельные позиции кремния изменения объема кристалла почти не происходит ( $\Delta V \sim 0$ ), поэтому взаимодействие дефектов определяется не величиной  $\Delta V$ , а преимущественно упругой неоднородностью дефекта  $\Lambda_{ijkl}$ , входящей в выражение для энергии взаимодействия с противоположным знаком. Последнее должно объяснять то, что только вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  происходит реакция образования SiC в методе замещения атомов, что свидетельствует о притяжении данных точечных дефектов именно вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ . Исследованию этого вопроса мы посвятим отдельное сообщение.

3. На примере кубического кремния и гексагональных полупроводниковых кристаллов III-нитридов (AlN, GaN, BN, InN) и  $\alpha$ -SiC построены графики зависимости энергии взаимодействия точечных дефектов от углов их взаимного расположения, по которым можно судить о направлениях взаимного притяжения или отталкивания дефектов.

4. Ab initio расчетом атомных смещений в кристалле AlN продемонстрировано расхождение решеточной функции Грина от ее континуального предела на расстоянии нескольких параметров решетки от узла приложения силы. Для сильных смещений, вызванных дефектом кристаллической решетки, континуальный предел наступает гораздо дальше. Для легирующей примеси Mg в AlN и GaN вычислена величина  $\Delta V \sim 4.7 \text{ \AA}^3$  для расчета энергии взаимодействия замещенных атомов по континуальной формуле.

## Приложение

$$\begin{aligned}
 S_1^{(i)}(\theta) &= q^2(\theta) \left( p_i(\theta) - \cos(2\theta)b_i + \frac{3}{4} \sin^2(2\theta) \frac{b_i^2}{p_i(\theta)} \right) \\
 &\quad - q(\theta) \left( (3 \sin^2(\theta) - 1)p_i^2(\theta) - \cos^4(\theta) \sin(\theta)^2 b_i^2 \right. \\
 &\quad \left. - \cos^2 \theta (6 \sin^2(\theta) - 1)b_i p_i(\theta) \right. \\
 &\quad \left. + \sin^2(2\theta)(2b_i + p^2(\theta)/q(\theta))p_i(\theta) \right. \\
 &\quad \left. - p(\theta) (2 \cos(2\theta)p_i(\theta) - \sin^2(2\theta)b_i) \right) \\
 &\quad - p(\theta) \cos^2(\theta) \left\{ (2(6 \sin^2(\theta) - 1))p_i^2(\theta) \right. \\
 &\quad \left. - \sin^2(2\theta)b_i p_i(\theta) \right\} - h(\theta) \cos^2(\theta) \sin^2(2\theta)p_i^2(\theta). \\
 S_2^{(i)}(\theta) &= \cos^2(\theta) \left\{ q(\theta) \left[ 2 \left( \frac{1}{\cos^2(\theta)} - 3 \right) p_i^2(\theta) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \sin^2(2\theta)b_i^2 - 4(3 \sin^2(\theta) - 1)b_i p_i(\theta) \right] \right. \\
 &\quad \left. + 2p(\theta) [4(3 \sin^2(\theta) - 1)p_i^2(\theta) - \sin^2(2\theta)b_i p_i(\theta)] \right. \\
 &\quad \left. + 2h(\theta) \sin^2(2\theta)p_i^2(\theta) \right\}.
 \end{aligned}$$

$$S_3^{(i)}(\theta) = \cos^4(\theta) \left\{ q^2(\theta) \left[ \frac{1}{\cos^2(\theta)} \left( \frac{b_i p_i(\theta)}{q_i(\theta)} + 2 \frac{p_i^2(\theta) h_i(\theta)}{q_i^2(\theta)} \right) - \frac{1}{\cos^4(\theta)} \frac{p_i^2(\theta)}{q_i(\theta)} \right] + q(\theta) \left[ \sin^2(2\theta) \left( 2 \frac{p_i^3(\theta) h_i^2(\theta)}{q_i^3(\theta)} + \frac{3}{4} \frac{b_i^2 p_i(\theta)}{q_i(\theta)} + 3 \frac{b_i p_i^2(\theta) h_i(\theta)}{q_i^2(\theta)} \right) - (10 \sin^2(\theta) - 3) \times \left( 3 \frac{b_i p_i^2(\theta)}{q_i(\theta)} + 2 \frac{p_i^3(\theta) h_i(\theta)}{q_i^2(\theta)} \right) + \left( \frac{6}{\cos^2(\theta)} - 15 \right) \frac{p_i^3(\theta)}{q_i(\theta)} + 2 \frac{1}{\cos^2(\theta)} p(\theta) \frac{p_i^2(\theta)}{q_i(\theta)} + 2 \sin^2(2\theta) \frac{(2b_s - b_i) p_i^3(\theta)}{q_i^2(\theta)} \right] - p(\theta) \left[ \sin^2(2\theta) \left( 3 \frac{b_i p_i^2(\theta)}{q_i(\theta)} + 2 \frac{p_i^3(\theta) h_i(\theta)}{q_i^2(\theta)} \right) - 2(10 \sin^2(\theta) - 3) \frac{p_i^3(\theta)}{q_i(\theta)} \right] + h(\theta) \sin^2(2\theta) \frac{p_i^3(\theta)}{q_i(\theta)} \right\}.$$

$$S_4^{(i)}(\theta) = \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left\{ q^2(\theta) \left[ \left( \frac{2}{\sin^2(\theta)} - 1 \right) p_i(\theta) + \cos^2(\theta) b_i \right] - q(\theta) \left[ \left( \cos(2\theta)(6 \sin^2(\theta) - 1) + \frac{2}{\sin^2(\theta)} \right) p_i^2(\theta) - \frac{1}{4} \sin^2(2\theta) \cos^2(2\theta) b_i^2 + \cos(2\theta)(3 \cos^2(2\theta) - \cos(2\theta) - 3) b_i p_i(\theta) + 2 p(\theta) \cos^2(\theta) p_i(\theta) + p(\theta) [2 \cos(2\theta)(3 \cos^2(2\theta) - \cos(2\theta) - 3) p_i^2(\theta) + \sin^2(2\theta) \cos^2(2\theta) b_i p_i(\theta)] - h(\theta) \sin^2(2\theta) \cos^2(2\theta) p_i^2(\theta) \right] \right\}.$$

## Список литературы

- [1] П.Г. Черемской, В.В. Слезов, В.И. Бетехтин. Поры в твердом теле. Энергоатомиздат, М. (1990). 376 с.
- [2] Б.Н. Мукашев, Х.А. Абдуллин, Ю.В. Горелкинский. УФН **170**, 2, 143 (2000).
- [3] В.В. Алексеенко. ФТТ **50**, 10, 1775 (2008).
- [4] M.Ø. Pedersen, L. Österlund, J.J. Mortensen, M. Mavrikakis, L.B. Hansen, I. Stensgaard, E. Lægsgaard, J.K. Nørskov, F. Besenbacher. Phys. Rev. Lett. **84**, 21, 4898 (2000).
- [5] Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций / Под ред. Б.Я. Любова. ИЛ, М. (1963). 248 с.
- [6] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985). 352 с.
- [7] T. Mura. Micromechanics of Defects in Solids. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht. 2nd ed. (1987). 588 с.
- [8] D.J. Bacon, D.M. Barnett, R.O. Scattergood. Progr. Mater. Sci. **23**, 51–262 (1979).
- [9] F. Bitter. Phys. Rev. **37**, 1527 (1931).
- [10] А.М. Косевич. Основы механики кристаллической решетки. Наука, М. (1972). 280 с.
- [11] W. Thompson. Cambridge Dublin Mathem. J. **3**, 87 (1848).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. Наука, М. (1987). 248 с.
- [13] R.D. Mindlin. Physics **7**, 195 (1936).
- [14] K.S. Chan, P. Karasudhi, S.L. Lee. Inf. J. Solids Structures **10**, 1179 (1974).
- [15] I. Fredholm. Acta Mathem. **23**, 1, 1 (1900).
- [16] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ **17**, 9 (1947).
- [17] L. Lejč ek. Czech. J. Phys. B **19**, 799 (1969).
- [18] E. Kröner. Z. Phys. **136**, 402 (1953).
- [19] J.R. Willis. J. Mech. Appl. Math. **18**, 419 (1965).
- [20] Y.-C. Pan, T.-W. Chou. J. Appl. Mech. **43**, 608 (1976).
- [21] Y.-C. Pan, T.-W. Chou. J. Appl. Mech. **46**, 551 (1979).
- [22] J.M. Burgers. Proc. Kon. Nederl. Akad. Wetensch. **42**, 378 (1939).
- [23] П.Н. Остапчук. ФТТ **54**, 1, 92 (2012).
- [24] R.-P. Hirschkorn, R. Siems. Z. Phys. B **47**, 155 (1982).
- [25] V.K. Tewary. Adv. Phys. **22**, 6, 757 (1973).
- [26] X. Gonze, B. Amadon, P.M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Cote, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zérah, J.W. Zwanziger. Comp. Phys. Commun. **180**, 2582 (2009). www.abinit.org.
- [27] I. Gorczyca, A. Svane, N.E. Christensen. Solid State Commun. **101**, 10, 747 (1997).
- [28] Дж. Най. Физические свойства кристаллов. ИЛ, М. (1960)ю 380 с.
- [29] M.H. Yoo. Phys. Status Solidi B **61**, 411 (1974).
- [30] K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.-K. Loong, M. Okada, I. Kimura. J. App. Phys. **82** 6, 3152 (1997).
- [31] C. Deger, E. Born, H. Angerer, O. Ambacher, M. Stutzmann. App. Phys. Lett. **72**, 2400 (1998).
- [32] J. Serrano, A. Bosak, M. Krisch, F.J. Manjón, A.H. Romero, N. Garro, X. Wang, A. Yoshikawa, M. Kuball. Phys. Rev. Lett. **106**, 20, 205 501 (2011).
- [33] A. Bosak, J. Serrano, M. Krisch. Phys. Rev. B **73**, 4, 041 402 (2006).
- [34] H.J. McSimin. J. Appl. Phys. **24**, 988 (1953).
- [35] P.H. Dederichs, J. Pollmann. Z. Phys. **255**, 315 (1972).
- [36] P.H. Dederichs, J. Pollmann. KFA-Jü lich-Report; Jül-836-FF (März 1972).
- [37] В.В. Кокорин. Физика металлов и металловедение **47**, 2, 438 (1979).
- [38] М.А. Кривоглаз. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. Наука, М. (1967). 336 с.
- [39] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ДАН **444**, 3, 266 (2012).
- [40] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Изв. РАН. МТТ **2**, 122 (2013).
- [41] С.В. Кузьмичев, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Изв. РАН. МТТ **4**, 90 (2013).
- [42] D.M. Barnett. Phys. Status Solidi B **49**, 741 (1972).
- [43] Е.В. Гобсон. Теория сферических и эллипсоидальных функций. ИЛ, М. (1952). 476 с.
- [44] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. J. Phys. D **47**, 313 001 (2014).