Особенности напряженно-деформированного состояния гетероструктур Si/SiO₂/Ge с наноостровками германия предельной плотности

© В.В. Курилюк[¶], О.А. Коротченков

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко (физический факультет), 01601 Киев, Украина

(Получена 4 декабря 2012 г. Принята к печати 4 декабря 2012 г.)

В рамках модели упругого континуума с использованием метода конечных элементов выполнены расчеты напряженно-деформированного состояния кремний-германиевых гетероструктур с полусферическими островками германия, выращенными на окисленной поверхности кремния. Показано, что при увеличении плотности островков до предельных значений в SiGe-структуре с открытыми квантовыми точками существенно изменяются величина и пространственное распределение полей упругих деформаций. Результаты теоретических расчетов позволяют выявить участки гетероструктуры с максимальным изменением напряженно-деформированного состояния, местоположение которых можно варьировать изменением плотности островков.

1. Введение

Кремний-германиевые гетероструктуры с нанокластерами (квантовыми точками, КТ) германия являются объектом многочисленных исследований в области физики полупроводниковых низкоразмерных систем. Интерес к указанным структурам обусловлен перспективами их применения в солнечных элементах [1], фотодетекторах ифракрасного (ИК) излучения [2], элементах памяти [3], приборах спинтроники [4]. Кроме того, привлекательной является совместимость метода выращивания SiGe-гетероструктур с уже существующей кремниевой технологией изготовления приборов и схем.

Свойства SiGe-структур с квантовыми точками Ge тесно связаны с их напряженно-деформированным состоянием, которое является результатом несоответствия параметров решетки кремния и германия. Именно деформации несоответствия способствуют пространственному упорядочению островков в процессе их роста. Более того, упругие деформации существенно изменяют ход конфайнмент-потенциала для носителей заряда, создавая потенциальную яму для электронов в Si-подложке и изменяя энергетический спектр дырок в квантовой точке [5]. Эффектам пространственного разделения носителей заряда в системе КТ Ge, выращенных на поверхности Si со сверхтонким слоем SiO₂, посвящено недавнее исследование [6]. Благодаря разделению носителей заряда достигается частичное подавление поверхностной рекомбинации и, как следствие, изменение электрических и оптических свойств гетероструктур. Поэтому важной задачей физики и технологии низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур является разработка методов определения и контроля полей упругих деформаций и управления посредством их свойствами структур.

Известно, что величина и распределение полей упругих деформаций в гетероструктурах зависят от размера островков, их формы и состава [7]. Перечисленные параметры, в свою очередь, определяются условиями выращивания структур в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. Выделяют два основных типа самоорганизующихся островков германия на чистой поверхности кремния: hut-кластеры, ограниченные плоскостями {105}, и dome-кластеры с более сложной огранкой [8]. Максимальные значения механических напряжений наблюдаются в гетероструктурах с hut-кластерами, которые образуются в условиях низкотемпературной эпитаксии $(T \approx 250^{\circ} \text{C})$ без перемешивания компонентов Si и Ge [9]. Подобные островки имеют размер основания не менее 20 нм и плотность $\leq 10^{11}$ см⁻². Несмотря на относительно высокую плотность, поля упругих деформаций оказываются существенными только в небольшой области вблизи квантовых точек и быстро угасают с расстоянием. В промежутке между островками подложка оказывается ненапряженной и конфайнментпотенциал для электронов остается практически не возмущенным. Исходя из этого, возможным вариантом коррекции напряженно-деформированного состояния гетероструктур является выращивание массивов островков с повышенной плотностью, при которой упругие поля соседних квантовых точек будут складываться, оказывая заметное влияние на энергетический спектр электронов, подобно структурам с вертикально-связанными КТ [10]. Кроме того, задача получения таких гетероструктур является важной и для прикладных целей: ожидается, что уменьшение размеров островков с одновременным повышением их плотности позволит создавать структуры с эффективностью оптических переходов, достаточной для их применения в качестве источников излучения.

Поскольку возможности воздействия на самопроизвольный рост германиевых островков на чистой поверхности кремния оказались ограниченными, было предпринят ряд попыток модификации исходной поверхности Si перед процессом эпитаксии. В частности, предварительное осаждение на исходную поверхность Si одного

1027

[¶] E-mail: kuryluk@univ.kiev.ua, olegk@univ.kiev.ua

монослоя углерода или сурьмы позволило изменить механизмы роста германия и получить островки размерами около 20 нм и плотностью 3 · 10¹¹-5 · 10¹¹ см⁻² [11,12]. Но наиболее оправданным оказалось использование методики окисления поверхности кремния перед осаждением Ge. С помощью технологии предварительного термического окисления (толщина окисленного слоя ~ 1 нм) удалось вырастить достаточно однородные массивы полусферических островков диаметром 7-10 нм и предельно высокой плотностью $2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ [13,14]. При этом эпитаксиальный рост КТ на окисленной Si-подложке реализуется через "наноокна" в оксидном слое, образующиеся в процессе осаждения германия [14]. Важным достоинством этой технологии является также возможность контроля плотности островков соответствующим выбором количества осажденного германия.

Кроме того, структуры SiGe с оксидными слоями представляют значительный интерес для дальнейшего развития комплементарной логики на транзисторах металл-оксид-полупроводник (CMOS) [15], упругие напряжения в которых рассматриваются одним из наиболее функциональных факторов направленного изменения свойств таких гетероструктур [16].

Первые исследования гетероструктур с оксидными слоями показали, что они способны излучать фотоны в более широком диапазоне длин волн, чем структуры Si/Ge с пирамидальными квантовыми точками [17]. Кроме того, наши недавние результаты указывают на то, что в гетероструктурах с КТ, выращенными на окисленной поверхности, величина сигнала фотоэдс в несколько раз превышает это значение для гетероструктур, полученных в режиме Странского-Крастанова [18]. Тем не менее для гетероструктур с плотными массивами квантовых точек пока малоизученным остается вопрос о влиянии полей упругих деформаций на их свойства. Поскольку экспериментальное исследование напряженного состояния в наноразмерных объектах сопряжено с определенными трудностями, большое внимание сейчас уделяется методам математического моделирования гетероструктур с наноостровками.

В данной работе представлены результаты теоретических расчетов напряженно-деформированного состояния гетероструктур Si/Ge с КТ германия, выращенных на предварительно окисленной поверхности кремния. В частности, с использованием метода конечных элементов в рамках теории упругости исследуется влияние плотности Ge-островков на величину и пространственное распределение полей упругих деформаций в кремниевой подложке и внутри квантовых точек.

Методика расчета полей упругих деформаций

Традиционно в литературе систему самоорганизованных квантовых точек на подложке рассматривают как



Рис. 1. Геометрия исследуемой гетероструктуры.

упорядоченный массив идентичных островков. Ввиду периодичности такой структуры для ее описания достаточно ограничиться одной ячейкой, выбрав соответствующие граничные условия. Поскольку гетероструктура с полусферическими КТ имеет осевую симметрию, в нашей работе будет анализироваться двумерная ячейка (рис. 1), содержащая кремниевую подложку с поперечным размером L_{ID} (в свою очередь величина L_{ID} соответствует расстоянию между островками) и высотой $L_{\rm S}$. Сверху подложка покрыта оксидным слоем SiO₂ толщиной h, на котором расположена квантовая точка германия с диаметром основания D и высотой H. Предполагается, что слой SiO₂ имеет идеальную адгезию как к материалу подложки, так и к КТ. В оксидном слое содержится "наноокно" диаметром d, посредством которого и осуществляется эпитаксиальный рост островков на подложке. Ось *x*, параллельная гетеропереходу, совпадает с кристаллографическим направлением [100], а ось z — с направлением [001]. В работе исследовались два типа гетероструктур: 1) структуры с открытыми островками германия, 2) структуры с КТ, покрытыми кремниевым слоем толщиной L_C (штриховая линия на рис. 1).

Расчет напряженно-деформированного состояния гетероструктур с квантовыми точками выполнялся в модели упругого континуума. Решались стандартные уравнения теории упругости:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \tag{1a}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}[\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{0kl}], \quad i, j, k, l = x, z, \qquad (16)$$

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

где σ_{ij} , ε_{ij} , C_{ijkl} — тензоры механических напряжений, упругих деформаций и модулей упругости соответственно, u_k — компоненты вектора упругих смещений. Через ε_{0ij} в (16) обозначены начальные деформации, возникающие из-за несоответствия параметров решеток компонент гетероструктуры:

$$\varepsilon_0 = \frac{a_s - a_i}{a_s} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где a_s и a_i — параметры решетки материалов подложки и островка соответственно. В расчетах предполагается, что начальные деформации существуют только в области, занимаемой квантовой точкой. Объединяя уравнения (1а)–(1б), получим окончательно:

$$C_{ijkl} \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial u_k}{\partial x_i} = C_{ijkl} \frac{\partial \varepsilon_{0kl}}{\partial x_i}.$$
 (3)

Отметим, что рассогласование решеток подложки и островков в гетероструктурах с КТ не является единственно возможным источником механических напряжений. Так как гетероструктуры выращиваются при температурах эпитаксии, то при последующем охлаждении в них возникают напряжения, связанные с различием коэффициентов термического расширения α материалов. Соответствующие деформации єте в структуре можно оценить из соотношения $\varepsilon_{\text{TE}} = \Delta \alpha \, \Delta T$, где ΔT — изменение температуры. Поскольку напряжения в гетероструктурах чаще всего интересны при комнатных температурах ($\Delta T \approx 500^{\circ}$ C), учитывая, что для гетеропары Si-Ge $\Delta \alpha = 3.3 \cdot 10^{-6} \circ C^{-1}$, находим $\varepsilon_{\text{TE}} \approx 0.002$. В то же время деформации ε_0 , описываемые соотношением (2), для пары кремний-германий составляют величину $\varepsilon_0 \approx 0.04$, превышая на порядок є_{те}. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать только механические напряжения, связанные именно с рассогласованием решеток материалов подложки и островков.

Для нахождения неизвестных u_k дифференциальные уравнения (3) необходимо дополнить граничными условиями относительно неизвестных компонент вектора смещений. Во-первых, для учета периодичности структуры на противоположных гранях $x = -L_{\rm ID}/2$ и $x = L_{\rm ID}/2$ фиксировалась нормальная u_x компонента вектора смещения:

$$u_x\left(x = -\frac{L_{\rm ID}}{2}\right) = u_x\left(x = \frac{L_{\rm ID}}{2}\right) = 0. \tag{4}$$

Во-вторых, нижняя грань подложки считается "зажатой":

$$u_x(z = -L_S) = u_z(z = -L_S) = 0.$$
 (5)

Кроме того, предполагается непрерывность компонент вектора упругих смещений на всех гетеропереходах структуры, а на внешних поверхностях, включая открытую поверхность островков и верхнюю грань подложки, — отсутствие механических напряжений.

Решение уравнений (3) совместно с граничными условиями (4), (5) выполнялось с помощью метода конечных элементов. Для этого рассматриваемая ячейка гетероструктуры разбивалась на сетку треугольных элементов, каждый из которых содержит 6 узлов. Вблизи гетеропереходов и внутри квантовой точки производилось измельчение сетки, так что общее число узлов составляло около $(2-3) \cdot 10^4$. В пределах каждого элемента неизвестные компоненты u_k аппроксимировались линейной комбинаций так называемых функций формы $\xi(x, z)$ [19]:

$$u_k(x,z) = \sum_{i=1}^{6} v_{ki} \xi_i(x,z),$$
(6)

где v_i — неизвестные коэффициенты, которые являются значениями u_k в узлах сетки. Подстановка (6) в (3) с использованием метода Галеркина позволяет преобразовать дифференциальные уравнения (3) в систему алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов v_i :

$$[K][\nu] = [f], \tag{7}$$

где компоненты матриц [K] и [f] определяются соотношениями:

$$K = \int_{\text{Se}} BCB^T \, dx \, dz,$$

$$f = \int_{\text{Se}} BC\varepsilon_0 \, dx \, dz.$$
 (8)

Верхний индекс "T" в (8) означает транспонирование, а через B обозначен оператор вида:

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & 0 & \frac{\partial \xi}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial \xi}{\partial z} & \frac{\partial \xi}{\partial x} \end{bmatrix}.$$
 (9)

Рассчитанные из уравнений (7) пространственные зависимости компонент u_k далее подставлялись в (1в) для определения деформаций в гетероструктуре.

3. Результаты и их обсуждение

Для расчетов напряженно-деформированного состояния гетероструктур с полусферическими квантовыми точками в работе использовались следующие параметры: диаметр основания германиевых островков D = 7 нм, высота H = 2.7 нм, диаметр окна в оксидном слое



Рис. 2. Распределения составляющих тензора деформаций вдоль оси *z* при *x* = 0 в гетероструктуре с открытыми квантовыми точками: *a* — деформации ε_{\parallel} вдоль гетероперехода; *b* — деформации ε_{\perp} в направлении роста гетероструктуры. Штриховые линии соответствуют плотности островков $\rho_{\rm QD} = 6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, сплошные — $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

d = 1 нм, толщина слоя SiO₂ h = 0.3 нм, высота кремниевой подложки $L_S = 10H$. В гетероструктурах с покрывающим слоем кремния толщина последнего выбиралась равной $L_C = 20$ нм. Плотность $\rho_{\rm QD}$ островков при расчетах варьировалась соответствующим выбором размера $L_{\rm ID}$ рассматриваемой ячейки. С учетом аксиальной симметрии расчеты выполнялись в цилиндрической системе координат, а упругие свойства всех слоев гетероструктуры предполагались изотропными. При этом тензор модулей упругости для Si, Ge и SiO₂ содержит две независимые компоненты C_{11} , C_{12} и компоненту C_{44} , которая связана с ними соотношением $C_{44} = (C_{11} - C_{12})/2$. Значения упругих постоянных, использовавшиеся в расчетах, заимствованы из работы [20] и собраны в таблице.

На рис. 2 представлены рассчитанные распределения деформаций $\varepsilon_{\parallel}(z)$ в плоскости гетероперехода и $\varepsilon_{\perp}(z)$ — в направлении роста гетероструктуры при x = 0. Внутри квантовой точки и в подложке вблизи

Материальные параметры составляющих исследуемой гетероструктуры

Материал	а,нм	<i>C</i> ₁₁ ,ГПа	<i>С</i> ₁₂ , ГПа	<i>C</i> ₄₄,ГПа
Si	0.543	165.7	63.9	50.9
SiO ₂	0.303	85.9	48.5 17.6	40.3 34.2

гетероперехода обе составляющие существенно неоднородны, поэтому в указанных участках гетероструктуры наблюдается высокий градиент деформаций. Видно, что в кремниевой подложке преобладают растягивающие вдоль гетерограницы деформации с максимальным значением $\varepsilon_{\parallel}^{\max} \approx 2\%$ вблизи основания островков (рис. 2, *a*). Возникновение данной компоненты связано с меньшим значением постоянной решетки кремния относительно германия.

Напротив, внутри германиевой КТ наблюдаются деформации сжатия ε_{\parallel} , величина которых уменьшается от гетероперехода к вершине островка. В упругой области деформаций отношение поперечных и продольных удлинений постоянно (эффект Пуассона). Как следствие, деформации ε_{\perp} в кремниевой подложке и германиевых островках противоположны по знаку: подложка испытывает деформации сжимающих напряжений, тогда как островки — растягивающих (рис. 2, *b*). На расстоянии порядка высоты островков *H* в глубь подложки обе составляющие тензора ε_{ij} практически исчезают.

Особенностью полусферических кластеров Ge является появление двух участков с разным градиентом деформаций $d\varepsilon/dz$, которые не наблюдаются в пирамидальных КТ [9]. Первый участок, с большим значением $d\varepsilon/dz$, соответствует части кластера, лежащей внутри "наноокна" в оксидном слое, второй — полусферической области, возвышающейся над слоем SiO₂. Как показали наши расчеты, такие немонотонные зависимости $\varepsilon(z)$ наблюдаются лишь в полусферических кластерах с соотношением диаметров основания и окна в слое SiO₂ $D/d \ge 4$.

Из представленных на рис. 2 данных также следует, что составляющие ε_{\parallel} и ε_{\perp} внутри квантовых точек и в подложке под их основанием не чувствительны к изменениям плотности $\rho_{\rm QD}$ германиевых островков. При увеличении $\rho_{\rm QD}$ от $6 \cdot 10^{10}$ см⁻² (пунктирные линии на рис. 2) до предельных значений $2 \cdot 10^{12}$ см⁻² (сплошные линии на рис. 2) изменения деформаций не превышают $\Delta \varepsilon_{\parallel} \approx 0.3\%$ и $\Delta \varepsilon_{\perp} \approx 0.1\%$. В то же время увеличение $\rho_{\rm QD}$ значительно сказывается на деформированном состоянии подложки под участками поверхности, не покрытыми островками Ge (участки при |x| > D/2 на рис. 1). Как подтверждение данного факта, на рис. 3 представлены зависимости составляющей $\varepsilon_{\parallel}(z)$ на краях моделируемой ячейки при $x = -L_{\rm ID}/2$ ($x = L_{\rm ID}/2$) для трех значений плотности KT.

При низкой плотности $\rho_{\rm QD}$ (рис. 3, *a*) Si-подложка подвергнута деформациям сжатия с $\varepsilon_{\parallel}^{\rm max} \approx 0.037\%$ на гетерогранице Si/SiO₂. Постепенно уменьшаясь до нуля на расстояниях порядка 4*H*, компонента ε_{\parallel} впоследствии изменяет знак и при $z \approx 5H$ в подложке наблюдаются небольшие растягивающие вдоль гетероперехода деформации, которые также быстро угасают вглубь. С увеличением $\rho_{\rm QD}$ (рис. 3, *b*) величина деформаций в подложке возрастает с одновременным изменением пространственного распределения $\varepsilon_{\parallel}(z)$: протяженность области



Рис. 3. Распределения компоненты ε_{\parallel} тензора деформаций между островками вдоль оси *z* в гетероструктуре с открытыми квантовыми точками при плотности $\rho_{\rm QD} = 6 \cdot 10^{10} \, {\rm cm}^{-2}$ (*a*), $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{11} \, {\rm cm}^{-2}$ (*b*) и $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{12} \, {\rm cm}^{-2}$ (*c*).

сжимающих напряжений в подложке уменьшается, тогда как максимум растягивающих напряжений смещается к поверхности раздела Si/SiO₂. При достижении предельной плотности островков в подложке между островками полностью преобладают растягивающие деформации ε_{\parallel} с максимальным значением $\varepsilon_{\parallel}^{max} \approx 0.38\%$.

Аналогично увеличение плотности островков влияет и на составляющую ε_{\perp} (рис. 4). В гетероструктурах с малой плотностью $\rho_{\rm QD}$ (рис. 4, *a*) подложка возле гетерограницы Si/SiO₂ оказывается растянутой в направлении роста. При удалении от поверхности на расстояние $z \approx 2H$ компонента ε_{\perp} изменяет свой знак, и подложка оказывается сжатой в направлении [001]. При сближении островков участок растягивающих напряжений под поверхностью сужается (рис. 4, *b*), а при достижении плотности $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{12}$ см⁻² в подложке наблюдаются только деформации сжатия в направлении роста гетероструктуры (рис. 4, *c*).

Как показали наши дальнейшие исследования, описанные выше изменения напряженно-деформированного состояния гетероструктур с увеличением $\rho_{\rm QD}$ характерны только для структур с открытыми КТ. На рис. 5 представлены результаты расчетов составляющих $\varepsilon_{\parallel}(z)$ (рис. 5, *a*) и $\varepsilon_{\perp}(z)$ (рис. 5, *b*) в гетероструктурах с покрывающим слоем кремния. Максимальные дефор-



Рис. 4. Распределения компоненты ε_{\perp} тензора деформаций между островками вдоль оси *z* в гетероструктуре с открытыми квантовыми точками при плотности $\rho_{\rm QD} = 6 \cdot 10^{10} \, {\rm cm}^{-2}$ (*a*), $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{11} \, {\rm cm}^{-2}$ (*b*) и $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{12} \, {\rm cm}^{-2}$ (*c*).



Рис. 5. Распределения составляющих ε_{\parallel} (*a*) и ε_{\perp} (*b*) тензора деформаций между островками вдоль оси *z* в гетероструктуре с покрывающим кремниевым слоем при плотности $\rho_{\rm QD} = 6 \cdot 10^{10} \, {\rm cm}^{-2}$ (пунктир), $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{11} \, {\rm cm}^{-2}$ (штриховые линии), $\rho_{\rm QD} = 2 \cdot 10^{12} \, {\rm cm}^{-2}$ (сплошные линии).

мации сжатия вдоль гетероперехода и растягивающие деформации в направлении роста наблюдаются вблизи гетерограниц Si/SiO₂. Увеличение плотности приводит к возрастанию деформаций в матрице между островками. Но, в отличии от гетероструктур с открытыми КТ, изменения $\rho_{\rm QD}$ не влияют на характер пространственных распределений $\varepsilon_{\parallel}(z)$ и $\varepsilon_{\perp}(z)$, и обе составляющие сохраняют свой знак.

Таким образом, выращивание SiGe-гетероструктур с разной плотностью германиевых полусферических островков позволяет существенно варьировать их напряженно-деформированное состояние. При этом максимальная чувствительность величины и пространственных распределений полей упругих деформаций к изменениям плотности нанокластеров наблюдаются в гетероструктурах без покрывающего кремниевого слоя.

4. Заключение

Методом конечных элементов рассчитаны распределения полей упругих деформаций в гетероструктурах с полусферическими квантовыми точками германия. Показано, что в структуре, не содержащей покрывающего кремниевого слоя, изменение плотности полусферических островков практически не изменяет напряженнодеформированного состояния внутри кластеров и в подложке под их основанием. В то же время вариации плотности островков германия оказывают заметное влияние на величину и пространственное распределение деформаций в участках подложки, заключенных между квантовыми точками. В работе также показано, что в структуре с покрывающим кремниевым слоем вариации плотности германиевых нанокластеров влияют только на величину деформаций без изменений их пространственных распределений. Указанные особенности могут быть использованы при разработке новых полупроводниковых устройств разного типа, использующих упругие напряжения в качестве масштабирующего фактора в кремниевых нанотехнологиях.

Список литературы

- A. Alguno, N. Usami, T. Ujihara, K. Fujiwara, G. Sazaki, K. Nakajima, Y. Shiraki. Appl. Phys. Lett., 83 (6), 1258 (2003).
- [2] A.I. Yakimov, A.V. Dvurechenskii, A.I. Nikiforov, Yu.Yu. Proskuryakov. J. Appl Phys., **89** (10), 5676 (2001).
- [3] S.H. Hong, M.C. Kim, P.S. Jeong, S.-H. Choi, K.J. Kim. Nanotechnology, **19** (30), 305 203 (2008).
- [4] R.O. Rezaev, S.M. Kiravittaya, V. Fomin, A. Rastelli, O.G. Schmidt. Phys. Rev. B, 82 (15), 153 306 (2010).
- [5] K. Brunner. Rep. Prog. Phys., 65 (1), 27 (2002).
- [6] V. Kuryliuk, O. Korotchenkov, A. Cantarero. Phys. Rev. B, 85 (7), 075 406 (2012).
- [7] J. Stangl, V. Holý, G. Bauer. Rev. Mod. Phys., 76 (3), 725 (2004).

- [8] G. Jin, J. Liu, K.L. Wang. Appl. Phys. Lett., 83 (14), 2847 (2003).
- [9] A.B. Talochkin, A.G. Cherkov. Nanotechnology, 20 (34), 345 702 (2009).
- [10] A.I. Yakimov, A.A. Bloshkin, A.V. Dvurechenskii. Phys. Rev. B, 81 (11), 115 434 (2010).
- [11] O.G. Schmidt, C. Lange, K. Eberl, O. Kienzle, F. Ernst. Appl. Phys. Lett., 71 (16), 2340 (1997).
- [12] I. Berbezier, A. Ronda, A. Portavoce, N. Motta. Appl. Phys. Lett., 83 (23), 4833 (2000).
- [13] A.A. Shklyaev, M. Shibata, M. Ichikawa. Phys. Rev. B, 62 (3), 1540 (2000).
- [14] А.А. Шкляев, М. Ичикава. УФН, 178 (2), 139 (2008).
- [15] C.-Y. Chien, Y.-J. Chang, K.-H. Chen, W.-T. Lai, T. George, A. Scherer, P.-W. Li. Nanotechnology, 22 (43), 435 602 (2011).
- [16] M. Hecker, M. Roelke, P. Hermann, E. Zschech, V. Vartanian. J. Phys.: Conf. Ser., 209 (1), 012 008 (2010).
- [17] A.A. Shklyaev, S. Nobuki, S. Uchida, Y. Nakamura, M. Ichikawa. Appl. Phys. Lett., 88 (12), 121919 (2006).
- [18] A.O. Podolian, V.V. Kuryliuk, A.B. Nadtochiy, S.V. Kondratenko, O.A. Korotchenkov, Yu.N. Kozyrev, V.K. Sklyar, M.Yu. Rubezhanska, V.S. Lysenko. Adv. Mater. Res., 276, 159 (2011).
- [19] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals* (London, Butterworth-Heinemann, 2005).
- [20] B.A. Auld. Acoustic Fields and Waves in Solids (N.Y., Wiley, 1973) v. 1.

Редактор Т.А. Полянская

Peculiarity of strain-deformated state of Si/SiO₂/Ge heterostructure with limit density Ge nanoislands

V.V. Kuriluk, O.A. Korotchenkov

Kiev National University, 01601 Kiev, Ukraine

Abstract Calculations of the stress-strain state of silicon-germanium heterostructures with hemispherical germanium islands grown on an oxidized silicon surface are performed in the framework of the elastic continuum using the finite element method. In is shown that increasing the island density up to limit values in the open-quantum-dot SiGe structure significantly changes the magnitude and spatial distribution of the elastic strain fields. The results of the theoretical calculations allow to identify the areas of the heterostructure with a maximum change of the stress-strain state, the location of which can be varied by changing the density of the islands.