

УДК 539.3

УПРУГОЕ ПОЛЕ ПОЛУСФЕРИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ НАНОМЕТРОВОГО РАЗМЕРА В ИЗОТРОПНОМ УПРУГОМ ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ

Нгуен Ван Туен (Университет ИТМО)

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Романов А. Е. (Университет ИТМО)

Введение

Начиная с классических работ Эшелби [1], [2], упругие включения привлекают внимание исследователей, работающих в области физики и механики твердого тела. Характеристики таких включений могут быть с успехом использованы при моделировании различных физических процессов и явлений в твердых телах. Например, упругие поля, создаваемые включениями в материале, влияют на параметры кристаллической решетки, включая её симметрию, тем самым изменяя зонную структуру, электронные и оптоэлектронные свойства полупроводников [3]. Поэтому изучение упругого поведения включений различной формы и его связи с физико-механическими свойствами материалов имеет практическое значения.

В настоящей работе исследуются упругие свойства (деформации и механические напряжения) полусферического включения с дилатационной собственной деформацией, расположенного в изотропном упругом полупространстве. Полученные результаты для полей деформаций и напряжений используются для оценки влияния упругого поля включения на зонную структуру и электронные свойства полупроводникового материала на примере GaN.

Основная часть

Рассматривается дилатационная полусфера, расположенная в изотропном упругом полупространстве с плоской свободной поверхностью. Центр полусферы находится на расстоянии h от свободной поверхности (больше радиуса R_0 сферы). Предполагается, что внутри включения собственная дилатационная деформация постоянна, а в окружающей матрице собственная деформация равна нулю.

Дан анализ двух проблем: микромеханической и физической.

Проблема 1. Определение упругих полей дилатационной полусферы в полупространстве. Для решения этой задачи используется метод виртуальных дефектов [4], в соответствии с которым полное упругое поле включения в упругом полупространстве представляется как сумма упругого поля, вызванного реальным включением в бесконечном упругом пространстве, и виртуальных дефектов, распределенных по свободной поверхности полупространства. Предполагается, что полусфера может быть представлена в виде набора коаксиальных тонких дисков переменного радиуса, распределенных с заданной плотностью вдоль оси цилиндрической симметрии. Затем для расчетов полного упругого поля полусферы в полупространстве используются полученные ранее решения задачи об упругом поле бесконечно-тонкого дилатационного диска в полупространстве [5].

Проблема 2. Анализ зонной структуры полупроводникового материала вблизи включения. Аналитические результаты для упругого поля полусферического включения применяются для оценки влияния упругих деформации на зонную структуру и ширину запрещенной зоны полупроводниковых материалов, например GaN. Приводятся данные об изменении электронных свойств материала внутри и вне включения на различных расстояниях от центра полусферы и свободной поверхности.

Заключение и выводы

Изучены характеристики упругого поля дилатационной полусферы в полупространстве. Полученные результаты упругого поля полусферы: смещения, деформации и напряжения – представлены в аналитическом виде в форме полиномиальных рядов

Лежандра. Проведён анализ влияния упругого поля нановключения (дилатационной полусферы), расположенного вблизи свободной поверхности полупроводника, на зонную структуру и ширину запрещенной зоны последнего. Показана определяющая роль свободной поверхности в индуцированным упругим полем изменении зонной структуры материала.

Список использованных источников

- [1] J. D. Eshelby. Elastic Inclusions and Inhomogeneities // in *Collected Works of J. D. Eshelby*, Dordrecht: Springer Netherlands, 1961, pp. 297–350. doi: 10.1007/1-4020-4499-2_26.
- [2] J.D. Eshelby. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion // *Proc R Soc Lond A Math Phys Sci*, vol. 252, no. 1271, pp. 561–569, Oct. 1959, doi: 10.1098/rspa.1959.0173.
- [3] T. Manku and A. Nathan. Valence energy - band structure for strained group-IV semiconductors // *J Appl Phys*, vol. 73, no. 3, pp. 1205–1213, Feb. 1993, doi: 10.1063/1.353287.
- [4] A. I. Kolesnikova and A. E. Romanov. Virtual Circular Dislocation-Disclination Loop Technique in Boundary Value Problems in the Theory of Defects // *J Appl Mech*, vol. 71, no. 3, pp. 409–417, May 2004, doi: 10.1115/1.1757488.
- [5] T. Nguyen Van, A.L. Kolesnikov, and A.E. Romanov. Elasticity of thin dilatational disk in an isotropic half-space // *Materials Physics and Mechanics*, vol. 48, pp. 44–60, 2022, doi: 10.18149/MPM.4812022_5.