

# 低维半导体材料应变分布\*

周旺民<sup>1,2)</sup> 王崇愚<sup>2,3)</sup>

<sup>1)</sup> 浙江工业大学机电学院 杭州 310032)

<sup>2)</sup> 钢铁研究总院功能材料研究所 北京 100081)

<sup>3)</sup> 清华大学物理系 北京 100084)

(2003 年 11 月 3 日收到 2004 年 4 月 5 日收到修改稿)

在各向同性弹性理论的假设下,探讨了理想简单化的二维、一维与零维半导体材料量子阱、量子线与量子点的应力和应变分布规律,并讨论了它们应力、应变与应变能密度分布之间的差异.结果有助于定性理解更复杂形状结构的低维半导体材料的应力、应变及应变能分布.

关键词:低维材料,应变分布,量子阱,量子线,量子点

PACC:6865,8190,6220D,6220

## 1. 引 言

低维半导体材料,即纳米半导体材料,是自然界不存在的人工设计、制造的(通过能带工程实施)新型半导体材料,它具有与体材料截然不同的性质.随着材料维度的降低和结构特征尺寸的减小(不大于 100 nm),量子尺寸效应、量子干涉效应、量子隧穿效应、库仑阻塞效应以及多体关联和非线性光学效应都会表现得越来越明显,这将从更深的层次揭示出纳米半导体材料所特有的新现象、新效应<sup>[1,2]</sup>.分子束外延、金属有机化学气相沉积技术,超微细离子束注入加工和电子束光刻等技术的发展为实现纳米半导体材料生长、制备及纳米器件的研制创造了条件.这类纳米器件以其固有的超高速、超高频、高集成度、高效低功耗和极低阈值电流密度、极高量子效率、高的调制速度与极窄带宽以及高特征温度等特点在未来的纳米电子学、光子学和光电集成等方面有着极其重要应用前景<sup>[3-5]</sup>,极有可能触发新的技术革命,成为 21 世纪信息技术的支柱.所以对量子点等低维半导体材料的研究不仅具有极为重要的理论意义,而且具有深远的实际意义.

在量子点等低维半导体材料生长初期基体上的成核是无序的,故其大小、密度及其在空间有序性难以控制.要想制备出实用化的量子器件,就必须从理

论上弄清它们生长过程的应力分布,并从实验上加以控制,实现有序可控生长.另外非均匀应变也影响量子点的电子结构,这种影响一是流体静应力或应变,它直接影响带隙的修正;二是压电效应产生的静电势.因此量子点等的应力分布是低维半导体材料研究极其重要的一个方面.

本文基于线弹性 Eshelby 夹杂理论<sup>[6-8]</sup>思想,研究了二维、一维与零维半导体材料量子阱、量子线与量子点应力和应变分布规律,并讨论了它们应力、应变及应变能分布之间的差异.这些结果可以帮助我们定性理解更复杂形状结构的低维半导体材料的应力、应变及应变能分布.

## 2. 弹性理论简介

弹性理论<sup>[9]</sup>是研究弹性体由于受外力作用或温度改变等原因而发生的应力、形变和位移等.弹性体在载荷作用下,体内任意一点的应力状态由 6 个应力分量  $\sigma_{ij}$  ( $i, j = x, y, z$ ) 表示,它们组成一个二阶张量.其中  $\sigma_{ii}$  为正应力,  $\sigma_{ij}$  ( $i \neq j$ ) 为剪应力.弹性体内任一点的应变由 6 个应变分量  $\epsilon_{ij}$  ( $i, j = x, y, z$ ) 表示,它们组成一个二阶张量.其中  $\epsilon_{ii}$  为正应变,  $\epsilon_{ij}$  ( $i \neq j$ ) 为剪应变.弹性体内任一点的位移由沿直角坐标轴方向的三个位移分量  $u_i$  ( $i = x, y, z$ ) 表示,它们

\* 国家自然科学基金(批准号 90101004)资助的课题.

组成一个一阶张量,描述弹性体变形的这 15 个量之间并不是孤立的,它们满足一定的关系,称之为弹性力学基本方程.

平衡方程

$$\sigma_{ij,j} + F_i = 0 \quad (\text{在弹性体 } V \text{ 内}). \quad (1)$$

几何方程

$$\epsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2 \quad (\text{在弹性体 } V \text{ 内}). \quad (2)$$

本构方程

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (\text{在弹性体 } V \text{ 内}). \quad (3)$$

除此之外,它们还应满足一些边界条件.

应力边界条件

$$\sigma_{ij}n_j = T_i \quad (\text{在应力边界 } S_\sigma \text{ 上}). \quad (4)$$

位移边界条件

$$u_i = \bar{u}_i \quad (\text{在位移边界 } S_u \text{ 上}). \quad (5)$$

上述方程采用 Einstein 求和约定. 这里,  $\sigma_{ij,j}$  (或  $u_{i,j}$ ) 表示  $\sigma_{ij}$  (或  $u_i$ ) 关于变量  $j$  的导数;  $F_i$  是单位体积的体力分量;  $C_{ijkl}$  是弹性常数张量;  $T_i$  是作用在应力边界上单位面积上的面力;  $\bar{u}_i$  是位移边界上给定的位移; 应力边界  $S_\sigma$  与位移边界  $S_u$  组成弹性体  $V$  的全部边界  $S$ . 一般情况下, 弹性常数张量  $C_{ijkl}$  有 21 个独立的弹性常数. 随着晶系的对称性增强, 独立弹性常数的数目会减少. 如第 IV 族半导体材料, 其晶格结构是金刚石结构, 由 III 族和 V 族元素合成的 III-V 族化合物半导体材料, 其晶格结构是闪锌矿结构, 这些都是立方晶系, 独立的弹性常数有 3 个:  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ . 如果材料是各向同性, 仅有两个独立的弹性常数<sup>[10]</sup>, 常取作  $E = (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} + C_{12})$ ,  $\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12})$ , 分别称为 Young's 模量和 Poisson 比.

求解微分方程的边值问题(1)~(5)式就可得到弹性体内的应力、位移与应变.

各向同性假设下的本构方程为

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \left[ \epsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \epsilon_{mm} \right]. \quad (6)$$

如果弹性体由于非弹性原因, 如相变、热膨胀、晶格错配等一些物理因素发生了所谓的本征应变  $\epsilon_{ij}^0$ , 则实际应变  $\epsilon_{ij}$  减去本征应变  $\epsilon_{ij}^0$  就是产生应力的应变, 亦即应力与应变的关系应为

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \left[ \epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0 + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} (\epsilon_{mm} - \epsilon_{mm}^0) \right]. \quad (7)$$

这时的应变能密度为

$$U = \frac{1}{2} \sigma_{ij} (\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0). \quad (8)$$

应变能密度  $U$  可分解为与应力和应变的球分量有关的膨胀能密度  $U_s$  和与偏量有关的畸变能密度  $U_d$  之和,  $U = U_s + U_d$ <sup>[11]</sup>, 其中

$$U_s = \frac{1}{6} \sigma_m (\epsilon_{pp} - \epsilon_{pp}^0), \quad (9)$$

$$U_d = \frac{1}{2} \sigma'_{ij} (\epsilon'_{ij} - \epsilon'_{ij}^0),$$

其中偏应力与偏应变分别为

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sigma_m,$$

$$\epsilon'_{ij} - \epsilon'_{ij}^0 = \epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0 - \frac{1}{3} \delta_{ij} (\epsilon_{mm} - \epsilon_{mm}^0).$$

### 3. 量子阱、量子线和量子点的应力及应变分布

量子阱是一个非常薄的扁平的半导体层, 它夹在具有高导带能的半导体两层之间; 量子线是以微型条的形式, 蚀刻在一个包含量子阱的样品里; 目前制备的量子点, 尺度为纳米量级, 包含在一较宽带隙的半导体材料中. 因此, 我们把量子阱、量子线与量子点分别抽象为理想化的几何形状<sup>[12]</sup>: 薄圆板形、细长圆柱形与小球形, 它们被称之为衬底的外部材料所包围. 假设它们是各向同性材料, 内部材料(量子阱、量子线和量子点)与外部材料(衬底)有不同的晶格常数及弹性常数, 但具有相同的晶体结构. 下面以 in 表示内部材料, 以 out 表示外部材料, 它们的晶格错配度是

$$\epsilon = (a_0^{\text{in}} - a_0^{\text{out}}) / a_0^{\text{out}}, \quad (10)$$

其中  $a_0^{\text{in}}$ ,  $a_0^{\text{out}}$  分别是内部材料与外部材料的晶格常数,  $a_0^{\text{in}} > a_0^{\text{out}}$ . 对于 III-V 族半导体材料, 由晶格错配诱生的本征应变为<sup>[13]</sup>

$$\epsilon_{ij}^0 = -\chi \delta_{ij} \epsilon, \quad (11)$$

其中内部材料  $\chi = 1$ , 外部材料  $\chi = 0$ .

#### 3.1. 圆板形量子阱

假定一非常大的衬底材料包含一非常小半径为  $r_0$  的薄圆板形量子阱材料. 在  $z$  方向很薄, 力学上, 这是平面应力状态, 即  $\sigma_{zz} = 0$ . 采用极坐标系  $(r, \theta)$ , 相应的基本方程(忽略体力)如下:

平衡方程

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{2\sigma_{r\theta}}{r} = 0. \quad (13)$$

几何方程

$$\begin{aligned}\epsilon_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r}, \\ \epsilon_{\theta\theta} &= \frac{u_r}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta}, \\ \epsilon_{r\theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r}.\end{aligned}\quad (14)$$

本构方程

$$\epsilon_{rr} + \chi\epsilon = \frac{1}{E}(\sigma_{rr} - \nu\sigma_{\theta\theta}), \quad (15)$$

$$\epsilon_{\theta\theta} + \chi\epsilon = \frac{1}{E}(\sigma_{\theta\theta} - \nu\sigma_{rr}), \quad (16)$$

$$\epsilon_{zz} + \chi\epsilon = -\frac{\nu}{E}(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}). \quad (17)$$

现在的力学问题是轴对称弹性问题,即剪应力与剪应变为零,且各个量只是径向坐标  $r$  的函数.在内部材料,由晶格错配引起的径向、环向及轴向的本征应变为  $-\epsilon$ .若外部材料在圆盘周界上给内部材料施加一个压力  $P$ ,则内部材料同时也给外部材料施加压力  $P$ ,由应力函数法不难得到<sup>[14]</sup>

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}^{\text{in}} &= \sigma_{\theta\theta}^{\text{in}} = -P \\ \sigma_{rr}^{\text{out}} &= -\sigma_{\theta\theta}^{\text{out}} = -P\left[\frac{r_0}{r}\right]^2.\end{aligned}\quad (18)$$

由(15)–(17)式得

$$\epsilon_{rr}^{\text{in}} = \epsilon_{\theta\theta}^{\text{in}} = -\frac{1-\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}}P - \epsilon, \quad (19)$$

$$\epsilon_{rr}^{\text{out}} = -\epsilon_{\theta\theta}^{\text{out}} = -\frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}}P\left[\frac{r_0}{r}\right]^2, \quad (20)$$

$$\epsilon_{zz}^{\text{in}} = \frac{2\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}}P - \epsilon, \quad (21)$$

$$\epsilon_{zz}^{\text{out}} = 0.$$

由位移在圆盘周界上的连续性条件

$$(u_r^{\text{in}} - u_r^{\text{out}})|_{r=r_0} = 0, \quad (22)$$

得

$$P = -\frac{\epsilon}{\frac{1-\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}} + \frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}}}. \quad (23)$$

由此可得

$$U_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1-2\nu^{\text{in}})}{3E^{\text{in}}}P^2, \quad (24)$$

$$U_d^{\text{in}} = \frac{1+\nu^{\text{in}}}{3E^{\text{in}}}P^2,$$

$$U_s^{\text{out}} = 0,$$

$$U_d^{\text{out}} = \frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}}P^2\left[\frac{r_0}{r}\right]^4. \quad (25)$$

相应的应变能

$$\Pi_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1-2\nu^{\text{in}})\pi r_0^2}{3E^{\text{in}}}P^2, \quad (26)$$

$$\Pi_d^{\text{in}} = \frac{(1+\nu^{\text{in}})\pi r_0^2}{3E^{\text{in}}}P^2,$$

$$\Pi_s^{\text{out}} = 0,$$

$$\Pi_d^{\text{out}} = \frac{(1+\nu^{\text{out}})\pi r_0^2}{E^{\text{out}}}P^2. \quad (27)$$

整个系统的应变能

$$\Pi = \left[\frac{1-\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}} + \frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}}\right]\pi r_0^2 P^2. \quad (28)$$

### 3.2. 圆柱形量子线

假定一无限大的衬底材料包含一细长圆柱形量子线,其横截面半径为  $r_0$ ,圆柱形轴是  $z$  轴,沿着轴方向,由于晶格错配内部材料发生变形,其应变为本征应变  $-\epsilon$ ,而外部材料保持不变<sup>[13,15]</sup>,即  $\epsilon_{zz}^{\text{in}} = -\epsilon$ ,  $\epsilon_{zz}^{\text{out}} = 0$ .这是一个平面应变力学问题,采用极坐标系  $(r, \theta)$ ,相应的平衡方程和几何方程同(12)–(14)式,本构方程为

$$\epsilon_{rr} = \frac{1-\nu^2}{E}\left(\sigma_{rr} - \frac{\nu}{1-\nu}\sigma_{\theta\theta}\right) - \chi\epsilon, \quad (29)$$

$$\epsilon_{\theta\theta} = \frac{1-\nu^2}{E}\left(\sigma_{\theta\theta} - \frac{\nu}{1-\nu}\sigma_{rr}\right) - \chi\epsilon, \quad (30)$$

$$\epsilon_{r\theta} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{r\theta}. \quad (31)$$

这里假定了内部材料由于晶格错配在径向及环向发生了本征应变  $-\epsilon$ .现在的力学问题也是轴对称问题,即剪应力与剪应变不存在,环向位移  $u_\theta = 0$ ,且各个量只是径向坐标  $r$  的函数.若外部材料在圆柱面上给内部材料施加一个压力  $P$ ,则内部材料同时也给外部材料施加压力  $P$ ,由应力函数法不难得到<sup>[14]</sup>

$$\epsilon_{rr}^{\text{in}} = \epsilon_{\theta\theta}^{\text{in}} = -\frac{(1+\nu^{\text{in}})\chi(1-2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}}P - \epsilon, \quad (32)$$

$$\sigma_{rr}^{\text{in}} = \sigma_{\theta\theta}^{\text{in}} = -P,$$

$$\epsilon_{rr}^{\text{out}} = -\epsilon_{\theta\theta}^{\text{out}} = -\frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}}P\left[\frac{r_0}{r}\right]^2, \quad (33)$$

$$\sigma_{rr}^{\text{out}} = -\sigma_{\theta\theta}^{\text{out}} = -P\left[\frac{r_0}{r}\right]^2.$$

由于圆柱面上位移连续,即

$$(u_r^{\text{in}} - u_r^{\text{out}})|_{r=r_0} = 0, \quad (34)$$

得

$$P = -\frac{1}{\frac{1+\nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} + \frac{(1+\nu^{\text{in}})\chi(1-2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}}}\epsilon. \quad (35)$$

相应的应变能密度

$$U_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})}{3E^{\text{in}}} P^2, \quad (36)$$

$$U_d^{\text{in}} = \frac{(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})^2}{3E^{\text{in}}} P^2, \\ U_s^{\text{out}} = 0, \\ U_d^{\text{out}} = \frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} P^2 \left[ \frac{r_0}{r} \right]^4. \quad (37)$$

横截面应变能

$$\Pi_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})\pi r_0^2}{3E^{\text{in}}} P^2, \quad (38)$$

$$\Pi_d^{\text{in}} = \frac{(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})^2\pi r_0^2}{3E^{\text{in}}} P^2, \\ \Pi_s^{\text{out}} = 0, \\ \Pi_d^{\text{out}} = \frac{(1 + \nu^{\text{out}})\pi r_0^2}{E^{\text{out}}} P^2. \quad (39)$$

系统总应变能

$$\Pi = \left[ \frac{(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}} + \frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} \right] \pi r_0^2 P^2. \quad (40)$$

### 3.3. 球形量子点

假定一无限大的衬底材料包含一半径为  $r_0$  的球形量子点. 所讨论的问题是球对称情况. 在球坐标系  $(r, \theta, \varphi)$  下的基本方程(不计体力)可简化成下述形式:

平衡方程

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{2\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\varphi\varphi}}{r} = 0. \quad (41)$$

几何方程

$$\epsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \\ \epsilon_{\theta\theta} = \frac{u_r}{r}, \\ \epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r}. \quad (42)$$

本构方程

$$\epsilon_{rr} = \frac{1}{E} [\sigma_{rr} - \chi(\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{\varphi\varphi})] - \chi\epsilon, \quad (43)$$

$$\epsilon_{\theta\theta} = \frac{1}{E} [\sigma_{\theta\theta} - \chi(\sigma_{rr} + \sigma_{\varphi\varphi})] - \chi\epsilon, \quad (44)$$

$$\epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{1}{E} [\sigma_{\varphi\varphi} - \chi(\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{rr})] - \chi\epsilon. \quad (45)$$

由于晶格错配内部材料发生了本征应变  $-\epsilon$ . 若外部材料在球面上给内部材料施加一个压力  $P$ , 则内部材料同时也给外部材料施加压力  $P$ , 由位移函数法可以得到<sup>[14, 16]</sup>

$$\sigma_{rr}^{\text{in}} = \sigma_{\theta\theta}^{\text{in}} = \sigma_{\varphi\varphi}^{\text{in}} = -P, \quad (46)$$

$$\epsilon_{rr}^{\text{in}} = \epsilon_{\theta\theta}^{\text{in}} = \epsilon_{\varphi\varphi}^{\text{in}} = -\frac{1 - 2\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}} P - \epsilon, \quad (47)$$

$$\sigma_{rr}^{\text{out}} = -2\sigma_{\theta\theta}^{\text{out}} = -2\sigma_{\varphi\varphi}^{\text{out}} = -P \left[ \frac{r_0}{r} \right]^3, \quad (48)$$

$$\epsilon_{rr}^{\text{out}} = -2\epsilon_{\theta\theta}^{\text{out}} = -2\epsilon_{\varphi\varphi}^{\text{out}} = -\frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} P \left[ \frac{r_0}{r} \right]^3. \quad (49)$$

由球面上径向位移的连续性条件

$$(u_r^{\text{in}} - u_r^{\text{out}})|_{r=r_0} = 0, \quad (50)$$

得

$$P = -\frac{\epsilon}{\frac{1 - 2\nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}} + \frac{1 + \nu^{\text{out}}}{2E^{\text{out}}}}. \quad (51)$$

相应的应变能密度

$$U_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1 - 2\nu^{\text{in}})}{2E^{\text{in}}} P^2, \quad (52)$$

$$U_d^{\text{in}} = 0,$$

$$U_s^{\text{out}} = 0,$$

$$U_d^{\text{out}} = \frac{\chi(1 + \nu^{\text{out}})}{4E^{\text{out}}} P^2 \left[ \frac{r_0}{r} \right]^6. \quad (53)$$

应变能

$$\Pi_s^{\text{in}} = \frac{\chi(1 - 2\nu^{\text{in}})\pi r_0^3}{E^{\text{in}}} P^2, \quad (54)$$

$$\Pi_d^{\text{in}} = 0,$$

$$\Pi_s^{\text{out}} = 0,$$

$$\Pi_d^{\text{out}} = \frac{(1 + \nu^{\text{out}})\pi r_0^3}{E^{\text{out}}} P^2. \quad (55)$$

系统总应变能

$$\Pi = \left[ \frac{\chi(1 - 2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}} + \frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} \right] \pi r_0^3 P^2. \quad (56)$$

## 4. 比较及讨论

我们已得到了量子阱、量子线及量子点的应力、应变及应变能密度分布. 对于这三种结构有一个共同点, 就是内部材料的应变是常数, 即应变分布均匀, 当然应力分布也均匀. 但外部材料的应变与应力分布, 对于薄圆盘和细圆柱以  $r^{-2}$  的规律衰减, 球形以  $r^{-3}$  的规律衰减. 对于应变能密度, 薄圆盘和细圆柱的膨胀能与畸变能密度都是非零常数, 而外部衬底的膨胀能密度为零(当然膨胀能也为零), 畸变能密度以  $r^{-4}$  的规律衰减; 小球形的膨胀能密度也为常数, 但畸变能密度为零, 外部衬底的膨胀能密度为零, 畸变能密度以  $r^{-6}$  的规律衰减. 如果取  $\nu = 1/3$ ,

膨胀能与畸变能分别与总应变能的比值示于图1. 由图1可以清楚地看出, 内部材料与外部衬底的膨胀能与畸变能分别在总应变能中的比重.

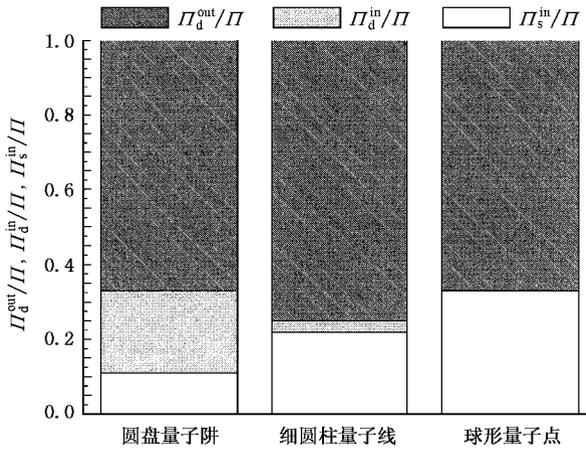


图1 薄圆盘量子阱、细圆柱量子线和球形量子点的各应变能与总应变能之比

系统达到平衡的总应变能为

$$\begin{aligned} \Pi &= \int_V U dV = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} (\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0) dV \\ &= -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^0 dV - \left( -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \epsilon_{ij} dV \right). \end{aligned} \quad (57)$$

(57)式等号右端第一项

$$\Pi_{\text{misfit}} = -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^0 dV \quad (58)$$

是由晶格错配引起的本征应变  $\epsilon_{ij}^0$  而产生的错配应变能, 第二项

$$\Pi_{\text{release}} = -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \epsilon_{ij} dV \quad (59)$$

是系统由晶格错配达到共格(平衡)状态释放的应变能. 通过计算我们发现, 内部材料(量子阱、量子线和量子点)在平衡过程中释放的应变能分别为

$$\Pi_{\text{release}} = -\left( \frac{1 - \nu^{\text{in}}}{E^{\text{in}}} P^2 + P\epsilon \right) \pi r_0^2 \quad (\text{量子阱}), \quad (60)$$

$$\Pi_{\text{release}} = -\left[ \frac{(1 + \nu^{\text{in}})(1 - 2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}} P^2 + P\epsilon \right] \pi r_0^2 \quad (\text{量子线}), \quad (61)$$

$$\Pi_{\text{release}} = -\left[ \frac{2(1 - 2\nu^{\text{in}})}{E^{\text{in}}} P^2 + 2P\epsilon \right] \pi r_0^3 \quad (\text{量子点}). \quad (62)$$

外部材料(衬底)释放(实际上吸收)的应变能为

$$\Pi_{\text{release}} = -\frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} P^2 \pi r_0^2 \quad (\text{量子阱、量子线}) \quad (63)$$

$$\Pi_{\text{release}} = -\frac{1 + \nu^{\text{out}}}{E^{\text{out}}} P^2 \pi r_0^3 \quad (\text{量子点}). \quad (64)$$

不难验证, 内部材料释放的应变能与外部材料(衬底)吸收的应变能大小相等, 正好抵消, 即平衡状态的应变能等于错配应变能  $\Pi = \Pi_{\text{misfit}}$ , 弹性弛豫应变能守恒.

以上这些结果可以有助于我们理解更复杂形状结构的低维半导体材料的应力、应变及应变能分布.

[ 1 ] Reimann S M, Manninen M 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 1283  
 [ 2 ] Ashoori R C 1996 *Nature* **379** 413  
 [ 3 ] Fafard S *et al* 1996 *Science* **274** 1350  
 [ 4 ] Phillips J, Kamath K, Bhattacharya P 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 2020  
 [ 5 ] Kim S, Mohseni H, Erdtmann M *et al* 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 963  
 [ 6 ] Eshelby J D 1957 *Proc. Roy. Soc. Lond A* **241** 376  
 [ 7 ] Eshelby J D 1959 *Proc. Roy. Soc. Lond A* **252** 561  
 [ 8 ] Eshelby J D 1961 *Progress in Solid Mechanics* (Vol. 2) (Amsterdam: North-Holland) p89  
 [ 9 ] Landau L D, Lifshitz E M 1986 *Theory of Elasticity* (3rd ed) (Oxford: Pergamon)  
 [ 10 ] Fang J X, Lu D 1980 *Solid State Physics* (Shanghai: Shanghai Science and Technology Press) [in Chinese] 方俊鑫、陆 栋 1980

固体物理学(上海:上海科学技术出版社)]  
 [ 11 ] Saada A S 1974 *Elasticity: Theory and Application* (New York: Pergamon).  
 [ 12 ] Grundmann M, Stier O, Bimberg D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11969  
 [ 13 ] Ipatova I P, Malyshev V G, Shchukin V A 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 7198  
 [ 14 ] Xu Z L 1982 *Elasticity* (2nd ed) (Beijing: People's Education Press) [in Chinese] 徐芝纶 1982 弹性力学(第二版) (北京:人民教育出版社)]  
 [ 15 ] Grundmann M, Stier O, Bimberg D 1994 *Phys. Rev. B* **50** 14187  
 [ 16 ] Wu J K, Wang M Z, Wang W 2001 *Introduction to Elasticity* (revised ed) (Beijing: Peking University Press) [in Chinese] 武际可、王敏中、王 炜 2001 弹性力学引论(修订版) (北京:北京大学出版社)]

# The strain distribution of low-dimensional semiconductor materials \*

Zhou Wang-Min<sup>1)2)</sup> Wang Chong-Yu<sup>2)3)</sup>

<sup>1)</sup>*College of Mechanical and Electrical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310032, China*

<sup>2)</sup>*Institute of Functional Materials, Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100081, China*

<sup>3)</sup>*Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

( Received 3 November 2003 ; revised manuscript received 15 April 2004 )

## Abstract

The stress and strain distributions of simplified and idealized two-, one- and zero-dimensional semiconductor materials, i. e. quantum well, quantum wire and quantum dot are investigated based on the isotropic theory of elasticity, and the differences among the stress, strain and strain energy distributions for the materials are discussed. The results can help us to understand qualitatively the stress, strain and strain energy distributions of the more complicated shapes and structures of low-dimensional semiconductor materials.

**Keywords** : low-dimensional materials, strain distribution, quantum well, quantum wire, quantum dots

**PACC** : 6865, 8190, 6220D, 6220

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 90101004 ).