

УДК 621.315.592

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ
НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОДЛОЖЕК АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ**

С. Э. Притчин, В. В. Артамонов

Кременчугский национальный университет имени Михаила Остроградского
ул. Первомайская, 20, г. Кременчуг, 39600, Украина. E-mail: pritchinse@ukr.net

Рассмотрен вопрос моделирования изменения механических свойств подложек арсенида галлия под влиянием остаточных напряжений. Показано, что механические свойства определяют много параметров подложки, например, такие как изгиб, внутренние деформации и хрупкость. Для моделирования механических свойств под давлением использовался метод сохранения деформации в объеме, который позволил рассчитать упругие константы, используя коэффициенты напряженно-деформированного состояния. Определены начальные условия моделирования, и при помощи программы CASTEP рассчитаны значения упругих констант c_{11} , c_{12} , c_{44} в зависимости от величины остаточных напряжений. Показано что увеличение уровня остаточных напряжений до значения 6 ГПа приводит к увеличению значения упругих констант, при этом наибольший приращение наблюдается у константы c_{12} . В диапазоне значений остаточных напряжений 5,0–6,0 ГПа значения констант c_{11} и c_{44} начинают уменьшаться. Определен критерий механической устойчивости подложки арсенида галлия при воздействии остаточных напряжений. Установлено, что нарушение устойчивости происходит при величине остаточных напряжений равной 8 ГПа.

Ключевые слова: подложки арсенида галлия, остаточные напряжения, механическая устойчивость.

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ЗАЛИШКОВИХ НАПРУЖЕНЬ НА МЕХАНІЧНІ
ВЛАСТИВОСТІ ПІДКЛАДОК АРСЕНІДУ ГАЛІЮ**

С. Е. Притчин, В. В. Артамонов

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського
вул. Першотравнева, 20, м. Кременчук, 39600, Україна. E-mail: pritchinse@ukr.net

Розглянуто питання моделювання зміни механічних властивостей підкладок арсеніду галію під впливом залишкових напруг. Показано, що механічні властивості визначають багато параметрів підкладки, наприклад, такі як вигин, внутрішні деформації та крихкість. Для моделювання механічних властивостей під тиском використовувався метод збереження деформації в об'ємі, який дозволив розрахувати пружні константи, використовуючи коефіцієнти напружено-деформованого стану. Визначено початкові умови моделювання, й за допомогою програми CASTEP розраховано значення пружних констант c_{11} , c_{12} , c_{44} залежно від величини залишкових напруг. Показано що збільшення рівня залишкових напруг до значення 6 ГПа призводить до збільшення значення пружних констант, при цьому найбільше збільшення спостерігається у константі c_{12} . Починаючи з діапазону значень залишкових напруг 5,0–6,0 ГПа значення констант c_{11} і c_{44} починає зменшуватися. Визначено критерій механічної стійкості підкладок арсеніду галію під впливом залишкових напруг. Встановлено, що порушення стійкості відбувається при величині залишкових напруг що дорівнює 8 ГПа.

Ключові слова: підкладки арсеніду галію, залишкові напруги, механічна стійкість.

АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ. В течение последних десятилетий приборы на основе арсенида галлия (GaAs) для микро- и оптоэлектроники перешли от военного применения к коммерческим. GaAs не заменяет, но дополняет линейку электронных приборов на основе кремния. Постоянное увеличение использования приборов на основе GaAs определяется уникальными физическими свойствами GaAs, которые позволяют создавать приборы с уникальными свойствами, а также прогрессом, который достигнут в технологии производства слитков и подложек GaAs.

Как правило, производители устройств GaAs требуют низкой стоимости подложек, которые при этом должны отвечать техническим требованиям. Электронные приборы, изготовленные на основе подложек GaAs, должны надежно работать длительное время в различных температурных режимах, обусловленных техническими условиями. Эти требования можно обеспечить только при отсутствии недостатков, связанных с электрическими и механическими свойствами подложки.

Известно, что механические свойства арсенида галлия относятся к фундаментальным явлениям твердотельной физики, таким как межатомные потенциалы, фоновые спектры и т.д. Они также связаны с теплоемкостью, тепловым расширением и температурой Дебая. Знание механических свойств GaAs имеет важное значение для многих практических применений, определяющимися этими свойствами, например, изгиб, термоупругие напряжения, внутренние деформации и хрупкость [1].

Несмотря на высокие технологические достижения в производстве GaAs, влияние остаточных напряжений на механические свойства GaAs до сих пор не достаточно изучено. Многие фундаментальные проблемы возникающие в подложках GaAs под действием остаточных напряжений, например, изменение упругих свойств, влияние на электронную структуру и т.д. по-прежнему остаются нерешенными.

Вопросу изучения влияния остаточных напряжений на параметры GaAs исследователями уделялось достаточно большое внимание [2].

В то же время вопрос определения влияние остаточного напряжения и внутреннего давления, кото-

рое они вызывают, на упругие константы требует особого рассмотрения. Данная проблема рассматривалась в работах [3, 4].

Использование компьютерного моделирования сделало возможным вычисления с большой точностью электронных и структурных свойств твердых тел из первых принципов. Это позволило объяснить и предсказать свойства твердых тел, в частности, подложек GaAs в условиях, которые являются недоступными для эксперимента [5].

Целью работы является разработка математической модели описывающей влияния остаточных напряжений на механические свойства подложек арсенида галлия и позволяющая прогнозировать качество получаемых подложек.

МАТЕРИАЛ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ. *Достижение цели* обеспечивается решением следующих задач:

- анализ влияния давления, создаваемого остаточными напряжениями на механические свойства подложек GaAs;
- определение начальных условий модели;
- разработка математической модели;
- определение условий механической устойчивости подложки.

Как показано в работе [6], остаточные напряжения создают искажение кристаллической решетки и вызывают давление в микрообъеме подложки.

Рассмотрим влияние этого давления на механические свойства GaAs.

Для моделирования механических свойств под давлением, создаваемым остаточными напряжениями P , мы использовали метод сохранения деформации в объеме, т.к. этот метод позволяет рассчитать упругие константы, используя коэффициенты напряженно-деформированного состояния, используемые для расчета скорости упругих волн в твердом теле. В соответствии с [7] упругие константы c_{ijkl} через конечные значения переменных деформации определяется как:

$$c_{ijkl} = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}(x)}{\partial e_{kl}} \right)_X, \quad (1)$$

где σ_{ij} и e_{kl} – приложенное напряжение и тензор деформации Эйлера, X и x являются координатами и до и после деформации. Для данного напряжения [8] можно использовать выражение:

$$c_{ijkl} = F_{ijkl} + \frac{P}{2} \begin{pmatrix} 2\delta_{ij} & \delta_{kl} & -\delta_{il} & \delta_{jk} & -\delta_{ik} & \delta_{jl} \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$F_{ijkl} = \left(\frac{1}{V(x)} \frac{\partial^2 E(x)}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right)_X, \quad (3)$$

где F_{ijkl} обозначает производные второго порядка

по отношению к бесконечно малой деформации (деформации Эйлера).

Тензор четвертого ранга c имеет в общем случае 21 независимый компонент. С учетом симметрии кристалла цинковой обманки, которую представляет собой арсенид галлия это число уменьшается до 3 (c_{11}, c_{12}, c_{44}). В соответствии с [8] значение δ для расчета общей энергии E можно принято равным $\pm 0,0018$.

По известным значениям упругих постоянных, можно получить значение температуры Дебая (Θ_D) при которой возбуждаются все моды колебаний в арсениде галлия. Дальнейшее увеличение температуры не приводит к появлению новых мод колебаний, а лишь ведёт к увеличению амплитуд уже существующих, т.е. средняя энергия колебаний с ростом температуры растёт. Температура Дебая может быть оценена по средней скорости звука V_m , значение которого получено в [9]:

$$\Theta = \frac{\hbar}{k} \left(\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right)^{\frac{1}{3}} V_m, \quad (4)$$

где \hbar – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, N_A – число Авогардо, n – число атомов в молекуле, M – молекулярный вес, ρ – плотность, V_m – средняя скорость звука в кристалле GaAs, которая определяется как

$$V_m = \left(\frac{1}{3} \left(\frac{2}{C_s^3} + \frac{1}{C_L^3} \right) \right)^{-\frac{1}{3}}, \quad (5)$$

где C_s и C_L являются поперечной и продольной скоростью звука соответственно.

Для арсенида галлия модуль объёмного сжатия K и модуль сдвига G определяются из следующих выражений:

$$K = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}; \quad (6)$$

$$G = \frac{(G_V + G_R)}{2}, \quad (7)$$

где G_V – модуль упругости,

$$G_V = \frac{(2C + 3c_{44})}{5}, \quad (8)$$

и G_R – модуль упругости.

$$G_R = \frac{1}{15 \left(\frac{6}{C} + \frac{9}{c_{44}} \right)}, \quad (9)$$

а параметр C определяется выражением:

$$C = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}. \quad (10)$$

Значение поперечной и продольной скорости звука C_S и C_L получаются из уравнения Навье в соответствии с [10]:

$$C_S = \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)}} = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{K+G}{\rho}} \quad (11)$$

$$C_L = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\nu)}} = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (12)$$

В качестве начальных условий были приняты следующие значения постоянной атомной решетки α , модуля объемного сжатия B_0 , и производной давления B_0' для арсенида галлия при нулевом начальном давлении и нулевой температуре:

$$\alpha = 5,653 [11]; B_0 = 75 [12]; B_0' = 4,49 [12].$$

Для расчета модели мы использовали программу CASTEP, со следующими принятыми начальными условиями:

Pseudo atomic calculation performed for Ga	$3d^{10} 4s^2 4p^1$
Converged in 31 iterations to a total energy of	-2050,9297 eV
Pseudo atomic calculation performed for As	$4s^2 4p^3$
Converged in 17 iterations to a total energy of	-168,5992 eV
Calculation parallelised over	1 nodes.
K-points are distributed over each containing	1 groups, 1 nodes.

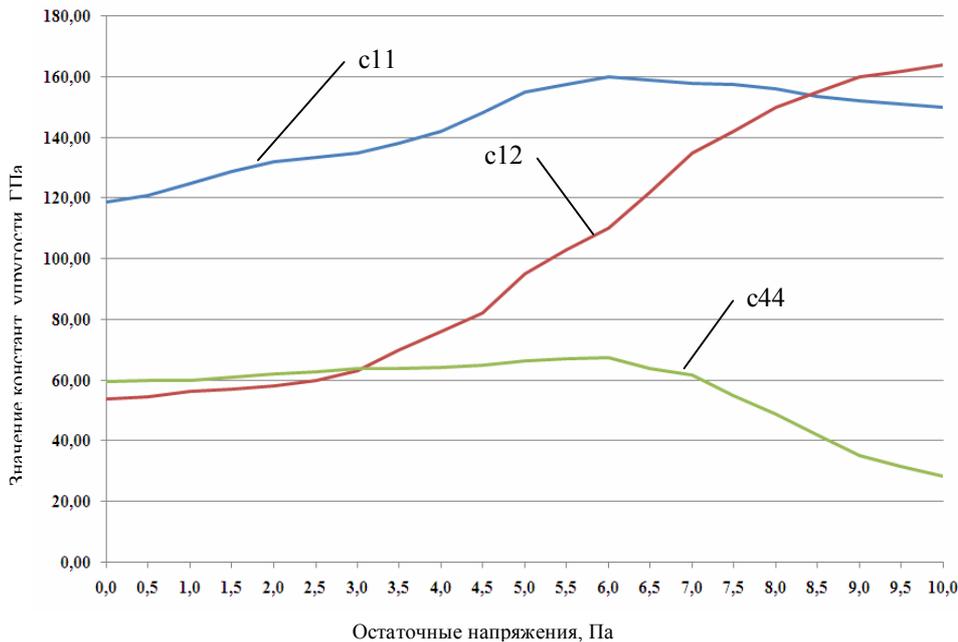


Рисунок 1 – Рассчитанные значения упругих констант c_{11} , c_{12} , c_{44} в зависимости от величины остаточных напряжений

Можно видеть, что увеличение уровня остаточных напряжений до значения 6 ГПа приводит к увеличению значения упругих констант, при этом наибольший приращение наблюдается у константы c_{12} . В диапазоне значений остаточных напряжений 5,0–6,0 ГПа значения констант c_{11} и c_{44} начинают уменьшаться.

Рассмотрим критерий механической устойчивости подложки арсенида галлия при воздействии остаточных напряжений создающих давление.

Предположим, что остаточное напряжение создает давление P которое сжимает область кристалла до плотности ρ_1 .

Тогда малая однородная деформация, создаваемая этим давлением, переводит решетку Браве \vec{a} в

новое положение, определяемое искажением решетки \vec{a}' . Можно записать что,

$$a'_i = \sum (\delta_{ij} + \varepsilon_{ij}) R_j. \quad (13)$$

Для этого случая значения деформации $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ являются константными и не зависят от \vec{a} . Изменение внутренней энергии на единицу массы кристалла по отношению к тензору деформаций Лагранжа можно записать в виде:

$$\eta_{ij} = \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_{ik} \varepsilon_{kj}. \quad (14)$$

Тогда с учетом [13] можно записать полную энергию напряженного состояния подложки:

$$E(\rho_1, \eta_{mn}) = E(\rho_1) + \frac{1}{\rho_1} \times \left(\sum_{ij} T_{ij} \eta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} c_{ijkl} \eta_{ij} \eta_{kl} + \dots \right), \quad (15)$$

где T_{ij} обозначает компоненты тензора напряжения перед деформацией:

$$T_{ij} = \rho_1 \frac{\partial E(\rho_1, \eta_{mn})}{\partial \eta_{ij}} \quad (16)$$

Для данного давления можно записать, что

$$T_{ij} = -P \delta_{ij}, \quad (17)$$

и упругие константы c_{ijkl} в произвольном кристаллографическом направлении при воздействии давления создаваемого остаточными напряжениями определяются по выражению:

$$c_{ijkl} = \rho_1 \frac{\partial^2 E(\rho_1, \eta_{mn})}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl}}. \quad (18)$$

Представив упругую деформацию в виде [13]:

$$\varepsilon_{ij} = s_{ij} \gamma + e_{ij} \gamma^2 + \dots \quad (19)$$

где γ - бесконечно малый параметр функции $\varepsilon_{ij} = f_{ij}(\gamma)$ и $f_{ij}(0) = 0$.

С учетом (14) и (17) можно переписать уравнение (15) в следующем виде:

$$E(\rho_1, \eta_{mn}) = E(\rho_1) + A \gamma + \frac{D}{2} \gamma^2 + \dots \quad (20)$$

где

$$A = -\frac{P}{\rho_1} \sum s_{ii},$$

$$D = \frac{1}{\rho_1} \sum_{ijkl} c_{ijkl} s_{ij} s_{kl} - \frac{2P}{\rho_1} \sum_{ik} \left(e_{ij} \delta_{ik} + \frac{s_{ik}^2}{2} \right).$$

Используя выражение (20) можно определить условия механической устойчивости подложка GaAs при любой пластической деформации.

Перепишем выражение (20) в следующем виде:

$$\Delta E = E(\rho_1, \gamma) - E(\rho_1, 0) = \Delta E' - P \Delta V \quad (21)$$

где ΔV - изменение объема под влиянием деформации. В свою очередь как показано в [14]

$$\Delta V = V_1 \gamma \left(\sum_i s_{ij} \right) + \frac{V_1 \gamma^2}{2} \times \left(2 \left(\sum_i e_{ii} \right) + \left(\sum_i s_{ii} \right)^2 - \sum_{ij} s_{ij}^2 \right) + \dots \quad (22)$$

$$\Delta E' = V_1 \frac{\gamma^2}{2} \left(P \left(\sum_i s_{ii} \right)^2 - 2P \sum_{ij} s_{ij}^2 + \sum_{ijkl} c_{ijkl} s_{ij} s_{kl} \right) + \dots = V_1 \frac{\gamma^2}{2} \sum_{ij} G_{ij} s_i s_j \quad (23)$$

Таким образом для обеспечения механической устойчивости подложки GaAs необходимо выполнения неравенства

$$\Delta E' > 0 \quad (24)$$

Это неравенство выполняется только в том случае, если матрица, описывающая модуль сдвига, симметрична и имеет положительный детерминант.

$$G = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{11} & \tilde{C}_{12} & \tilde{C}_{13} & 2c_{14} & 2C_{15} & 2C_{16} \\ \tilde{C}_{21} & \tilde{C}_{22} & \tilde{C}_{23} & 2C_{24} & 2C_{25} & 2C_{26} \\ \tilde{C}_{31} & \tilde{C}_{32} & \tilde{C}_{33} & 2C_{34} & 2C_{35} & 2C_{36} \\ 2C_{41} & 2C_{42} & 2C_{43} & 4\tilde{C}_{44} & 4C_{45} & 4C_{46} \\ 2C_{51} & 2C_{52} & 2C_{53} & 4C_{54} & 4\tilde{C}_{55} & 4C_{56} \\ 2C_{61} & 2C_{62} & 2C_{63} & 4C_{64} & 4C_{65} & 4\tilde{C}_{66} \end{bmatrix}, \quad (25)$$

где $\tilde{C}_{ij} = c_{ij} - P$.

С учетом симметрии кубической ячейки арсенида галлия можно записать следующие равенства [15]:

$$C_{11} = C_{22} = C_{33};$$

$$C_{12} = C_{13} = C_{21} = C_{23} = C_{31} = C_{32};$$

$$C_{44} = C_{55} = C_{66}.$$

Тогда тензор (25) может быть записан в виде:

$$G = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{11} & \tilde{C}_{12} & \tilde{C}_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{C}_{12} & \tilde{C}_{11} & \tilde{C}_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{C}_{12} & \tilde{C}_{12} & \tilde{C}_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{C}_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{C}_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{C}_{44} \end{bmatrix}.$$

Следовательно, для обеспечения механической устойчивости требует выполнение следующих условий:

$$\tilde{C}_{44} > 0, \quad \tilde{C}_{11} > \left| \tilde{C}_{12} \right|, \quad \tilde{C}_{11} + 2\tilde{C}_{12} > 0. \quad (26)$$

Анализ полученной нами зависимости значения упругих констант (рис. 1) показывает, что в диапазоне остаточных напряжений (0,5–2 ГПа) подложки арсенида галлия остаются механически стабильными. Начиная с 3 ГПа, происходит увеличение константы c_{12} , и при значении остаточного напряжения, равным 8 ГПа, происходит нарушения условия (26), что приводит к потери механической устойчивости.

ВЫВОДЫ. 1. Разработана математическая модель из первых принципов позволяющая математически определить влияние величины остаточных напряжений на константы упругости c_{11} , c_{12} , c_{44} , определяющие модуль Юнга и коэффициент Пуассона подложек арсенида галлия. Установлено, что увеличение уровня остаточных напряжений до значения 6 ГПа приводит к увеличению значения констант, при этом константа c_{12} имеет наибольшее приращение. Начиная со значения 6 ГПа, значение констант c_{11} , c_{44} начинают уменьшаться, при этом значение константы c_{44} изменяется в большей степени.

2. Определены условия, при которых обеспечивается механической устойчивости подложки арсенида галлия при воздействии на нее остаточных напряжений. Показано, что нарушение устойчивости происходит при величине остаточных напряжений, равной 8 ГПа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Louail L, Maouche D, Roumili A, Shraoui F. Calculation of elastic constants of 4d transition metals. // *Materials Letters*. – 2004. – Vol. 58. – PP. 2975–2978.
2. Оксанич А.П., Притчин С.Э., Краскевич В.Е., Батареев В.В. Автоматизированный комплекс для измерения внутренних напряжений в пластинах

GaAs // *Складні системи і процеси*. – Запоріжжя, 2006. – № 2. – С. 40–50.

3. Litaka T., Ebisuzaki T. First-principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures // *Phys. Rev. B*. – 2001. – Vol. 65. – PP. 012103–012109.

4. Jochym P.T., Parlinski K. Elastic properties and phase stability of AgBr under pressure // *Phys. Rev. B*. – 2001. – Vol. 65. – PP. 024106–024112.

5. Khenata R., Baltache H., Sahnoun M. at oth. Full potential linearized augmented plane wave calculations of structural and electronic properties of GeC, SnC and GeSn // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. – 2003. – Vol. 336. – PP. 321–328.

6. Lucazeau G., Abello L. Micro-Raman analysis of residual stresses and phase transformation in crystalline silicon under microindentation // *J. Mater. Res.* – 1997. – Vol. 9. – PP. 2262–2273.

7. Wang J., Yip S., Phillpot S.R., Wolf D. Mechanical instabilities of homogeneous crystals // *Phys. Rev. B*. – 1995. – Vol. 52. – PP. 12627–12635.

8. Elastic instabilities in crystals from ab initio stress - strain relations/ B.B. Karki, G.J. Ackland, J. Crain // *J. Phys. Condens. Matter*. – 1997. – Vol. 9. – PP. 8579–8589.

9. Anderson O.L. A simplified method for calculating the debye temperature from elastic constants // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1963. – Vol. 24. – PP. 909–918.

10. Beardsley R.P., Akimov A.V., Henini M., Kent A.J. Coherent Terahertz Sound Amplification and Spectral Line Narrowing in a Stark Ladder Superlattice // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 104. – PP. 085501–085505.

11. Driscoll C.M.H., A.F.W. Willoughby, J.B. Mullin, and B.W. Straughan. In Gallium Arsenide and Related Compounds // *IOP Conf. Proc, London*. – 1974. – № 24. – P. 275.

12. McSkirmin H.J., Jayaraman A., Andreatch P. Elastic Moduli of GaAs at Moderate Pressures and the Evaluation of Compression to 250 kbar // *J. Appl. Phys.* – 1967. – Vol. 38. – PP. 2362–2364.

13. Wallace D.C. Thermoelastic theory of stressed crystals and higher-order elastic constants // *Solid State Physics*. – 1970. – Vol. 25. – P. 301.

14. Gülseren O., Cohen R.E. High Pressure Thermoelasticity of Body-centered Cubic Tantalum // *Phys. Rev. B*. – 2001. – Vol. 65. – PP. 064103–064111.

15. Шашкольская М.П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984. – 386 с.

MATHEMATICAL MODELING OF INFLUENCE OF RESIDUAL STRESS ON MECHANICAL PROPERTIES OF GALLIUM ARSENIDE SUBSTRATES

S. Pritchyn, V. Artamonov

Kremenchuk Mykhailo Ostrohradskyi National University

vul. Pershotravneva, 20, Kremenchuk, 39600, Ukraine. E-mail: pritchinse@ukr.net

The paper deals with modeling of changes in the mechanical properties of gallium arsenide substrates under the influence of residual stresses. It is shown that the mechanical properties of substrate identify many parameters, for example, such as bending, internal strain, and fragility. For modeling of mechanical properties under pressure (p), it was used a method preserving the deformations in volume, which allowed for the calculation of elastic constants using the coefficients of stress-strain conditions. The author has determined and described the initial conditions; values of the elastic constants c_{11} , c_{12} , c_{44} were calculated via CASTEP modeling program, depending on the magnitude of residual

stresses. It is shown that increase in the residual stress to a value of 6 GPa leads to growing values of elastic constants, with the largest increase observed for the constant c_{12} . In the range of values of the residual stresses 5,0–6,0 GPa the constants c_{11} and c_{44} start decreasing. The criteria for the mechanical stability of the gallium arsenide substrate under the influence of residual stresses were defined. Also, it was established that stability violation occurs at the value of the residual stress of 8 GPa.

Key words: gallium arsenide substrate, residual stresses, mechanical stability.

REFERENCES

1. Louail, L., Maouche, D., Roumili, A., Shraoui, F. (2004), "Calculation of elastic constants of 4d transition metals", *Materials Letters*, vol. 58, pp. 2975–2978.
2. Oksanich, A.P., Pritchyn, S.E., Kraskevich, V.Ye., Batareyev, V.V. (2006), "Automated complex for measuring of internal stresses in GaAs wafers", *Skladni sistemi i protsesi*, Zaporizhzhya, no. 2, pp. 40–50.
3. Litaka, T., Ebisuzaki, T. (2001), "First-principles calculation of elastic properties of solid argon at high pressures" *Phys. Rev. B.* vol. 65, pp. 012103–012109.
4. Jochym, P.T., Parlinski, K. (2001), "Elastic properties and phase stability of AgBr under pressure", *Phys. Rev. B.* vol. 65, pp. 024106–024112.
5. Khenata, R., Baltache, H., Sahnoun, M. et al. (2003), "Full potential linearized augmented plane wave calculations of structural and electronic properties of GeC, SnC and GeSn", *Physica B: Physics of Condensed Matter*, vol. 336, pp. 321–328.
6. Lucazeau, G., Abello, L. (1997), "Micro-Raman analysis of residual stresses and phase transformation in crystalline silicon under microindentation", *J. Mater. Res.* vol. 9, pp. 2262–2273.
7. Wang, J., Yip, S., Phillpot, S.R., Wolf, D. (1995), "Mechanical instabilities of homogeneous crystals", *Phys. Rev. B.* vol. 52, pp. 12627–12635.
8. Karki, B.B., Ackland, G.J., Crain, J. (1997), "Elastic instabilities in crystals from ab initio stress – strain relations", *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 9, pp. 8579–8589.
9. Wallace, D.C. (1972), *Thermodynamics of crystals*, Wiley: New York, 484 p.
10. Beardsley, R.P., Akimov, A.V., Henini, M., Kent, A.J. (2010), "Coherent Terahertz Sound Amplification and Spectral Line Narrowing in a Stark Ladder Superlattice", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, pp. 085501–085505.
11. Driscoll, C.M.H., Willoughby, A.F.W., Mullin, J.B., and Straughan, B.W. (1974), "In Gallium Arsenide and Related Compounds", *IOP Conf. Proc.*, London, no. 24, p. 275.
12. McSkirmin, H.J., Jayaraman, A., Andreatch, P. (1967), "Elastic Moduli of GaAs at Moderate Pressures and the Evaluation of Compression to 250 kbar", *J. Appl. Phys.*, vol. 38, pp. 2362–2364.
13. Wallace, D.C. (1970), "Thermoelastic theory of stressed crystals and higher-order elastic constants", *Solid State Physics*, vol. 25, p. 301.
14. Gülseren, O., Cohen, R.E. (2001), "High Pressure Thermoelasticity of Body-centered Cubic Tantalum", *Phys. Rev. B.* vol. 65, pp. 064103–064111.
15. Shashkol'skaya, M.P. (1984), *Kristallografiya* [Crystallography], Vysshaya shkola, Moscow, Russia.

Стаття надійшла 27.07.2013.