

Математичне моделювання просторово-часового розподілу дефектів у тришарових напружених наногетеросистемах

Пелешак Р.М.*, Дорошенко М.В.**, Кулик Н.Я.*, Мацько М.Б.*, Галь Ю.М.***

email: nikdorman@mail.ru

*кафедра загальної фізики

**кафедра інформатики та обчислювальної математики

***кафедра математики

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100.

Побудовано математичну модель просторово-часового розподілу точкових дефектів у тришаровій напруженій наногетеросистемі, яка базується на самоузгодженій системі рівнянь в частинних похідних для параметра деформації та концентрації дефектів.

Ключові слова: рівняння деформації і дифузії, епітаксійний шар, напружені наногетеросистеми, центри розтягу і стиску, інтегральне перетворення Лапласа.

ВСТУП

Інтенсивний розвиток нанотехнологій дав можливість створювати на основі напружених наногетеросистем $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs(ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe)$ наноелектронні прилади.

Відомо, що оптичні та електричні властивості таких приладів значною мірою залежать як від деформації ґраток контактуючих систем, так і від просторового розподілу точкових дефектів.

Такі дефекти можуть проникати з поверхні або виникати в процесі епітаксійного росту. Крім цього, в технології виготовлення оптоелектронних приладів відіграють важливу роль дифузійні процеси, які пов'язані із перерозподілом домішок у напівпровідниковій структурі.

Взаємодія дефектів з полем деформації, створеним як неузгодженням кристалічних ґраток контактуючих матеріалів, так і точковими дефектами, зумовлює просторовий перерозподіл останніх. Це може призвести як до накопичення, так і до зменшення числа дефектів у активній області ($In_xGa_{1-x}As$; $Zn_{1-x}Cd_xTe$) робочого елемента в залежності від характеру деформації, створеної як невідповідністю параметрів контактуючих кристалічних ґраток ($\epsilon_0 = 7\%$, 4% для гетеросистем $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ та $ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe$ відповідно [1,2]), так

дією дефектів. Зокрема, відомо, що арсенід галію, вирощений методом молекулярно-пучкової епітаксії при низькій температурі, містить надлишок миш'яку [3, 4]. Впровадження надлишкового миш'яку спричиняє тетрагональне спотворення ґратки матеріалу $GaAs$ і генерацію в ньому точкових дефектів: міжвузлових атомів (As), вакансій (Ga) та антиструктурних дефектів (As_{Ga}), що, в свою чергу, призводить до їх просторового перерозподілу. Деформація ґратки і концентрація генерованих точкових дефектів, які визначають фізичні властивості матеріалу, залежать від невідповідності параметрів ґраток контактуючих шарів гетероструктури, температури росту, молекулярних потоків Ga і As, концентрації і хімічної природи легуючих домішок.

Напруження, зумовлені неузгодженням ґраток епітаксійного шару і підкладки, можуть бути пружними у випадку, коли товщина шару не перевищує певного критичного значення [5]. В іншому випадку відбувається утворення дислокацій невідповідності, що супроводжується різким погіршенням як оптичних, так і електричних характеристик приладів. Однак, в шарах $In_xGa_{1-x}As$ з неузгодженням меншим за критичне при певних умовах спостерігається значний спад рухливості й інтенсивності фотолюмінесценції [5], що пов'язано із збільшенням числа точкових дефектів і відповідним збільшен-

ням дифузійного бар'єру для атомів III групи.

У експериментальній роботі [6] показано, що в гетероструктурі GaAs/In_xGa_{1-x}As напружені квантово-розмірні гетерошари затримують дифузію водню і дефектів в об'єм матеріалу, що призводить до істотної відмінності їх просторового розподілу в гетероструктурі та однорідних шарах.

Тому для створення приладів з наперед заданими фізичними властивостями виникає необхідність побудови просторово-часової дифузійно-деформаційної моделі, яка б описувала самоузгоджені дифузійно-деформаційні процеси в напружених наногетероструктурах з власними точковими дефектами та домішками.

Метою цієї роботи є побудова просторово-часової дифузійно-деформаційної моделі та розрахунок просторово-часового профілю розподілу точкових дефектів (міжвузлових атомів і вакансій) у тришарових напружених гетеросистемах GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs (ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe).

1. МОДЕЛЬ ПРОСТОРОВО-ЧАСОВОГО ПЕРЕРОЗПОДІЛУ ДОМІШОК У ТРИШАРОВІЙ НАПРУЖЕНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ

Розглянемо напружені наногетеросистеми GaAs/InAs/GaAs, ZnTe/CdTe/ZnTe з внутрішніми шарами InAs, CdTe товщиною $2a$, що складається з трьох шарів (рис.1), в яких середня концентрація цих дефектів становить $N_{d0}^{(1)}, N_{d0}^{(2)}, N_{d0}^{(3)}$ відповідно, а коефіцієнти дифузії D_1, D_2, D_3 . Вважаємо, що зовнішні шари GaAs (ZnTe) мають товщини, які значно перевищують ширину внутрішнього шару гетероструктури ($2a/L \ll 1$), тому деформацією їхніх шарів можна знехтувати ($\varepsilon_i(x) = 0, i = 1, 3$).

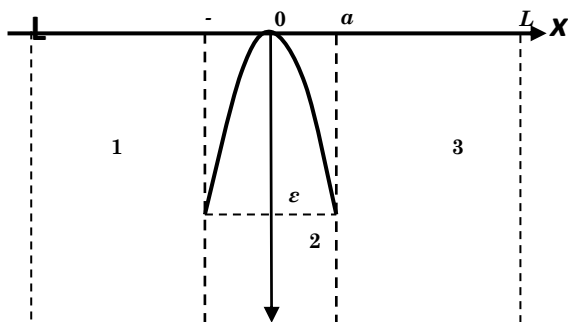


Рисунок 1. Модель напружених наногетероструктур 1 – GaAs (ZnTe), 2 – In_xGa_{1-x}As, Zn_{1-x}Cd_xTe, 3 – GaAs (ZnTe).

Механічна деформація, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток

контактуючих матеріалів гетеросистеми, моделюється функцією [7]:

$$\varepsilon_i(x) = \begin{cases} \varepsilon_0 \frac{x^2}{a^2}, & i = 2; \\ 0, & i = 1, 3; \end{cases} \quad (1)$$

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} < 0, \quad \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{a_{i+1} - a_i}{a_i},$$

$$\varepsilon_{xx} = -\frac{2C_{12}^{(2)}}{C_{11}^{(2)}} \varepsilon_{yy},$$

де $i = 1, 3$ відповідає шарам GaAs (ZnTe), $i = 2$ – внутрішнім шарам InAs (CdTe);

a_i – параметри кристалічних ґраток відповідно матеріалів GaAs (ZnTe) та InAs (CdTe) гетероструктури;

$C_{11}^{(2)}$ та $C_{12}^{(2)}$ – пружні константи матеріалу InAs (CdTe).

Оскільки епітаксійний ріст відбувається на підкладці з неузгодженими параметрами ґраток одночасно з дифузійним процесом, тому в основі моделі необхідно покласти самоузгоджену систему нестационарних рівнянь для параметра деформації $U_i(x, t)$ та концентрації домішок $N_d^{(i)}(x, t)$ у напруженій гетеросистемі.

Нехай в даній гетеросистемі розподілені точкові дефекти з середньою концентрацією $N_{d0}^{(i)}$. В результаті їх самоузгодженої взаємодії через поле деформації, створеної як невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми, так і наявністю дефектів відбувається зміна концентраційного профілю точкових дефектів та характеру деформації.

Механічна напруга в епітаксійних шарах, створена як точковими дефектами, так і неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, має вигляд:

$$\sigma_i(x, t) = \rho_i c_i^2 U_i(x, t) - \theta_d^{(i)} N_d^{(i)}(x, t) - \rho_i c_i^2 \varepsilon_i(x) \quad (2)$$

Використовуючи рівняння неперервності

$$\rho_i \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma_i}{\partial x^2}, \quad (3)$$

запишемо рівняння для перенормованої деформації $U_i(x, t)$ у вигляді:

$$\frac{1}{c_i^2} \frac{\partial^2 U_i(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U_i(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\theta_d^{(i)}}{\rho_i c_i^2} \frac{\partial^2 N_d^{(i)}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_i(x)}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Рівняння для концентрації дефектів (міжвузлових атомів або вакансій) запишеться у вигляді [8]:

$$\frac{\partial N_d^{(i)}(x,t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 N_d^{(i)}(x,t)}{\partial x^2} - D_i \frac{\theta_d^{(i)}}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left[N_d^{(i)}(x,t) \frac{\partial U_i(x,t)}{\partial x} \right] + G_d^{(i)} - \frac{N_d^{(i)}(x,t)}{\tau_d^{(i)}}, \quad (5)$$

де D_i – коефіцієнт дифузії точкових дефектів; $G_d^{(i)}$ – швидкість генерації дефектів; $\tau_d^{(i)}$ – час життя дефекту; $\theta_d^{(i)} = K^{(i)} \Delta Q^{(i)}$ – механічний деформаційний потенціал; $K^{(i)} = (C_{11}^{(i)} + 2C_{12}^{(i)})/3$; $\Delta Q^{(i)}$ – зміна об'єму елементарної комірки за наявності дефекту.

В результаті отримали самоузгоджену систему рівнянь (4)-(5) для визначення просторово-часового розподілу концентрації дефектів $N_d^{(i)}(x,t)$ та параметра деформації $U_i(x,t)$ в різних областях тришарової наногетероструктури.

Представимо концентрацію дефектів у вигляді:

$$N_d^{(i)}(x,t) = N_{d0}^{(i)} + N_{dl}^{(i)}(x,t), \quad (6)$$

Враховуючи представлення (6) в наближенні $N_{dl}^{(i)} \ll N_{d0}^{(i)}$, рівняння дифузії запишемо у вигляді:

$$\frac{\partial N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\partial x^2} - D_i N_{d0}^{(i)} \frac{\theta_d^{(i)}}{k_B T} \frac{\partial^2 U_i(x,t)}{\partial x^2} + G_d^{(i)} - \frac{N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\tau_d^{(i)}}. \quad (7)$$

В подальшому розв'язок самоузгодженої системи рівнянь (4)-(5) будемо шукати в наближенні

$$\left(\frac{L_{dl}^2}{2D_i} \right)^2 \frac{\partial^2 U_i(x,t)}{\partial t^2} \ll \varepsilon_0, \text{ тобто } \frac{\partial^2 U_i(x,t)}{\partial t^2} \approx 0. \quad (8)$$

У наближенні (8) знайдемо з рівняння (4) $\frac{\partial^2 U_i(x,t)}{\partial x^2}$ і підставимо в рівняння (7). В результаті отримуємо диференціальне рівняння для визначення просторово-часового розподілу дефектів у напруженій гетеросистемі

$$\frac{\partial N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\partial t} = \left[D_i \left(1 - \frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}} \right) \right] \frac{\partial^2 N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\partial x^2} - D_i \frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)} \Delta Q} \frac{\partial^2 \varepsilon_i(x)}{\partial x^2}, \quad (9)$$

$$+ G_d^{(i)} - \frac{N_{dl}^{(i)}(x,t)}{\tau_d^{(i)}}$$

де $N_{dc}^{(i)} = \frac{k_B T \rho c_i^2}{\theta_d^{(i)}}$ – критична концентрація дефектів після перевищення якої відбувається самоорганізація дефектів [9].

Крім того, на межах шарів гетероструктури, зображеної на рис. 1, повинні виконуватись умови рівності концентрацій домішок, а також їх потоків:

$$\begin{aligned} N_{dl}^{(1)}(-L,t) &= 0, \\ N_{dl}^{(2)}(a,t) &= N_{dl}^{(3)}(a,t), \\ N_{dl}^{(1)}(-a,t) &= N_{dl}^{(2)}(-a,t), \end{aligned} \quad (10)$$

$$J_2(a,t) = J_3(a,t),$$

$$J_1(-a,t) = J_2(-a,t),$$

$$N_{dl}^{(3)}(L,t) = 0,$$

$$\text{де } J_i(x,t) = - \frac{\partial}{\partial x} \left[D_i N_{dl}^{(i)}(x,t) (1 - \varepsilon_i(x)) \right].$$

В початковий момент часу

$$N_{dl}^{(i)}(x,0) = 0 \quad (11)$$

Ввівши безрозмірні змінні:

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{t}{\tau_d^{(2)}}, \quad L_d^{(i)} = \sqrt{D_i \tau_d^{(i)}}, \\ N_{dl}^{(i)}(x,t) &= Y_i(x,t) G_d^{(i)} \tau_d^{(i)}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\hat{x} = \frac{x}{a}, \quad N_{d0}^{(i)} = G_d^{(i)} \tau_d^{(i)},$$

$$\beta = D_2 \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} \frac{2\varepsilon_0}{\Delta Q a^2 G_d^{(2)}},$$

рівняння (9) та крайові умови (11) набудуть вигляду:

$$\frac{\partial Y_1(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} = \frac{D_1}{D_2} \left(\frac{L_d^{(2)}}{a^2} \right)^2 \left(1 - \frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} \right) \frac{\partial^2 Y_1(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2} - \frac{D_1}{D_2} \left(\frac{L_d^{(2)}}{L_d^{(1)}} \right)^2 (Y_1(\hat{x}, \theta) - 1)$$

$$\frac{\partial Y_2(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} = \left(\frac{L_d^{(2)}}{a} \right)^2 \left(1 - \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} \right) \frac{\partial^2 Y_2(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2}$$

$$+ \beta - Y_2(\hat{x}, \theta) + 1$$

$$\frac{\partial Y_3(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} = \frac{D_3}{D_2} \left(\frac{L_d^{(2)}}{a^2} \right)^2 \left(1 - \frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} \right) \frac{\partial^2 Y_3(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2} - \frac{D_3}{D_2} \left(\frac{L_d^{(2)}}{L_d^{(3)}} \right)^2 (Y_3(\hat{x}, \theta) - 1) \quad (13)$$

$$Y_1(-\hat{L}, \theta) = 0,$$

$$Y_1(-\hat{a}, \theta) = \frac{G_d^{(2)} L_d^{(2)}}{G_d^{(1)} L_d^{(1)}} Y_2(-\hat{a}, \theta), \quad (14)$$

$$Y_2(\hat{a}, \theta) = \frac{G_d^{(3)} L_d^{(3)}}{G_d^{(2)} L_d^{(2)}} Y_3(\hat{a}, \theta),$$

$$\left(-1 + \frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} \right) \frac{\partial Y_1(-\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} = \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} \right) \frac{\partial Y_2(-\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} - \beta \hat{a},$$

$$\left(-1 + \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} \right) \frac{\partial Y_2(\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} + \beta \hat{a} = \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} \right) \frac{\partial Y_3(\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}}$$

$$Y_3(\hat{L}, \theta) = 0,$$

Як видно з формули (12) параметр β може приймати як додатні значення $\beta > 0$ ($\varepsilon_0 > 0, \Delta Q^{(2)} > 0; \varepsilon_0 < 0, \Delta Q^{(2)} < 0$), так і від'ємні значення $\beta < 0$ ($\varepsilon_0 > 0, \Delta Q^{(2)} < 0; \varepsilon_0 < 0, \Delta Q^{(2)} > 0$).

Розв'язок рівнянь (13) з крайовими умовами (14) шукаємо у вигляді

$$Y_i(\hat{x}, \theta) = e^{-\theta} Z_i(\hat{x}, \theta), \quad (15)$$

де $Z_i(\hat{x}, \theta)$ задовольняє наступним рівнянням

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z_1(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} &= \left(1 - \frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}\right) \frac{\partial^2 Z_1(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2} + e^\theta \\ \frac{\partial Z_2(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} &= \left(1 - \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right) \frac{\partial^2 Z_2(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2} + e^\theta (\beta + 1) \\ \frac{\partial Z_3(\hat{x}, \theta)}{\partial \theta} &= \left(1 - \frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}\right) \frac{\partial^2 Z_3(\hat{x}, \theta)}{\partial \hat{x}^2} + e^\theta\end{aligned}\quad (16)$$

з такими крайовими умовами

$$\begin{aligned}Z_1(-\hat{L}, \theta) &= 0, \\ Z_1(-\hat{a}, \theta) &= Z_2(-\hat{a}, \theta), \\ Z_2(\hat{a}, \theta) &= Z_3(\hat{a}, \theta), \\ \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}\right) \frac{\partial Z_1(-\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} &= \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right) \frac{\partial Z_2(-\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} - \beta \hat{a} e^\theta, \\ \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}\right) \frac{\partial Z_2(\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}} &+ \beta \hat{a} e^\theta = \left(-1 + \frac{N_{d0}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}\right) \frac{\partial Z_3(\hat{a}, t)}{\partial \hat{x}}, \\ Z_3(\hat{L}, \theta) &= 0,\end{aligned}\quad (17)$$

Для знаходження розв'язку диференціальних рівнянь (16) з крайовими умовами (17) скористаємось інтегральними перетвореннями Лапласа:

$$X_i(\hat{x}, p) = \int_0^\infty Z_i(\hat{x}, \theta) e^{-p\theta} d\theta. \quad (18)$$

Тоді диференціальні рівняння (16) з врахуванням початкових умов (11) приймуть вигляд:

$$\begin{aligned}H_1 X_1''(\hat{x}, p) - p X_1(\hat{x}, p) + \frac{1}{p-1} &= 0 \\ H_2 X_2''(\hat{x}, p) - p X_2(\hat{x}, p) + \frac{\beta+1}{p-1} &= 0 \\ H_3 X_3''(\hat{x}, p) - p X_3(\hat{x}, p) + \frac{1}{p-1} &= 0,\end{aligned}\quad (19)$$

з наступними крайовими умовами:

$$\begin{aligned}X_1(-\hat{a}, p) &= X_2(-\hat{a}, p) \\ -H_1 X_1'(-\hat{a}, p) &= -H_2 X_2'(-\hat{a}, p) - \frac{\beta \hat{a}}{p-1} \\ X_2(\hat{a}, p) &= X_3(\hat{a}, p) \\ -H_2 X_2'(\hat{a}, p) + \frac{\beta \hat{a}}{p-1} &= -H_3 X_3'(\hat{a}, p)\end{aligned}\quad (20)$$

$$\text{де } H_i = \left(1 - \frac{N_{d0}^{(i)}}{N_{dc}^{(i)}}\right)$$

Аналітичні розв'язки диференціальних рівнянь (19) в кожному із шарів мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned}X_1(\hat{x}, p) &= C_1 e^{\sqrt{\frac{p}{H_1}} \hat{x}} + \frac{1}{p(p-1)}, \text{ де } -\hat{a} \leq \hat{x} \leq -\hat{L} \\ X_2(\hat{x}, p) &= C_2 e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{x}} + C_3 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{x}} + \frac{\beta+1}{p(p-1)}, \text{ де } -\hat{a} \leq \hat{x} \leq \hat{a} \\ X_3(\hat{x}, p) &= C_4 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_3}} \hat{x}} + \frac{1}{p(p-1)}, \text{ де } \hat{a} \leq \hat{x} \leq \hat{L}\end{aligned}\quad (21)$$

Константи інтегрування C_1, C_2, C_3, C_4 визначаємо із наступної системи алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{aligned}C_1 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_1}} \hat{a}} - C_2 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} - C_3 e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} &= \frac{\beta}{p(p-1)} \\ -C_1 \sqrt{H_1} e^{-\sqrt{\frac{p}{H_1}} \hat{a}} + C_2 \sqrt{H_2} e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} - C_3 \sqrt{H_2} e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} &= \frac{\beta \hat{a}}{\sqrt{p(p-1)}} \\ C_2 e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} + C_3 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} - C_4 e^{-\sqrt{\frac{p}{H_3}} \hat{a}} &= -\frac{\beta}{p(p-1)} \\ -C_2 \sqrt{H_2} e^{\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} + C_3 \sqrt{H_2} e^{-\sqrt{\frac{p}{H_2}} \hat{a}} + C_4 \sqrt{H_3} e^{-\sqrt{\frac{p}{H_3}} \hat{a}} &= \frac{\beta \hat{a}}{\sqrt{p(p-1)}}\end{aligned}\quad (22)$$

Здійснивши обернене перетворення Лапласа, отримаємо просторово-часовий перерозподіл точкових дефектів в першому, другому та третьому напружених шарах відповідно:

$$\begin{aligned}Y_1(\hat{x}, \theta) &= e^{-\theta} Z_1(\hat{x}, \theta) - e^{-\theta} + 1 \\ Y_2(\hat{x}, \theta) &= Z_2(\hat{x}, \theta) (1 - e^{-\theta}) (1 + \beta) \\ Y_3(\hat{x}, \theta) &= e^{-\theta} Z_3(\hat{x}, \theta) - e^{-\theta} + 1,\end{aligned}\quad (23)$$

де функції $Z_1(\hat{x}, \theta)$, $Z_2(\hat{x}, \theta)$ та $Z_3(\hat{x}, \theta)$ є розв'язками диференціальних рівнянь (16) з крайовими умовами (17) відповідно

$$Z_1(\hat{x}, \theta) = \frac{1}{b} \left(e^\theta - 1 + e^\theta \frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}} \operatorname{Erf}(\sqrt{\theta}) \right) l_3 +$$

$$\begin{aligned}& \sum_{i=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{a^m}{b^{m+1}} \sum_{k=1}^{\infty} l_{2i-1} r_{2i-1} \theta^k \hat{O}_1(\hat{x}, \theta, k) \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{a^m}{b^{m+1}} \sum_{k=1}^{\infty} l_2 r_2 \theta^k \hat{O}_2(\hat{x}, \theta, k)\end{aligned}\quad (24)$$

де

$$\begin{aligned}\hat{O}_1(\hat{x}, \theta, k) &= -\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta} \Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{r_{2i-1} \Gamma(k+1)} \\ & - (-1)^j \frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta} r_{2i-1} \Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(1-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\theta \Gamma(k+\frac{1}{2})} \\ \hat{O}_2(\hat{x}, \theta, k) &= -\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta} \Gamma(k+\frac{1}{2})} \\ & + \frac{{}_1F_1\left(-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{r_2 \Gamma(k+1)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a &= (\sqrt{H_1} - \sqrt{H_2})(\sqrt{H_2} - \sqrt{H_3}); \\ b &= (\sqrt{H_1} + \sqrt{H_2})(\sqrt{H_2} + \sqrt{H_3}); \\ l_1 &= \beta \sqrt{H_2} (\sqrt{H_3} - \sqrt{H_2}); \quad l_2 = -\frac{l_1 \hat{a}}{\sqrt{H_2}}; \\ l_3 &= \beta \sqrt{H_2} (\sqrt{H_3} + \sqrt{H_2}); \quad l_4 = \frac{l_3 \hat{a}}{\sqrt{H_2}}; \\ \eta_1 &= -\frac{\hat{x} + \hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}}; \quad r_2 = -\frac{\hat{x} + \hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}; \\ r_3 &= -\frac{\hat{x} + \hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}}.\end{aligned}$$

$$Z_2(\hat{x}, \theta) = \frac{1}{b} \left((e^\theta - 1)(p_3 + p_4) + (p_5 + p_6) e^\theta \operatorname{Erf}(\sqrt{\theta}) \right) +$$

$$\sum_{i=1}^4 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{a^m}{b^{m+1}} \sum_{k=1}^{\infty} p_i e_i \theta^k \hat{O}_3(\hat{x}, \theta, k)$$

$$\begin{aligned} \text{де } \hat{O}_3(\hat{x}, \theta, k) = & -\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{3}{2}, -\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(-k, \frac{1}{2}, -\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{e_i\Gamma(k+1)} + ; \\ & \frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}} \frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{1}{2}, -\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}r_{2i-1}\Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(1-k, \frac{3}{2}, -\frac{e_i^2}{4\theta}\right)}{\theta\Gamma(k+\frac{1}{2})} \\ p_1 = & \beta\sqrt{H_2}(\sqrt{H_3}-\sqrt{H_2}); \quad p_2 = \beta\hat{a}(\sqrt{H_2}-\sqrt{H_3}); \\ p_3 = & -\frac{p_2\hat{a}}{\sqrt{H_2}}; \quad p_4 = -\beta\sqrt{H_3}(\sqrt{H_1}+\sqrt{H_2}); \\ e_1 = & -\frac{\hat{x}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}} + \frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}}; \quad e_2 = -\frac{\hat{x}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}} + \frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}; \\ e_3 = & -\frac{\hat{x}+\hat{a}}{\sqrt{H_2}} + \frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}}; \quad e_4 = \frac{\hat{x}-\hat{a}}{\sqrt{H_2}} + \frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}}; \\ e_5 = & \frac{\hat{x}-\hat{a}}{\sqrt{H_2}} + \frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z_3(\hat{x}, \theta) = & \frac{1}{b} \left(e^\theta - 1 + e^\theta \frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}} \text{Erf}(\sqrt{\theta}) \right) l_3 + \\ & \sum_{i=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{a^m}{b^{m+1}} \sum_{k=1}^{\infty} l_{2i-1} r_{2i-1} \theta^k \hat{O}_4(\hat{x}, \theta, k) \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{a^m}{b^{m+1}} \sum_{k=1}^{\infty} l_2 r_2 \theta^k \Phi_5(\hat{x}, \theta, k), \quad (25) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \hat{O}_4(\hat{x}, \theta, k) = & -\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{r_{2i-1}\Gamma(k+1)} + ; \\ & \frac{\hat{a}}{\sqrt{H_2}} \left(\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}r_{2i-1}\Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(1-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_{2i-1}^2}{4\theta}\right)}{\theta\Gamma(k+\frac{1}{2})} \right) \\ \Phi_5(\hat{x}, \theta, k) = & -\frac{{}_1F_1\left(\frac{1}{2}-k, \frac{3}{2}, -\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{\sqrt{\theta}\Gamma(k+\frac{1}{2})} + \frac{{}_1F_1\left(-k, \frac{1}{2}, -\frac{r_2^2}{4\theta}\right)}{r_2\Gamma(k+1)} ; \\ l_1 = & \beta\sqrt{H_2}(\sqrt{H_1}-\sqrt{H_2}); \quad l_2 = -\frac{l_1\hat{a}}{\sqrt{H_2}}; \\ l_3 = & \beta\sqrt{H_2}(\sqrt{H_2}+\sqrt{H_1}); \quad l_4 = \frac{l_3\hat{a}}{\sqrt{H_2}}; \\ r_1 = & \frac{\hat{x}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{4\hat{a}(m+1)}{\sqrt{H_2}}; \quad r_2 = \frac{\hat{x}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{2\hat{a}(2m+1)}{\sqrt{H_2}}; \\ r_3 = & \frac{\hat{x}-\hat{a}}{\sqrt{H_1}} + \frac{4\hat{a}m}{\sqrt{H_2}}. \end{aligned}$$

2. АНАЛІЗ ЧИСЛОВИХ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

У межах запропонованої нестационарної моделі самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу домішок у тришарових напружених гетероструктурах простежимо за впливом напруженого шару $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ та точкових дефектів виду центрів розтягу ($\theta_d^{(i)} > 0$, міжвузлових атомів та домішок впровадження) або стиску ($\theta_d^{(i)} < 0$, вакансії та домішки заміщення з ковалентним (іонним) радіусом, меншим за іонний радіус

матриці) на профіль нестационарного розподілу домішок кремнію у гетероструктурі $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ з наступними параметрами: $a=10 \text{ \AA}$; $L=1 \text{ мкм}$; $\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}}=0,4$; $\frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}}=0,3$; $\frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}}=0,7$. Домішки Si в гетеросистемі $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ є дефектами виду центрів розтягу.

На рис. 2, 3 представлені профілі нестационарного розподілу точкових дефектів виду У випадку, коли внутрішній епітаксійний шар буде зазнавати деформації стиску ($\epsilon_0 < 0$) за рахунок неузгодження параметрів ґраток контактуючих епітаксійних шарів буде спостерігатись зменшення концентрації вакансій у цьому шарі (рис. 2), тоді як у випадку розтягу ($\epsilon_0 > 0$) внутрішнього епітаксійного шару буде спостерігатись збільшення концентрації вакансій (рис. 3). Для дефектів виду центрів розтягу матиме місце обернений ефект. Такий ефект спостерігався в експериментальних роботах [6, 10] з дослідження спектрів фотолумінесценції напружених гетероструктур, де було показано, що напружені гетерошари $GaAs/In_xGa_{1-x}As$ затримують дифузю водню та дефектів у об'єм кристалічної системи. А це, в свою чергу, приведе до збільшення деформації розтягу (стиску) у середньому епітаксійному шарі тришарової наногетеросистеми

Оскільки дифузія дефектів відбувається в деформаційному полі, створеному як неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і просторовим перерозподілом точкових дефектів (міжвузлових атомів, вакансій), то крім звичайного дифузійного потоку, який визначається тільки величиною і напрямом градієнта концентрацій дії ще індукований деформаційний потік дефектів.

У випадку відсутності дефектів ($N_{d0}^{(i)} = 0$) у контактуючих матеріалах створюється неоднорідна деформація тільки через неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів ($\epsilon_i(x) = \epsilon_0 \frac{x^2}{a^2}$, $i=2$), а при відсутності неузгодження параметрів ґраток ($\epsilon_0 = 0$) деформація ($U^{(i)} = \frac{\theta_d^{(i)}}{K^{(i)}} N_d^{(i)}$) зумовлена тільки точковими дефектами.

Встановлено, що концентраційний профіль точкових дефектів у припущенні $N_{d0}^{(i)} \ll N_{dc}^{(i)}$ має немонотонний характер з мінімумом в середині внутрішнього шару $In_xGa_{1-x}As$ ($Zn_{1-x}Cd_xTe$), який збіднюється точковим дефектами виду центрів стиску, коли внутрішній шар гетероструктури $GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs$ ($ZnTe/Zn_{1-x}Cd_xTe/ZnTe$) зазнає неоднорідного

стиску, а у випадку неоднорідного розтягу має місце обернений ефект.

Отже, деформаційним полем можна керувати кількістю дефектів у робочій області наногетеросистеми.

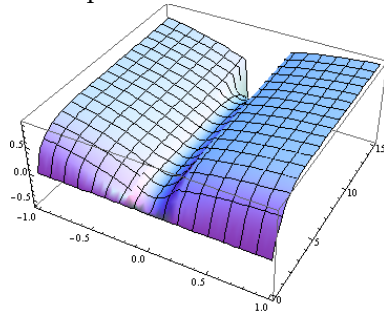


Рисунок 2. Профіль нестационарного розподілу концентрації вакансій у тришаровій напруженій наногетеросистемі з неоднорідно-стиснутим внутрішнім шаром

$$\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0,4; \frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0,3; \frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0,7; \beta = 10,2,$$

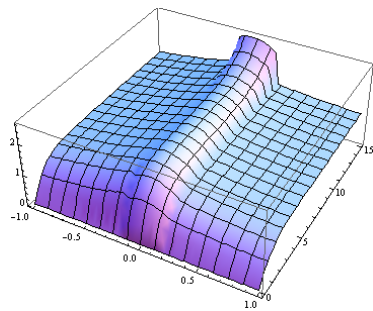


Рисунок 3. Профіль нестационарного розподілу концентрації міжвузлових атомів у тришаровій напруженій наногетеросистемі з неоднорідно-стиснутим внутрішнім шаром

$$\frac{N_{do}^{(1)}}{N_{dc}^{(1)}} = 0,4; \frac{N_{do}^{(2)}}{N_{dc}^{(2)}} = 0,3; \frac{N_{do}^{(3)}}{N_{dc}^{(3)}} = 0,7; \beta = -10,2,$$

ВИСНОВКИ

1. Побудовано математичну модель дифузії точкових дефектів виду центрів стиску з врахуванням самоузгоджених деформаційно-дифузійних ефектів.

2. Показано, що неоднорідна деформація стиску у внутрішньому шарі приводить до збіднення вакансій у цьому шарі або до збагачення міжвузлових атомів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Войцеховский А., Коханенко А., Кортаев А.Г., и др. Облучение высокоэнергетическими электронами и γ -квантами эпитаксиальных пленок КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Прикладная физика. – 2003. – № 5. – С.99-101.
- [2] Бобиль А.В., Гуткин А.А., Брунков П.Н., и др.. Рентгено-дифракционные и электронно-микроскопические исследования

влияния γ -излучения на многослойные гетероструктуры AlGaAs/InGaAs/ GaAs // ФТП. – 2006. – Т.40, № 6. – С.707-710.

[3] Вилисова М.Д., Куницын А.Е., Лаврентьева Л.Г., и др. Легирование слоев GaAs кремнием в условиях низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии // ФТП. – 2002. – Т.14, № 11. – С.3157-3161.

[4] Вилисова М.Д., Ивонин И.В., Лаврентьева Л.Г., Субач С.В., Якубеня М.П., Преображенский В.В., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Берт Н.А., Мусихин Ю.Г., Чалдышев В.В. Структура и свойства слоев InGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низкой температуре // ФТП. – 1999. – Т.33, № 8. – С.900-905.

[5] Жуков А.Е., Егоров А.Ю., Устинов В., Цацульников А.Ф., Максимов М.В., Фалеев Н.Н., Копьев П.С. Влияние рассогласования параметров решеток на структурные, оптические и транспортные свойства слоев InGaAs, выращиваемых методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках InP (100) // ФТП. – 1997. – Т.31, № 1. – С.19-22.

[6] Карпович И., Аншон А., Филатов Д. Образование и пассивация дефектов в гетероструктурах с напряженными квантовыми ямами GaAs/InGaAs при обработке в водородной плазме // ФТП. – 1998. – Т.32, № 9. – С.1089-1093.

[7] Пелешак Р.М., Кузик О.В. Самоорганизованный диффузионно-деформационный розподіл точкових дефектів у напружених гетеросистемах // УФЖ. – 2007. – Т.52, № 7. – С.689-694.

[8] Кузик О.В., Пелешак Р.М. Деформація ґратки та просторовий перерозподіл точкових дефектів у напруженому епітаксійному шарі // УФЖ. – 2006. – Т.51, № 4. – С.404-407.

[9] Пелешак Р.М., Даньків О.О., Кузик О.В. Формування періодичних дефектних структур у напівпровідниках під впливом акустичної хвилі // УФЖ. – 2011. – Т.15, № 4. – С.3602-36006.

[10] Chen Y.C., Singh J., Bhattacharya P.K. Suppression of defect propagation in semiconductors by pseudomorphic layers // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.74, № 6. – P.3800-3804.