

УДК 517.958:539.3:530.182

## Математичне моделювання впливу деформаційних ефектів на коефіцієнт дифузії домішок у наногетероструктурах

Олеся Даньків<sup>1</sup>, Юрій Нечипор<sup>2</sup>, Олег Кузик<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
кафедра фізики та інформаційних систем, м. Дрогобич, Україна  
[dankivolesya@dspu.edu.ua](mailto:dankivolesya@dspu.edu.ua)

<https://orcid.org/0000-0002-2154-8396>

<sup>2</sup>Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
кафедра фізики та інформаційних систем, м. Дрогобич, Україна  
[nechypor.yurij.asp@dspu.edu.ua](mailto:nechypor.yurij.asp@dspu.edu.ua)

<https://orcid.org/0009-0007-8010-1010>

<sup>3</sup>Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
кафедра фізики та інформаційних систем, м. Дрогобич, Україна  
[olehkuzyk@dspu.edu.ua](mailto:olehkuzyk@dspu.edu.ua)

<https://orcid.org/0000-0002-8474-444X>

---

*Анотація.* Побудовано математичну модель явища дифузії у гетеросистемах із врахуванням деформації. Математична модель ґрунтується на розв'язуванні модифікованого механіко-деформаційними ефектами стаціонарного рівняння Фіка. У межах розробленої моделі досліджено вплив деформації на коефіцієнт дифузії домішок у гетероструктурі. Встановлено, що зі збільшенням невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетероструктури GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs на 7% коефіцієнт дифузії домішок виду центру розтягу у внутрішньому шарі In<sub>0,2</sub>Ga<sub>0,8</sub>As зменшується на 35% відносно коефіцієнта дифузії домішок у ненапруженому шарі, що пов'язано зі збільшенням деформації розтягу в результаті самоузгодженого деформаційно-дифузійного перерозподілу.

*Ключові слова:* математичне моделювання, гетеросистема, деформація, домішка, дифузія, механічна напруга.

---

## 1. Вступ

Інформація про коефіцієнт дифузії домішок і дефектів у напівпровідниках та гетероструктурах на їх основі важлива для розуміння процесів формування їхньої структури та властивостей. Цей параметр визначає, як саме розподіляються домішкові атоми під час технологічних процесів, зокрема дифузійного легування, йонної імплантації та термічної обробки. Врахування дифузії дефектів дає змогу краще контролювати якість кристалу та стабільність характеристик напівпровідникових приладів. Одним з факторів, який може впливати на коефіцієнт дифузії є механічна деформація [1, 2]. Авторами робіт [1, 2, 3, 4] досліджено вплив неоднорідних полів механічного напруження різного виду на характеристики міграції точкових дефектів – вакансій і міжвузлових атомів. У роботах [2, 5] досліджено зміну енергетичного рельєфу міграції вакансій і міжвузлових атомів за наявності градієнта механічного напруження.

Для вакансій та домішок заміщення з йонним радіусом, меншим від йонного радіуса заміщеного атома, енергетично вигідною є міграція в область деформацій стиску [2], а для міжвузлових атомів, домішок впровадження та домішок заміщення з йонним радіусом, більшим від йонного радіуса заміщеного атома, — в область деформації розтягу [5].

Таким чином, наявність неоднорідної механічної напруги призводить до виникнення додаткового деформаційного потоку власних дефектів та домішок, тобто до зміни їх концентрації. А це, своєю чергою, є причиною зміни їх коефіцієнта дифузії [6, 7, 8].

Причиною виникнення неоднорідної деформації у гетероструктурах може бути як наявність точкових дефектів та дислокацій [9], так і невідповідність параметрів ґраток контактуючих матеріалів [10].

Незважаючи на велику кількість експериментальних досліджень [1, 2, 3, 4, 5, 11] щодо впливу деформаційних ефектів на процес дифузії, на сьогодні відсутня математична модель, яка б дозволяла прогнозувати концентраційні профілі власних дефектів і чужорідних домішок та їх коефіцієнт дифузії у напружених гетеросистемах. У ряді робіт [12, 13, 14, 15] розроблено математичні моделі для опису впливу деформації на процес дифузії в об'ємних напівпровідниках, або шаруватих структурах. Зокрема, у роботі [12] запропоновано модель дифузії, у якій враховано вплив локальної механічної деформації на коефіцієнт дифузії та швидкість переносу речовини в композитних середовищах, а для обчислень використано метод скінчених різниць. У роботі [13] розроблено одномірну математичну модель взаємозв'язку дифузії та деформації у бінарних шарах, де дифузія частинок спричиняє локальні деформації, а концентраційні градієнти викликають механічні напруження. Математична модель, яка представлена у роботі [14], включає залежність коефіцієнта дифузії та хімічного потенціалу від локальної деформації кристалічної ґратки, розглядаючи стиснення і розтягнення атомних шарів, що дозволяє передбачати зміну профілів концентрації під впливом механічного навантаження. Однак, у всіх цих роботах не береться до уваги деформація, яка виникає в околі гетеромережі, що є важливим для точного прогнозування дифузійних процесів у реальних напружених структурах.

Для формування напівпровідникових гетероструктур з наперед заданими фізичними властивостями важливою є інформація про закономірності зміни коефіцієнта дифузії імплантованих домішок і власних точкових дефектів під впливом механічних напруг [11], що й визначає актуальність роботи.

Метою цієї роботи є розробка математичної моделі явища дифузії точкових дефектів у напівпровідникових гетеросистемах, яка б враховувала наявність деформації, створеної самими дефектами, та деформації, яка виникає в околі гетеромежі матеріалів із різними параметрами ґраток. У роботі в межах розробленої математичної моделі досліджено вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів і концентрації домішок на їх коефіцієнт дифузії у напруженій тришаровій гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs.

## 2. Постановка проблеми

Взаємодія домішок із полем деформації, створеним як неузгодженням кристалічних ґраток контактуючих матеріалів, так і домішками, зумовлює просторовий перерозподіл останніх. Це може призвести до зміни коефіцієнта дифузії, а також як до накопичення, так і до зменшення числа дефектів у активній області залежно від характеру деформації.

Розглянемо напружену гетеросистему АВА, що складається з трьох шарів (рис. 1) із середньою концентрацією домішок  $N_0$ . У зв'язку з тим, що товщина шару А значно перевищує товщину внутрішнього шару В ( $l \gg 2a$ ), можна знехтувати деформацією зовнішніх шарів А.

Механічна деформація у шарі В моделюється кусково-лінійною функцією:

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_0 \frac{|x|}{a}, \quad |x| \leq a. \quad (1)$$

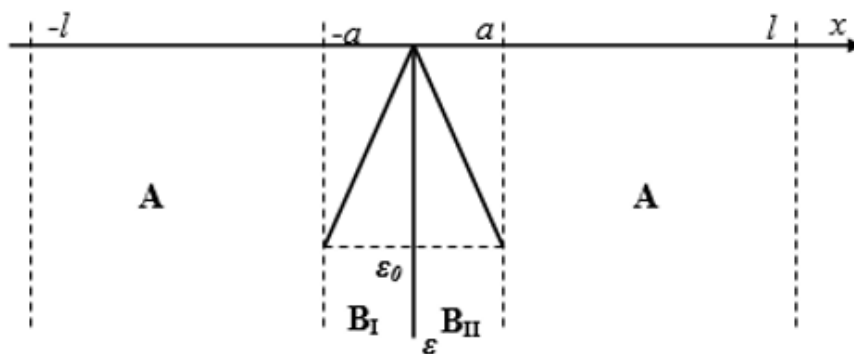


Рис. 1. Деформація тришарової гетеросистеми АВА.

Деформація, яка виникла внаслідок неузгодження параметрів ґраток контактуючих шарів А та В, описується такими компонентами тензора деформації:

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel} = \frac{a_A - a_B}{a_B},$$

$$\varepsilon_{xx} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{yy}.$$

де  $a_A$  та  $a_B$  – параметри ґраток шарів А та В, відповідно.

Величина деформації на межі шарів А та В визначається як

$$\varepsilon_0 = 2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{xx}. \quad (2)$$

В результаті самоузгодженої взаємодії домішок із деформаційним полем гетероструктури, яке створюється як внаслідок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і через наявність домішок, відбувається їх просторовий перерозподіл [15, 16, 17]. В основі моделі покладемо модифіковане деформаційними ефектами значення потоку домішок [5]:

$$J = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ DN(x) \left( 1 - \varepsilon(x) \frac{N_1}{N_b} \right) \right], \quad (3)$$

де  $D$  – коефіцієнт дифузії домішок,  $N(x)$  – концентрація домішок,  $N_1$  – концентрація атомів напівпровідникового матеріалу напруженого шару,

$$N_b = \frac{k_B T}{W} \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \frac{\rho}{r_1} N_1, \quad (4)$$

$W$  – величина дифузійного бар'єра,  $k_B$  – стала Больцмана,  $T$  – температура,  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона,  $r_1$  – характерний радіус дифузійного каналу,  $\rho$  – константа, яка входить у вираз для модельного потенціалу відштовхування між атомами:

$$U(r) \sim e^{-r/\rho}.$$

Потік дефектів у напруженій гетероструктурі складається з двох частин:

1) звичайного дифузійного (градієнтного) потоку:

$$J_d = -D_{\text{ef}} \frac{\partial N(x)}{\partial x},$$

з перенормованим коефіцієнтом дифузії  $D_{\text{ef}}$  внаслідок зміни ефективних розмірів дифузійних каналів під впливом напружень у гетероструктурі,

$$D_{\text{ef}} = D \left[ 1 - \frac{N_1}{N_b} \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \varepsilon(x) dx \right]; \quad (5)$$

2) деформаційного потоку:

$$J_p = D \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial x},$$

який виникає за наявності неоднорідної деформації.

Стаціонарний розподіл домішок у напруженій кристалічній системі АВА знаходиться шляхом розв'язання модифікованого механіко-деформаційними ефектами рівняння дифузії:

$$D_{\text{ef}} \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left( DN(x) \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial x} \right) = 0. \quad (6)$$

Перепишемо рівняння (6) у вигляді:

$$D_{\text{ef}} \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} - V \frac{\partial N}{\partial x} - DN(x) \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial^2 \varepsilon(x)}{\partial x^2} = 0, \quad (7)$$

де  $V = D \frac{N_1}{N_b} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$  – швидкість домішок, отримана під дією градієнта деформаційного поля, що виникає внаслідок неоднорідної деформації.

Розв'язок диференціального рівняння (7) знаходився у кожній області гетероструктури окремо. Области  $B_I$  і  $B_{II}$  відрізняються тим, що швидкість домішок під дією градієнта деформаційного поля має протилежний напрям. Це пов'язано з тим, що швидкість

домішок, отримана у полі неоднорідної деформації, створеної як внаслідок неузгодження параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і наявністю домішок, є пропорційною до градієнта деформації  $V \sim \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$  [11].

На межах шарів гетероструктури ( $x = -a$ ,  $x = 0$ ,  $x = a$ ) повинні виконуватись умови рівності концентрацій домішок, а також їх потоків:

$$\begin{aligned} N(-a-0) &= N(-a+0), & J(-a-0) &= J(-a+0), \\ N(0-) &= N(0+), & J(0-) &= J(0+), \\ N(a-0) &= N(a+0), & J(a-0) &= J(a+0). \end{aligned} \quad (8)$$

Крім цього, вважаємо, що після вимкнення джерела імплантуючих домішок потік крізь поверхні кристалічної системи відсутній (відбивні межі) [4]:

$$J(-l) = J(l) = 0. \quad (9)$$

При заданих умовах кількість домішок, що перебуває в гетеросистемі, буде залишатись постійною, тобто повинна виконуватись умова:

$$\int_{-l}^l N(x) dx = Q. \quad (10)$$

де  $Q$  – кількість домішок у кристалічній структурі, що припадає на одиницю площі поперечного перерізу,  $2l$  – товщина гетероструктури.

У відповідному однорідному матеріалі при однакових фізичних умовах кількість домішок, що проникнуть у кристал за певний час імплантації, вважаємо рівною кількості домішок, що проникають за такий же проміжок часу у гетероструктуру з напруженими шарами. Це твердження буде справедливим при виконанні наступної умови:  $L_d \ll l$ , де  $L_d$  – ефективна дифузійна довжина.

У стаціонарному випадку в результаті вільної дифузії (ненапружена гетероструктура) при заданих умовах домішки розподіляються рівномірно, тобто

$$Q = 2N_0l. \quad (11)$$

Розв'язок диференціального рівняння (7), який задовільняє умовам (8)–(10), матиме вигляд:

$$N(x) = \begin{cases} \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - e^{ka/l})}, & |x| > a, \\ \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - e^{ka/l})} \exp\left[\frac{k}{l}(x+a)\right], & -a \leq x < 0, \\ \frac{N_0}{1 - \frac{a}{l} - \frac{1}{k}(1 - e^{ka/l})} \exp\left[-\frac{k}{l}(x-a)\right], & 0 \leq x \leq a, \end{cases} \quad (12)$$

де  $k = -\text{sign } \varepsilon_0 \frac{|V|}{D_{\text{ef}}} l$ .

Для дослідження процесів дифузії домішок і точкових дефектів у напруженій гетеросистемі використано аналітичний метод, що базується на розв'язанні модифікованого рівняння дифузії з урахуванням деформаційного поля. Механічний стан системи описано в межах теорії пружності, а вплив неоднорідної деформації враховано через додатковий внесок у потік домішок. Розв'язок задачі отримано шляхом аналітичного інтегрування стаціонарного диференціального рівняння дифузії з урахуванням умов

неперервності концентрації та потоку на межах шарів, а також умови збереження загальної кількості домішок.

### 3. Основні результати

Для ілюстрації висновків із запропонованої моделі деформаційного перерозподілу домішок у тришарових напружених гетероструктурах простежимо за впливом напруженого шару  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  на профіль стаціонарного розподілу домішок кремнію у гетероструктурі  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  наступних розмірів:  $a = 30 \text{ \AA}$ ,  $l = 1 \text{ мкм}$ . Результати розрахунку координатної залежності концентрації домішок при різних значеннях параметра  $k$  представлені на рис. 2. Для візуалізації отриманих результатів було використано програмне середовище Wolfram Mathematica. Помітно, що домішки накопичуються у стиснутому шарі  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ . У результаті такого перерозподілу концентрація імплантованих домішок у ненапруженій частині ( $\text{GaAs}$ ) гетероструктури різко зменшується. І при великих значеннях параметра  $k$  їх концентрація може зменшуватися у 30 разів ( $k = 85$ ) порівняно з ненапруженою структурою. Оскільки  $k = \frac{|V|}{D_{ef}} l$ , то очевидно, що здатність напружених шарів затримувати дифузію буде зростати зі зменшенням ефективного коефіцієнта дифузії  $D_{ef}$ . Це явище проявляється помітніше при значній зміні деформації з віддаленням від гетеромеж ( $V \sim \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$ ), тобто значною мірою визначається пружними сталими контактуючих матеріалів гетероструктури та неузгодженням параметрів їх ґраток.

Наявність домішок ненульового об'єму  $\Omega_i$  призводить до збільшення об'єму кристалу та перерозподілу механічних напружень гетероструктури. У найпростішому випадку ( $\Omega_i = \Omega_0$ , де  $\Omega_0$  — об'єм атома матриці) деформація кристалічної ґратки внаслідок наявності домішок ненульового об'єму визначається відношенням концентрації домішок до концентрації атомів матеріалу імплантованої матриці  $\varepsilon_1(x) = \frac{N(x)}{N_1}$ . Тоді повну деформацію гетероструктури, спричинену як неузгодженням параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і наявністю домішок, можна записати у вигляді:

$$U(x) = \varepsilon(x) + \varepsilon_1(x) = \begin{cases} \varepsilon_0 \frac{|x|}{a} + \frac{N(x)}{N_1}, & |x| \leq a, \\ \frac{N(x)}{N_1}, & |x| > a. \end{cases} \quad (13)$$

Характер деформації гетероструктури  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  визначається двома факторами: розподілом домішок і невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів гетеросистеми. Біля меж гетероструктури визначальним є другий фактор і, відповідно, напружений шар  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  зазнає деформації стиску. При віддаленні від гетеромежі зменшується вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих шарів. Тоді характер деформації гетероструктури визначається розподілом домішок. Причому, при зростанні неузгодження параметрів кристалічних ґраток контактуючих матеріалів та швидкості зміни деформації з віддаленням від гетеромежі, яка визначається пружними сталими матеріалу, спостерігається збільшення деформації в центрі внутрішнього напруженого шару. У напружених шарах, окрім звичайної градієнтної дифузії, суттєву роль відіграють дифузійні ефекти, індуковані деформаційним полем, яке існує в напруженій гетеросистемі. Деформаційний потік  $j_p$ , який виникає в такій гетеросистемі, пропорційний градієнту механічного напруження. За наявності стиснутих шарів у гетероструктурі цей потік сприяє накопиченню домішок у напружених шарах (рис. 2).

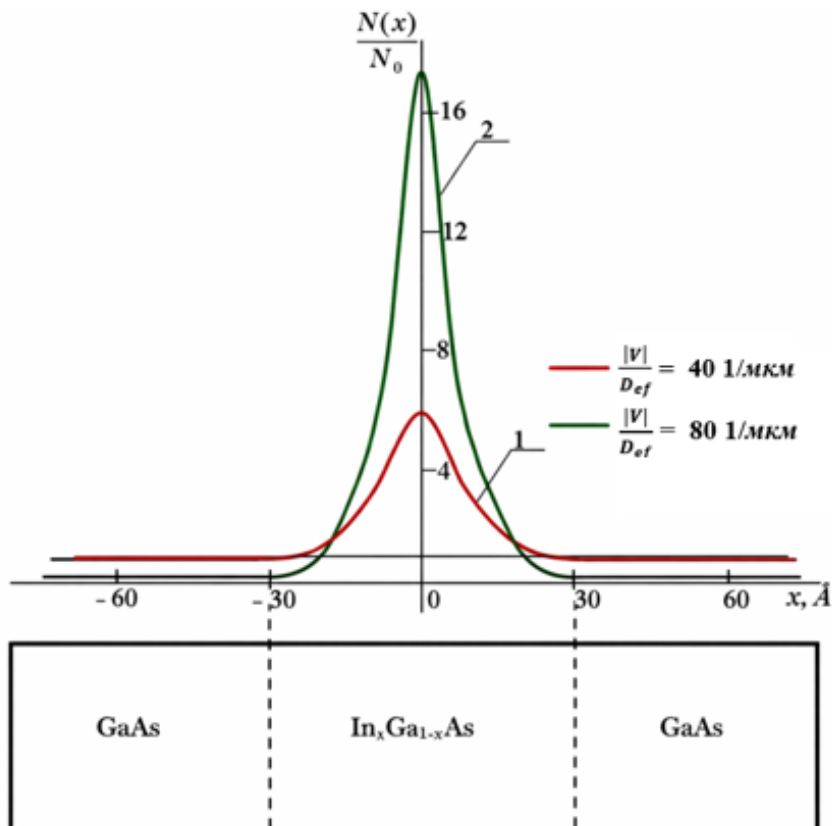


Рис. 2. Перерозподіл концентрації домішок кремнію у гетероструктурі GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs: 1 –  $\frac{|V|}{D_{ef}} = 40 \text{ 1/мкм}$ ; 2 –  $\frac{|V|}{D_{ef}} = 80 \text{ 1/мкм}$  ( $x=0,2$ )

У випадку всебічної деформації розтягу внутрішнього шару деформаційний потік призводить до переміщення домішок із менш неоднорідно-розтягнутої області внутрішнього шару (центру внутрішнього шару) до меж контактуючих матеріалів гетероструктури.

Для того, щоб дослідити вплив невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів на перерозподіл домішок у шарах гетероструктури з деформацією розтягу (гетероструктура In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As), проведемо відповідні розрахунки координатної залежності їх концентрації та повної деформації  $U(x)$  матеріалу при від’ємних значеннях параметра  $k$ . Як бачимо з рис. 3, у цьому випадку домішки практично не проникають у внутрішні напружені шари.

Внаслідок цього концентрація імплантованих домішок у зовнішніх шарах гетероструктури несуттєво зростає порівняно з кристалічною системою без напружених шарів. Причому, при зростанні величини невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів тришарової гетероструктури (зростанні параметра  $k$ ) спостерігається зменшення концентрації домішок у внутрішньому шарі. Такий характер стаціонарного розподілу імплантованих домішок можна пояснити на основі механіко-деформаційного механізму дифузії.

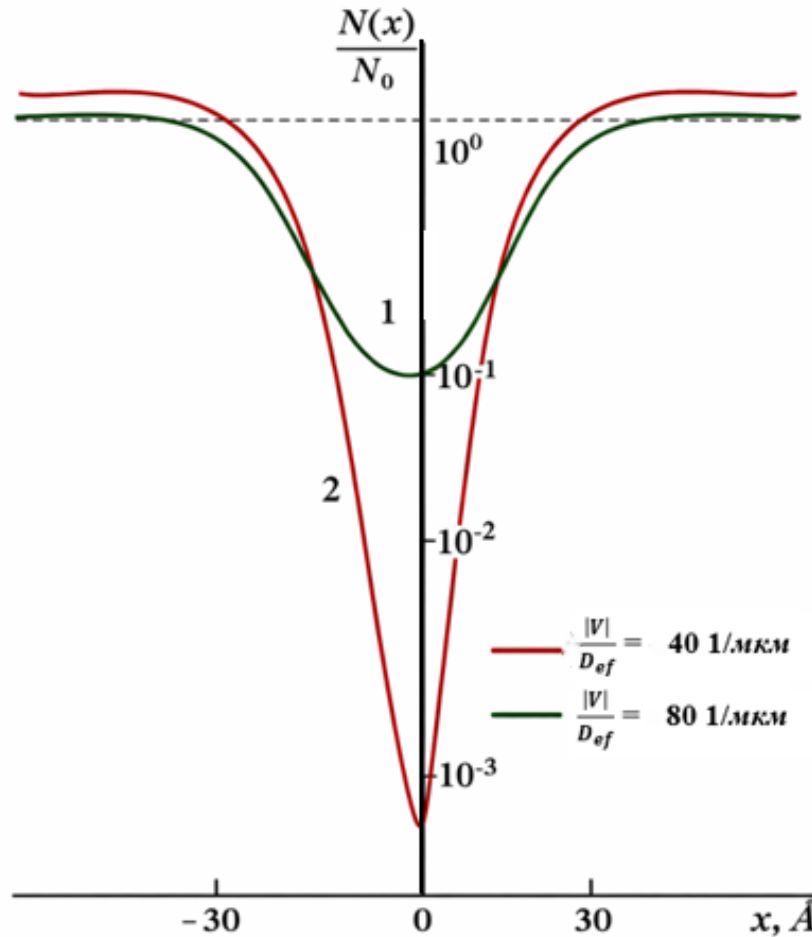


Рис. 3. Перерозподіл концентрації домішок кремнію у гетероструктурі  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ : 1 -  $\frac{|V|}{D_{ef}} = 40 \text{ 1/мкм}$ ; 2 -  $\frac{|V|}{D_{ef}} = 80 \text{ 1/мкм}$  ( $x=0,2$ )

У напружених шарах, окрім звичайної градієнтної дифузії, суттєву роль відіграють дифузійні ефекти, індуковані деформаційним полем, яке існує в напруженій гетеросистемі. Деформаційний потік  $j_p$ , який виникає в такій гетеросистемі, пропорційний градієнту механічного напруження. За наявності стиснутих шарів у гетероструктурі цей потік сприяє накопиченню домішок у напружених шарах (рис. 2). У випадку всебічної деформації розтягу внутрішнього шару деформаційний потік призводить до переміщення домішок із менш неоднорідно-розтягнутої області внутрішнього шару (центру внутрішнього шару) до меж контактуючих матеріалів гетероструктури (рис. 3).

Напруження, які виникають в гетеросистемі як внаслідок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і через наявність домішок, є причиною зміни ефективного розміру дифузійного каналу. Залежність коефіцієнта дифузії напруженої гетеросистеми від неузгодження параметрів ґраток та концентрації домішок визначається формулою (5). Підставивши перенормовану деформацію  $U(x)$  (13) у формулу (5), отримаємо:

$$\frac{D_{ef}}{D} = 1 - \left( \frac{N_1 \varepsilon_0}{N_b} \frac{1}{2} + \frac{\eta \cdot l / (ka)}{1 - a/l - \frac{1}{k} (1 - \exp(\frac{ka}{l}))} \left( \exp\left(\frac{ka}{l}\right) - 1 \right) \right) \quad (14)$$

де  $\eta = \frac{N_0}{N_b}$ .

На рис. 4 представлено результати розрахунку залежності коефіцієнта дифузії домішок кремнію в гетероструктурі GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs від складу її внутрішнього шару або від величини невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів при різних значеннях середньої концентрації домішок відносно коефіцієнта вільної дифузії. При незначній концентрації домішок ( $\eta = 10^{-8}$ ,  $N_0 = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) зі зростанням величини невідповідності ґраток гетероструктури коефіцієнт дифузії  $D_{ef}$  лінійно збільшується. Його зміна відносно коефіцієнта вільної дифузії  $D$  не перевищує 3 %. Подальше зростання середньої концентрації домішок призводить до монотонного зменшення коефіцієнта дифузії. Причому, з ростом невідповідності параметрів ґраток (з ростом долі In у шарі In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As) коефіцієнт дифузії в напруженій гетероструктурі також зменшується. Зокрема, при середній концентрації домішок кремнію  $N_0 = 1,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $\eta = 0,015$  коефіцієнт дифузії гетеросистеми зменшується на 35 % ( $x = 1$ ) порівняно з коефіцієнтом вільної дифузії.

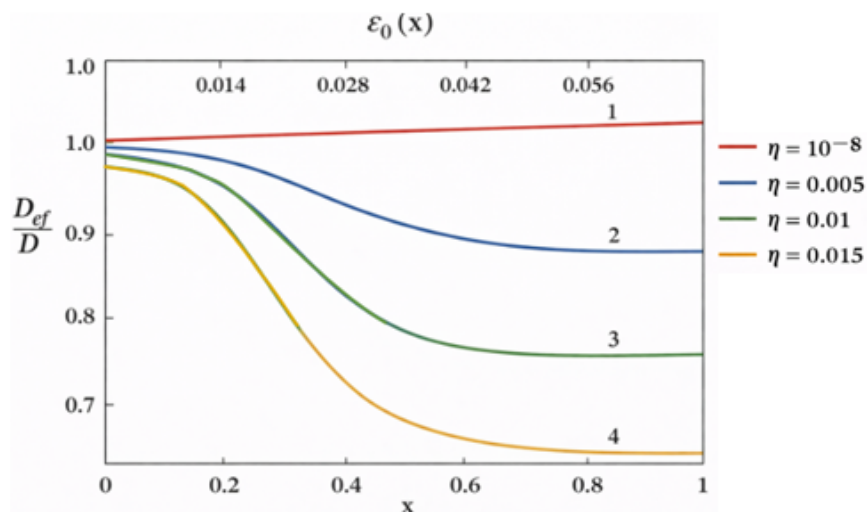


Рис. 4. Залежність коефіцієнта дифузії кремнію у внутрішньому шарі гетероструктури GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs від складу твердого розчину при різних значеннях середньої концентрації домішок ( $k = 2700$ ): 1 –  $\eta = 10^{-8}$ ; 2 –  $\eta = 0,005$ ; 3 –  $\eta = 0,01$ ; 4 –  $\eta = 0,015$

При незначних концентраціях домішок деформація структури в основному визначається складовою, що виникає внаслідок неузгодження параметрів ґраток шарів В (In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As) та А (GaAs) [11]. В цьому випадку зростання долі In у шарі In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As призводить до зростання деформації стиску внутрішнього шару In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As за абсолютною величиною і, відповідно, до зменшення часу між двома зіткненнями домішок, що і є причиною збільшення коефіцієнта дифузії (рис. 4, лінія 1).

При зростанні середньої концентрації домішок характер деформації матеріалу гетероструктури основним чином визначається перерозподілом домішок. У цьому випадку збільшення невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів призводить до

накопичення домішок у внутрішньому шарі (рис. 2) і, відповідно, до збільшення деформації розтягу. Як було зазначено в роботі [15], напруження розтягу збільшує потенціальний бар'єр для дифузії. Збільшення концентрації домішок у внутрішньому напруженому шарі  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  тришарової гетероструктури  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  призводить до зменшення відстані між двома положеннями рівноваги (відстань між вузлами або міжвузлями), що і є причиною зменшення коефіцієнта дифузії (рис. 4) [8]. У випадку, коли внутрішній шар зазнає всебічної деформації розтягу, спостерігається незначне (до 3,2%) монотонне зменшення коефіцієнта дифузії домішок як при збільшенні їх концентрації, так і при зростанні неузгодження параметрів кристалічних ґраток контактуючих шарів (рис. 5). Така поведінка коефіцієнта дифузії пояснюється тим, що наявність домішок практично не змінює величини деформації внутрішнього розтягнутого шару тришарової гетероструктури і, відповідно, несуттєво зменшується коефіцієнт дифузії в напруженій структурі [15] з внутрішнім шаром, який зазнає всебічної деформації розтягу.

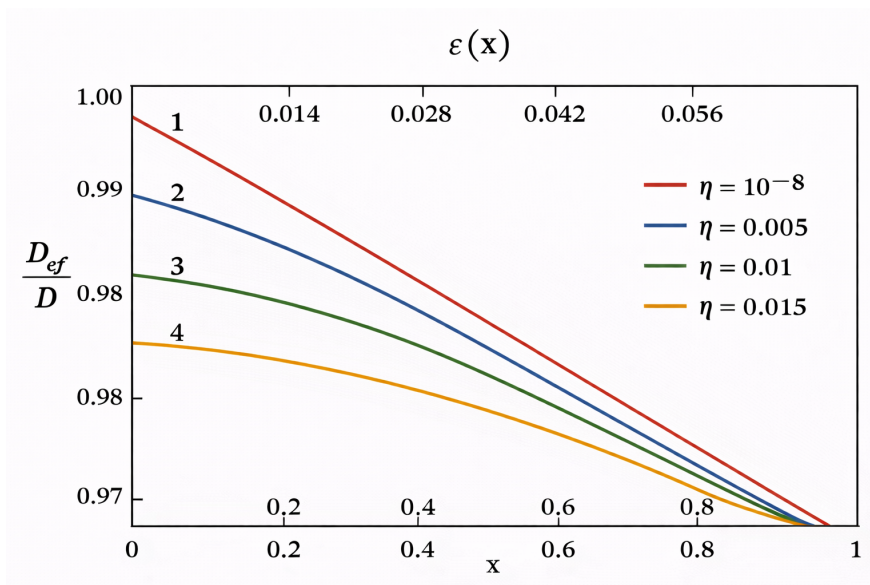


Рис. 5. Залежність коефіцієнта дифузії кремнію у внутрішньому шарі гетероструктури  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  від складу твердого розчину при різних значеннях середньої концентрації домішок ( $k=2700$ ): 1 —  $\eta = 10^{-8}$ ; 2 —  $\eta = 0,005$ ; 3 —  $\eta = 0,01$ ; 4 —  $\eta = 0,015$

Проведені теоретичні розрахунки якісно узгоджуються з експериментальними результатами, отриманими у роботі [18], де показано, що напружені шари гетероструктури  $\text{InGaAs}/\text{AlGaAs}$  суттєво впливають на міжшарову дифузію, зменшуючи коефіцієнт дифузії для дефектів, які є центрами розтягу.

Практична цінність роботи полягає в тому, що розроблена математична модель дозволяє прогнозувати просторовий розподіл домішок і точкових дефектів у напружених напівпровідникових гетероструктурах з урахуванням впливу механічних деформацій, спричинених як невідповідністю параметрів ґраток, так і наявністю домішок. Отримані результати можуть бути використані для оптимізації технологічних процесів (дифузійного легування, йонної імплантації, термічної обробки) шляхом керування перерозподілом домішок у гетероструктурах, прогнозування концентраційних профілів у багатшарових структурах типу  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  без проведення дороговартісних

експериментів, керування ефективним коефіцієнтом дифузії через зміну невідповідності параметрів ґраток і рівня легування, а також підвищення якості напівпровідникових приладів шляхом зменшення небажаного проникнення домішок у активні області. Показано, що напружені шари можуть виконувати роль бар'єрів або пасток для домішок, що відкриває можливості для проєктування гетероструктур із наперед заданими фізичними властивостями та контрольованим просторовим розподілом носіїв заряду.

### **Висновки.**

1. Розроблено математичну модель явища дифузії точкових дефектів у напівпровідникових гетеросистемах, яка враховує наявність деформації, створеної самими дефектами, та деформації, яка виникає в околі гетеромежі внаслідок неспівпадіння параметрів ґраток контактуючих матеріалів.

2. У межах розробленої моделі досліджено залежність коефіцієнта дифузії домішок від величини невідповідності параметрів ґраток матеріалів напівпровідникової гетероструктури GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs.

3. Встановлено, що зі збільшенням невідповідності параметрів ґраток на 7% ( $x = 1$ ) коефіцієнт дифузії домішок у внутрішньому шарі In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As гетероструктури GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs з деформацією стиску зменшується на 35%. Таку поведінку коефіцієнта дифузії можна пояснити зростанням концентрації домішок і відповідним збільшенням величини деформації розтягу, що призводить до збільшення потенціального бар'єру для дифузії.

4. Встановлено, що у тришаровій гетероструктурі з внутрішнім розтягнутим шаром наявність домішок практично не змінює значення коефіцієнта дифузії порівняно з бездомішковою кристалічною системою. Це зумовлено тим, що імплантація домішок виду центру розтягу практично не змінює величини параметра деформації внутрішнього напруженого шару.

**Конфлікт інтересів і етика.** Автори заявляють, що не мають конфліктів інтересів. Автори також заявляють про повне дотримання всіх правил етики журнальних досліджень.

**Подяки.** Автори заявляють про відсутність спеціального фінансування цієї роботи.

### **Список використаних джерел**

1. Robson J. D. Deformation enhanced diffusion in aluminium alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2020. Vol. 51. P. 5029–5041. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11661-020-05960-5>
2. Voges J., Duvigneau F., Juhre D. On the deformation dependency of the diffusion flux in solids at large deformations. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2022. Vol. 34. P. 1991–2012. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00161-022-01092-w>
3. Danielewski M. Entropy production and stress–deformation effect on interdiffusion. *Defect and Diffusion Forum*. 2012. Vol. 323–325. P. 43–48. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.323-325.43>
4. Mehrer H. Diffusion in stressed solids. *Diffusion in Solids*. Springer Series in Solid-State Sciences. 2007. Vol. 155. P. 235–260. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-71488-0>
5. Fisher D. J. Diffusion in GaAs and other III–V semiconductors. Switzerland: Trans Tech Publications, 1998.
6. Beernink K. J., Thornton R. L. Si diffusion and intermixing in AlGaAs/GaAs structures using buried impurity sources. *Applied Physics Letters*. 1995. Vol. 66, No. 10. P. 1271–1273. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.113154>

7. Bugge F., Zeimer U., Wenzel H., Erbert G., Weyers M. Interdiffusion in highly strained InGaAs quantum wells for laser applications. *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 272, No. 1–4. P. 531–537. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.08.050>
8. Park Y. M., Park Y. J., Kim K. M., Song J. D. Interdiffusion and structural change in InGaAs quantum well structures by rapid thermal annealing. *Journal of Applied Physics*. 2004. Vol. 96, No. 10. P. 6080–6084. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1805191>
9. Khreis O. M. Interdiffusion and strain effects in pseudomorphic quantum well heterostructures. *Solid State Communications*. 2004. Vol. 132, No. 11. P. 767–771. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.09.036>
10. Reveil M., Clancy P. Resolving the mystery of the concentration-dependence of amphoteric dopant diffusion in III–V semiconductors. *Acta Materialia*. 2020. Vol. 186. P. 555–563. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.016>
11. Ryu S., Kim I., Choe B., Jeong W. The effect of strain on the interdiffusion in InGaAs/GaAs quantum wells. *Applied Physics Letters*. 1995. Vol. 67. P. 1419. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.114512>
12. Klepach T.I., Zohdi M. Strain assisted diffusion: Modeling and simulation of deformation-dependent diffusion in composite media. *Composites Part B: Engineering*. 2014. Vol. 56. P. 413–423. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2013.08.035>
13. Suo Y., Yang F. One-dimensional analysis of the coupling between diffusion and deformation in a bi-layer electrode. *Acta Mechanica Sinica*. 2019. Vol. 35. P. 589–599. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10409-018-0817-5>
14. Фльорко О. В., Чекурін В. Ф. Математична модель дифузії в деформованій ґратці. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка"*. 2000. № 393. С. 64–67. <https://ena.lpnu.ua/handle/ntb/9185>
15. Peleshchak, R.M., Kuzyk, O.V., Dan’kiv, O.O. The deformation-diffusion mechanism of the formation of n-n+-transitions in semiconductors under the influence of pulsed laser irradiation. *Romanian Reports in Physics*. 2021. Vol. 73. P. 506:1–11. URL: <https://rrp.nipne.ro/2021/AN73506.pdf>
16. Rammohan K., Rich D. H., MacDougal M. H., Dapkus P. D. Thermal processing of strained InGaAs/GaAs quantum well heterostructures. *Applied Physics Letters*. 1997. Vol. 70, No. 12. P. 1599–1601. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.118627>
17. Djie H. S., Ho C. K. F., Mei T., Ooi B. S. Quantum well intermixing enhancement using Ge-doped encapsulant layers in InGaAs/InP. *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 86. Art. 041107. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1868867>
18. Yang Z., Zhang S., Ma S., Shi Y., Liu Q., Hao X., Shang L., Han B., Qiu B., Xu B. Effects of Thermal-Strain-Induced Atomic Intermixing on the Interfacial and Photoluminescence Properties of InGaAs/AlGaAs Multiple Quantum Wells. *Materials*. 2023. Vol. 16(17). Art. 6068. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma16176068>

UDC 517.958:539.3:530.182

## Mathematical modeling of the influence of deformation effects on the diffusion coefficient of impurities in nanoheterostructures

Olesya Dan’kiv, Yuriy Nechypor, Oleh Kuzyk

*Abstract.* A mathematical model of diffusion in heterosystems taking into account deformation has been constructed. The mathematical model is based on the solution of the stationary Fick equation modified by mechanical-deformation effects. Within the framework of the developed model, the influence of deformation on the diffusion coefficient of impurities in the heterostructure was studied. It was found that with an increase in the mismatch of the lattice parameters of the contacting materials of the GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs heterostructure by 7%, the diffusion coefficient of impurity of the type of stretching center in the inner In<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As layer decreases by 35% relative to the diffusion coefficient of impurities

in the unstrained layer, which is associated with an increase in stretching deformation as a result of self-consistent deformation-diffusion redistribution.

*Keywords:* mathematical modeling, heterosystem, deformation, impurity, diffusion, mechanical strain.

## References

1. Robson, J. D. (2020). *Deformation enhanced diffusion in aluminium alloys*, Metallurgical and Materials Transactions A, **51**, 5029–5041. <https://doi.org/10.1007/s11661-020-05960-5>
2. Voges, J., Duvigneau, F., Juhre, D. (2022). *On the deformation dependency of the diffusion flux in solids at large deformations*, Continuum Mechanics and Thermodynamics, **34**, 1991–2012. <https://doi.org/10.1007/s00161-022-01092-w>
3. Danielewski, M. (2012). *Entropy production and stress–deformation effect on interdiffusion*, Defect and Diffusion Forum, **323–325**, 43–48. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.323-325.43>
4. Mehrer, H. (2007). *Diffusion in stressed solids*, Diffusion in Solids, Springer Series in Solid-State Sciences, **155**, 235–260. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-71488-0>
5. Fisher, D. J. (1998). *Diffusion in GaAs and other III–V semiconductors*, Trans Tech Publications, Switzerland.
6. Beernink, K. J., Thornton, R. L. (1995). *Si diffusion and intermixing in AlGaAs/GaAs structures using buried impurity sources*, Applied Physics Letters, **66** (10), 1271–1273. <https://doi.org/10.1063/1.113154>
7. Bugge, F., Zeimer, U., Wenzel, H., Erbert, G., Weyers, M. (2004). *Interdiffusion in highly strained InGaAs quantum wells for laser applications*, Journal of Crystal Growth, **272** (1–4), 531–537. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.08.050>
8. Park, Y. M., Park, Y. J., Kim, K. M., Song, J. D. (2004). *Interdiffusion and structural change in InGaAs quantum well structures by rapid thermal annealing*, Journal of Applied Physics, **96** (10), 6080–6084. <https://doi.org/10.1063/1.1805191>
9. Khreis, O.M. (2004). *Interdiffusion and strain effects in pseudomorphic quantum well heterostructures*, Solid State Communications, **132** (11), 767–771. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.09.036>
10. Reveil, M., Clancy, P. (2020). *Resolving the mystery of the concentration-dependence of amphoteric dopant diffusion in III-V semiconductors*, Acta Materialia, **186**, 555–563. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.016>
11. Ryu, S., Kim, I., Choe, B., Jeong, W. (1995). *The effect of strain on the interdiffusion in InGaAs/GaAs quantum wells*, Applied Physics Letters, **67**, 1419. <https://doi.org/10.1063/1.114512>
12. Klepach, T.I., Zohdi, M. (2014). *Strain assisted diffusion: Modeling and simulation of deformation-dependent diffusion in composite media*, Composites Part B: Engineering, **56**, 413–423. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2013.08.035>
13. Suo, Y., Yang, F. (2019). *One-dimensional analysis of the coupling between diffusion and deformation in a bilayer electrode*, Acta Mechanica Sinica, **35**, 589–599. <https://doi.org/10.1007/s10409-018-0817-5>
14. Florko, O.V., Chekurin, V.F. (2000). *Mathematical model of diffusion in a deformed lattice*, Visnyk of Lviv Polytechnic National University, **393**, 64–67 [in Ukrainian]. <https://ena.lpnu.ua/handle/ntb/9185>
15. Peleshchak, R.M., Kuzyk, O.V., Dan'kiv, O.O. (2021). *The deformation-diffusion mechanism of the formation of  $n-n+$  transitions in semiconductors under the influence of pulsed laser irradiation*, Romanian Reports in Physics, **73**, 506:1–11. <https://rrp.nipne.ro/2021/AN73506.pdf>
16. Rammohan, K., Rich, D. H., MacDougall, M. H., Dapkus, P. D. (1997). *Thermal processing of strained InGaAs/GaAs quantum well heterostructures*, Applied Physics Letters, **70** (12), 1599–1601. <https://doi.org/10.1063/1.118627>
17. Djie, H. S., Ho, C. K. F., Mei, T., Ooi, B. S. (2005). *Quantum well intermixing enhancement using Ge-doped encapsulating layers in InGaAs/InP*, Applied Physics Letters, **86**, 041107. <https://doi.org/10.1063/1.1868867>
18. Yang, Z., Zhang, S., Ma, S., Shi, Y., Liu, Q., Hao, X., Shang, L., Han, B., Qiu, B., Xu, B. (2023). *Effects of Thermal-Strain-Induced Atomic Intermixing on the Interfacial and Photoluminescence Properties of InGaAs/AlGaAs Multiple Quantum Wells*, Materials, **16**(17), 6068. <https://doi.org/10.3390/ma16176068>

**Про авторів / About the authors**

**Олеся Даньків**, кандидат фізико-математичних наук, доцент, кафедра фізики та інформаційних систем, Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Івана Франка, 24, м. Дрогобич, 82100, Україна;

**Olesya Dan'kiv**, Candidate of Science in Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Physics and Information Systems, Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 24, Ivan Franko Str., Drohobych 82100, Ukraine;

**Юрій Нечипор**, аспірант, кафедра фізики та інформаційних систем, Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Івана Франка, 24, м. Дрогобич, 82100, Україна;

**Yurij Nechypor**, Postgraduate Student, Department of Physics and Information Systems, Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 24, Ivan Franko Str., Drohobych 82100, Ukraine;

**Олег Кузик**, кандидат фізико-математичних наук, доцент, кафедра фізики та інформаційних систем, Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Івана Франка, 24, м. Дрогобич, 82100, Україна;

**Oleh Kuzyk**, Candidate of Science in Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Physics and Information Systems, Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 24, Ivan Franko Str., Drohobych 82100, Ukraine.

Отримано / Received 12.03.2026  
Прийнято до друку / Accepted 08.04.2026  
Опубліковано / Published 27.05.2026