

Анализ особенностей процесса диффузии Zn в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP с учетом эффекта сегрегации

© П.Е. Копытов¹, И.А. Старков², И.И. Новиков¹, С.А. Блохин³, Д.С. Папылев¹, Р.В. Левин³,
В.В. Андрюшкин¹, Я.Н. Ковач³, Е.В. Никитина⁴, К.О. Воропаев⁵, А.Ф. Цацульников⁶, Л.Я. Карачинский¹

¹ Университет ИТМО,
197101 Санкт-Петербург, Россия

² НТЦ тонкопленочных технологий в энергетике,
194064 Санкт-Петербург, Россия

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

⁴ Академический университет им. Ж.И. Алфёрова,
194021 Санкт-Петербург, Россия

⁵ АО „ОКБ-Планета“,
173004 Великий Новгород, Россия

⁶ НТЦ микроэлектроники Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: kopytovpe@itmo.ru

Поступила в Редакцию 4 февраля 2026 г.

В окончательной редакции 2 марта 2026 г.

Принята к публикации 20 марта 2026 г.

Представлена физическая модель процесса диффузии примеси Zn в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP с учетом эффекта сегрегации, позволяющая качественно и количественно рассчитывать эволюцию профиля концентрации Zn. Проанализирован широкий набор экспериментальных данных при различных технологических режимах диффузии Zn в гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP в реакторе установки эпитаксии из металлорганических соединений, используя диэтилцинк в качестве источника диффузианта. Определено влияние температуры и давления в реакторе на коэффициенты диффузии и сегрегации. Показано, что игнорирование сегрегационных процессов при моделировании диффузии может приводить к значительной ошибке в определении коэффициентов диффузии. Выполнены расчеты профилей диффузии Zn в зависимости от толщины слоев твердых растворов гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP и технологических режимов диффузии. Показано, что использование слоев твердых растворов даже относительно малой толщины может значительно менять глубину диффузионного проникновения из-за малого коэффициента диффузии и большого градиента коэффициента сегрегации.

Ключевые слова: диффузия, сегрегация, примесь, диэтилцинк, фосфид индия.

DOI: 10.61011/FTP.2026.01.62897.9058

1. Введение

Диффузия цинка (Zn) в гетероструктуры на основе соединений III-V является широко применяемым процессом для изготовления электронных и оптоэлектронных устройств [1–3]. Технологически процесс диффузии происходит локально через диэлектрическую маску с применением одного из технологических методов: диффузия в запаянной ампуле [4], диффузия Zn из нанесенного покрытия [5], диффузия Zn через узкий зазор с использованием планарного источника [6] или диффузия из газовой фазы в открытой трубе [7]. Последний метод хорошо зарекомендовал себя ввиду высокой однородности процесса диффузии по площади образца при сохранении воспроизводимости получаемых результатов.

Основными параметрами, которые влияют на профиль диффузии Zn, являются диффузионные условия, тип диффузанта, технологический метод и тип используемого реактора [7]. К сожалению, в литературе встречаются лишь единичные как теоретические, так и эксперимен-

тальные работы, в которых комплексно рассматривается зависимость глубины диффузии от перечисленных параметров. Очевидно, что математическое моделирование диффузионных процессов в реальных гетероструктурах позволяет оптимизировать и ускорить процесс исследования. Кроме того, математическая модель позволяет выявить такие особенности и детали процессов, которые трудно обнаружить в реальном эксперименте.

Исследования процесса диффузии Zn в гетероструктурах на основе соединений III-V опираются на комплексные подходы к анализу профилей распределения легирующей примеси и характеристик интерфейсов. Сканирующая электронная микроскопия (англ. scanning electron microscopy, SEM) представляет собой наиболее прямой метод оценки глубины диффузии Zn путем выявления границы контраста изображения между областями полупроводника с разным типом носителей заряда [8–10]. Однако распределение электрического поля на поперечном сечении образца влияет на контраст SEM-изображения и на точность определения глубины залегания примеси

Zn и оптимально подходит для контроля формирования двойного фронта легирования [7,11]. Вторичная ионная масс-спектрометрия (англ. secondary-ion mass spectrometry, SIMS) позволяет получить информацию о профиле распределения атомов Zn, внедренных в InP [7,12–14]. Такая информация широко используется для моделирования процесса диффузии [15]. Однако на практике зачастую необходимо знать актуальное распределение электрически активных примесей в гетероструктуре, концентрация которых может сильно зависеть от типа процесса диффузии Zn и его параметров в совокупности с конструкцией самой гетероструктуры. Решение данного вопроса связано с применением менее ресурсоемкого метода электрохимического вольт-емкостного профилирования (англ. electrochemical capacitance-voltage profiling, ECV) [16]. Хотя количество электрически активных примесей может заметно отличаться от концентрации внедренных атомов примеси при диффузии Zn из газовой фазы [12,17], применение *in situ* или *ex situ* термической активации примесей позволяет получить хорошую корреляцию профиля распределения электрически активных примесей, полученного методом ECV, с профилем распределения внедренных атомов Zn, полученным методом SIMS [14,18].

Длительное время в научной литературе влияние сегрегационных процессов на профиль диффузии Zn игнорировалось и зачастую объяснялось погрешностью измерительных процедур или физическими артефактами [12,17,19]. Ранее исследование методом ECV особенностей диффузии Zn в InP через поверхностный слой InGaAs позволило выявить сегрегацию легирующей примеси вблизи гетерограницы InGaAs–InP [11]. В работе [20], посвященной изучению диффузии Zn в гетероструктуру InGaAs/InP/InAlAs/InP, комбинацией методов времяпролетной SIMS, магнитной SIMS и высокоэнергетической рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии была обнаружена эффективная блокировка диффузии Zn в InP слоем InAlAs.

Ранее, используя результаты анализа методом ECV гетероструктур InGaAs/InP, подвергнутых диффузии Zn из газовой фазы, был разработан подход для моделирования процесса диффузии Zn в гетероструктуры InGaAs/InP с учетом сегрегации легирующей примеси [21]. На основании разработанного ранее подхода в настоящей работе проведен комплексный теоретический анализ экспериментальных данных диффузии Zn из газовой фазы в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP с целью определения влияния тонкого (~ 10 нм) стоп-слоя InAlAs на глубину залегания легирующей примеси.

2. Диффузионно-сегрегационная модель распределения Zn

В твердотельных структурах диффузия примесных атомов или точечных дефектов различной природы происходит одновременно с процессом сегрегации. Вслед-

ствие этого для прецизионного моделирования концентрационного распределения примеси N_a необходимо рассматривать оба данных явления [22–24]. Аналогично классическим законам Фика общее уравнение диффузии-сегрегации может быть получено на основе термодинамических принципов и имеет следующий вид [24,25]:

$$\frac{\partial N_a(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, t) \left(\frac{\partial N_a(x, t)}{\partial x} - \frac{N_a(x, t)}{m(x)} \frac{\partial m(x)}{\partial x} \right) \right], \quad (1)$$

где x — глубина, t — время, D — эффективный коэффициент диффузии, m — безразмерный коэффициент сегрегации. Ввиду наличия межузельного и вакансионного механизмов диффузии Zn в структуры InP, InGaAs/InP и InGaAs/InAlAs эффективный коэффициент диффузии D оказывается зависимым от концентрации примеси $N_a(x, t)$ [12,26]:

$$D(x, t) = D_0 \left(\frac{N_a(x, t)}{N_0} \right)^n. \quad (2)$$

Параметры D_0 и N_0 определяют коэффициент диффузии и концентрацию примеси на поверхности гетероструктуры (аналог источника). Математическая запись уравнения (1) позволяет нормировать коэффициент сегрегации $m(x)$ на значение на поверхности гетероструктуры $m(0)$ без внесения каких-либо дополнительных изменений. Подобное преобразование существенно упрощает процесс нахождения параметров диффузии-сегрегации из экспериментальных данных.

Для полной постановки задачи диффузии-сегрегации необходимо сформулировать краевые условия. Соответствующие граничные и начальные условия имеют вид

$$N_a(x, 0) = 0, \quad N_a(0, t) = N_0, \quad \frac{\partial N_a(H, t)}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

где H — общая толщина гетероструктуры, а начало координат соответствует границе раздела газовой фазы и поверхности гетероструктуры. Численное решение уравнений (1)–(3) было реализовано в среде Comsol Multiphysics в модуле дифференциальной математики.

3. Экспериментальные образцы и методы исследования

Для нахождения эволюции пространственного распределения концентрации примеси $N_a(x, t)$ при заданном источнике N_0 необходимо знать параметры гетероструктуры D_0 и $m(x)$. Если усредненные значения коэффициентов диффузии можно найти в научной литературе, то зависимость коэффициента сегрегации от глубины залегания примеси уникальна для каждого технологического режима роста. В качестве простого решения данная информация может быть найдена при помощи

воспроизведения экспериментальных зависимостей примеси $N_a(x, t)$ в гетероструктурах на основе системы материалов InAlGaAs/InP с учетом особенностей используемого метода диффузии Zn и конечного приборного применения.

При реализации диффузии Zn из газовой фазы типично применяют диметилцинк (DMZn) или диэтилцинк (DEZn) в качестве источника Zn. Однако в первом случае длительное сохранение высокого фонового уровня диффузанта в реакторе установки обуславливает необходимость выделения отдельной технологической установки только под эту задачу. Тогда как во втором случае низкий предельный уровень легирования InP ведет к проблеме формирования омического p -контакта к слоям InP:Zn (типично степень легирования не превышает $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Для решения данной проблемы в гетероструктуру вводят дополнительный слой InGaAs, предел растворимости Zn в котором выше на несколько порядков, чем в InP [13]. При этом стоит учитывать то, что толщина слоя InGaAs и его латеральный размер существенно влияют на скорость и глубину диффузии Zn в InP через InGaAs [27].

При создании лавинных фотодиодов (ЛФД) в планарной конструкции с отдельными областями поглощения фотонов и умножения фотогенерированных носителей заряда, в том числе для детектирования одиночных фотонов, необходимо сформировать двойной фронт залегания примеси p -типа [28]. Однако локальное формирование двойного фронта залегания примеси p -типа за два процесса диффузии Zn, необходимое для работы ЛФД, сопряжено с проблемами модификации поверхности полупроводника при формировании диэлектрической маски, приводящими к росту темновых токов ЛФД [27]. Альтернативным методом формирования двухступенчатого профиля залегания примеси p -типа за один процесс диффузии Zn является формирование поверхностного рельефа [7,10]. Однако применение плазмохимических методов травления полупроводника сопряжено с риском повреждения поверхности и генерацией кристаллических дефектов в умножительном слое [29], а неселективное химическое травление не позволяет обеспечить однородность и воспроизводимость травления рельефа как по площади, так и по глубине. Решение данной проблемы связано с применением селективного химического травления и стоп-слоев InAlAs. Итоговая конструкция экспериментальных образцов представляет собой четырехслойную систему, состоящую из поверхностного слоя нелегированного InGaAs толщиной $h_1 = 250 \text{ нм}$, стоп-слоя нелегированного InAlAs толщиной $h_2 = 10 \text{ нм}$, слоя нелегированного InGaAs толщиной $h_3 = 50 \text{ нм}$ и слоя нелегированного InP толщиной $h_4 = 3.5 \text{ мкм}$. Гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP данной конструкции были выращены на подложках InP методом газовой фазной эпитаксии из металлоорганических соединений (англ. metal organic chemical vapor deposition, MOCVD). Схематическое изображение исследуемой структуры приведено на рис. 1. Впоследствии, для анализа влияния

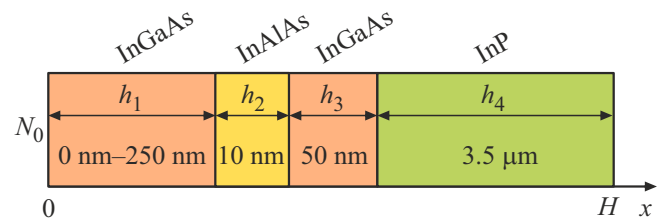


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP.

толщины h_1 на глубину диффузии, выращенные структуры подвергались последовательному сухому травлению поверхностного слоя InGaAs (т.е. $h_1 = 200, 150, 100, 50, 0 \text{ нм}$).

Реализация процесса диффузии Zn из газовой фазы в исследуемые гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP происходила в реакторе установки MOCVD Aixtron AIX-200. В качестве металлоорганического источника Zn был использован DEZn. Процесс диффузии Zn выполнялся при температурах $475\text{--}500^\circ\text{C}$ и давлении в реакторе $50\text{--}200 \text{ мбар}$. После процесса диффузии Zn исследуемые гетероструктуры подвергались *ex situ* быстрому термическому отжигу в потоке азота длительностью 5 мин при температуре 450°C для термической активации примесей.

Одномерные профили распределения электрически активных примесей в гетероструктурах, подвергнутых процессу диффузии Zn, были получены методом ECV с использованием электрохимического профилометра Nanometrics ECVpro.

4. Результаты и обсуждение

4.1. Определение коэффициентов диффузии и сегрегации

Результаты измерений одномерных профилей распределения электрически активных примесей $N_a(x, t)$ в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP методом ECV при различных технологических режимах приведены на рис. 2. В процессе диффузии концентрация примеси испытывает скачок на границах раздела сред, обусловленный явлением сегрегации в разнородных слоях. Для воспроизведения полученных зависимостей при помощи модели (1)–(3) концентрация источника N_0 определялась из экспериментальных зависимостей $N_a(x, t)$ при $x = 0$. В результате минимизации квадрата ошибки между расчетной величиной и реальным значением $N_a(x, t)$ были найдены зависимости коэффициентов диффузии D_0 от температуры и давления в реакторе для каждого материала гетероструктуры (см. рис. 3, а). Также были определены зависимости коэффициента сегрегации от глубины залегания примеси $m(x)$, продемонстрированные на рис. 3, б. При этом характер поведения зависимостей $m(x)$ для всех рассмотренных толщин поверх-

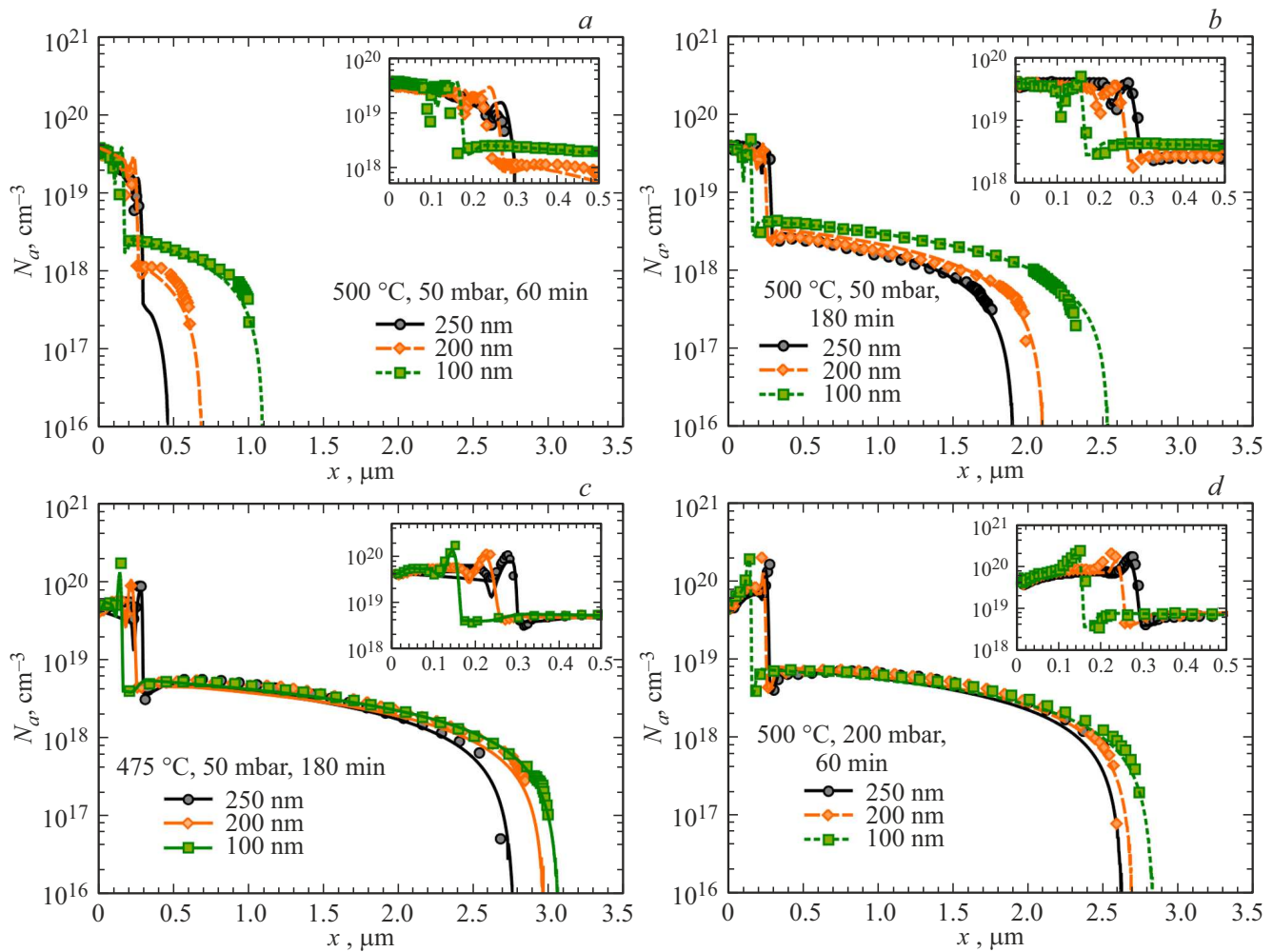


Рис. 2. Профили распределения электрически активных примесей p -типа в гетероструктуре InGaAs/InAlAs/InP для различных толщин поверхностного слоя InGaAs h_1 . Символы — эксперимент, линии — численный расчет. a — температура — 500 °C, давление — 50 мбар, время процесса — 60 мин; b — температура — 500 °C, давление — 50 мбар, время процесса — 180 мин; c — температура — 475 °C, давление — 50 мбар, время процесса — 180 мин; d — температура — 500 °C, давление — 200 мбар, время процесса — 60 мин.

ночного слоя InGaAs идентичен, и для каждого случая может быть получен при помощи пропорционального масштабирования приведенных на рис. 3, b зависимостей. Из рис. 3, b видно, что давление, температура и тип материала оказывают существенное влияние на $m(x)$. Так, увеличение температуры с 475 до 500 °C при фиксированном давлении в реакторе 50 мбар приводит к снижению значений коэффициента сегрегации во всех слоях гетероструктуры с сохранением заметного провала зависимости $m(x)$ на границе раздела поверхностного слоя InGaAs и InAlAs. Как следствие, при данном технологическом режиме наблюдается наиболее слабое влияние сегрегации и уменьшение глубины залегания примеси Zn в слое InP. Повышение давления в реакторе с 50 до 200 мбар при сохранении температуры 500 °C увеличивает значения коэффициента сегрегации во всех слоях гетероструктуры, при этом наблюдаемый ранее скачок на границе раздела поверхностного слоя InGaAs

и InAlAs практически нивелируется, что подавляет блокировку диффузии Zn во второй слой InGaAs и, как следствие, увеличивает глубину залегания примеси в слое InP.

В таблице приведены значения коэффициентов диффузии D_0 , восстановленные из данных измерений методом ECV для различных технологических режимов диффузии Zn. Для материалов InP и InGaAs выявлено, что в диапазонах температур 475–500 °C и давлений 50–200 мбар, D_0 возрастает как с повышением температуры, так и с увеличением давления в реакторе. В случае InAlAs, при тех же температурах и давлениях, D_0 увеличивается с ростом давления в реакторе, тогда как повышение температуры в реакторе не оказывает значительного влияния на D_0 . Температурная зависимость коэффициента диффузии согласуется с описанной в литературе моделью [30]. В то же время в описанной модели давление также влияет на величину D_0 , причем

Коэффициенты диффузии D_0 , установленные в рамках диффузионно-сегрегационной модели

Технологический режим	InGaAs	InAlAs	InP
$T = 475^\circ\text{C}$, $P = 50$ мбар	$1.3 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$4.0 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$3.0 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$
$T = 500^\circ\text{C}$, $P = 50$ мбар	$1.4 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$6.3 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$4.8 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$
$T = 500^\circ\text{C}$, $P = 200$ мбар	$7.7 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$6.2 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	$6.1 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$

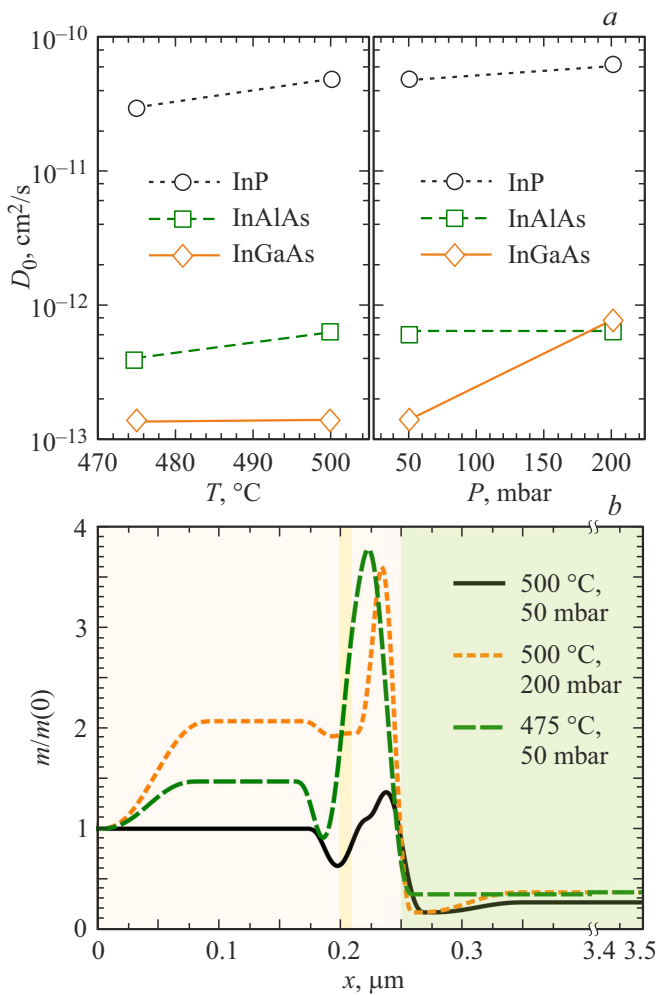


Рис. 3. *a* — зависимость коэффициента диффузии слоев InGaAs, InAlAs и InP от температуры (давление фиксировано, 50 мбар) и давления (температура фиксирована, 500 °C); *b* — зависимость безразмерного параметра сегрегации от глубины залегания примеси при различных технологических параметрах в случае толщины поверхностного слоя InGaAs $h_1 = 200$ нм. Заливка цветом соответствует границам слоев гетероструктуры.

увеличение давления должно приводить к снижению D_0 ввиду уменьшения энтропии активации процесса диффузии [31]. Однако в рассматриваемой системе для материалов InP и InGaAs наблюдается обратный эффект, который, предположительно, можно связать со сменой механизма диффузии от вакансионного к межузельно-му [32].

Величины D_0 , опубликованные в литературе для различных методов диффузии Zn в InP, варьируются в пределах ± 1 порядка от полученного в данной работе результата. Так, для диффузии из Zn_3P_2 в запаянной ампуле величина D_0 для нелегированного InP достигает $1.4\text{--}1.6 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$ при 550 °C [33,34], а при смене диффузанта на Zn_3As_2 при 500 °C составляет $\sim 1.3 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{с}$ [35]. В случае использования диффузии из покрытия, содержащего источник Zn (таких как Demesol, ZnCl_2 , $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$, Zn_2SiO_4) при 550 °C, D_0 составляет $\sim 1.7\text{--}2.7 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$ [36–38]. Для диффузии из газовой фазы при использовании DMZn величина D_0 при 500 °C и потоке 200 $\text{см}^3/\text{мин}$ составляет $\sim 6\text{--}8 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$ [39]. Стоит отметить, что в той же работе [39] установлено снижение величины D_0 при увеличении температуры от 500 до 570 °C. Подобное поведение можно связать со следующим эффектом: при повышении температуры, доля атомов Zn, диффундирующих в подложку, снижается, тогда как доля испаряемых с подложки атомов Zn растет, что в свою очередь ведет к одновременному снижению поверхностной концентрации Zn и коэффициента диффузии. Подобное явление наблюдалось при использовании DEZn как источника *p*-примеси в InP непосредственно в процессе роста в установке MOCVD [40].

Как было отмечено выше, влияние сегрегации наиболее слабо проявляется при температуре 500 °C и давлении 50 мбар. При данном режиме диффузии Zn из газовой фазы особенности (пики и провалы) распределения концентрации Zn на границах раздела сред наименее заметны. Подобное поведение может быть описано в рамках простой модели диффузии (1)–(3) без учета вклада сегрегации (т.е. при $m(x) = 0$). В этом случае коэффициенты D_0 , позволяющие воспроизвести эксперимент, должны быть определены заново: InGaAs — $1.6 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$, InAlAs — $3.9 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2/\text{с}$, InP — $2.3 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с}$. На рис. 4 приведено сравнение экспериментальных и расчетных данных эволюции профиля концентрации $N_a(x, t)$ при определенных выше значениях D_0 для образцов с толщиной h_1 , равной 100 и 250 нм. Несмотря на адекватное совпадение результатов моделирования с экспериментальными данными, даже в этом случае коэффициент диффузии в слое InAlAs оказывается заниженным практически на 2 порядка по сравнению с диффузионно-сегрегационной моделью (см. таблицу), что фактически компенсирует отсутствие коэффициента сегрегации $m(x)$ в модели простой диффузии. Подобный факт говорит о необходимости использования

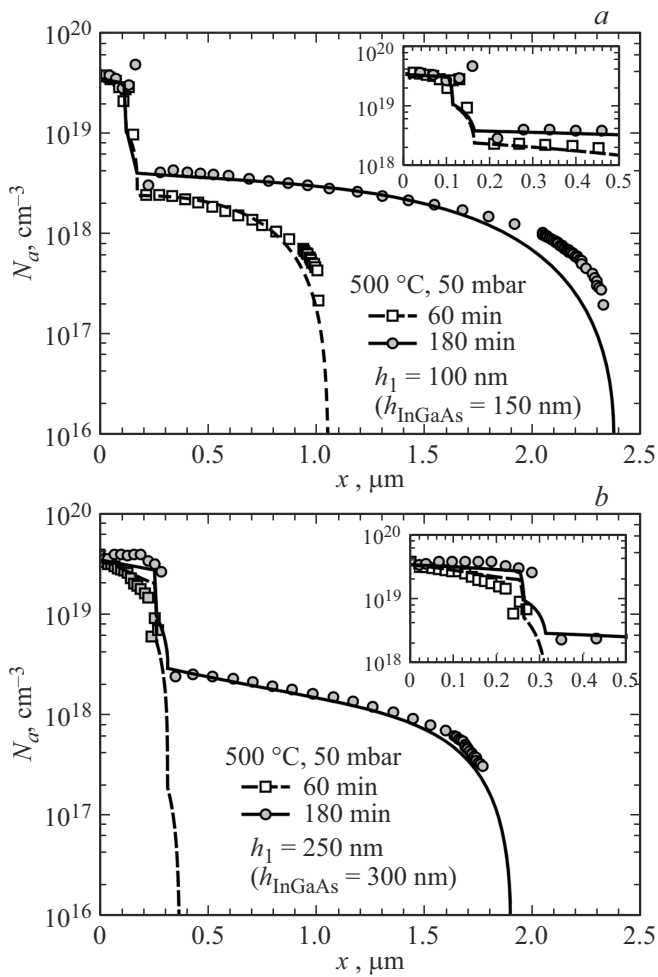


Рис. 4. Профили распределения электрически активных примесей p -типа в гетероструктуре InGaAs/InAlAs/InP при толщине поверхностного слоя InGaAs $h_1 = 100$ нм (а) и $h_1 = 250$ нм (б). Температура — 500 °С, давление — 50 мбар, время процесса — 60 и 180 мин. Символы — эксперимент, линии — численный расчет без учета сегрегации, $m(x) = 0$.

диффузионно-сегрегационной модели при моделировании диффузии Zn в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP для исключения ошибки в определении коэффициентов диффузии.

4.2. Моделирование глубины диффузии Zn

При заданной конструкции гетероструктуры изменение коэффициентов диффузии, определяющих глубину легирования примесью, возможно посредством выбора температурного режима и давления в реакторе. Дополнительной возможностью изменения глубины диффузии d является варьирование конструкции гетероструктуры, а в нашем случае — изменение толщины слоев твердых растворов. При выполнении расчетов профилей легирования с различными толщинами слоев твердых растворов в рамках настоящей работы глубина диффузии

определялась по положению фронта с концентрацией, равной $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

На рис. 5, а построены экспериментальные и расчетные зависимости глубины залегания примеси Zn от толщины поверхностного слоя InGaAs для всех рассмотренных температур и давлений в реакторе. Толщины остальных слоев оставались неизменными ($h_2 = 10$ нм, $h_3 = 50$ нм, $h_4 = 3.5$ мкм). Для технологического режима с температурой 500 °С и давлением 200 мбар стоит обратить внимание на явное уменьшение глубины фронта диффузии при малых h_1 . Подобное поведение соответствует увеличению влияния сегрегации и наличию стоп-слоя InAlAs, обладающим наименьшим коэффициентом диффузии при данном технологическом режиме. С этой точки зрения особый интерес представляет исследование изменения величины d от толщины стоп-слоя h_2 при фиксировании остальной конструкции структуры ($h_1 = 250$ нм, $h_3 = 50$ нм, $h_4 = 3.5$ мкм). Ввиду малой толщины данного слоя им часто пренебрегают при про-

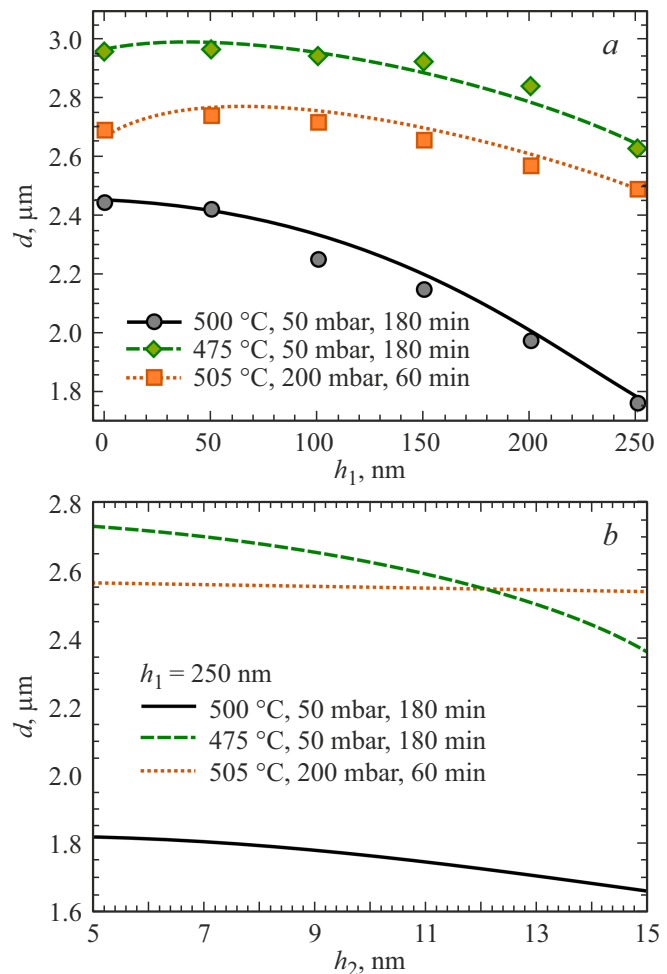


Рис. 5. Зависимость глубины диффузии Zn в гетероструктуре InGaAs/InAlAs/InP от толщины поверхностного слоя h_1 (а) и толщины стоп-слоя h_2 (б) при различных технологических режимах. Символы — эксперимент, линии — численный расчет.

ведении различных оценок диффузионного процесса. Согласно результатам моделирования, зависимости $d(h_2)$, представленные на рис. 5, *b*, даже при незначительных изменениях толщины стоп-слоя InAlAs могут оказывать заметное влияние на глубину диффузии Zn в InP при определенных технологических режимах. В рассматриваемом случае наибольшее относительное изменение величины d ($\sim 12\%$) при варьировании толщины стоп-слоя InAlAs на 5 нм наблюдается при температуре 475 °С и давлении 50 мбар. Повышение температуры и (или) давления, при которых идет процесс диффузии, ведет к ослаблению эффекта блокировки стоп-слоем InAlAs диффузии Zn в InP вследствие роста коэффициентов диффузии D_0 .

В свою очередь варьирование толщины h_3 второго слоя InGaAs не приводит к заметному изменению d . Так, увеличение толщины данного слоя в 2 раза приводит к изменению глубины диффузии всего лишь на 2–3% в зависимости от технологического режима. Подобное малое влияние толщины h_3 на глубину диффузии можно связать с наличием сегрегации Zn на границе раздела InGaAs/InP при всех исследованных технологических режимах. При варьировании h_3 концентрация примеси в слое остается высокой, а значит, условие для преодоления границы раздела сохраняется, вследствие чего большого изменения глубины диффузии не наблюдается. По этой причине данные результаты не приводятся в настоящей работе. Можно заключить, что выполненные численные расчеты демонстрируют необходимость рассмотрения полноценной конструкции гетероструктуры (т.е. четырехслойную систему InGaAs–InAlAs–InGaAs–InP) для адекватного восстановления эволюции профиля распределения концентрации Zn из эксперимента.

5. Заключение

В работе представлен подход на основе уравнения диффузии-сегрегации, позволяющий моделировать эволюцию профиля концентрации примеси Zn в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP. Для проведения исследований был изготовлен набор гетероструктур InGaAs/InAlAs/InP различной конструкции, с использованием различных технологических режимов диффузии Zn из газовой фазы, содержащей DEZn. Диффузионно-сегрегационные параметры материалов и слоев гетероструктур определялись из экспериментальных распределений электрически активных примесей методом ECV. Предложенная модель позволяет качественно и количественно рассчитывать профили концентрации Zn в гетероструктурах InGaAs–InAlAs–InGaAs–InP при различных технологических режимах диффузии Zn из газовой фазы. Установленные, согласно расчетам, коэффициенты диффузии в материалах InGaAs/InAlAs/InP и зависимости распределения коэффициента сегрегации от

глубины залегания примеси показали наличие их зависимости не только от температуры, но и от давления. Значения установленных коэффициентов диффузии для диффузии из газовой фазы при использовании DEZn сопоставимы с аналогичными величинами для других диффузионных методов, представленных в научной литературе. Установлено, что при низких температуре и давлении толщина стоп-слоя InAlAs оказывает существенное влияние на глубину залегания примеси, однако оно уменьшается с ростом температуры и (или) давления вследствие роста коэффициентов диффузии в материалах InP и InGaAs. Проведенный в рамках предложенной модели диффузии анализ экспериментальных результатов продемонстрировал необходимость учета вклада сегрегации в диффузионных процессах Zn в гетероструктуры InGaAs/InAlAs/InP.

Финансирование работы

Авторы благодарят РЖД за финансовую поддержку в части изготовления образцов гетероструктур InGaAs/InAlAs/InP для комплексных исследований процесса диффузии Zn из газовой фазы. Численное моделирование процессов диффузии выполнено в рамках государственного задания (проект FSER-2025-0005).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V.V. Andryushkin, A.G. Gladyshev, A.V. Babichev, E.S. Kolodeznyi, I.I. Novikov, L.Ya. Karachinsky, N.A. Maleev, V.P. Khvostikov, B.Ya. Ber, A.G. Kuzmenkov. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **2103**, 012184 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2103/1/012184
- [2] A. Ozcan-Atar, A. Gocalinska, P.P. Michałowski, M. Johnson, J. O'Hara, B. Corbett, A. Rejmer, F. Peters, D.D. Vvedensky, A. Zangwill, G. Juska, E. Pelucchi. *Appl. Surf. Sci.*, **688**, 162360 (2025). DOI: 10.1016/j.apsusc.2025.162360
- [3] М.О. Петрушков, М.С. Аксенов, Д.Б. Богомолов, Е.А. Емельянов, Д.Ю. Протасов, М.А. Путятю, И.Б. Чистохин, В.В. Преображенский, А.М. Гилинский, К.О. Воропаев. *Оптический журн.*, **91** (2), 40 (2024). DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-02-40-49 [М.О. Petrushkov, M.S. Aksenov, D.B. Bogomolov, E.A. Emelyanov, D.Y. Protasov, M.A. Putyato, I.B. Chistokhin, V.V. Preobrazhenskii, A.M. Gilinsky, K.O. Voropaev. *J. Opt. Technol.*, **91** (2), 86 (2024). DOI: 10.1364/JOT.91.000086].
- [4] K. Lee, K. Yang. *IEEE Phot. Techn. Lett.*, **26** (10), 999 (2014). DOI: 10.1109/LPT.2014.2312022
- [5] Y. Chen, Z. Zhang, G. Miao, H. Jiang, H. Song. *Phys. Status Solidi A*, **219** (2), 2100577 (2022). DOI: 10.1002/pssa.202100577
- [6] В.В. Преображенский, И.Б. Чистохин, М.А. Путятю, Н.А. Валишева, Е.А. Емельянов, М.О. Петрушков, А.С. Плешков, И.Г. Неизвестный, И.И. Рябцев. *Автоматерия*, **57** (5), 48 (2021). DOI: 10.15372/AUT20210506

- [V.V. Preobrazhenskii, I.B. Chistokhin, M.A. Putyato, N.A. Valisheva, E.A. Emelyanov, M.O. Petrushkov, A.S. Pleshkov, I.G. Neizvestny, I.I. Ryabtsev. Optoelectron. Instrum. Data Process., **57** (5), 485 (2021). DOI: 10.3103/S8756699021050125].
- [7] D.-H. Jun, H.-Y. Jeong, Y. Kim, C.-S. Shin, K.H. Park, W.-K. Park, M.-S. Kim, S. Kim, S.W. Han, S. Moon. J. Korean Phys. Soc., **69** (8), 1341 (2016). DOI: 10.3938/jkps.69.1341
- [8] O.J. Pitts, M. Hisko, W. Benyon, S. Raymond, A.J. Springthorpe. J. Cryst. Growth, **393**, 85 (2014). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.09.0.53
- [9] D.D. Agostino, G. Carnicella, C. Ciminelli, P. Thijs, P.J. Veldhoven, H. Ambrosius, M. Smit. Opt. Express, **23** (19), 25143 (2015). DOI: 10.1364/OE.23.025143
- [10] М.О. Петрушков, М.А. Путятю, И.Б. Чистохин, Б.Р. Семягин, Е.А. Емельянов, М.Ю. Есин, Т.А. Гаврилова, А.В. Васев, В.В. Преображенский. Письма ЖТФ, **44** (14), 19 (2018). DOI: 10.21883/PJTF.2018.14.46340.17146 [M.O. Petrushkov, M.A. Putyato, I.B. Chistokhin, B.R. Semyagin, E.A. Emel'yanov, M.Yu. Esin, T.A. Gavrilova, A.V. Vasev, V.V. Preobrazhenskii. Techn. Phys. Lett., **44** (7), 612 (2018). DOI: 10.1134/S1063785018070258]
- [11] S.A. Blokhin, R.V. Levin, V.S. Epoletov, A.G. Kuzmenkov, A.A. Blokhin, M.A. Bobrov, Y.N. Kovach, N.A. Maleev, E.V. Nikitina, V.V. Andryushkin, A.P. Vasil'ev, K.O. Voropaev, V.M. Ustinov. Mater. Phys. Mech., **51** (4), 66 (2023). DOI: 10.18149/MPM.5142023_6
- [12] K. Vanhollebeke, M. D'Hondt, I. Moerman, P. Van Daele, P. Demeester. J. Electron. Mater., **30**, 951 (2001). DOI: 10.1007/BF02657716
- [13] D. Franke, F.W. Reier, N. Grote. J. Cryst. Growth, **195** (1–4), 112 (1998). DOI: 10.1016/S0022-0248(98)00681-2
- [14] O.J. Pitts, W. Benyon, D. Goodlich, A.J. Springthorpe. J. Cryst. Growth, **352** (1), 249 (2012). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2011.10.006
- [15] C.A. Hampel, C. Blaauw, J.E. Haysom, R. Glew, I.D. Calder, S. Guillon, T. Bryskiewicz, N. Puetz. J. Vac. Sci. Techn. A, **22** (3), 916 (2004). DOI: 10.1116/1.1640392
- [16] P.L. Gareso. Indonesian. J. Phys., **20** (2), 21 (2009). DOI: 10.5614/itb.iip.2009.20.2.1
- [17] A. van Geelen, T.M.F. De Smet, T. van Dongen, W.M.E.M. van Gils. J. Cryst. Growth, **195** (1–4), 79 (1998). DOI: 10.1016/S0022-0248(98)00628-9
- [18] J. Wisser, M. Glade, H.J. Schmidt, K. Heime. J. Appl. Phys., **71** (7), 3234 (1992). DOI: 10.1063/1.350969
- [19] L. Zhang, X. La, X. Zhu, J. Guo, L. Zhao, W. Wang, S. Liang. IEEE J. Select. Top. Quant. Electron., **28** (2), 1 (2022). DOI: 10.1109/JSTQE.2021.3072702
- [20] G. Tsamo Tagougue, M. Veillerot, E. Martinez, V. Thoréton, M. Martin, T. Baron, G. Lefevre, S. Cavalaglio, F. Bassani. J. Vac. Sci. Techn. B, **43** (3), 033204 (2025). DOI: 10.1116/6.0004489
- [21] П.Е. Копытов, И.А. Старков, И.И. Новиков, С.А. Блохин, Д.С. Папылев, Р.В. Левин, В.В. Андрияшкин, Я.Н. Ковач, Е.В. Никитина, К.О. Воропаев, Л.Я. Карачинский. Письма ЖТФ, **50** (22), 48 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.22.59136.20059 [P.E. Kopytov, I.A. Starkov, I.I. Novikov, S.A. Blokhin, D.S. Papylev, R.V. Levin, V.V. Andryushkin, Ya.N. Kovach, E.V. Nikitina, K.O. Voropaev, L.Ya. Karachinsky. Techn. Phys. Lett., **50** (11), 99 (2024). DOI: TPL.2024.11.59678.20059].
- [22] О.В. Александров, А.А. Криворучко. Конденсированные среды и межфазные границы, **7** (2), 109 (2005). http://www.kcmf.vsu.ru/resources/t_07_2_2005_001.pdf
- [23] F. Didley, M.C. Amann, R. Treichler. Jpn. J. Appl. Phys., **29** (5), 810 (1990). DOI: 10.1143/JJAP.29.810
- [24] H.M. You, U.M. Gosele, T.Y. Tan. J. Appl. Phys., **74** (4) 2461 (1994). DOI: 10.1063/1.354683
- [25] R. Gafiteanu, H.-M. You, U. Gösele, T.Y. Tan. MRS Online Proc. Library, **318**, 31 (1993). DOI: 10.1557/PROC-318-31
- [26] B. Tuck. J. Phys. D: Appl. Phys., **18** (4), 557 (1985). DOI: 10.1088/0022-3727/18/4/002
- [27] S.A. Blokhin, R.V. Levin, V.S. Epoletov, A.G. Kuzmenkov, A.A. Blokhin, M.A. Bobrov, Y.N. Kovach, N.A. Maleev, N.D. Prasolov, M.M. Kulagina, A.Yu. Guseva, Yu.M. Zadiranov, E.V. Nikitina, V.V. Andryushkin, A.P. Vasil'ev, K.O. Voropaev, V.M. Ustinov. Mater. Phys. Mech., **51** (5), 142 (2023). DOI: 10.18149/MPM.5152023_14
- [28] П.Е. Копытов, С.А. Блохин, Д.С. Папылев, Р.В. Левин, В.В. Андрияшкин, Я.Н. Ковач, Н.А. Малеев, А.И. Баранов, Е.В. Никитина, А.Ю. Андреев, И.В. Яроцкая, А.А. Мармалюк, М.А. Ладугин, К.О. Воропаев, А.Ф. Цацульников, И.И. Новиков, Л.Я. Карачинский. Квант. электрон., **55** (7), 455 (2025).
- [29] K. Lee, K. Yang. Phys. Status Solidi C, **10** (11), 1445 (2013). DOI: 10.1002/pssc.201300178
- [30] А.И. Курносов, В.В. Юдин. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных схем (М., Высш. шк., 1979).
- [31] A. Azarov, V. Venkatachalapathy, L. Vines, E. Monakhov, In-H. Lee, A. Kuznetsov. Appl. Phys. Lett., **119** (18), 182103 (2021). DOI: 10.1063/5.0070045
- [32] Б.С. Бокштейн. Диффузия в металлах (М., Металлургия, 1978).
- [33] G.J. van Gurp, P.R. Boudewijn, M.N.C. Kempeners, D.L.A. Tjaden. J. Appl. Phys., **61**, 1846 (1987). DOI: 10.1063/1.338028
- [34] H. Ando, N. Susa, H. Kanbe. IEEE Trans. Electron Dev., **29** (9), 1408 (1982). DOI: 10.1109/T-ED.1982.20890
- [35] M.H. Ettenberg, M.J. Lange, A.R. Sugg, M.J. Cohen, G.H. Olsen. J. Electron. Matter., **28**, 1433 (1999). DOI: 10.1007/s11664-999-0136-5
- [36] U. Schade, P. Enders. Semicond. Sci. Technol., **7**, 752 (1992). DOI: 10.1088/0268-1242/7/6/006
- [37] F. Schmitt, L.M. Su, D. Franke, R. Kaumanns. IEEE Trans. Electron Dev., **31** (8), 1083 (1984). DOI: 10.1109/T-ED.1984.21665
- [38] N. Arnold, R. Schmitt, K. Heime. J. Phys. D: Appl. Phys., **17**, 443 (1983). DOI: 10.1088/0022-3727/17/3/006
- [39] M. Wada, M. Seko, K. Sakakibara, Y. Sekiguchi. Jpn. J. Appl. Phys., **28** (10), L1700 (1989). DOI: 10.1143/JJAP.28.L1700
- [40] M. Razeghi, M.A. Poisson, J.P. Larivain, J.P. Duchemin. J. Electron. Mater., **12** (6), 371 (1983). DOI: 10.1007/BF02651138

Редактор Г.А. Оганесян

Segregation-considered feature analysis of the Zn diffusion in InGaAs/InAlAs/InP heterostructures

*P.E. Kopytov¹, I.A. Starkov², I.I. Novikov¹,
S.A. Blokhin³, D.S. Papylev¹, R.V. Levin³,
V.V. Andryuskhin¹, Ya.N. Kovach³, E.V. Nikitina⁴,
K.O. Voropaev⁵, A.F. Tsatsulnikov⁶, L.Ya. Karachinsky¹*

¹ ITMO University,

197101 St. Petersburg, Russia

² R&D Center of Thin Film Technologies LLC,

194064 St. Petersburg, Russia

³ Ioffe Institute,

194021 St. Petersburg, Russia

⁴ Alferov University,

194021 St. Petersburg, Russia

⁵ JSC OKB-Planeta,

173004 Veliky Novgorod, Russia

⁶ SHM R&E Center Russian Academy of Sciences,

194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Presents segregation-considered diffusion model of Zn dopants in InGaAs/InAlAs/InP heterostructures, which makes it possible to calculate the qualitative and quantitative evolution of the Zn concentration profile. A wide range of experimental data has been analyzed for various technological regimes of Zn diffusion into InGaAs/InAlAs/InP heterostructures in a metalorganic chemical vapor deposition reactor using diethylzinc as the diffusant source. The influence of temperature and pressure on the diffusion and segregation coefficients is determined. It is demonstrated that ignoring segregation processes in diffusion model can lead to a significant error in determining the diffusion coefficients. The Zn diffusion profiles are calculated depending on the thickness of InGaAs/InAlAs/InP heterostructure layers and technological regimes of diffusion process. It has been demonstrated that the use of solid solution layers, even those of relatively small thickness, can significantly change the depth of diffusion penetration due to the low diffusion coefficient and the large gradient of the segregation coefficient.