

УДК 621.315.592

XXVII Международный симпозиум „Нанозифика и нанозлектроника“,  
Нижний Новгород, 13–16 марта 2023 г.

## Формирование заряженных вакансий в анионной подрешетке AlAs

© Т.С. Шамирзаев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

<sup>2</sup> Новосибирский государственный университет,  
630090 Новосибирск, Россия

E-mail: sha\_tim@mail.ru

Поступила в Редакцию 5 мая 2023 г.

В окончательной редакции 18 мая 2023 г.

Принята к публикации 18 мая 2023 г.

Исследована динамика образования вакансий в легированных полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми точками, сформированными в анионной подрешетке AlAs. Построена теоретическая модель, описывающая влияние легирования на динамику генерации вакансий. Показано, что при высоких концентрациях дырок генерация положительно заряженных вакансий мышьяка более вероятна, чем генерация нейтральных. При высоких концентрациях электронов формирование нейтральных вакансий мышьяка идет эффективнее, чем положительно заряженных. Экспериментально установлено, что вакансионно-стимулированная высокотемпературная диффузия сурьмы усиливается (подавляется) в  $p$ -( $n$ )-легированных гетероструктурах с квантовыми точками Al(Sb,As)/AlAs.

**Ключевые слова:** заряженные вакансии, квантовые точки, атомная диффузия.

DOI: 10.21883/FTP.2023.04.55890.01k

### 1. Введение

Собственные точечные дефекты — вакансии оказывают сильное влияние на электронную и атомную подсистемы полупроводниковых материалов [1]. В структурах с квантовыми ямами (КЯ) и квантовыми точками (КТ) формирование вакансий при высоких температурах приводит к вакансионно-стимулированной взаимодиффузии составляющих гетероструктуру материалов [2,3]. Перемешивание материалов широко используется для модификации параметров структур, позволяя изменять ширину запрещенной зоны [4,5], управлять сверхтонким взаимодействием [6] и уменьшать градиенты деформации [7]. В непрямозонных гетероструктурах с КЯ и КТ, сформированных на основе широкозонного полупроводника AlAs [8,9], диффузионное размытие гетерограницы позволяет управляемо изменять время жизни излучательной рекомбинации экситонов на несколько порядков величины [10].

Хорошо известно, что вакансии в полупроводниках могут быть электрически заряжены [11]. В результате возникает сильная зависимость энергии образования вакансий от концентрации носителей заряда [12–14]. Формирование заряженных вакансий хорошо изучено в гетероструктурах на основе GaAs [15–17]. Однако в AlAs, достаточно широко используемом для создания

различных полупроводниковых приборов [18,19], образование вакансий изучено гораздо слабее.

В данной работе изучалась динамика формирования вакансий анионной подрешетки объемного AlAs ( $V_{As}$ ), находящихся в различных зарядовых состояниях. Показано, что в  $n$ -легированном AlAs формируются главным образом незаряженные вакансии, в то время как в  $p$ -легированном материале доминирует образование положительно заряженных вакансий. Эти выводы подтверждены экспериментально. Установлено, что при высоких температурах диффузионно-стимулированное размытие Al(Sb,As) КТ, сформированных в анионной подрешетке AlAs, имеет место в  $p$ -легированных и отсутствует в  $n$ -легированных гетероструктурах.

### 2. Результаты и обсуждение

#### 2.1. Теоретическая модель и компьютерное моделирование

Основными путями образования вакансий в кристалле являются их генерация на поверхности (образование дефекта Шоттки) и в объеме (образование пары Френкеля). В первом случае при рассмотрении процесса образования вакансий необходимо учитывать состояние поверхности (например, тип и структуру покры-

тия [20–22]), а также обмен атомами и молекулами свободной поверхности с окружающей средой [14,17,23,24]. Для большинства полупроводниковых материалов спонтанное образование пары Френкеля считается менее вероятным источником вакансий из-за более высокой энергии образования двух дефектов в виде тесной пары. Однако здесь мы сосредоточимся только на процессах, происходящих в объеме AlAs. Поэтому мы будем пренебрегать образованием и рекомбинацией вакансий на поверхности (дефекты Шоттки), а также диффузией таких дефектов от поверхности и к поверхности. Таким образом, в рассматриваемой нами простой модели концентрация вакансий определяется температурно-активированным образованием пар Френкеля (вакансия + межузельный атом). Кроме того, при построении модели для упрощения мы использовали следующие приближения: (1) вакансии могут быть нейтральными или иметь различные зарядовые состояния, в то время как межузельный атом нейтрален; (2) рекомбинация пары Френкеля происходит только тогда, когда межузельный атом находится в ближайшем междоузлии к вакансии (контактное приближение); (3) пренебрегаем участием вакансий в образовании сложных дефектов, таких как бивакансии и другие комплексы точечных дефектов.

В объемном кристалле динамику формирования вакансий можно описать кинетическим уравнением [13]:

$$\frac{\partial N_V(t)}{\partial t} = G(t) - R(t), \quad (1)$$

где  $N_V$  — концентрация вакансий, а  $G$  и  $R$  — темпы генерации и рекомбинации вакансий. Темп генерации вакансий описывается функцией Аррениуса  $A \exp(-H_A/kT)$ , где  $A$  — предэкспоненциальный множитель,  $H_A$  — энтальпия образования пары Френкеля и  $k$  — постоянная Больцмана. Множитель  $A$  можно записать в виде [13]:

$$A = \gamma_c N_{AP} N_{IP} \nu \exp \left[ \frac{S_f + S_m}{k} \right], \quad (2)$$

где  $N_{AP}$  — количество атомов, способных перейти в межузельное состояние с образованием вакансии,  $N_{IP}$  — количество межузельных состояний около атомов  $N_{AP}$  (в однородном объемном кристалле можно считать  $N_{AP} = N_{IP} = N$ , где  $N$  — плотность атомов в кристаллической решетке),  $\nu$  — частота Дебая,  $S_f$  и  $S_m$  — энтропии формирования и миграции, а  $\gamma_c$  — коэффициент, зависящий от механизма взаимодействия между вакансией и межузельным атомом. В нашей недавней работе [13] показано, что в контактном приближении  $\gamma_c = a^3$ , где  $a$  — постоянная решетки кристалла. Энтальпию образования пары Френкеля можно записать в виде суммы  $H_A = H_f + H_m$ , где  $H_f$  — энтальпия формирования и  $H_m$  — энтальпия миграции, определяющая развал тесно связанной пары дефектов [14,25]. Как правило, энергетический барьер для миграции межузельного атома

меньше, чем для вакансии [26], поэтому будем считать, что  $H_m$  описывает миграцию межузельного атома.

Темп рекомбинации вакансий можно записать в виде [13]:

$$R = a^3 N_V N_I \nu \exp \left[ \frac{S_m}{k} \right] \exp \left[ -\frac{H_m}{kT} \right], \quad (3)$$

где  $N_I$  — концентрация межузельных атомов.

При формировании незаряженных вакансий,  $V_{As}^0$ , мы можем записать, используя выражения (2) и (3), темпы их генерации и рекомбинации в следующем виде:

$$G = N^2 G^0,$$

$$G^0 = a^3 \nu \exp \left[ \frac{S_f + S_m}{kT} \right] \exp \left[ -\frac{H_f^0 + H_m^0}{kT} \right], \quad (4a)$$

$$R = N_V N_I R^0, \quad R^0 = a^3 \nu \exp \left[ \frac{S_m}{k} \right] \exp \left[ -\frac{H_m}{kT} \right], \quad (4б)$$

где  $H_f^0$  и  $H_m^0$  — энтальпии формирования и миграции незаряженных дефектов.

Решение уравнения (1) с учетом выражений (4a) и (4б) дает, в термодинамическом равновесии, хорошо известное выражение для равновесной концентрации нейтральных вакансий, формирующихся по механизму Френкеля, которая не зависит от состояния электронной подсистемы кристалла:

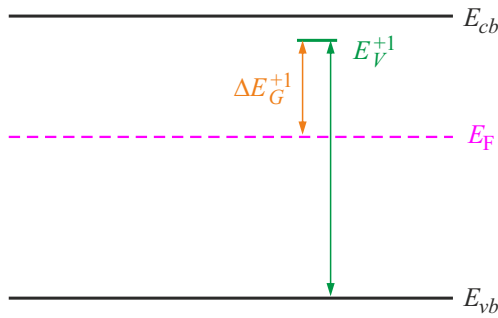
$$N_V^0 = N \exp \left[ \frac{S_f}{2k} \right] \exp \left[ -\frac{H_f}{2kT} \right]. \quad (5)$$

Рассмотрим теперь темп генерации при формировании заряженных вакансий  $V_{As}^j$  в легированных материалах. При формировании таких вакансий происходят изменения не только в атомной, но и в электронной подсистемах кристалла [11,12,14,27,28]. Процессы, происходящие в электронной подсистеме кристалла, оказывают влияние на вероятность образования вакансии через изменение как энтальпии образования пары  $H_A$ , так и предэкспоненциального множителя  $A$ .

Вакансии, образующиеся в анионной подрешетке соединений III–V, являются донорами и могут находиться в зарядовых состояниях 0, +1, +2 и +3 [29]. При рождении вакансии с положительным зарядом  $j$  из-за электронейтральности кристалла в систему добавляется  $j$  электронов. Это приводит к изменению энтальпии образования, которое можно записать как  $H_A^j = H_A^0 + \Delta E_G^j$ .

Слагаемое  $\Delta E_G^j = \sum_{i=1}^j (E_F - E_V^i)$ , где  $E_F$  — положение уровня Ферми и  $E_V^i$  — энергия электронного состояния в запрещенной зоне для вакансии с зарядом  $i$ , описывает изменение энергии электронной подсистемы кристалла при рождении заряженной вакансии.

Изменение энергии электронной подсистемы при рождении однократно заряженной вакансии показано схематически на рис. 1. Видно, что  $\Delta E_G^j$  зависит от уровня



**Рис. 1.** Схематическое изображение зонной диаграммы для положительно заряженной вакансии. Вертикальные стрелки — энергия электронного состояния вакансии в запрещенной зоне ( $E_V^{+1}$ ) и разница между энергией электронного состояния вакансии и положением уровня Ферми ( $\Delta E_G^{+1}$ ).

легирования. При движении уровня Ферми к потолку валентной зоны,  $E_{vb}$ , оно увеличивается и, наоборот, уменьшается при его движении ко дну зоны проводимости,  $E_{cb}$ . Все энергии отсчитываются от потолка валентной зоны  $E_{vb}$ , поэтому энтальпия активации заряженной вакансии увеличивается ( $\Delta E_G^{+1} > 0$ ) относительно энтальпии активации нейтральной вакансии при  $E_F > E_V^{+1}$  и, наоборот, уменьшается ( $\Delta E_G^{+1} < 0$ ) при  $E_F < E_V^{+1}$ .

Необходимо также отметить, что множитель  $A$  должен быть скорректирован на вероятность того, что в области формирования заряженной вакансии есть  $j$  свободных мест под размещение высвобождающихся электронов. Эта вероятность равна отношению концентрации дырок ( $p$ ) к плотности состояний валентной зоны ( $N_{vh}$ ). Следовательно, количество элементарных ячеек кристалла, в которых возможно рождение положительно заряженной вакансии с зарядом  $j$ , равно  $N(p/N_{vh})^j$ .

Для невырожденного полупроводника, когда выполняется условие  $E_F - E_{vb} \leq kT$ , концентрация дырок описывается выражением  $p = N_{vh} \exp[-E_F/kT]$  [30], а количество ячеек, в которых рождаются заряженные вакансии (и близлежащих к ним межузельных состояний), дается выражением  $N_{AP} = N_{IP} = N(p/N_{vh})^j = N \exp[-jE_F/kT]$ . Используя это выражение, можно записать темп генерации для положительно заряженных вакансий как:

$$G^j = N^2 \exp\left[-2j \frac{E_F}{kT}\right] G^0 \exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^j (E_F - E_V^i)}{kT}\right]. \quad (6)$$

В то же время, темп рекомбинации заряженных вакансий с участием нейтрального межузельного атома не зависит от состояния электронной подсистемы и описывается выражением (4б).

Вакансии, формирующиеся в различных зарядовых состояниях, могут перезарядаться после своего рождения. Поэтому динамика концентрации вакансий в различных

зарядовых состояниях описывается системой кинетических уравнений, учитывающей их перезарядку:

$$\frac{\partial N_V^0(t)}{\partial t} = N^2 G^0 - N_V^0(t) N_I(t) R^0 + \sum_{i=1}^3 \left( \gamma^i \left( N_V^i(t) \exp\left[-\frac{E_V^i - E_F(t)}{kT}\right] - N_V^0(t) \right) \right), \quad (7)$$

$$\frac{\partial N_V^{+1}(t)}{\partial t} = N^2 G^0 \exp\left[\frac{E_V^{+1} - 3E_F(t)}{kT}\right] - N_V^{+1}(t) N_I(t) R^0 + \gamma^1 N_V^0(t) - \gamma^1 N_V^{+1}(t) \exp\left[-\frac{E_V^{+1} - E_F(t)}{kT}\right],$$

$$\frac{\partial N_V^{+2}(t)}{\partial t} = N^2 G^0 \exp\left[\frac{\sum_{i=1}^2 (E_V^i - E_F(t)) - 4E_F(t)}{kT}\right]$$

$$- N_V^{+2}(t) N_I(t) R^0 + \gamma^2 N_V^0(t) - \gamma^2 N_V^{+2}(t) \exp\left[-\frac{E_V^{+2} - E_F(t)}{kT}\right],$$

$$\frac{\partial N_V^{+3}(t)}{\partial t} = N^2 G^0 \exp\left[\frac{\sum_{i=1}^3 (E_V^i - E_F(t)) - 6E_F(t)}{kT}\right]$$

$$- N_V^{+3}(t) N_I(t) R^0 + \gamma^3 N_V^0(t) - \gamma^3 N_V^{+3}(t) \exp\left[-\frac{E_V^{+3} - E_F(t)}{kT}\right],$$

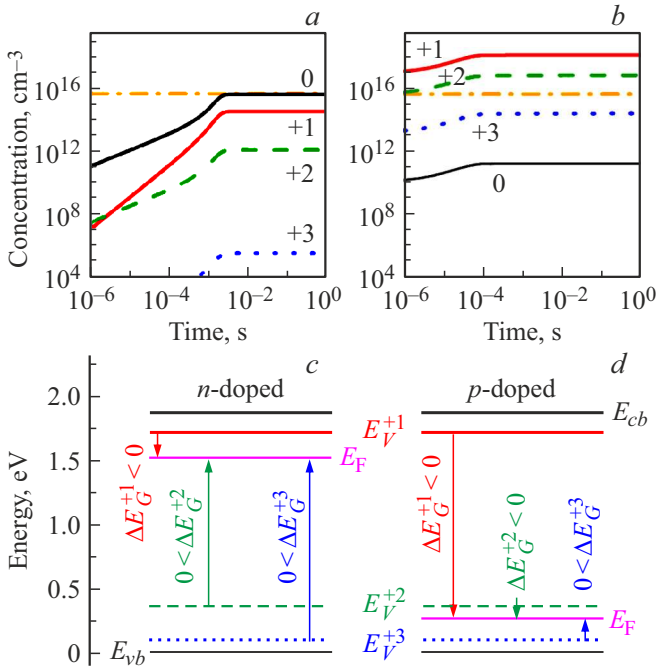
$$N_I(t) = N_V^0(t) + N_V^{+1}(t) + N_V^{+2}(t) + N_V^{+3}(t),$$

$$N_{ec} \exp\left[\frac{E_F(t) - E_{cb}}{kT}\right] - N_{vh} \exp\left[-\frac{E_F(t)}{kT}\right]$$

$$- N_V^{+1}(t) - N_V^{+2}(t) - N_V^{+3}(t) - N_D + N_A = 0.$$

Первые четыре уравнения, где  $\gamma^i$  — коэффициент эмиссии  $i$  электронов с нейтральной вакансией, описывают динамику перезарядки вакансий. Пятое уравнение отражает равенство концентраций межузельных атомов и вакансий, рождающихся как пары Френкеля. И наконец, уравнение электронейтральности, где  $N_A$  и  $N_D$  — концентрации акцепторов и доноров, описывает изменение баланса концентрации свободных носителей заряда при образовании заряженных вакансий. Необходимо отметить, что мы рассматриваем высокотемпературное приближение слабокомпенсированного ( $N_A \ll N_D$  или  $N_D \ll N_A$ ) широкозонного кристалла, когда все легирующие примеси ионизованы, а концентрация собственных электронов и дырок много меньше, чем концентрация легирующей примеси.

Для расчета динамики формирования вакансий мы использовали параметры AlAs, взятые из работы [31],



**Рис. 2.** Динамика концентрации вакансий в различных зарядовых состояниях при температуре 1100 К: *a* — в *n*-легированном и *b* — в *p*-легированном AlAs. Горизонтальной штрихпунктирной линией обозначена равновесная концентрация нейтральных вакансий, рассчитанная по формуле (5). Энергетические состояния заряженных вакансий, положение уровня Ферми и изменение энергии электронной подсистемы кристалла при рождении вакансий в различных зарядовых состояниях: *c* — в *n*-легированном и *d* — в *p*-легированном материале. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

энтальпию формирования нейтральной вакансии в под решетке мышьяка  $H_f^0 = 3.83$  эВ [32], энтальпию миграции межузельных атомов  $H_m^0 = 2.7$  эВ, энергии электронных уровней в запрещенной зоне AlAs для вакансий мышьяка, находящихся в различных зарядовых состояниях:  $E_V^{+1} = 0.94 \cdot E_g$ ,  $E_V^{+2} = 0.20 \cdot E_g$  и  $E_V^{+3} = 0.06 \cdot E_g$ , где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны AlAs [29], и частоту Дебая  $\nu = 1.3 \cdot 10^{13}$  Гц [33]. Так как значения параметров  $S_f$  и  $S_m$  определяются главным образом конфигурационной энтропией [14], мы взяли значения этих параметров, определенные для GaAs — кристалла, с конфигурацией решетки, такой же, как у AlAs [34,35]. Результаты расчетов приведены на рис. 2, *a* и *b*.

Динамика концентрации вакансий во всех зарядовых состояниях представляет собой типичную возрастающую кривую с насыщением. В *n*-легированном AlAs, как это видно на рис. 2, *a*, формируются главным образом незаряженные вакансии мышьяка, концентрация которых насыщается, достигая равновесного значения. Концентрация заряженных вакансий заметно меньше и последовательно уменьшается с ростом положительного заряда  $N_V^{+1} > N_V^{+2} > N_V^{+3}$ . В *p*-легированном AlAs

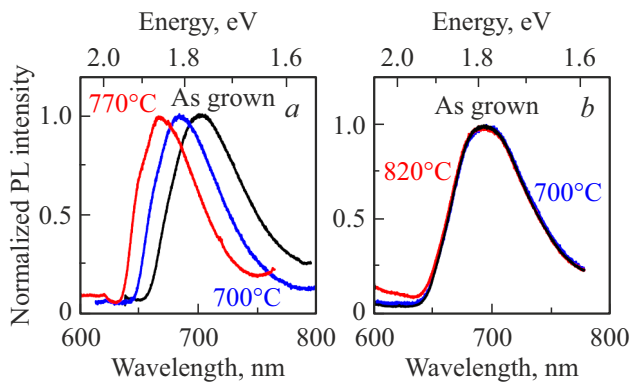
(рис. 2, *b*) наиболее эффективным процессом становится образование однократно заряженных вакансий, при этом их концентрация на 2 порядка величины больше, чем равновесная концентрация нейтральных вакансий. Концентрации вакансий в других зарядовых состояниях заметно ниже, и их соотношение определяется последовательностью  $N_V^{+2} > N_V^{+3} > N_V^0$ .

Эффективность формирования вакансий, находящихся в различных зарядовых состояниях, определяется, как это видно из выражения (6), величиной энтальпии формирования и долей элементарных ячеек кристалла, в которых возможно образование вакансий. В *n*-легированном материале, как это видно из рис. 2, *c*, соотношение  $N_V^0 > N_V^{+2} > N_V^{+3}$  выполняется в силу того, что энтальпия формирования вакансий в зарядовых состояниях  $V_{As}^{+2}$  и  $V_{As}^{+3}$  больше, чем в состоянии  $V_{As}^0$ . В то же время небольшое уменьшение энтальпии формирования вакансий в состоянии  $V_{As}^{+1}$  (по сравнению с  $V_{As}^0$ ) компенсируется невысокой концентрацией элементарных ячеек кристалла, в которых возможно образование положительно заряженной вакансии, что и обеспечивает доминирование нейтральных вакансий  $N_V^0 > N_V^{+1}$ . С другой стороны, в *p*-легированном материале, как это видно из рис. 2, *d*, имеет место значительное (сравнимое с шириной запрещенной зоны AlAs) уменьшение энтальпии формирования для вакансий в состоянии  $V_{As}^{+1}$ , что и приводит к доминированию таких вакансий в этом материале. Необходимо также отметить, что соотношение концентраций  $N_V^{+2} > N_V^{+3} > N_V^0$  в *p*-легированном AlAs не отражает соотношение вероятностей формирования вакансий в этих зарядовых состояниях. Очевидно, что для  $V_{As}^0$  энтальпия формирования ниже (рис. 2, *d*), а доля элементарных ячеек, в которых возможно их формирование, выше, чем для вакансий в состоянии  $V_{As}^{+3}$ . Наблюдаемое соотношение концентраций обусловлено перезарядкой вакансий уже после их формирования.

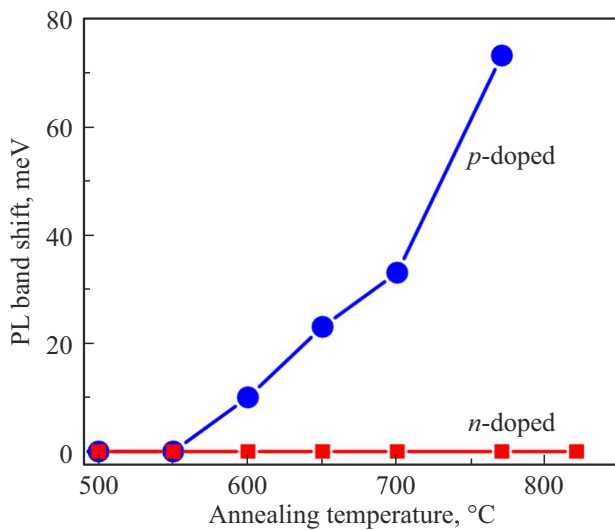
## 2.2. Высокотемпературный отжиг легированных Al(Sb,As)/AlAs-гетероструктур: диффузия сурьмы в AlAs

Так как диффузия примесей замещения в AlAs идет по вакансионному механизму, коэффициент диффузии такой примеси ( $D$ ) можно записать в виде  $D = D_V N_V / N$ , где  $D_V$  и  $N_V$  — коэффициент диффузии и суммарная концентрация вакансий [36]. Таким образом, изменение темпа формирования заряженных вакансий при изменении концентрации носителей заряда должно приводить, при прочих равных условиях, к изменению скорости диффузии примесей замещения в этом материале.

Для подтверждения результатов моделирования мы провели экспериментальное исследование диффузии сурьмы в анионной подрешетке гетероструктур с квантовыми точками Al(Sb,As)/AlAs. Гетероструктуры были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующих подложках GaAs ориентации (001).



**Рис. 3.** Спектры фотолюминесценции гетероструктур с квантовыми точками Al(Sb,As)/AlAs, отожженных при различных температурах: *a* — структуры, легированные акцепторами; *b* — структуры, легированные донорами.



**Рис. 4.** Синее смещение положения максимума полосы излучения в спектрах фотолюминесценции *n*- и *p*-легированных гетероструктур с квантовыми точками Al(Sb,As)/AlAs, в зависимости от температуры отжига.

Структуры содержали один слой КТ, помещенный между слоями AlAs. Плотность ( $5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ) и средний диаметр (20 нм) КТ определены методом электронной микроскопии в работе [37]. Относительно низкая плотность точек препятствует перераспределению носителей заряда по ансамблю КТ [38,39]. Для защиты верхнего слоя AlAs от окисления выращивался покровный слой GaAs. Изменение концентрации носителей заряда в гетероструктуре осуществлялось ее легированием донорной (кремний) или акцепторной (бериллий) примесью до уровня  $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Технология выращивания гетероструктур подробно описана в работах [37,40,41]. Для предотвращения возгонки As с поверхности структур при высоких температурах структуры покрывались защитным слоем SiO<sub>2</sub> толщиной 150 нм [5].

Диффузия сурьмы стимулировалась высокотемпературным отжигом в потоке H<sub>2</sub> в течение 10 мин в диапазоне температур 600–850°C. Степень перемешивания материалов анализировалась по сдвигу положения полосы экситонной рекомбинации, в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) структур, измеренных при температуре жидкого азота. ФЛ возбуждалась полупроводниковым лазером ( $h\nu = 3.06 \text{ эВ}$ ) и измерялась на установке, построенной на основе спектрографа Acton Advanced SP500A, оснащенного охлаждаемой ПЗС-камерой.

Нормированные спектры ФЛ гетероструктур с Al(Sb,As)/AlAs КТ приведены на рис. 3, *a* и *b*. Полосы ФЛ в спектрах не отожженных (as grown) структур показаны черными кривыми и имеют максимум 1.767 и 1.792 эВ, соответственно, для *p*- и *n*-легированных структур. Ширина полос обусловлена разбросом размеров КТ и состава твердого раствора, из которого сформированы КТ.

Десятиминутный отжиг при температурах 550°C и ниже не оказывает никакого влияния на форму спектров ФЛ. При повышении температуры отжига до 600°C в спектрах ФЛ *p*-легированных гетероструктур наблюдается смещение полосы в коротковолновую область спектра (синее смещение). Величина синего смещения увеличивается с ростом температуры отжига, как это показано на рис. 4. В то же время повышение температуры отжига вплоть до 820°C не оказывает никакого влияния на положение полосы в спектрах ФЛ *n*-легированных гетероструктур (см. рис. 3, *b* и 4).

Синее смещение полос в спектрах ФЛ гетероструктур после высокотемпературного отжига обусловлено изменением ширины запрещенной зоны Al(Sb,As)/AlAs КТ из-за увеличения доли AlAs в твердом растворе AlSbAs [5], вследствие диффузии сурьмы в AlAs. Таким образом, результаты экспериментов свидетельствуют о том, что повышение концентрации дырок способствует увеличению темпа генерации заряженных вакансий мышьяка в анионной подрешетке AlAs и, тем самым, увеличению коэффициента диффузии сурьмы, описываемой выражением:

$$D = \frac{D_V}{N} \sum_{i=0}^3 N_V^i.$$

### 3. Заключение

Исследовано влияние концентрации носителей заряда на формирование вакансий по механизму Френкеля в анионной подрешетке AlAs. В *n*-легированном материале концентрация этих дефектов определяется формированием нейтральных вакансий, вероятность образования которых не зависит от концентрации носителей заряда. При переходе к *p*-легированному материалу вероятность формирования положительно заряженных вакансий увеличивается и, начиная с некоторого уровня легирования,

полная концентрация вакансий начинает превышать равновесную концентрацию нейтральных вакансий. Повышение концентрации вакансий приводит к увеличению скорости диффузии примесей замещения. Увеличение коэффициента вакансионно-стимулированной диффузии сурьмы при высоких температурах с ростом концентрации дырок продемонстрировано экспериментально в гетероструктурах с квантовыми точками Al(Sb,As)/AlAs.

### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00022).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Richard J.D. Tilley. *Defects in solids* (John Wiley & Sons, Ltd, 2008).
- [2] *Diffusion Processes in Advanced Technological Materials* edited by Devendra Gupta (Springer Verlag, N.Y., 2005).
- [3] B. Tuck. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **18**, 557 (1985).
- [4] Shambhu Sharan Kumar Sinha, Subindu Kumar, Mukul Kumar Das. *Appl. Phys. A*, **125**, 774 (2019).
- [5] T.S. Shamirzaev, A.K. Kalagin, A.I. Toropov, A.K. Gutakovskii, K.S. Zhuravlev, *Phys. Status Solidi C*, **3** (11), 3932 (2006).
- [6] M.Yu. Petrov, I.V. Ignatiev, S.V. Poltavtsev, A. Greilich, A. Bauschulte, D.R. Yakovlev, M. Bayer. *Phys. Rev. B*, **78**, 045315 (2008).
- [7] S.O. Hruszkewycz, S. Maddali, C.P. Anderson, W. Cha, K.C. Miao, M.J. Highland, A. Ulvestad, D.D. Awschalom, F.J. Heremans. *Phys. Rev. Mater.*, **2**, 086001 (2018).
- [8] Т.С. Шамирзаев. ФТП, **45**, 97 (2011).
- [9] Д.С. Абрамкин, Т.С. Шамирзаев. ФТП, **53**, 710 (2019).
- [10] T.S. Shamirzaev, J. Debus, D.S. Abramkin, D. Dunker, D.R. Yakovlev, D.V. Dmitriev, A.K. Gutakovskii, L.S. Braginsky, K.S. Zhuravlev, M. Bayer. *Phys. Rev. B*, **84**, 155318 (2011).
- [11] E.G. Seebauer, M.C. Kratzer. *Mater. Sci. Eng. R*, **55**, 57 (2006).
- [12] В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь. *Статистическое взаимодействие электронов и дефектов в полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1969).
- [13] T.S. Shamirzaev, V.V. Atuchin, V.E. Zhilitskiy, A.Y. Gornov. *Nanomaterials*, **13**, 308 (2023).
- [14] C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer. *Rev. Mod. Phys.*, **86**, 253 (2014).
- [15] J. Gebauer, M. Lausmann, F. Redmann, R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner, E.R. Weber, P. Ebert. *Phys. Rev. B*, **67**, 235207 (2003).
- [16] H.S. Djie, O. Gunawan, D.-N. Wang, B.S. Ooi, J.C.M. Hwang. *Phys. Rev. B*, **73**, 155324 (2006).
- [17] J.-L. Rouviere, Y. Kim, J. Cunningham, J.A. Rentschler, A. Bourret, A. Ourmazd. *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2798 (1992).
- [18] M. Feiginov. *J. Infrared Millim. Terahertz Waves*, **40**, 365 (2019).
- [19] Saad Muttalak, Omar Abdulwahid, James Sexton, Michael J. Kelly, M. Missous. *IEEE J. Electron Dev. Soc.*, **6**, 254 (2018).
- [20] Y. Alahmadi, W.P. LiKam. *Semicond. Sci. Technol.*, **34**, 025010 (2019).
- [21] P. Lever, H.H. Tan, C. Jagadish. *J. Appl. Phys.*, **96**, 7544 (2004).
- [22] I. McKerracher, L. Fu, H.H. Tan, C. Jagadish. *J. Appl. Phys.*, **112**, 113511 (2012).
- [23] D.T.J. Hurler. *J. Appl. Phys.*, **85**, 6957 (1999).
- [24] Т.С. Шамирзаев, А.Л. Соколов, К.С. Журавлев, А.Ю. Кобитский, Н.Р. Вагнер, D.R.T. Zahn. ФТП, **36**, 87 (2002).
- [25] J.H. Crawford, jr., L.M. Slifkin (eds). *Point defects in solids. In Semiconductors and Molecular Crystals* (Plenum Press, N.Y., USA, 1975) v. 2.
- [26] A.F. Wright, N.A. Modine. *J. Appl. Phys.*, **120**, 215705 (2016).
- [27] G.A. Baraff, M. Schliiter. *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 1327 (1985).
- [28] W. Walukiewicz. *Appl. Phys. Lett.*, **54**, 2094 (1989).
- [29] M.J. Puska. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **1**, 7347 (1989).
- [30] M. Grundmann. *The Physics of Semiconductors* (Springer Verlag, Berlin–Heidelberg, Germany, 2006).
- [31] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- [32] H.A. Tahini, A. Chroneos, S. Murphy, U. Schwingenschlogl, R.W. Grimes. *J. Appl. Phys.*, **114**, 063517 (2013).
- [33] B. Ullrich, M. Bhowmick, H. Xi. *AIP Advances*, **7**, 045109 (2017).
- [34] P. Mitev, S. Seshadri, L.J. Guido, D.T. Schaafsma, D.H. Christensen. *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 3718 (1998).
- [35] M. Bockstedte, M. Schefer. *Z. Phys. Chem.*, **200**, 195, (1997).
- [36] O.M. Khreis, W.P. Gillin, K.P. Homewood. *Phys. Rev. B*, **55**, 15813 (1997).
- [37] Д.С. Абрамкин, К.М. Румынин, А.К. Бакаров, Д.А. Колотовкина, А.К. Гутаковский, Т.С. Шамирзаев. *Письма ЖЭТФ*, **103** (11), 785 (2016).
- [38] T.S. Shamirzaev, D.S. Abramkin, D.V. Dmitriev, A.K. Gutakovskii. *Appl. Phys. Lett.*, **97**, 263102 (2010).
- [39] T.S. Shamirzaev, A.M. Gilinsky, A.K. Kalagin, A.I. Toropov, A.K. Gutakovskii, K.S. Zhuravlev. *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, 527 (2006).
- [40] T.S. Shamirzaev, D.R. Yakovlev, N.E. Kopteva, D. Kudlacik, M.M. Glazov, A.G. Krechetov, A.K. Gutakovskii, M. Bayer. *Phys. Rev. B*, **106**, 075407 (2022).
- [41] T.S. Shamirzaev, D.R. Yakovlev, A.K. Bakarov, N.E. Kopteva, D. Kudlacik, A.K. Gutakovskii, M. Bayer. *Phys. Rev. B*, **102**, 165423 (2020).

Редактор А.Н. Смирнов

## Charged vacancies formation in AIAs anionic sublattice

T.S. Shamirzaev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Rzhanov Institute of Semiconductor Physics,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup> Novosibirsk State University,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** The vacancy formation dynamics in doped semiconductor heterostructures with quantum dots (QDs) formed in the AIAs anionic sublattice has been studied. A theoretical model that describes the effect of doping on the vacancy generation dynamics is constructed. It is shown that the generation of positively charged arsenic vacancies is more probable than the generation of neutral ones at high hole concentrations. On the other hand, at high electron concentrations, the formation of neutral arsenic vacancies is more efficient than that positively charged ones. It has been experimentally revealed that the vacancy-stimulated high-temperature diffusion of antimony is enhanced (suppressed) in *p*-(*n*-)doped heterostructures with Al(Sb,As)/AIAs QDs.