

УДК 621.315.592

Численное моделирование процесса гидрогенизации GaAs на стадии охлаждения

© В.А. Кагадей, Е.В. Нефёдцев*[¶]НИИ полупроводниковых приборов,
634034 Томск, Россия* Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук,
634055 Томск, Россия

(Получена 5 февраля 2009 г. Принята к печати 9 сентября 2009 г.)

Проведено моделирование эволюции концентрационных профилей всех типов водородных частиц, носителей заряда, активной легирующей примеси и распределения электрического поля в приповерхностном слое гидрогенизированного p -GaAs в процессе охлаждения образца после окончания этапа введения водорода. Показано, что вид конечных концентрационных профилей водородсодержащих частиц и распределение внутреннего электрического поля в гидрогенизированном слое p -GaAs зависят от температурно-временного режима охлаждения образца. Степень влияния скорости охлаждения на конечное состояние гидрогенизированного слоя увеличивается по мере уменьшения уровня легирования полупроводника. Приводятся и обсуждаются закономерности формирования конечного состояния системы водород–кристалл в зависимости от скорости охлаждения образца.

1. Введение

Поведение системы водород–полупроводник активно исследуется для случаев монокристаллических полупроводниковых материалов Si, GaAs, C [1,2], гетероструктур с квантовыми ямами GaAs/InGaAs [3], GaAs/AlGaAs [4], $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ [5,6], аморфных [7] и поликристаллических [8,9] тонких полупроводниковых пленок. Практический интерес к гидрогенизации связан с возможностями устранения отрицательного влияния большого спектра дефектов и глубоких уровней, а также модификации электрофизических и оптических свойств приповерхностных слоев. Известно, что в ограниченных диапазонах варьирования температуры образцов, времени гидрогенизации, а также плотности потока атомарного водорода улучшаются параметры GaAs-диодов [10,11] и полевых транзисторов с барьером Шоттки [12], а также солнечных элементов на основе поликристаллического кремния [9]. В работе [13] предложено использовать гидрогенизацию для формирования топологии изолированных ферромагнитных областей $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ планарных приборов спинтроники.

Физическая картина процесса гидрогенизации даже в случае монокристаллических полупроводниковых материалов сложна. В ней тесно переплетаются процессы диффузии атомов водорода, их обмена зарядом с системой носителей заряда (в результате чего формируется внутреннее поле и соответствующие дрейфовые потоки частиц), их объединения в комплексы мелкий центр–водород и водород–водород (молекулы), а также процессы распада этих комплексов [1,14]. Данные процессы протекают в условиях формирования плотного приповерхностного молекулярного слоя, оказывающего блокирующее действие по отношению к входящему в

кристалл потоку водорода. Эта блокировка начинает проявляться на самых ранних стадиях экспозиции образцов в водородной плазме или потоке атомарного водорода [15,16].

В работе [16] нами было проведено численное моделирование проникновения водорода в p -GaAs и пассивации им мелкой примеси с учетом всех перечисленных выше процессов. Результаты расчетов соответствуют закономерностям, обнаруженным ранее в экспериментах, в частности тому, что концентрация водорода растет, а глубина проникновения падает с ростом концентрации легирующей примеси [17]. Рассчитываемый суммарный по всем водородсодержащим частицам профиль концентрации водорода соответствует по форме экспериментальным профилям, полученным методом вторично-ионной масс-спектропии: за областью высокой концентрации с резким спадом следует область сравнительно медленного спада (плато) с концентрацией водорода, по порядку величины близкой к уровню легирования [18–21]. Сложность результирующего профиля объясняется наложением различных фракций водородных частиц: молекул, атомов, ионов и атомов, связанных в комплексы.

Ранее отмечалось [22,23], что при близких условиях проведения гидрогенизации данные разных авторов имеют существенные различия в отношении формы результирующих профилей активной примеси и степени ее пассивации. При этом в подавляющем количестве литературных источников при описании условий гидрогенизации режимы охлаждения образцов не приводятся. В работах [24,25] экспериментально было показано, что результат гидрогенизации как в случае GaAs-диодов с барьером Шоттки [24], так и при исследовании пассивации акцепторов Be в сверхрешетках на основе AlGaAs/GaAs [25] во многом зависит от температурного режима охлаждения образцов. В работе [16] на основе

[¶] E-mail: nev@lve.hcei.tsc.ru

анализа расчетных данных было отмечено, что весомую роль в формировании конечных профилей концентрации активной примеси действительно могут играть не только режимы экспозиции в водородной плазме или в атомном водороде, но и температурно-временные режимы завершающего этапа охлаждения образца, когда концентрация атомарного водорода в газовой фазе уже равна нулю.

Настоящая работа является дальнейшим развитием работы [16] и посвящена исследованию эволюции профилей концентрации водородсодержащих частиц, активной примеси, носителей заряда и распределения электрического поля в процессе охлаждения образцов *p*-GaAs после окончания этапа введения водорода. В работе на основе анализа решений развернутой системы уравнений обсуждены механизмы протекающих процессов и сделан ряд обобщающих выводов.

2. Математическая модель

Как и в работе [16], при моделировании гидрогенизации образца GaAs рассматриваются процессы диффузии водорода, образования и распада комплексов водород-легирующая примесь, образование и распад молекул водорода, учитывается возможность нахождения водорода в ионизованном состоянии и дрейф ионов во внутреннем электрическом поле. Все процессы моделируются как динамически неравновесные.

Математическая модель базируется на уравнениях диффузионно-дрейфового переноса частиц следующего вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial N_i}{\partial x} + q_i \mu_i N_i \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \\ & - \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n P_{(i \rightarrow jm)} N_i + \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n P_{(m \rightarrow ij)} N_m \\ & + \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n R_{(i \leftarrow jm)} N_j N_m - \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n R_{(m \leftarrow ij)} N_i N_j + G_i, \end{aligned} \quad (1)$$

где индексы i, j, m обозначают тип частицы, t — время, x — координата, отсчитываемая от поверхности кристалла, подвергаемого обработке потоком атомов водорода; D_i, μ_i, q_i — коэффициент диффузии, подвижность и заряд частицы типа i ; φ — потенциал электрического поля. В качестве неизвестных функций выступают концентрации N_i следующих частиц: H^0 (атом водорода), H^+ (положительно заряженный ион водорода), H^- (отрицательно заряженный ион водорода), L^- (отрицательно заряженный ион активной примеси, акцептор), h^+ (основной носитель заряда — дырка), e^- (неосновной носитель заряда — электрон), HH^0 (двухатомный комплекс водорода), HL^0 (комплекс водород-мелкая примесь). Для определенности выбран полупроводник *p*-типа проводимости.

Полная система уравнений получается добавлением к уравнениям (1) уравнения Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \sum_{i=1}^n q_i N_i = 0, \quad (2)$$

где $\epsilon_0 \epsilon$ — абсолютная диэлектрическая проницаемость полупроводника.

Известно, что реальная поверхность GaAs характеризуется высокой плотностью поверхностных состояний, что приводит к поверхностному изгибу зон. В наибольшей степени это обусловлено структурной перестройкой поверхностных атомов и хемосорбцией примесей. Уже на начальной стадии гидрогенизации атомы водорода удаляют хемосорбированные примеси и ионизируются, активно перестраивая область пространственного заряда. В связи с этим в расчетах [16] предполагалось, что исходное состояние поверхности не оказывает существенного влияния на последующее распределение потенциала и частиц в ходе гидрогенизации. Исходя из этого в начале процесса предполагались условия плоских зон. Расчеты подтвердили, что при плотности потока атомарного водорода $j_0 \geq 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ в течение нескольких секунд формируется новая структура распределения потенциала, обусловленная прежде всего формированием плотного облака ионов в приповерхностной области.

В настоящей работе в качестве начальных условий задачи для стадии охлаждения выступают конечные профили частиц и распределение потенциала, полученные в [16] моделированием этапа введения атомов водорода *p*-GaAs в течение 5 мин.

Отличие в граничных условиях для рассматриваемого этапа охлаждения заключается только в том, что в точке поверхности $x = 0$, как и для всех частиц, плотность потока атомов водорода полагается равной нулю (с учетом равенства нулю заряда атома водорода):

$$-\left[D_{H^0} \frac{\partial N_{H^0}}{\partial x} + q_{H^0} \mu_{H^0} N_{H^0} \right]_{x=0} = -\left[D_{H^0} \frac{\partial N_{H^0}}{\partial x} \right]_{x=0} = 0.$$

На удаленной границе по-прежнему предполагаются условия фиксированных значений концентраций частиц, $N_i = 0$ ($i = H^0, H^+, H^-, HH^0, HL^0$) и $N_j = L_j$ ($i = L^-, h^+$), а также условие полной экранировки электрического поля $\partial \varphi / \partial x(\infty, t) = 0$. При этом, как и в [16], потенциал „объема“ полупроводника полагается равным $\varphi_\infty = \varphi(\infty, t) = -kT \ln(L_j/n_j)$, где L_j — уровень легирования, n_j — собственная концентрация носителей заряда, T — температура, k — постоянная Больцмана.

Для определенности расчетов предполагается релаксационный закон охлаждения образца, соответствующий выражению

$$T(t) = T_\infty + (T_0 - T_\infty) \exp[-t/\tau], \quad (3)$$

где t — текущее время, отсчитываемое от момента начала охлаждения образца, совпадающего с моментом

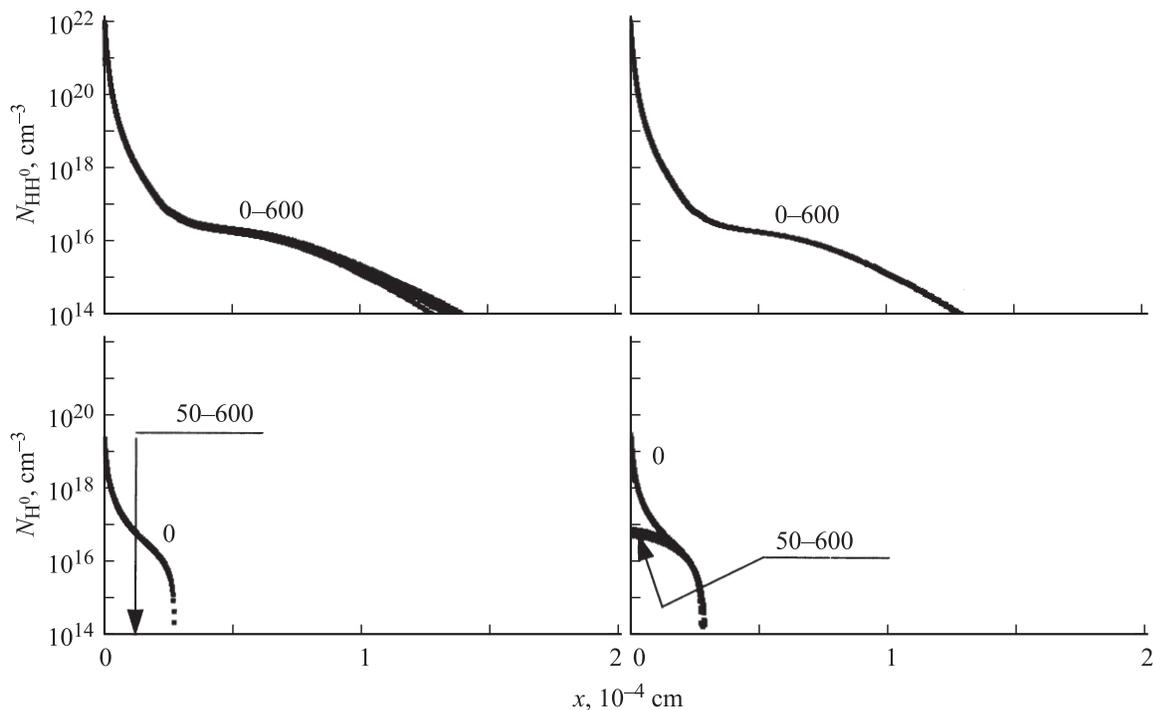


Рис. 1. Профили распределения концентраций нейтральных водородных частиц NH^0 и H^0 по глубине для разных моментов времени t . Слева — медленное охлаждение, $dT/dt(0) = 0.25$ град/с; справа — быстрое охлаждение, $dT/dt(0) = 4$ град/с. Времена указаны в секундах, отсчет от начала этапа охлаждения.

окончания этапа экспозиции образца в атомарном водороде; T , T_0 и T_∞ — соответственно текущая, начальная (температура экспозиции в атомарном водороде) и фоновая температура, до уровня которой охлаждается образец; τ — характеристическое время охлаждения, определяемое конструкцией и параметрами теплоотдачи оснастки, на которой закреплен образец. Вычисления проводились для различных значений начальной скорости спада температуры $dT/dt(0)$, которая связана с параметром τ выражением

$$dT/dt(0) = -(T_0 - T_\infty)/\tau. \quad (4)$$

В уравнениях модели [16] большинство коэффициентов являются зависимыми от температуры, поэтому на этапе охлаждения все эти коэффициенты оказываются неявно зависимыми от времени.

Все результаты, приведенные далее, относятся к исходному состоянию системы водород–кристалл, получаемому после 5-минутной экспозиции образца GaAs в потоке атомарного водорода плотностью $j_0 = 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ при $T_0 = 200^\circ\text{C}$. Полагается, что фоновая температура составляет $T_\infty = 20^\circ\text{C}$.

3. Результаты численных расчетов и их обсуждение

На рис. 1 и 2 показана эволюция профилей частиц для образцов GaAs с уровнем легирования $L_l = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, режим охлаждения которых характери-

зуется существенно различными начальными скоростями: $dT/dt(0) = 0.25$ град/с (медленное охлаждение) и $dT/dt(0) = 4$ град/с (быстрое охлаждение). На рис. 3 показаны соответствующие изменения распределения заряда Q и напряженности электрического поля E .

Из данных рис. 1 видно, что в обоих случаях охлаждение образца не влияет на форму профилей концентрации молекул водорода. Распределение молекул остается таким, каким оно было на момент окончания экспозиции в атомарном водороде. Форма профилей остальных частиц существенным образом зависит от скорости охлаждения.

В случае медленного охлаждения, $dT/dt(0) = 0.25$ град/с, вследствие отсутствия внешней подпитки приповерхностного слоя кристалла атомами водорода происходит практически полное исчезновение фракции нейтральных атомов водорода, так как за время охлаждения подвижные атомы успевают объединиться в молекулы или частично превратиться в ионы. При быстром охлаждении, $dT/dt(0) = 4$ град/с, также происходит резкое снижение концентрации атомов водорода, но в приповерхностной области, в пределах $x < 0.25$ мкм, концентрация атомов остается выше уровня легирования.

Эволюция профилей подвижных ионов водорода H^+ определяет конечные профили других заряженных частиц — L^- и h^+ , а также общее распределение заряда и электрического поля. В некотором температурном диапазоне $T_{\text{max}} > T > T_{\text{min}}$, который для данного уровня легирования, согласно оценкам [16], расположен ниже температуры гидрогенизации $T_0 = 200^\circ\text{C}$ и имеет

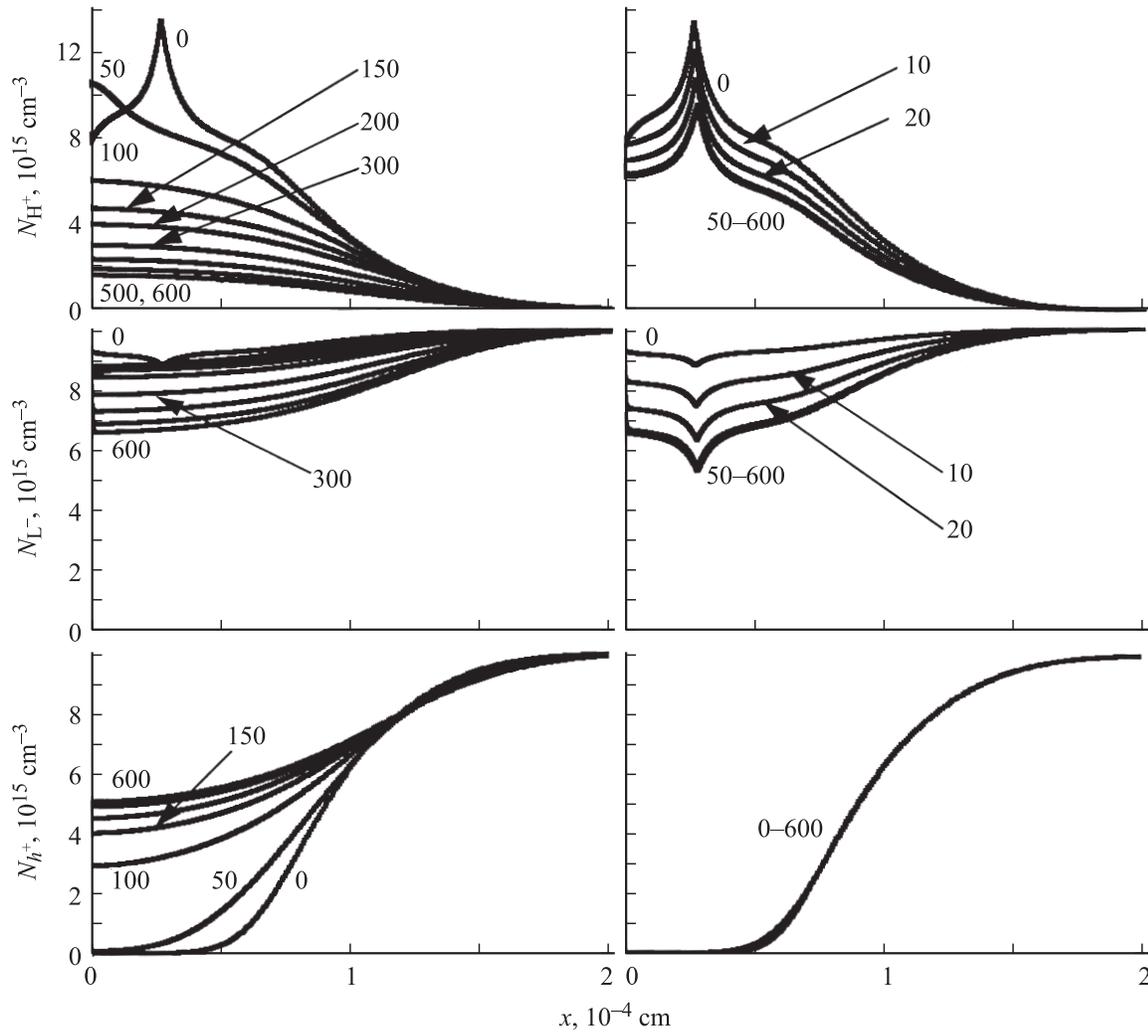


Рис. 2. Профили распределения концентраций заряженных частиц H^+ , L^- и h^+ по глубине для разных моментов времени t . Слева — медленное охлаждение, $dT/dt(0) = 0.25$ град/с; справа — быстрое охлаждение, $dT/dt(0) = 4$ град/с. Времена указаны в секундах, отсчет от начала этапа охлаждения.

границы $T_{\max} \approx 90^\circ\text{C}$, $T_{\min} \approx 40^\circ\text{C}$, интенсифицированы как процесс образования комплексов, так и обратный процесс их распада: $H^+ + L^- \leftrightarrow HL^0$. Иными словами, в указанном диапазоне устанавливается динамическое равновесие между процессами синтеза и распада комплексов HL^0 . В то же время в силу большой энергии связи молекул водорода при всех температурах ниже T_0 процесс образования молекул с участием ионов $H^+ + H^+ \rightarrow HH^0 + 2h^+$ является практически необратимым. Несмотря на то что вероятность образования молекул значительно меньше вероятности образования комплекса, после медленного охлаждения значительная часть ионов оказывается связанной в молекулы, а концентрация свободных ионов становится намного меньше уровня легирования (рис. 2).

Если же температура быстро достигает значения T_{\min} (быстрое охлаждение), то время, „выделенное“ ионам на интенсивное термоактивационное движение, сокращается. Это приводит к тому, что значительная часть ионов

водорода остается свободной, а большая часть связанных в процессе охлаждения ионов оказывается связанной в комплексы водород-легирующая примесь.

После быстрого охлаждения происходит незначительное перераспределение заряда (рис. 3), поскольку основная часть положительного заряда в приповерхностной области остается сосредоточенной на ионах, „замороженных“ в кристалле. Соответственно почти не происходит и перераспределения электрического поля и дырок. Наблюдаемые небольшие изменения вызваны диффузионно-дрейфовым движением ионов, обусловленным прерыванием поставки водорода в кристалл.

Напротив, при доминирующем объединении ионов в молекулы в процессе медленного охлаждения происходит интенсивное перераспределение заряда за счет освобождения двух носителей заряда в каждом акте объединения ($H^+ + H^+ \rightarrow HH^0 + 2h^+$). Это приводит к существенному уменьшению напряженности электрического поля и изменению профиля распределения носите-

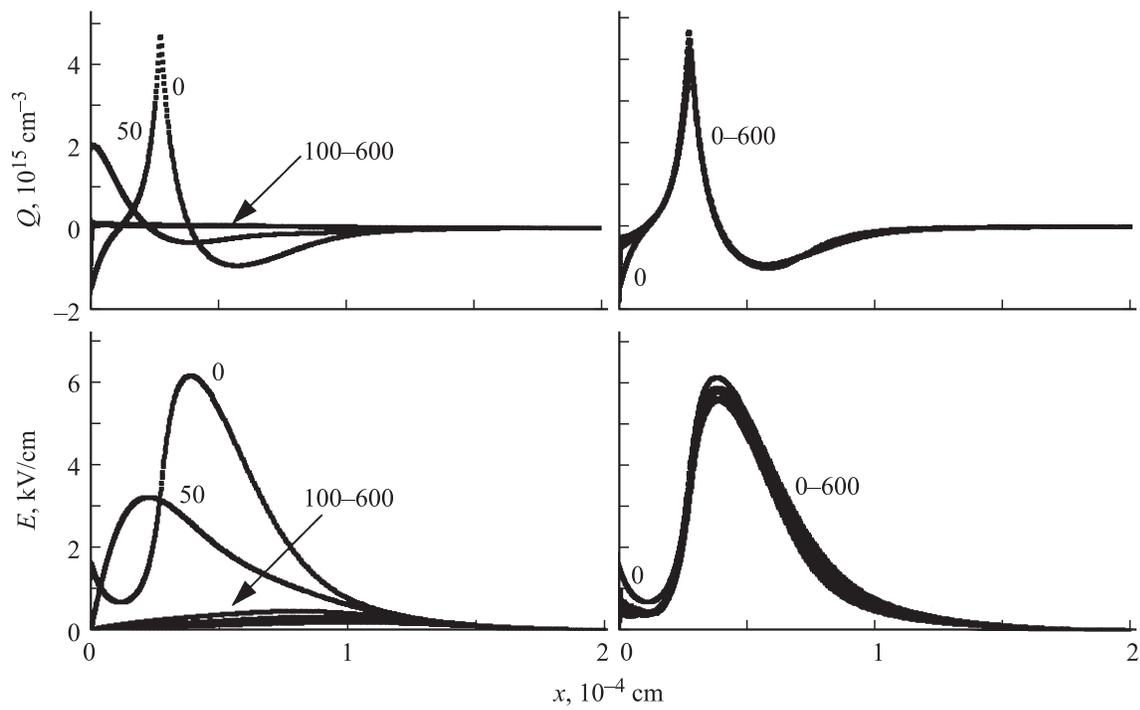


Рис. 3. Распределение заряда Q и напряженности электрического поля E по глубине для разных моментов времени t . Слева — медленное охлаждение, $dT/dt(0) = 0.25$ град/с; справа — быстрое охлаждение, $dT/dt(0) = 4$ град/с. Времена указаны в секундах, отсчет от начала этапа охлаждения.

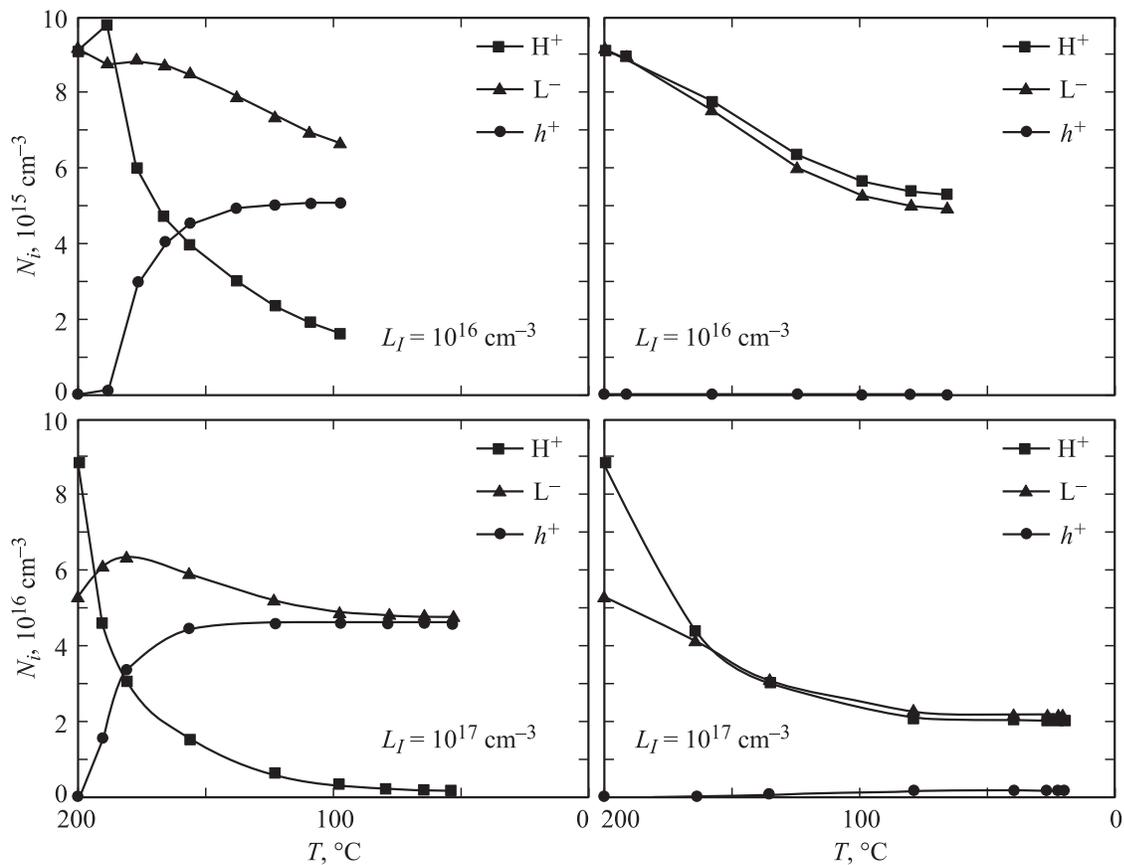


Рис. 4. Концентрации водородных ионов (H^+), активной примеси (L^-) и основных носителей заряда (h^+) на глубине 0.1 мкм в зависимости от температуры в процессе охлаждения полупроводника. Слева — медленное охлаждение: $dT/dt(0) = 0.25$ град/с для $L_I = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ и $dT/dt(0) = 1$ град/с для $L_I = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Справа — быстрое охлаждение: $dT/dt(0) = 1$ град/с для $L_I = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ и $dT/dt(0) = 4$ град/с для $L_I = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

лей заряда (рис. 2). Поскольку основными заряженными частицами остаются активная примесь и дырки, профиль распределения дырок в конечном состоянии почти сливается с профилем распределения активной примеси.

Критерии быстрого и медленного охлаждения являются относительными и зависимыми от уровня легирования полупроводника. Чем выше уровень легирования, тем выше скорость охлаждения образца, которую можно считать пограничной между режимами быстрого и медленного охлаждения. На рис. 4 показаны изменения концентрации заряженных частиц от температуры на глубине 0.1 мкм при различных уровнях легирования полупроводника и при различных скоростях снижения температуры (в рамках зависимости (3)). Из рисунка, в частности, видно, что для уровня легирования $L_I = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ начальная скорость охлаждения 1 град/с соответствует быстрому охлаждению (заряд активной примеси компенсируется зарядом ионов), в то время как эта же начальная скорость для $L_I = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ соответствует медленному охлаждению (заряд активной примеси компенсируется зарядом дырок).

На рис. 5 показаны концентрации заряженных частиц (H^+ , L^- и h^+) на глубине 0.1 мкм, установившиеся после окончания охлаждения. Видно, что для каждого уровня легирования существует определенное значение начальной скорости охлаждения (в рамках рассматриваемого закона охлаждения (3)), при котором имеет место максимальная степень пассивации примеси (минимум концентрации активной примеси). Следует обратить внимание на то, что чем выше уровень легирования, тем большей степени пассивации можно достичь. Это относится как к исходному состоянию, установившемуся после окончания этапа экспозиции в водороде, так и к конечному состоянию, получающемуся после охлаждения образца. При высоком уровне легирования, $L_I \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$, согласно настоящим расчетам, а также оценкам, выполненным в [16], существенная пассивация достигается уже на этапе экспозиции образца в атомарном водороде и сохраняется при охлаждении. Поэтому больших вариаций конечных профилей заряженных частиц в зависимости от режимов охлаждения в данном случае получить невозможно.

В литературе довольно долго дискутируется вопрос о том, каков механизм обеднения носителями заряда приповерхностного слоя гидрогенизированных полупроводников. Такое обеднение может быть вызвано, с одной стороны, компенсацией объемного заряда легирующей примеси объемным зарядом водородных ионов. С другой стороны, это может быть вызвано и образованием нейтральных комплексов водород-легирующая примесь. Такие часто используемые методы, как метод вольт-фарядных характеристик (определяющий распределение носителей заряда) и метод вторично-ионной масс-спектрографии (определяющий распределение внедренного водорода), не позволяют экспериментально установить механизм обеднения приповерхностного слоя носителями заряда. Поэтому значительное внимание для получения ответа на этот вопрос было уделено оптическим

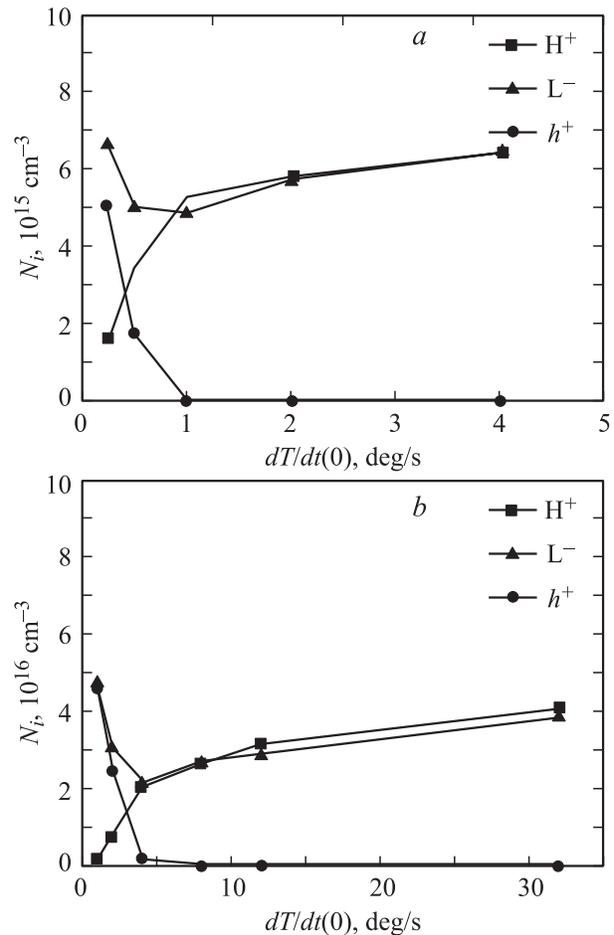


Рис. 5. Концентрации водородных ионов (H^+), активной примеси (L^-) и основных носителей заряда (h^+) на глубине 0.1 мкм после гидрогенизации и последующего охлаждения в зависимости от начальной скорости охлаждения. Уровень легирования: *a* — $L_I = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, *b* — $L_I = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

методам. В частности, исчезновение полосы фотолуминесценции экситонов, рекомбинирующих на легирующих центрах, в [26] и в других работах рассматривалось как прямое доказательство полной пассивации примеси водородом. Однако обеспечение достаточной чувствительности оптических методов требовало использования высоколегированных материалов с $L_I \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В то же время в гетероструктурах, где возбуждение центров люминесценции эффективно при низких уровнях легирования ($L_I \leq 10^{16} \text{ см}^{-3}$), напротив, отмечалась малая эффективность образования комплексов HL^0 [4].

Результаты настоящей работы говорят о том, что при умеренных уровнях легирования, $L_I \leq 10^{17} \text{ см}^{-3}$, в отличие от высоколегированного состояния, $L_I \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$, существуют оба механизма обеднения. При этом в ходе охлаждения можно получить разнообразные степени компенсации и пассивации легирующей примеси водородом, а также разнообразные профили концентрации носителей заряда и распределения внутреннего электрического поля.

4. Заключение

На основе анализа проведенных расчетов можно сделать следующие выводы.

— Конечные профили концентрации водородсодержащих частиц и распределение внутреннего электрического поля гидрогенизированного слоя *p*-GaAs определяются не только параметрами этапа введения водорода в кристалл, но и температурно-временным режимом охлаждения образца. Степень влияния скорости охлаждения на конечное состояние гидрогенизированного слоя увеличивается по мере уменьшения уровня легирования полупроводника.

— В умеренно легированном ($L_I \leq 10^{17} \text{ см}^{-3}$), гидрогенизированном GaAs могут сосуществовать два состояния легирующей примеси — пассивированная примесь, входящая в комплексы HL^0 , и активная примесь, компенсирующая зарядом ионов водорода противоположного знака или носителями заряда. Соотношение между концентрациями компенсирующей и пассивированной примеси зависит от скорости охлаждения. В сильно легированном GaAs ($L_I \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$) сразу после окончания этапа введения водорода основная часть примеси находится в пассивированном состоянии, поэтому этап охлаждения оказывает незначительное влияние на конечное состояние.

— Для умеренно легированного гидрогенизированного образца GaAs, характеризующегося большой долей примеси, находящейся в активном состоянии, могут существовать два принципиально разные конечные состояния, определяемые режимом охлаждения. При медленном охлаждении заряд активной примеси компенсируется носителями заряда. При быстром охлаждении заряд активной примеси компенсируется зарядом ионов водорода. Для последнего состояния характерно сохранение в приповерхностной области сравнительно сильного внутреннего электрического поля.

Список литературы

- [1] S.J. Pearton, J.W. Corbett, M. Stavola. Hydrogen in Crystalline Semiconductors (Springer-Verlag, 1991) p. 374.
- [2] Ф.П. Коршунов, Н.Ф. Курилович, Т.А. Прохоренко, В.К. Шешолок, Ю.А. Бумай. Вопросы атомной науки и техники, 2, 38 (2001).
- [3] И.А. Карпович, А.В. Аншон, Д.О. Филатов. ФТП, 32, 1089 (1998).
- [4] Ю.А. Бумай, Г. Гобш, Р. Гольдхан, Н. Штайн, А. Голомбек, В. Наков, Т.С. Ченг. ФТП, 36, 211 (2002).
- [5] M. Geddo, R. Pezzuto, M. Capizzi, A. Polimeni, D. Gollub, M. Fischer, A. Forchel. Eur. Phys. J. B, 30, 39 (2002).
- [6] G. Pettinari, F. Masia, A. Polimeni, M. Felici, A. Frova, M. Capizzi, A. Lindsay, E.P. O'Reilly, P.J. Klar, W. Stolz. Phys. Rev. B, 74, 245 202 (2006).
- [7] Yao Yan-Ping, Liu Chun-Ling, Qiao Zhong-Liang, Li Mei, Gao Xin, Bo Bao-Xue. Chinese Phys. Lett., 25, 1071 (2008).
- [8] B. Herzog, B. Raabe, G. Hahn. Proc. 22nd Eur. Photovoltaic Solar Energy Conf. (Milan, 2007) p. 1722.
- [9] H.G. Svavarsson, D.M. Danielsson, J.T. Gudmundsson. Proc. 23rd Eur. Photovoltaic Solar Energy Conf. (Valencia, 2008) p. 2221.
- [10] В.Г. Божков, В.А. Кагадей, Н.А. Торхов. ФТП, 32, 1343 (1998).
- [11] U.P. Singh. Bull. Mater. Sci., 21, 155 (1998).
- [12] В.А. Кагадей, Е.В. Нефёдцев, Д.И. Проскуровский, С.В. Романенко, Л.С. Широкова. Письма ЖТФ, 29, 27 (2003).
- [13] R. Farshchi, E.V. Chopdekar, Y. Suzuki, P.D. Ashby, I.D. Sharp, J.W. Beeman, E.E. Haller, O.D. Dubon. Phys. Status Solidi, C 4, 1755 (2007).
- [14] M. Capizzi, A. Mittaga. Appl. Phys. Lett., 50 (14), 918 (1987).
- [15] V.A. Kagadei, E.V. Nefyodtsev, D.I. Proskurovsky. J. Vac. Sci. Technol. A, 19, 1871 (2001).
- [16] В.А. Кагадей, Е.В. Нефёдцев. ФТП, 43, 128 (2009).
- [17] S.J. Pearton, W.C. Dautremont-Smith, J. Chevallier, C.W. Tu, K.D. Cummings. J. Appl. Phys., 58, 2821 (1986).
- [18] J.C. Mikkelsen, jr. Appl. Phys. Lett., 46, 882 (1985).
- [19] J.I. Pankove, P.J. Zanzucchi, C.W. Magee. Appl. Phys. Lett., 46, 421 (1985).
- [20] J.I. Pankove, C.W. Magee, R.O. Wance. Appl. Phys. Lett., 47 (7), 748 (1985).
- [21] Э.М. Омеляновский, А.В. Пахомов, А.Я. Поляков, А.В. Говорков, О.М. Бородин, А.С. Брук. ФТП, 22, 1203 (1988).
- [22] Э.М. Омеляновский, А.Я. Поляков. Высококачественные вещества, 5, 5 (1988).
- [23] J. Chevallier, M. Aucouturier. Ann. Rev. Mater. Sci., 18, 219 (1988).
- [24] В.Г. Божков, В.А. Кагадей, Н.А. Торхов. Изв. вузов. Физика, 8, 115 (1997).
- [25] Q.X. Zhao, B.O. Fimland, U. Sodervall, M. Willander, E. Selvig. Appl. Phys. Lett., 71 (15), 2139 (1997).
- [26] J. Weber, S.J. Pearton, W.C. Dautremont-Smith. Appl. Phys. Lett., 49 (18), 1181 (1986).

Редактор Л.В. Шаронова

Computational modeling of the GaAs hydrogenation process at the cooling stage

V.A. Kagadei, E.V. Nefyodtsev*

Federal Research Institute of Semiconductor Devices, 634034 Tomsk, Russia

* Institute of High Current Electronics, Russian Academy of Sciences, Siberian Branch, 634055 Tomsk, Russia

Abstract The evolution of concentration profiles for all types of hydrogen particles, charge carriers, doping active impurity and electric field distribution in the near-surface region of the hydrogenated *p*-type GaAs during sample cooling after hydrogen introduction was simulated. It was shown that both resulted concentration profiles of the hydrogen-containing particles and the internal electric field distribution depended on the sample cooling regime. The influence of the cooling rate on the final state of the hydrogenated layer increases with decreasing of the doping level of the semiconductor. The regularities of the final state formation of the hydrogen-GaAs system depending on the cooling rate of the sample are discussed.