

Влияние эффекта экранирования на пассивацию дырочного кремния водородом

© О.В. Александров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 31 января 2001 г. Принята к печати 11 мая 2001 г.)

Проведено моделирование пассивации дырочного кремния в процессе диффузии водорода путем решения диффузионно-кинетических уравнений с учетом образования водородно-акцепторных пар, внутреннего электрического поля и эффекта экранирования. Экранирование свободными носителями ионов водорода и акцепторной примеси приводит к уменьшению их радиуса взаимодействия и ослаблению концентрационной зависимости коэффициента диффузии водорода при высоких уровнях легирования кремния. Соответствие расчетных и экспериментальных профилей дырок и водородно-акцепторных пар достигается в широком диапазоне уровней легирования кремния бором от $4 \cdot 10^{14}$ до $1.2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ при энергии связи пар $0.70\text{--}0.79 \text{ эВ}$. Радиус кулоновского взаимодействия ионов водорода и бора при слабом легировании составляет 35 \AA и уменьшается с увеличением уровня легирования.

1. Введение

При обработке монокристаллического кремния, легированного акцепторными примесями (В, Al, Ga, In, Tl), в водород-содержащей плазме, парах воды или водных растворах при температурах $65\text{--}200^\circ\text{C}$ наблюдается увеличение удельного сопротивления приповерхностных слоев [1–3]. Установлено, что это происходит в результате пассивации акцепторов ионами водорода путем образования нейтральных водородно-акцепторных пар A^-H^+ , где A^- — ионизованный акцептор [1,2], а не вследствие компенсации при введении водородных доноров, как полагалось в [4]. Структура и симметрия пар A^-H^+ в решетке кремния обсуждается в [2]. Наиболее вероятными полагаются конфигурации с атомом водорода вблизи центра связи между узельными атомами акцептора и кремния ("bond-centered"), а также с атомом водорода на продолжении этой связи за атомом примеси ("dopant-antibonding"). Ширина области пассивации пропорциональна корню квадратному из времени и уменьшается с увеличением уровня легирования; профили водорода имеют ступенчатый характер с высотой ступеньки, равной уровню легирования, вблизи поверхности наблюдается накопление водорода [1,2].

Для описания диффузии водорода в дырочном кремнии был предложен ряд моделей, в которых учитывались различные зарядовые состояния атомов Н в Si с соответствующими разными коэффициентами диффузии [5–7], влияние внутреннего электрического поля на диффузию ионизованного водорода [5–9], взаимодействие атомов Н с атомами легирующей примеси [6–10], образование молекул H_2 [6,11], а также многократный захват атомов Н на акцепторы [11]. Ступенчатый характер профилей водорода объяснялся его захватом на ловушки-акцепторы с образованием неподвижных комплексов [6–11], а также влиянием внутреннего электрического поля [8]. Накопление в поверхностном слое водорода, не участвующего

в пассивации, связывалось с его захватом на поверхностные дефекты-ловушки, образовавшиеся в результате воздействия плазмы [6,7], а также с многократным захватом атомов Н на акцепторы при высоких уровнях легирования [11]. Влияние уровня легирования на ширину области пассивации исследовалось в работах [8,10,12]. В работе [8] это влияние объяснялось увеличением коэффициента диффузии водорода под действием внутреннего электрического поля в области компенсации акцепторов водородными донорами. Установлено, однако, что при диффузии водорода в дырочный кремний имеет место не компенсация, а пассивация акцепторов [1,2]. Кроме того, в этом случае ширина полки на профилях водорода уменьшается с понижением уровня легирования, что не соответствует экспериментальным данным. В работах [10,12] наблюдаемое уменьшение ширины области пассивации с повышением уровня легирования объяснялось усилением комплексобразования ионов водорода с ионизованными акцепторами. Ширина области пассивации L оценивалась с помощью эффективного коэффициента диффузии $D_{\text{ef}} = L^2/t$, где t — время пассивации. Для D_{ef} были получены следующие зависимости от уровня легирования кремния бором C_B : обратно пропорциональная [10] (при 150°C)

$$D_{\text{ef}} = \frac{8.5 \cdot 10^{14} D_H}{C_B}, \quad (1)$$

где D_H — коэффициент диффузии свободного водорода, и зависимость вида [12]

$$D_{\text{ef}} = \frac{D_H}{1 + r C_B \exp(E_B/kT)}, \quad (2)$$

где E_B — энергия связи ионов водорода и бора в комплексе ($E_B + 0.6 \pm 0.1 \text{ эВ}$), r — эмпирический параметр ($r = 7 \cdot 10^{-5}/5 \cdot 10^{22}$), k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Зависимости (1) и (2) построены на рис. 1 вместе с экспериментальными значениями L^2/t из работ [12–14] при 150°C . Как видно из

✉ E-mail: aleks_ov@mailbox.alkor.ru

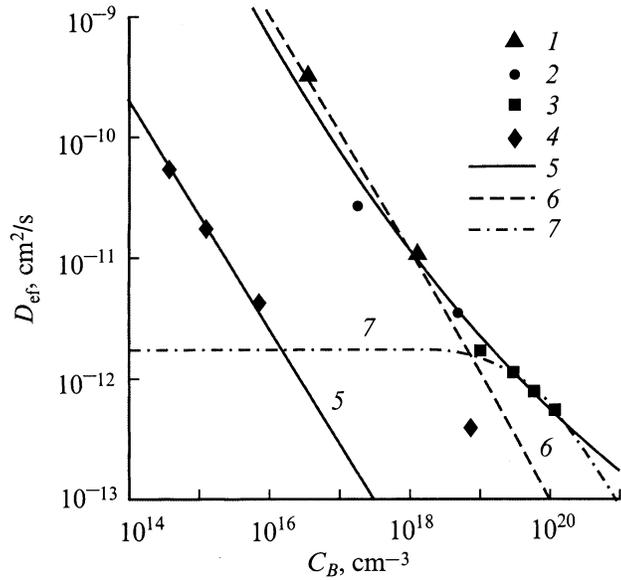


Рис. 1. Зависимость эффективного коэффициента диффузии водорода от уровня легирования кремния бором по данным работ: 1 — [13], 2 — [14], 3 — [12], 4 — [18] при температуре, °C: 1, 2, 3 — 150, 4 — 122, 5 — расчет по модели при E_B : 0.73 эВ для 150°C и 0.79 эВ для 122°C; 6 — расчет по (1), 7 — расчет по (2).

рисунка, зависимость (1) удовлетворительно описывает экспериментальные результаты только в области низких концентраций, а зависимость (2) — только в области высоких. Из рисунка также видно, что показатель степени m экспериментальной зависимости $D_{\text{ef}}(C_B^m)$ с увеличением уровня легирования изменяется от $m = -1$ до $m \cong -0.5$. Этот результат свидетельствует об ослаблении взаимодействия ионов водорода H^+ и акцепторов A^- при высоких уровнях легирования, что можно связать с эффектом экранирования ионов свободными носителями.

Цель настоящей работы — моделирование процесса пассивации дырочного кремния водородом с учетом эффекта экранирования.

2. Уравнение модели

Полагаем, что водород в p -Si существует в двух зарядовых состояниях — нейтральном H^0 и положительном H^+ , связанных друг с другом реакцией перезарядки



где h^+ — дырка. Положительно заряженный ион водорода H^+ взаимодействует с отрицательно заряженным ионом акцептора A^- с образованием донорно-акцепторной неподвижной пары H^+A^-



Диффузия водорода в нейтральном и ионизованном состояниях с образованием неподвижных водородно-акцеп-

торных пар описывается системой диффузионно-кинетических уравнений

$$\frac{\partial \text{H}^0}{\partial t} = D_{\text{H}}^0 \frac{\partial^2 \text{H}^0}{\partial x^2} - k_1 \text{H}^0 p + k_2 \text{H}^+, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \text{H}^+}{\partial t} = D_{\text{H}}^+ \frac{\partial^2 \text{H}^+}{\partial x^2} + k_1 \text{H}^0 p - k_2 \text{H}^+ - k_3 \text{H}^+ \text{A}^- + k_4 W - D_{\text{H}}^+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\text{H}^+}{p} \frac{\partial p}{\partial x} \right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial \text{A}^-}{\partial t} = k_3 \text{H}^+ \text{A}^- - k_4 W, \quad (7)$$

где D_{H}^0 и D_{H}^+ — коэффициенты диффузии свободного водорода в нейтральном и ионизованном состояниях соответственно, k_1 и k_2 — константы скоростей прямой и обратной реакции (3) соответственно, k_3 и k_4 — константы скоростей прямой и обратной реакции (4) соответственно, W — концентрация пар, p — концентрация дырок,

$$p = \frac{1}{2} \left[\text{A}^- - \text{H}^+ + \sqrt{(\text{A}^- - \text{H}^+)^2 + 4n_i^2} \right], \quad (8)$$

где n_i — собственная концентрация носителей. Последний член в (6) учитывает влияние внутреннего электрического поля на диффузию ионов H^+ . Складывая (5)–(7), получаем

$$\frac{\partial \text{H}}{\partial t} = D_{\text{H}}^0 \frac{\partial^2 \text{H}^0}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\text{H}}^+ h_E \frac{\partial \text{H}^+}{\partial x} \right), \quad (9)$$

где H — полная концентрация водорода, $\text{H} = \text{H}^0 + \text{H}^+ + W$, h_E — фактор влияния внутреннего электрического поля на диффузию ионов H^+

$$h_E = 1 - \frac{\text{H}^+}{p} \frac{\partial p / \partial x}{\partial \text{H}^+ / \partial x}. \quad (10)$$

При выполнении условий локального равновесия в реакции (3)

$$\text{H}^+ = k_{12} \text{H}^0 p, \quad (11)$$

где k_{12} — константа равновесия реакции (3), $k_{12} = k_1/k_2$, и в реакции (4)

$$W = k_{34} \text{H}^+ \text{A}^-, \quad (12)$$

где k_{34} — константа равновесия реакции (4), $k_{34} = k_3/k_4$, уравнение (9) приводится к виду уравнения диффузии с коэффициентом диффузии, зависящим от концентрации компонентов,

$$\frac{\partial \text{H}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\text{H}} \frac{\partial \text{H}}{\partial x} \right), \quad (13)$$

где

$$D_{\text{H}} = \frac{D_{\text{H}}^0 \text{H}^0 + D_{\text{H}}^+ h_E \text{H}^+}{\text{H}} = \frac{D_{\text{H}}^0 + D_{\text{H}}^+ h_E k_{12} p}{1 + k_{12} p + k_{12} k_{34} p \text{A}^-}. \quad (14)$$

Граничным условием при диффузии полагается постоянство концентрации нейтрального водорода на поверхности (при $x = 0$): $H^0(0, t) = H_s^0 = \text{const}$, откуда для полной концентрации водорода на поверхности имеем граничное условие

$$H_s = H_s^0 [1 + k_{12} p_s (1 + k_{34} A_s^-)], \quad (15)$$

где p_s и A_s^- — поверхностные концентрации дырок и свободных ионов акцептора соответственно.

3. Параметры модели

Параметрами модели являются: D_H^0 , D_H^+ , k_{12} , k_{34} и H_s^0 . Поскольку имеются многочисленные данные, свидетельствующие о высоком коэффициенте диффузии водорода в легированном, т.е. не содержащем ловушек, кремнии [1–3], в качестве D_H^0 берем экспериментальные данные [15], дающие максимальный коэффициент диффузии при экстраполяции к температурам пассивации, $D_H^0 = 9.4 \cdot 10^{-3} \exp(-0.48/kT)$. Как показано в работе [9], при температурах вблизи комнатной D_H^+ близок к экстраполированным данным [15], поэтому принимаем $D_H^+ = D_H^0$.

Константа равновесия реакции перезарядки (3) определяется уровнем H^+ в запрещенной зоне $(k_{12})^{-1} = p_H = N_v \exp[(E_H^+ - E_V)/kT]$, где N_v — эффективная плотность состояний в валентной зоне, $(E_H^+ - E_V)$ — положение уровня H^+ в запрещенной зоне кремния относительно потолка валентной зоны ($E_H^+ = E_V + 0.60$ эВ [6,7]), p_H — концентрация дырок при уровне Ферми, совпадающем с уровнем E_H^+ . Константа равновесия реакции образования водородно-акцепторных пар (4) $k_{34} = k_3/k_4$, где $k_3 = 4\pi R D_H^+$, $k_4 = \nu \exp[-(E_B + E_M)/kT]$, R — радиус взаимодействия ионов H^+ и A^- , ν — частота колебаний ионов в паре, E_B — энергия связи ионов в паре, E_M — энергия миграции ионов H^+ . В работе [16] определены частоты колебаний и энергии активации отжига E_A ($E_A = E_B + E_M$) водородно-акцепторных пар в кремнии. Так, для пар В-Н в [16] получено $\nu = 2.8 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $E_A = 1.28 \pm 0.03$ эВ, откуда при $E_M = 0.48$ эВ имеем $E_B \cong 0.8$ эВ.

При выборе поверхностной концентрации нейтрального водорода H_s^0 мы исходили из того, что пассивация p -Si обусловлена образованием пар $H^+ A^-$, а не компенсацией водородными донорами. А именно, концентрация H_s^+ не может превосходить уровень легирования кремния акцепторной примесью C_A . Условие $H_s^+ < C_A$ выполняется при $H_s^0 < p_H$, где $p_H \cong 3 \cdot 10^{11} - 1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ при $E_H^+ = E_V + 0.60$ эВ и температурах пассивации $T = 122 - 150^\circ \text{C}$.

Относительно радиуса взаимодействия ионов H^+ и A^- в различных моделях имеется значительный разброс от $R = 0.5 \text{ \AA}$ [10] до $R = 50 - 100 \text{ \AA}$ [9]. Оценка радиуса взаимодействия может быть проведена из условия равенства энергии взаимодействия между ионами

тепловой энергии kT . При кулоновском характере взаимодействия ионов H^+ и A^- в решетке кремния получаем $R \cong 35 \text{ \AA}$ при $T = 122 - 150^\circ \text{C}$. При высоких уровнях легирования радиус взаимодействия, по-видимому, не может превышать длину экранирования Дебая. В связи с этим полагаем, что эффективный радиус взаимодействия ионов H^+ и A^- с учетом эффекта экранирования выражается соотношением

$$R_L = \frac{R L_D}{R + L_D}, \quad (16)$$

где L_D — длина экранирования Дебая, $L_D = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 kT}{q^2 C_A}}$, ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость Si, ϵ_0 — абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума, q — заряд электрона. При низких концентрациях акцепторов $C_A < 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ имеем $L_D > 10R$ и $R_L \cong R$, а при высоких концентрациях $C_A > 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ имеем $L_D < 0.1R$ и $R_L \cong L_D$.

При используемых значениях параметров характерные времена жизни ионов H^+ в свободном состоянии $1/(k_3 A^-)$ и в связанном состоянии $1/k_4$, так же как и времена электронной перезарядки в (3), много меньше используемых времен пассивации. В этом случае, вследствие интенсивного обмена частиц между состояниями [17], условия локального равновесия (11) и (12) действительно выполняются, поверхностная концентрация H_s не зависит от времени, а коэффициент диффузии D_H является функцией полной концентрации водорода.

4. Результаты расчета и их обсуждение

Уравнение диффузии (13) с коэффициентом диффузии (14) и с граничным условием на поверхности (15) решалось численно методом конечных разностей с использованием неявной разностной схемы. Концентрации компонентов диффузии находились из полной концентрации водорода методом итераций с использованием соотношений локального равновесия (11), (12) и условия сохранения локальной концентрации акцепторной примеси.

Распределения концентраций компонентов диффузии H^0 , H^+ , W и A^- по глубине при однородном легировании кремния акцепторной примесью бора с концентрацией $C_B = 1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ показаны на рис. 2. При найденных значениях параметров на протяжении всего профиля выполняется соотношение $W > H^+ > H^0$. Вблизи поверхности концентрация комплексов приближается к уровню легирования кремния акцепторами $W \cong C_A$, приводя к соответствующему уменьшению концентрации свободных ионов акцептора и дырок и обеспечивая таким образом пассивацию приповерхностного слоя кремния. Учет эффекта экранирования приводит к увеличению ширины области пассивации (ср. кривые $I-4$ и $I'-4'$). На рис. 3 представлены расчетные профили водородно-

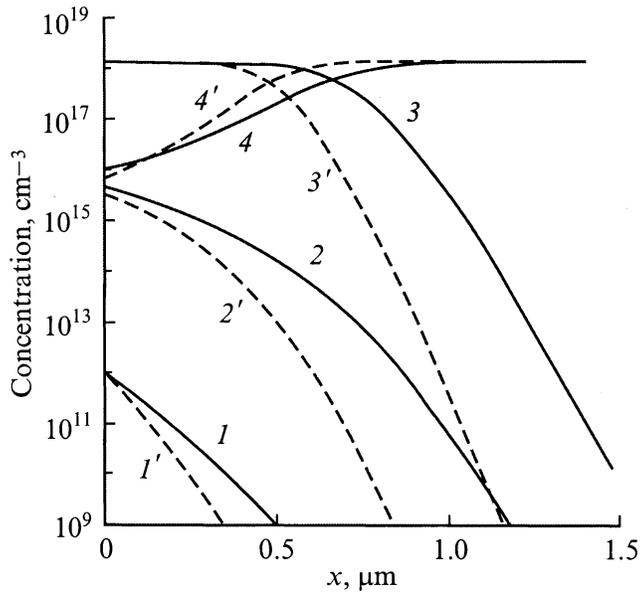


Рис. 2. Профили концентраций компонентов по глубине Si, легированного бором, ($C_B = 1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$): 1, 1' — H^0 , 2, 2' — H^+ , 3, 3' — W , 4, 4' — V^- с учетом (1–4) и без учета (1'–4') экранирования при значениях параметров: $N_s^0 = 1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $E_B = 0.73 \text{ эВ}$ ($T = 150^\circ\text{C}$, $t = 10 \text{ мин}$).

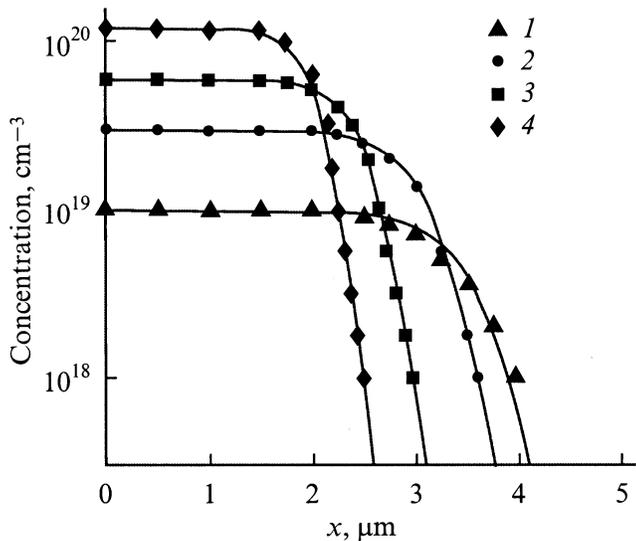


Рис. 3. Профили концентраций пар при пассивации Si, легированного бором, с концентрацией $C_B, \text{ см}^{-3}$: 1 — $1 \cdot 10^{19}$, 2 — $3 \cdot 10^{19}$, 3 — $6 \cdot 10^{19}$, 4 — $1.2 \cdot 10^{20}$. Точки — экспериментальные данные [12], сплошная линия — расчет по модели при $N_s^0 = 1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $E_B \cong 0.74 \text{ эВ}$ ($T = 150^\circ\text{C}$, $t = 20 \text{ ч}$).

акцепторных пар при высоких ($1 \cdot 10^{19}$ – $1.2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) уровнях легирования кремния бором и соответствующие экспериментальные профили, полученные в работе [12] методом ИК отражения, при температуре пассивации 150°C . Как видно из рисунка, расчетные профили

удовлетворительно описывают экспериментальные при значениях параметров $N_s^0 = 1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ и $E_B = 0.73 \text{ эВ}$. На рис. 4 представлены расчетные профили распределения дырок при более низких ($4 \cdot 10^{14}$ – $7.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) уровнях легирования кремния бором и соответствующие экспериментальные профили, полученные в работе [18] методом сопротивления растекания, при температуре пассивации 122°C . Удовлетворительное соответствие расчетных профилей с экспериментальными достигается при значениях H_s^0 от $1 \cdot 10^9$ до $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $E_B \cong 0.79 \text{ эВ}$ для низких концентраций (от $4 \cdot 10^{14}$ до $7.4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и $E_B \cong 0.70 \text{ эВ}$ для высокой концентрации ($5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Расчетные зависимости $D_{\text{эф}} = L^2/t$ от уровня легирования при $T = 150$ и 122°C приведены на рис. 1 (сплошные линии). За ширину области пассивации L принималась глубина, при которой концентрация пар или дырок составляла 0.5 от уровня легирования. Как видно из рис. 4, зависимости, рассчитанные по модели с учетом эффекта экранирования, позволяют удовлетворительно описать поведение $D_{\text{эф}}$ в зависимости от уровня легирования как при низких, так и при высоких концентрациях акцепторов. Во всем диапазоне легирования при используемых значениях параметров в выражении (14) для D_H имеем $k_{12}p \gg 1$ и $k_{34}A \gg 1$, поэтому $D_H \cong \frac{D_H^0 h_E}{k_{34}A^-}$. При низких концентрациях акцепторов ($C_A < 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$) k_{34} не зависит от концентрации, на фронте диффузии при $A^- \cong C_A$ имеем $D_H \sim 1/C_A$. При высоких концентрациях акцепторов ($C_A > 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) $k_{34} \sim 1/\sqrt{C_A}$, на фронте диффузии при $A^- \cong C_A$ имеем $D_H \sim \sqrt{C_A}$.

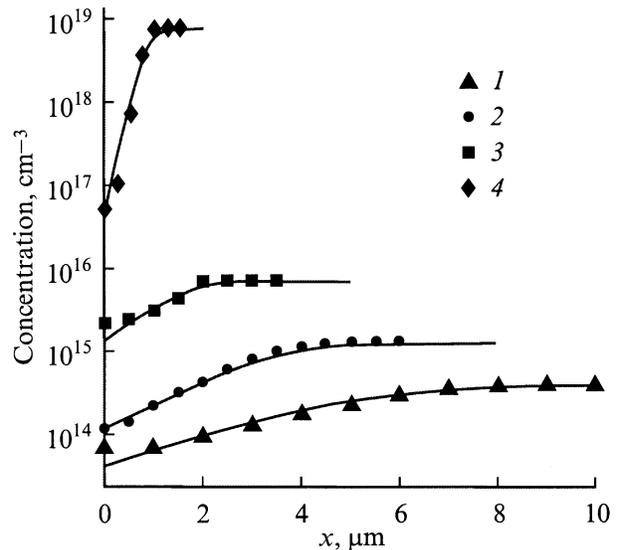


Рис. 4. Профили концентраций дырок при пассивации Si, легированного бором, с концентрацией $C_B, \text{ см}^{-3}$: 1 — $4 \cdot 10^{14}$, 2 — $1.3 \cdot 10^{15}$, 3 — $7.4 \cdot 10^{15}$, 4 — $5 \cdot 10^{18}$. Точки — экспериментальные данные [18], сплошная линия — расчет по модели при $H_s^0, \text{ см}^{-3}$: 1, 4 — $2 \cdot 10^{10}$, 2 — $1.3 \cdot 10^{10}$, 3 — $1 \cdot 10^9$; $E_B, \text{ эВ}$: 1–3 — 0.79, 4 — 0.70. ($T = 122^\circ\text{C}$, $t = 1 \text{ ч}$ для 1–3 и $t = 4 \text{ ч}$ для 4).

Найденные значения энергии связи при низких уровнях легирования $E_B \cong 0.79$ эВ соответствуют экспериментальным данным работы [16], тогда как при высоких $E_B = 0.70-0.73$ эВ — несколько ниже. Этот результат может быть связан с влиянием эффекта экранирования не только на радиус взаимодействия, но и на энергию связи. Отметим, что теоретические расчеты для энергии связи (диссоциации) пары B^-H^+ в конфигурации центральной связи дают значение 0.70 эВ [19], достаточно близкое к найденным. Значения поверхностной концентрации нейтрального водорода ($N_s^0 < p_N$), по-видимому, определяются конкретными условиями гидрогенизации в каждом эксперименте. Значение $R = 35$ Å соответствует радиусу взаимодействия при чисто кулоновском характере взаимодействия между ионами H^+ и A^- в решетке кремния и лежит между нейтральными ранее значениями от 0.5 Å [10] до $50-100$ Å [9], приближаясь к значениям 30 и 40 Å, определенным в [6] и [16] соответственно.

Отметим, что в вышеперечисленных моделях [2,9–11] не учитывался распад водородно-акцепторных пар, тогда как в настоящей модели образование пар полагалось обратимым в связи с малым временем их жизни ($1/k_4 < 100$ с) при температурах пассивации. Уменьшение эффективного радиуса взаимодействия вследствие эффекта экранирования, согласно (16), позволяет описать процесс пассивации дырочного кремния в широком диапазоне уровней легирования без привлечения образования молекул H_2 и многократного захвата атомов H на акцепторы, используемых в моделях [6,11].

5. Заключение

Проведено моделирование пассивации дырочного кремния водородом при различных уровнях легирования путем решения диффузионно-кинетических уравнений для свободного водорода в нейтральном и положительно заряженном состояниях с учетом образования водородно-акцепторных пар, внутреннего электрического поля и эффекта экранирования. Количественное соответствие расчетных профилей с экспериментальными в широком диапазоне уровней легирования кремния бором от $4 \cdot 10^{14}$ до $1.2 \cdot 10^{20}$ см⁻³ достигается при использовании данных по коэффициенту диффузии водорода в нелегированном кремнии [15], донорном уровне $E_N^+ = E_V + 0.60$ эВ [6,7], поверхностной концентрации нейтрального водорода $N_s^0 < p_N$ и энергии связи пар $E_B = 0.70-0.79$ эВ, близкой к данным [16]. Радиус взаимодействия ионов водорода и акцептора в решетке кремния определяется кулоновским взаимодействием ($R = 35$ Å при слабом легировании) и уменьшается с повышением уровня легирования в соответствии с выражением (16) вследствие эффекта экранирования ионов свободными носителями.

Список литературы

- [1] N.M. Johnson, C. Doland, F. Ponce, J. Walker, G. Anderson. *Physica B*, **170**, 3 (1991).
- [2] S.J. Pearton, J.W. Corbett, M. Stavola. *Hydrogen in crystalline semiconductors* (Springer Verlag, Berlin, 1992) ch. 2, 4, 9.
- [3] Y. Ohmura, K. Abe, M. Ohtaka, A. Kimoto, M. Yamaura. *Mater. Sci. Forum*, **258–263**, 185 (1997).
- [4] S.T. Pantelides. *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 995 (1987).
- [5] M. Capizzi, A. Mittiga. *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 918 (1987).
- [6] D. Mathiot. *Phys. Rev. B*, **40**, 5867 (1989).
- [7] R. Rizk, P. de Mierry, D. Ballutaud, M. Aucouturier, D. Mathiot. *Phys. Rev. B*, **44**, 6141 (1991).
- [8] Е.Д. Горнушкина, Р.Ш. Малкович. *Электрон. техн.*, сер. 6, вып. 7, 73 (1991).
- [9] C.H. Seager, R.A. Anderson. *Appl. Phys. Lett.*, **53**, 1181 (1988).
- [10] J.P. Kalejs, S. Rajendran. *Appl. Phys. Lett.*, **55**, 2763 (1989).
- [11] J.T. Borenstein, J.W. Corbett, S.J. Pearton. *J. Appl. Phys.*, **73**, 2751 (1993).
- [12] C.P. Herrero, M. Stutzmann, A. Breitschwerdt, P.V. Santos. *Phys. Rev. B*, **41**, 1054 (1990).
- [13] B.Y. Tong, X.W. Wu, C.R. Yang, S.K. Wong. *Canadian J. Phys.*, **67**, 379 (1989).
- [14] N.M. Johnson, M.D. Moyer. *Appl. Phys. Lett.*, **46**, 787 (1985).
- [15] A. Van Wieringen, N. Warmoltz. *Physica*, **22**, 849 (1956).
- [16] T. Zundel, J. Weber. *Phys. Rev. B*, **39**, 13 549 (1989).
- [17] Р.Ш. Малкович. *Математика диффузии в полупроводниках* (СПб., Наука, 1999) гл. 4, с. 154.
- [18] J.I. Pankove, R.O. Wance, J.E. Berkeyheiser. *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 1100 (1984).
- [19] C.G. Van de Walle. *Phys. Rev. B*, **49**, 4579 (1994).

Редактор Л.В. Беляков

Influence of screening effect on hydrogen passivation of hole silicon

O.V. Aleksandrov

State Electrotechnical University,
197376 St. Petersburg, Russia

Abstract The simulation of hole silicon passivation during hydrogen diffusion with account of hydrogen-acceptor pairs formation, internal electrical field and screening effect has been carried out. Screening by hydrogen and acceptor ions results shortening their interaction radii and slacking the concentration dependence of hydrogen diffusivity at high level of silicon doping. The account of screening effect allows to quantitatively describe hole and hydrogen-acceptor pair concentration profiles in the passivation region of hole silicon. The consistency of simulated and experimental profiles is reached in a broad band of doping levels from $4 \cdot 10^{14}$ to $1.2 \cdot 10^{20}$ cm⁻³, the pair binding energy being $0.70-0.79$ eV while the radius of the Coulomb interaction of hydrogen and boron ions is equal to 35 Å under low doping and decreases with increasing doping level.