

УДК 538.931:538.971

ДИФФУЗИЯ МЫШЬЯКА В ОКСИДЕ GaAs, ОБЛУЧЕННОМ ИОНАМИ Ag⁺

© 2022 г. А. П. Солоницына^{а, *}, Е. А. Макаревская^а, Д. А. Новиков^а, В. М. Микушкин^а

^аФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,
Санкт-Петербург, 194021 Россия

*e-mail: Anna.Solonitsina@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 19.12.2021 г.

После доработки 22.01.2022 г.

Принята к публикации 22.01.2022 г.

Рассмотрен ряд механизмов диффузии атомов мышьяка, включая радиационно-стимулированный вакансионный, междоузельный и смешанный (Франка–Турнбула), для объяснения обнаруженного ранее ионно-стимулированного преобразования при комнатной температуре слоя естественного оксида GaAs в слой Ga₂O₃. Оценка коэффициентов и длин диффузии позволила сделать вывод о доминировании междоузельного механизма диффузии при флуенсе $Q < 10^{15}$ см⁻². Установлено, что при комнатной температуре коэффициент ($D_{As} \sim 1.3 \times 10^{-16}$ см²/с) и длина ($L > 9$ нм) диффузии при реализации междоузельного механизма достаточны для удаления элементарного мышьяка, образующегося под действием ионов аргона, из слоя естественного оксида толщиной 2.0–2.5 нм в течение 10 мин. Однако вклад вакансионного механизма растет при увеличении дозы облучения вследствие увеличения концентрации вакансий. При этом механизм диффузии становится смешанным. При флуенсе $Q > 10^{15}$ см⁻² вакансионный механизм обеспечивает коэффициент ($D_{As} \sim 0.7 \times 10^{-17}$ см²/с) и длину ($L > 2.5$ нм) диффузии, также достаточные для удаления элементарного мышьяка из оксидного слоя за 10–20 мин. Показано, что диффузия мышьяка может быть значительной в процессах химического преобразования оксидов GaAs даже при комнатной температуре.

Ключевые слова: GaAs, мышьяк, Ga₂O₃, естественный оксид, ионное облучение, атомно-чистые поверхности, радиационно-стимулированная диффузия, точечные дефекты, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия.

DOI: 10.31857/S1028096022090199

ВВЕДЕНИЕ

Оксид галлия (Ga₂O₃) — один из наиболее интенсивно исследуемых в последнее десятилетие широкозонных полупроводников [1]. Вместе с тем, широкая запрещенная зона (4.85 эВ) позволяет применять этот оксид в качестве диэлектрика при относительно низких (близких к комнатной) температурах. Практическое значение оксида галлия определяется также тем, что он входит в состав собственного (естественного) оксида, создаваемого или возникающего естественным образом на поверхности GaAs — одного из наиболее важных полупроводников быстродействующей электроники [2]. Поэтому исследования таких физических процессов, как диффузия атомов в Ga₂O₃ и собственном оксиде GaAs активно продолжали на протяжении последних десятилетий. Естественный, термический и химический оксиды GaAs изучали многими методами, включая поверхностно-чувствительный метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), который является одним из наиболее эффективных в исследовании элементарного и химического

составов тонких пленок [3–9]. Было установлено, что оксидные слои, сформированные на GaAs при относительно низких температурах ($T < 350^\circ\text{C}$), содержат смесь оксидов галлия и мышьяка (Ga₂O₃, As₂O₃ и As₂O₅) [2, 4, 7], а их типичная толщина не превышает 2.5–3.0 нм [8, 9]. Многофазность и относительно узкая ширина запрещенной зоны оксидов мышьяка делает собственный оксид GaAs слабым диэлектриком с большими токами утечки [1]. Поэтому он не может играть роль технологически совместимого диэлектрика в приборных структурах, как оксид кремния (SiO₂) в кремниевой электронике, а проблема улучшения диэлектрических свойств собственного оксида GaAs остается актуальной.

Привлекательным подходом представляется преобразование оксида GaAs в слой Ga₂O₃. Так, в работе [10] методом РФЭС наблюдали полукратное обогащение фазой Ga₂O₃ естественного оксида, возникающего на поверхности GaAs, подвергнутой бомбардировке низкоэнергетическими ионами Ag⁺. Наблюдаемый процесс был объяснен диффузией атомов мышьяка, развива-

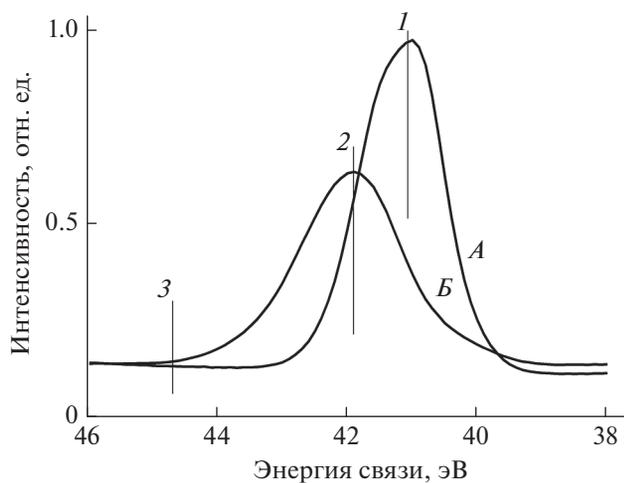


Рис. 1. As 3d РФЭС-спектры атомно-чистой поверхности GaAs (А), приготовленной ионным травлением, и поверхности со слоем GaAs-окс (Б), облученным ионами Ar^+ с энергией $E_i = 2500$ эВ и флуенсом $Q = 10^{14}$ см $^{-2}$. Цифрами отмечены энергии связи 3d электронов: 1 – в GaAs (41.1 эВ); 2 – в элементарном мышьяке As^0 (41.9 эВ); 3 – в оксиде мышьяка As_2O_3 (44.7 эВ). Энергия облучающих фотонов $h\nu = 150$ эВ.

ющейся по радиационным вакансиям в GaAs при комнатной температуре [11]. В работе [12] было обнаружено практически полное преобразование естественного оксида GaAs в Ga_2O_3 под действием малых доз низкоэнергетических ионов Ar^+ . Предложенная в работе [12] качественная модель процесса модификации оксида включала разрыв химических связей ионами Ar^+ и диффузию атомов As из оксидного слоя по радиационным вакансиям при комнатной температуре. В настоящей работе выполнен более детальный количественный анализ экспериментальных результатов работы [12] в части диффузии атомов мышьяка в оксиде и выявлена определяющая роль междуузельной диффузии As при комнатной температуре.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для независимого изложения настоящего исследования приведем краткое описание эксперимента и основного результата работы [12] по определению элементного и химического составов естественного оксида GaAs, облученного ионами Ar^+ с энергией $E_i = 2500$ эВ и флуенсом $Q = 10^{14}$ см $^{-2}$. Исследование проводили в сверхвысоком вакууме с использованием синхротронного излучения источника BESSY-II (Российско-Германская станция) с помощью фотоэлектронного спектрометра SPECS Phoibos 150 (SPECS GmbH) с высоким энергетическим разрешением ($\Delta E < 300$ мэВ) [13]. В качестве объекта исследования использовали легированную пластину GaAs

(100) *n*-типа ($n \sim 10^{18}$ см $^{-3}$), выращенную методом вертикальной направленной кристаллизации. За полгода до эксперимента пластина была подвергнута травлению ионами Ar^+ с энергией $E_i = 2500$ эВ и флуенсом $Q \sim 5 \times 10^{15}$ см $^{-2}$ в электронном спектрометре LHS-11 (Leybold AG) для удаления слоя оксида и получения воспроизводимой (реперной) атомно-чистой поверхности. Затем поверхность была окислена в сухой атмосфере.

На рис. 1 приведены As 3d РФЭС-спектры мышьяка для атомно-чистой поверхности GaAs, приготовленной ионным травлением, и поверхности со слоем естественного оксида (GaAs-оксид), облученного ионами Ar^+ . Измерение спектров оксидной пленки начинали в течение 10–20 мин после ионного облучения и продолжали не более 1 ч. Спектры получены при энергии облучающих фотонов $h\nu = 150$ эВ, обеспечивающей зондирование слоя толщиной ~ 1 нм. Энергия связи As 3d электронов в GaAs ($E_B = 41.1$ эВ) совпадает с литературными данными [14]. Поэтому полученные в одном эксперименте спектры можно считать надежными, несмотря на то, что в спектре слабо облученного естественного оксида отсутствует линия оксида мышьяка ($E_B = 44.7$ эВ). Весь мышьяк оксидного слоя оказывается в виде элементарного мышьяка As^0 ($E_B = 41.9$ эВ), химически не связанного с кислородом или галлием. Преобразование химического состояния мышьяка происходит под действием ионов аргона. Анализ относительных интенсивностей линий галлия Ga 3d и мышьяка As 3d с нормированием их на соответствующие сечения фотоионизации позволил определить элементный и химический составы приповерхностных слоев GaAs и его облученного естественного оксида (GaAs-окс) толщиной ~ 2.5 нм (энергия использованных для анализа фотонов составила $h\nu = 650$ эВ) [12].

В табл. 1 приведены относительные концентрации галлия, мышьяка и их оксидов в GaAs и в его слабо облученном естественном оксиде GaAs-окс, а также отношение концентраций галлия и мышьяка. Из табл. 1 видно, что атомно-чистая поверхность GaAs, приготовленная ионным травлением, лишь незначительно обеднена мышьяком: 45 ат. % вместо стехиометрических 50 ат. %. Относительное содержание мышьяка резко уменьшается в облученном оксиде до величины 12 ат. %, что может быть объяснено диффузией мышьяка из оксидного слоя. При этом весь оставшийся мышьяк As^0 оказывается химически несвязанным с атомами галлия или кислорода. Таким образом, было установлено, что облучение естественного оксида GaAs малой дозой ($Q \sim 10^{14}$ см $^{-2}$) ионов Ar^+ практически полностью (на 90 ат. %) преобразует его в Ga_2O_3 , в котором в междуузлиях находится около 10 ат. % элементарного мышьяка. Предложенная в работе [12] качественная модель про-

Таблица 1. Относительные концентрации Ga, As, As⁰, O, Ga₂O₃ и As₂O₃ и отношение концентраций Ga/As в GaAs и его естественном оксиде, облученном ионами Ag⁺ с энергией E_i = 2500 эВ и флуенсом Q = 10¹⁴ см⁻² (GaAs-ox). Толщина зондируемого слоя ~1 нм

| Образцы | Содержание, ат. % | | | | | | Ga/As |
|---------|-------------------|----|-----------------|----|--------------------------------|--------------------------------|-------|
| | Ga | As | As ⁰ | O | Ga ₂ O ₃ | As ₂ O ₃ | |
| GaAs | 55 | 45 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1.2 |
| GaAs-ox | 35 | 0 | 12 | 53 | 88 | ~0 | 2.9 |

цесса модификации оксида включала разрыв химических связей ионами Ag⁺ и диффузию атомов As⁰ из оксидного слоя по радиационным вакансиям.

РУЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Очевидно, исчезновение мышьяка из слоя слабо облученного естественного оксида происходит в диффузионном процессе. Основным механизмом диффузии атомов в твердом теле при относительно низких температурах ($T < 900^\circ\text{C}$), как известно [15, 16], является вакансионный механизм. Поэтому анализ диффузионных процессов в слое естественного оксида GaAs, состоящего после облучения ионами Ag⁺ преимущественно из оксида галлия Ga₂O₃, начнем с этого механизма. Коэффициент диффузии D с учетом радиационных вакансий в этом случае имеет вид [16]:

$$D = D_0 \exp(E_m/kT)(C_{\text{eq}} + C_{\text{rad}}), \quad (1)$$

где D_0 – коэффициент, не зависящий от температуры, характеризующий материал и вычисляемый из первых принципов [16]; E_m – энергия активации миграции атома по вакансиям, $C_{\text{eq}} \sim \exp(-E_f/kT)$ – равновесная концентрация вакансий; E_f – энергия формирования вакансии; k – постоянная Больцмана; T – температура; C_{rad} – концентрация радиационных вакансий, отнесенная к атомной плотности материала.

Особенностью вакансионного механизма в оксиде, по нашему мнению, является невозможность миграции атомов As по вакансиям As и Ga, которые для атомов мышьяка, очевидно, являются ловушками: попадая в эти вакансии, мышьяк с высокой вероятностью химически связывается с кислородом и прекращает миграцию. Вакансионная миграция As в оксиде, предположительно, возможна только по кислородным вакансиям, составляющим ~60% всех вакансий. Общую концентрацию вакансий оценивали с помощью программы TRIM [17]. На рис. 2 показано расчетное распределение по глубине (профиль) плотности вакансий или пар точечных дефектов “вакансия – междоузельный атом”, образованных облучением пластины GaAs со слоем Ga₂O₃ толщиной 2 нм ионами Ag⁺ с энергией E_i = 2500 эВ и дозой Q =

= 10¹⁴ см⁻². Максимум распределения находится в пределах оксидного слоя. Однако полная ширина профиля (~6 нм) превышает толщину этого слоя и захватывает объемные слои GaAs. Из чего можно сделать вывод, что диффузия атомов по вакансиям возможна как к поверхности, так и вглубь объема образца.

При интересующей нас дозе облучения Q = 10¹⁴ см⁻² усредненная плотность вакансий в оксидном слое составляет $C_{\text{rad}} = 1.1 \times 10^{22}$ см⁻³, что на порядок превышает равновесную концентрацию вакансий C_{eq} , которой, в таком случае, можно пренебречь. Значений энергии активации миграции As по вакансиям в Ga₂O₃ в литературе не обнаружено. Значение энергии активации атома в Ga₂O₃ должно быть не меньше, чем в GaAs, поскольку химическая (ковалентная) связь атомов в оксиде более полярная и должна быть сильнее. Поэтому для оценки максимально возможного значения энергии активации миграции As было использовано усредненное значение энергии активации $E_m \sim 0.9$ эВ по вакансиям в GaAs [18, 19]. С использованием этого значения были получены дозовые зависимости коэффициента и длины

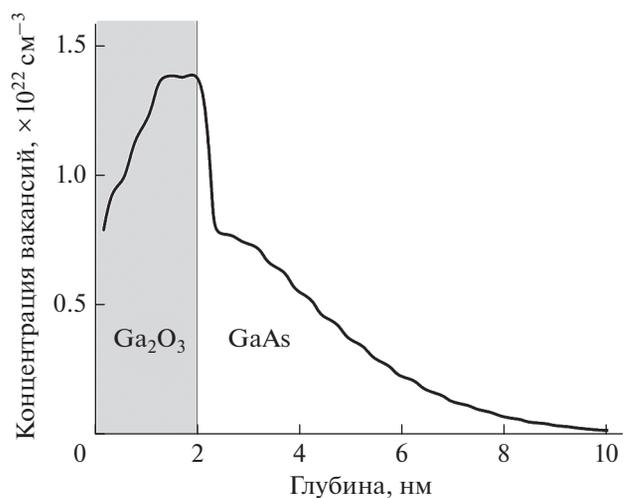


Рис. 2. Распределение вакансий, образованных ионами аргона с энергией E_i = 2500 эВ и флуенсом Q = 3 × 10¹⁴ см⁻² в GaAs, покрытым слоем Ga₂O₃ толщиной 2 нм.

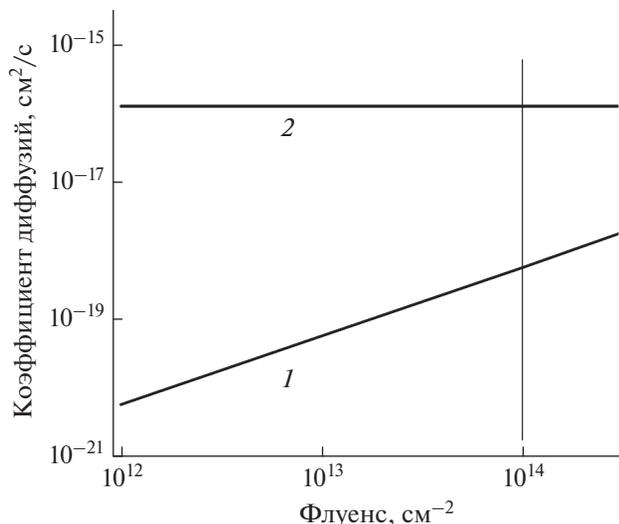


Рис. 3. Зависимость коэффициента диффузии As в Ga_2O_3 от дозы ионного облучения по вакансионному (1) и междуузельному (2) механизмам.

диффузии As за 10 и 60 мин при реализации вакансионного механизма (рис. 3 и 4, кривые 1). Видно, что при флуенсе $Q = 10^{14} \text{ см}^{-2}$ коэффициент диффузии $D_{\text{As}} \sim 0.7 \times 10^{-18} \text{ см}^2/\text{с}$, а диффузионная длина за 10 мин не превышает $L \sim 0.6 \text{ нм}$. Таким образом, расчеты показали, что по вакансионному механизму мышьяк может покинуть оксидный слой (2.0–2.5 нм) не за десятки мин, а за часы, что противоречит результатам эксперимента.

Поскольку только вакансионным механизмом не удастся объяснить исчезновение мышьяка из слоя естественного оксида, рассмотрим возможный альтернативный междуузельный механизм диффузии As в Ga_2O_3 . В общем случае этот механизм является энергетически более выгодным из-за меньшей энергии активации. Однако в GaAs такая междуузельная диффузия не может играть существенной роли при невысоких температурах из-за кристаллической структуры GaAs с плотной упаковкой атомов в условиях, когда размеры атомов сравнимы с межатомными расстояниями [16]. Однако в Ga_2O_3 существуют направления, в которых возможна междуузельная диффузия не только кислорода, но и мышьяка [16]. В условиях высокой концентрации радиационных вакансий более вероятным представляется не чистый междуузельный механизм диффузии, а механизм Франка–Турнбулла [20], являющийся комбинацией междуузельного и вакансионного механизмов. В таком случае коэффициент диффузии может быть вычислен по формуле:

$$D = D_0 \exp(E_m/kT) + D_0 \exp(E_m/kT) C_{\text{rad}}, \quad (2)$$

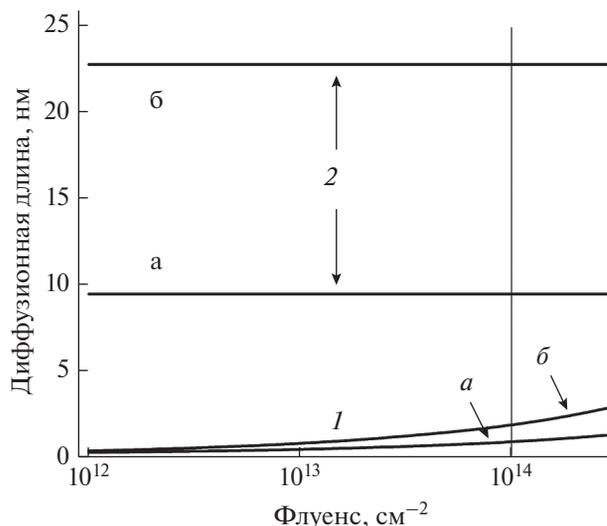


Рис. 4. Зависимость диффузионной длины As в Ga_2O_3 от дозы ионного облучения по вакансионному (1) и междуузельному (2) механизмам за 10 мин (а) и 1 ч (б).

где E_{m1} – энергия активации миграции атома по междуузлиям, необходимая для преодоления междуузельного потенциального барьера. Эта энергия меньше энергии E_m , соответствующей прохождению барьера из узла решетки в соседнюю вакансию. На рис. 5 приведены схемы, иллюстрирующие положение диффундирующего атома и междуузельного потенциального барьера (рис. 5а), а также диффузии атома по механизму Франка–Турнбулла (рис. 5б). Коэффициент диффузии As^0 по междуузлиям в Ga_2O_3 или соответствующую энергию активации E_{m1} найти в литературе не удалось. Поэтому было использовано значение энергии $E_{m1} \sim 0.83 \text{ эВ}$ [21] для междуузельной диффузии атома кислорода в аморфном Ga_2O_3 в предположении, что междуузельные потенциальные барьеры для кислорода и мышьяка примерно одинаковы. Выбранное значение подтверждается данными работы [22], в которой, в частности, была определена энергия активации ($E_{m1} \sim 0.8 \text{ эВ}$) диффузии атома кислорода в Ga_2O_3 , радиационно-поврежденном плотным потоком γ -квантов. При повышении дозы облучения и увеличении концентрации дефектов авторы работы [22] обнаружили понижение энергии активации ($E_{m1} \sim 0.77 \text{ эВ}$). Согласно формуле (2), оценка коэффициента междуузельной диффузии As^0 в Ga_2O_3 при комнатной температуре и энергии активации $E_{m1} \sim 0.83 \text{ эВ}$ составляет $D_{\text{As}} \sim 1.3 \times 10^{-16} \text{ см}^2/\text{с}$, а диффузионная длина за 10 мин достигает $L = 9 \text{ нм}$, то есть превышает толщину оксидного слоя. Коэффициент и длина диффузии атомов мышьяка за 10 и 60 мин при реализации междуузельного механизма показаны на рис. 3 и 4 (кривые 2) соответственно. Близкие параметры характеризуют и диффузию мышьяка в оксиде

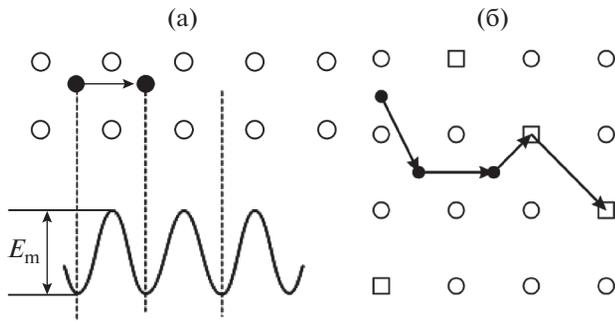


Рис. 5. а – Схематическое изображение междоузельного потенциального барьера кристалла, преодолеваемого атомом при миграции из одного междоузельного положения в другое. Высота барьера E_m соответствует энергии активации миграции атомов. б – Схематическое изображение диффузии атома примеси согласно механизму Франка–Турнбула.

As_2O_3 , составляющем значительную часть исходного естественного оксида до облучения. Однако, как было обнаружено в работе [12], под действием облучения ионами аргона эта химическая фаза почти полностью распадается на атомы мышьяка и кислорода. Следует отметить, что атомы кислорода диффундируют с не менее высокой скоростью. Поскольку полученная диффузионная длина превышает известную толщину слоя оксидной пленки (2.0–2.5 нм), рассмотренная диффузионная модель объясняет быстрое исчезновение мышьяка из облученного оксидного слоя. При увеличении дозы облучения пропорционально увеличивается концентрация вакансий и растет вклад вакансионного механизма. При флуэнсе $Q = 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и выше вакансионный механизм обеспечивает диффузионную длину $L \sim 2.5 \text{ нм}$ и более, которой также оказывается достаточно для удаления элементарного мышьяка из оксидного слоя.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненный анализ диффузионных процессов позволил объяснить исчезновение элементарного мышьяка из слоя естественного оксида GaAs, облученного ионами Ag^+ , и превращение этого слоя в слой широкозонного полупроводника Ga_2O_3 . Было показано, что удаление элементарного мышьяка из слоя естественного оксида происходит преимущественно по механизму междоузельной диффузии, высокая скорость которой по сравнению с вакансионной диффузией особенно заметна при комнатной температуре и относительно небольших дозах облучения ($Q < 10^{15} \text{ см}^{-2}$). Высокая эффективность междоузельной диффузии может влиять и на динамику окисления поверхности GaAs, поскольку этот про-

цесс, как известно, сопровождается образованием элементарного мышьяка.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа поддержана Российским научным фондом (№ 17-19-01200-П).

Конфликт интересов: авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pearton S.J., Yang J., Cary P.H., Ren F., Kim J., Tadjer M.J., Mastro M.A.* // *Appl. Phys. Rev.* 2018. V. 5. P. 011301. <https://doi.org/10.1063/1.5006941>
2. *Baca A.G., Ashby C.I.H.* *Fabrication of GaAs devices.* London, United Kingdom: IET., 2005. <https://doi.org/10.49/PBEP006E>
3. *Schwartz G.P., Gualtieri G.J., Kammlott G.W., Schwartz B.* // *J. Electrochem. Soc.* 1979. V. 126. P. 1737. <https://doi.org/10.1149/1.2128789>
4. *Contour J.P., Massies J., Saletes A.* // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1985. V. 24 P. L563. <https://doi.org/10.1143/JJAP.27.L167>
5. *Ishikawa T., Ikoma H.* // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1992. V. 31. P. 3981.
6. *Hollinger G., Skheyta-Kabbani R., Gendry M.* // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. P. 11159. <https://doi.org/10.1103/physrevb.49.11159>
7. *Surdu-Bob C.C., Saied S.O., Sullivan J.L.* // *Appl. Surf. Sci.* 2001. V. 183. P. 126. [https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(01\)00583-9](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(01)00583-9)
8. *Vilar M.R., Beghdadi J.E., Debontridder F., Artzi R., Naaman R., Ferraria A.M., Botelho do Rego A.M.* // *Surf. Interface Anal.* 2005. V. 37. P. 673. <https://doi.org/10.1002/SIA.2062>
9. *Feng L., Zhang L., Liu H., Gao X., Miao Zh., Wang L., Niu S., Cheng C.* // *Proc. SPIE.* 2013. V. 8912. P. 89120N. <https://doi.org/10.1117/12.2033679>
10. *Mikoushkin V.M., Bryzgalov V.V., Makarevskaya E.A. et al.* // *Semiconductors.* 2018. V. 52. P. 2057. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.03.004>
11. *Mikoushkin V.M., Solonitsyna A.P., Makarevskaya E.A., Novikov D.A.* // *Semiconductors.* 2019. V. 53. P. 1918. <https://doi.org/10.1134/S1063782619140124>
12. *Mikoushkin V.M., Bryzgalov V.V., Makarevskaya E.A., Solonitsyna A.P., Marchenko D.E.* // *Surf. Coat. Technol.* 2018. V. 344. P. 149. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.03.004>
13. *Fedoseenko S.I., Vyalikh D.V., Iossifov I.E., Follath R., Gorovikov S.A., Püttner R., Schmidt J.S., Molodtsov S.L., Adamchuk V.K., Gudat W., Kaindl G.* // *Nucl. Instr. Meth. A.* 2003. V. 505. P. 718. <https://doi.org/10.1007/s00339-008-4916-1>
14. *Briggs D., Seah M.P.* *Practical Surface Analysis by Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy.* N.Y.: John Wiley & Sons, 1983.

15. Mehrer H. // Diffusion in solids. Springer Science & Business Media, 2007. P. 654.
<https://doi.org/10.1007/978-3-540-71488-0>
16. Shaw D. // Atomic diffusion in semiconductors. London and N.Y.: Plenum Press, 1973. P. 607.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4615-8636-4>
17. Ziegler J.F., Manoyan J.M. // Nucl. Instrum. Methods. 1988. V. 35. P. 215.
[https://doi.org/10.1016/0168-583X\(88\)90273-X](https://doi.org/10.1016/0168-583X(88)90273-X)
18. Rim A., Beserman R. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. P. 897.
<https://doi.org/10.1063/1.354884>
19. Wager J.F. // J. Appl. Phys. 1991. V. 69. P. 3022.
<https://doi.org/10.1063/1.348589>
20. Stark J.P. Solid State Diffusion. Malabar, FL: Krieger Publishing, 1983.
21. Heiden A., Bornhofft M., Mayer J., Martin M. // PCCP. 2019. V. 21. P. 4268.
<https://doi.org/10.1039/c8cp06439c>
22. Bobyl A.V., Konnikov S.G., Ustinov V.M. et al. // Semiconductors. 2012. V. 52. P. 814.
<https://doi.org/10.1134/S1063782612060085>

Arsenic Diffusion in the GaAs Oxide Irradiated by Ar⁺ Ions

A. P. Solonitsyna^{1, *}, E. A. Makarevskaya¹, D. A. Novikov¹, V. M. Mikoushkin¹

¹*Ioffe Institute, St. Petersburg, 194021 Russia*

**e-mail: Anna.Solonitsina@mail.ioffe.ru*

A number of arsenic diffusion mechanisms, including radiation-enhanced, interstitial, and mixed (Frank–Turnbull) diffusion ones, were considered to explain the previously discovered ion-stimulated transformation of a natural GaAs oxide layer into a Ga₂O₃ layer at room temperature. Estimating of the diffusion coefficients and lengths made it possible to conclude that the interstitial diffusion mechanism prevails at the fluence $Q < 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ at room temperature. In this case, the coefficient ($D_{\text{As}} \sim 1.3 \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{s}$) and length ($L > 9 \text{ nm}$) of interstitial diffusion are sufficient for elemental arsenic formed under the action of argon ions to be removed from a layer of natural oxide (with a thickness of 2.0–2.5 nm) in 10 min. However, the contribution of the vacancy mechanism increases with increasing the fluence due to an increase in the concentration of vacancies, and the diffusion mechanism becomes mixed. At the fluence $Q > 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, the vacancy mechanism provides the diffusion coefficient ($D_{\text{As}} \sim 0.7 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$) and length ($L > 2.5 \text{ nm}$), which are also sufficient for elemental arsenic to be removed from the oxide layer in 10–20 minutes. It was shown that arsenic diffusion can play an important role in the chemical modification of GaAs oxides even at room temperature.

Keywords: GaAs, arsenic, Ga₂O₃, native oxide, ion irradiation, atomically pure surfaces, radiation-enhanced diffusion, point defects, photoelectron spectroscopy.