

量子化学計算による Si(100)面及び Si(110)面上の結晶成長機構の解析

(早大院) ○石塚茉奈・山口勉功・国吉ニルソン

Analysis of crystal growth mechanism at Si(100) and Si(110) surfaces via quantum chemical calculation (*Grad. Sch. Sci. Eng., Waseda University*)

○Mana Ishizuka, Katsunori Yamaguchi, Nilson Kunioshi

The CVD method is one of the processing technologies used to improve the quality of silicon wafers, and semiconductor substrates. This study focuses on the adsorption/desorption reactions of chemical species (SiCl_2 , H_2 , HCl , etc.) on/from Si(100) surface and Si(110) surface, which has excellent electrical properties, to unravel the epitaxial growth mechanism of silicon crystal using CVD method. The quantum chemical calculation software Gaussian 16 was used in the study. The activation energies and the reaction rate coefficients calculated based on the transition state theory were used as indices for evaluating how easily a reaction proceeds. A novel epitaxial growth route on Si(100) surface was proposed assuming a larger cluster than used in previous studies. The adsorption reactions of SiCl_2 and H_2 molecules on Si(110) surface were analyzed and compared with those on Si(100) surface, suggesting that there is no transition state in the adsorption reaction of SiCl_2 and the adsorption of H_2 molecules may be comparable to that on Si(100) surface.

Keywords : *Chemical Vapor Deposition, Reaction Dynamics, Transition State Theory*

半導体の基板であるシリコンウェーハの品質を担保する加工技術の一つに CVD 法が挙げられる。本研究では Si(100)面と、優れた電気的特性を持つ Si(110)面に気相中の化学種(SiCl_2 、 H_2 、 HCl など) が吸脱着する反応に焦点を当て、CVD 法を用いたシリコン結晶のエピタキシャル成長機構を解明する。

研究には量子化学計算ソフトウェア Gaussian 16 を使用した。また反応の起こりやすさを比較する指標に活性化エネルギーと、遷移状態理論に基づいて算出した反応速度係数を用いた。Si(100)面において先行研究よりも広い表面を想定し、エピタキシャル成長する過程を新たに提示した。また Si(110)面に SiCl_2 分子と H_2 分子が吸着する反応を解析し、(100)面と比較を行った。 SiCl_2 の吸着反応には遷移状態が存在せず、また H_2 分子の吸着は(100)面と同程度である可能性が示唆された。

