

シリコン表面処理プロセスに関する計算化学的検討

○千葉景子¹、磯田直征¹、篠田克己¹、横須賀俊之¹、遠藤 明¹、久保百司¹、
二井啓一²、寺本章伸²、大見忠弘²、宮本 明^{1, 2}

¹ 東北大学大学院工学研究科（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07）

² 東北大学未来科学技術共同研究センター（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04）

【緒言】 近年の半導体デバイスの高集積化に伴い、高精度な表面処理技術が求められている。デバイス製造プロセスにおいて、Si 基板を安定に保つためには表面の水素終端化が最も有効であり、様々な薬液を用いて表面処理が行なわれている。本研究では、高速化量子分子動力学法[1]を用いて Si 表面の水素水による水素終端シミュレーションを行ない、表面反応に注目して解析した。

【計算方法】 水素終端シミュレーションには、当研究室で開発した tight-binding 近似に基づく高速化量子分子動力学プログラム Colors を用いた。Colors では、計算に幾つかのパラメータを用いることで従来の第一原理計算の数千倍の高速計算が可能である。用いたパラメータとしては、イオン化ポテンシャル、Slater-exponent 等があり、これらは密度汎関数法プログラム ADF の結果にフィッティングすることで決定した。図 1 に計算に用いたモデルを示す。基板には Si(100)表面を用いた。また、液相での反応を再現するために水分子の一部を固定し、水素水を表現するために水素ラジカルを加えた。温度 300 K、積分時間 0.1 fs として、2000 ステップのシミュレーションを周期境界条件下で行った。

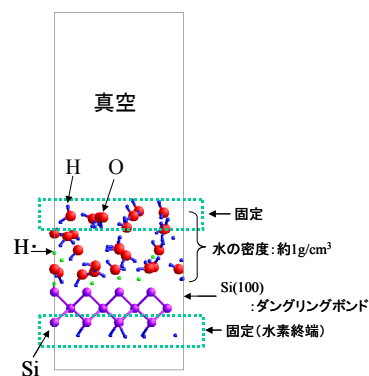


図 1 計算モデル

【結果と考察】 図 2 に表面処理反応のスナップショットを示す。計算ステップが進むにつれて水素ラジカルはダングリングボンドを持つ Si 原子と結合を形成する様子が確認された。電荷の解析から、Si 表面は正に帯電していることがわかった。Si 原子と結合した水素ラジカルは、ほぼ 0 の電荷となり、水分子と相互作用した水素ラジカルは正に帯電した。また、水素ラジカルの軌跡から、ダングリングボンドを持つ Si 原子に接近する様子が観察された。以上のことから、水素終端プロセスのシミュレーションに Colors プログラムが有効であることが示された。発表当日には、電荷や Bond Population の経時変化など、より詳細に解析した結果についても報告する。

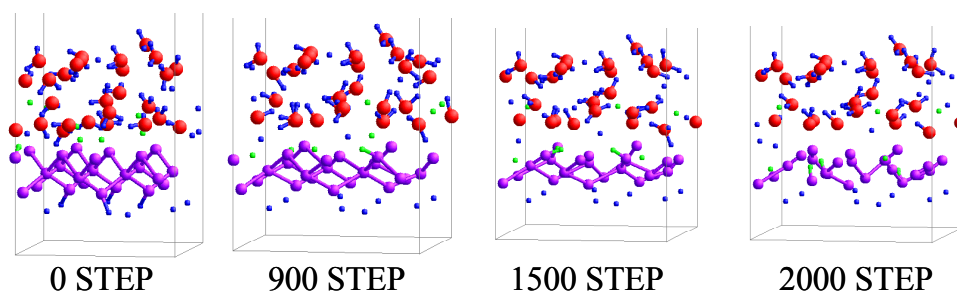


図 2 表面反応のスナップショット

【文献】 [1] M. Elanany et al., J. Phys. Chem. B, 107 (2003) 1518.