

## シリコン結晶成長における素反応の解析と速度定数の評価

(早大理工院) ○石塚茉奈・山口勉功・国吉ニルソン

Analysis and determination of rate coefficients of elementary reactions in the growth mechanism of silicon crystals (*Grad. Sch. Sci. Eng., Waseda University*)

○Mana Ishizuka, Katsunori Yamaguchi, Nilson Kunioshi

The epitaxial growth method is one of the special processing techniques used to improve the quality of silicon wafers. This method involves vapor phase growth of a thin film of single-crystal silicon on the surface of a wafer. Although this method's crystal growth mechanism has been reported before, there is still room for further consideration. In this study, we show the adsorption/desorption of chemical species ( $\text{SiCl}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{HCl}$ , etc.) at the silicon surface from/into the gas phase. The quantum chemical calculation software Gaussian 09 and Gaussian 16 were used in the study. The activation energy and the reaction rate coefficient calculated based on transition state theory were used as indices for comparing the ease of reaction. The results suggest the existence of pathways that differ from the mechanisms reported in previous studies. *Keywords* : Reaction kinetics, Chemical Vapor Deposition, Simulation, Quantum chemical calculation, Transition State Theory

シリコンウェーハの品質を向上させるために用いられる特殊加工技術の一つに、エピタキシャル成長法が挙げられる。これはウェーハの表面に単結晶シリコンの薄膜を気相成長させる方法である。この方法を用いた結晶成長機構は以前から報告されているものの、未だ考慮の余地がある。本研究では結晶成長機構のなかでも、気相中の化学種 ( $\text{SiCl}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{HCl}$  など) がシリコン表面に吸脱着する過程を示す。研究には量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09, Gaussian 16 を使用した。反応の起こりやすさを比較する指標には、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。その結果、先行研究で報告されている機構とは異なる経路が存在することが示唆された。

