

Si(100) 表面での水素吸着 kinetics

Kinetics of hydrogen adsorption on Si(100) surface

山形大工¹, 九州工大工² ○成田 克¹, 稲永 征司², 並木 章²Yamagata Univ.¹, Kyushu Inst. Tech.² ○Yuzuru Narita¹, Shoji Inanaga², Akira Namiki²

E-mail: narita@yz.yamagata-u.ac.jp

[はじめに] Si(100) 表面での水素吸着と脱離現象は半導体プロセスにおいて非常に重要な反応過程であり, これまで精力的に研究が行われてきた [1-3]. 現在, 水素は隣り合う 2 つのダイマー間で吸着 (脱離) が起こる inter-dimer モデルが支持されている. この inter-dimer モデルでは, 2 つのダイマー上の水素配置によって異なる 3 つのパス (2H, 3H, 4H) が存在する. Dynamics において, 各吸着/脱離パスでは detailed balance が成立している [4,5] ことが示されたが, kinetics については不明な点が多く, 我々はこれまで特に脱離 kinetics についての研究を行ってきた [6,7]. Dynamics 実験では, 0.8ML 以下の被覆率で脱離は 2H パスが優先的に生じるが, 吸着では吸着バリアの無い 4H パスが優先的に生じることが示されている. そこで我々は, これらの実験事実を反映した 2H 脱離と 4H 吸着を同時に満たすモデルを提案した [7]. このモデルでは, 2H 脱離サイトと 4H 吸着サイトはどちらも SOD/SOD であることに着目し, その SOD/SOD は DOD/UOD の DOD から UOD への水素拡散によって形成されるというモデル (DU pathway) である. これに一般的な 2H 反応 (SS pathway) を加えることで, 昇温脱離スペクトルを数値計算によって見事に再現した [7]. しかし, このモデルを用いた吸着 kinetics の観点での吸着確率 S -被覆率 Θ カーブはまだ計算されていない. そこで本研究では, S - Θ カーブの計算と, 実際に測定された実験結果とを比較し, 我々が提案しているモデルが吸着 kinetics においても成立していることを示す.

[吸着モデルと計算結果] 吸着確率 S は

$$S = S^{\text{DU}} + S^{\text{SS}} \quad (1)$$

で表現される. ここで, S^{DU} は DU path-

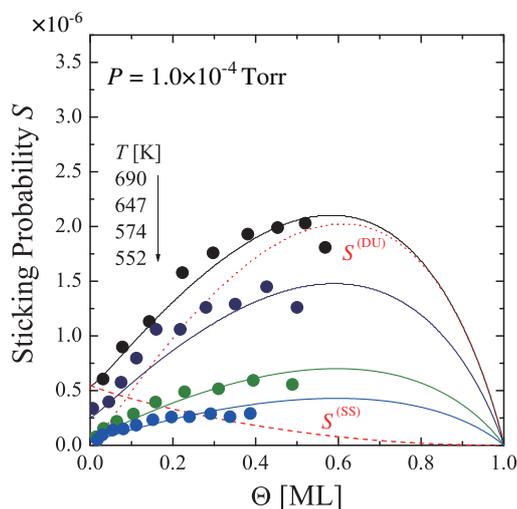


図 1: 吸着確率 S -被覆率 Θ カーブ. ドットが実験結果 [8] を, 実線が計算結果を示す.

way での, S^{SS} は SS pathway での吸着確率を表し, $S^{\text{DU}} = \sigma^{\text{DU}} \xi(T) \theta_{\text{DU}}$ と $S^{\text{SS}} = \sigma^{\text{SS}} \exp(-E_{\text{ads}}^{\text{SS}}/k_{\text{B}}T) \theta_{\text{UU}}$ で記述される. 式中の θ_{DU} と θ_{UU} は DOD/UOD と UOD/UOD の被覆率を示し, 格子ガスモデル [8] によって各 Θ 毎に計算した.

図 1 に計算結果を示す. 図中のドットは Zimmermann 等によって測定された実験結果 [8] を, 実線は本研究での計算結果を示す. この図から明らかのように, 脱離 kinetics から出発して我々が提案した反応モデルが吸着 kinetics においても成立していることが分かる. つまり吸着は 4H パスで, 脱離は 2H パスで進行することを意味する. 詳細については当日報告する.

[参考文献]

- [1] A. Namiki, Prog. Surf. Sci. **81** (2006) 337.
- [2] M. Dürr *et al.*, Surf. Sci. Rep. **61** (2006) 465.
- [3] W. Brenig *et al.*, Prog. Surf. Sci. **83** (2008) 263.
- [4] M. Dürr *et al.*, PRL **86** (2001) 123.
- [5] T. Matsuno *et al.*, JCP **122** (2005) 024702.
- [6] Y. Narita *et al.*, Surf. Sci. **603** (2009) 1168.
- [7] Y. Narita *et al.*, Surf. Sci. **605** (2011) 32.
- [8] F. M. Zimmermann *et al.*, PRL **85** (2000) 618.