ANN ポテンシャルを用いた Si(100)表面近傍の原子空孔クラスターに関する計算

Calculation of atomic vacancy clusters near Si(100) surface using ANN potential

岡山県大院情報系工1,名古屋大院工2,岡山県大情報工3

○(M2)佐藤 正義¹,横井 達矢²,神山 栄治³,野田 祐輔³,末岡 浩治³

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ. 1,

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.²,

Faculty of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Pref. Univ.³

°M. Sato¹, T. Yokoi², E. Kamiyama³, Y. Noda³, K. Sueoka³

E-mail: satopu0112@gmail.com

半導体 Si ウェーハの表面近傍に存在する原子空孔 (V) クラスターについて,その物性を理解することは,Si ウェーハの高品位化のために重要である。V クラスターに関する研究では,密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算が広く使われている。しかし,大規模モデルが必要な表面近傍の V クラスターを扱う DFT 計算は,計算コストの観点から極めて困難となっている.

最近、DFTの計算結果をよく再現し、かつ、計算コストが低い人工ニューラルネットワーク (ANN) ポテンシャルの先行研究が報告されている[1]. 我々は、前回までに Si(100)表面用の ANN ポテンシャルを開発し[2]、さらに大規模な Si(100)表面モデルが計算可能であることを報告した。今回、Vを含む表面モデルの計算結果を学習データに加えた ANN ポテンシャルを作成し、表面構造を持つ 35 個の Vからなる Vクラスター (V35) の安定性について計算を行った。

計算に用いた Si(100)表面モデルと導入した V_{35} クラスターを図 1 に示す。モデルの原子数は 8,192 個,厚さは 4.21 nm,表面積は 37.70 nm² である。ANN ポテンシャルで計算した, V_{35} クラスターを含む Si(100)表面モデルの計算結果を図 2(a)表面近傍,2(b)内部として示す。図 2(b)の結果と比較して,図 2(a)では V_{35} クラスター周囲の表面側の Si 原子が大きく変位していることがわかる。また,図 2(a)では V_{35} クラスターの直上の表面ダイマー構造が乱れていることもわかる。さらに,形成エネルギーは表面直下では 34.91 eV,内部では 36.69 eV であり,表面直下の方が 1.78 eV 低かった。これは,表面近傍の Si 原子の方が結合が弱く,V クラスターが形成されやすいためと考えられる。なお,内部における形成エネルギーは,バルクでの先行研究(約 36 [eV])[3]と近い値を示した。計算結果の詳細は当日報告する。

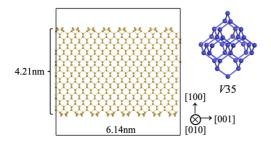


Fig. 1 Structural models of Si(100) surface and V_{35} cluster.

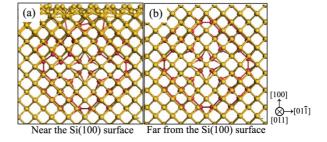


Fig. 2 A V_{35} cluster (a) near the Si(100) surface and (b) far from the Si(100) surface.

参考文献

- [1] T. Yokoi, Y. Noda, A. Nakamura, and K. Matsunaga, *Phys. Rev. Mater.* 4 (2020) 014605.
- [2] 佐藤他, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 26a-E104-5 (2022).
- [3] T. Ushiro, et. al., J. Phys. Chem. C 125 (2021) 26869-26882.