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

^O(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

^oM. 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 V₃₅ 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,V₃₅ 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V₃₅ 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V₃₅ 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.