

# DFT simulation for Si etching using Pt catalyst and pure water

Osaka university, Department of Precision Engineering Assistant Professor Daisetsu Toh

**目的** 純水とPtを使用したSi(100)のエッチング機構の解明

**内容** 申請者は純水中でPtとSiを接触させ相互に運動させることでエッチングが進行し、ステップテラス構造を持つ原子レベルの平滑面を取得している。さらに本エッチング反応は液中の溶存酸素を抜いた脱気水中でも進行することを見出し、従来報告されている金属アシストエッチングとは別物であることが示唆された。そこで申請者は本反応がPt上での水分子の解離吸着(IS1→IS2)・生成されたOH基によるステップ端Si原子の過配位構造の形成(MS)・Siのバックボンドの切断(FS)からなる間接的な加水分解反応であると仮定し、本反応におけるエネルギー障壁の算出を実施した。

**結果** IS1(レプリカNo.1), IS2 (レプリカNo.2), MS (レプリカNo.3), FS (レプリカNo.12)のトータルエネルギーはIS1を基準とするとそれぞれ, 0 eV, 0.42 eV, 0.10 eV, 0.16eVとなった。またMS→FSにおけるエネルギー障壁高さは0.84 eVとなりバックボンドの切断は室温でも十分に進行するといえ申請者の想定した反応が実系でも進行することが示唆された。今後IS1→IS2, IS2→MSにおけるエネルギー障壁の算出を進める。

## 利用した計算機

SQUID 汎用CPUノード群	
ノード時間	2742 時間
使用メモリ	26 GB
並列化	4ノード 並列

反応経路探索結果

