

4P120

## $H^+$ - $SiH_4$ 衝突による電子捕獲ダイナミクス

(九州大院・理<sup>1</sup>, 国際基督教大院・理<sup>2</sup>, Bergische Universität Wuppertal<sup>3</sup>)

○深田 翔<sup>1</sup>, Yan Li<sup>3</sup>, Lukas Pichl<sup>2</sup>,

Heinz-Peter Liebermann<sup>3</sup>, Robert Buenker<sup>3</sup>, 季村 峯生<sup>1</sup>

### [序論]

イオン - 分子衝突による電子捕獲過程の研究は、イオン - 原子衝突の場合に比べ非常に少なく、様々な衝突の断面積、反応速度定数などを網羅したデータベースの構築が急がれている。我々はこれまでイオン - 多原子分子衝突による電子捕獲・イオン化の研究を行ってきた。特に様々な炭化水素分子標的の研究から、keV衝突エネルギー領域での、(i)標的分子の振動励起効果、(ii)同位体効果、(iii)異性体効果、(iv)分子の配向効果の重要性を指摘してきた。この分子標的研究プロジェクトの一貫として、今回はkeV領域の入射エネルギーを持つプロトンとシラン( $SiH_4$ )の衝突による電子捕獲過程について調べた。 $SiH_4$ ガスはプラズマプロセスガスとして、イオン照射によるエッチングや薄膜生成技術の基礎となっている。また、現在半導体製造においては、生じた $SiH_4$ ガスは空気中に排出されているが、宇宙から飛来する光・電子・イオンや、大気中の $N_2$ ・ $O_2$ ・ $CO_2$ などとの反応による大気への影響もわかっていない。さらに、最近では $SiH_4$ ガスによる核融合炉中のプラズマモデリングの実験も行われており、プラズマ(陽子、電子)と $SiH_4$ 分子との衝突過程の知見が重要となっている。

### [計算手法]

$H^+$  -  $SiH_4$ 衝突過程のダイナミクス計算には半古典論的分子軌道緊密結合(Molecular Orbital Close-Coupling; MOCC)法<sup>[1]</sup>を用いた。この方法では核の運動は古典力学で記述し、電子状態は全て量子化学的に求めている。今回考慮した衝突エネルギーは60 eV ~ 10 keVの範囲なので、入射粒子の軌道は直線軌道と仮定した。この衝突エネルギー領域では、衝突時間に比べ標的分子の振動回転運動は遥かに遅いため、衝突中標的分子の原子核の配置が平衡核間配置に保たれると言う、固定核配置近似を採用した。その上で今回はプロトンの入射軌道について、 $SiH_4$ 分子のSi-H結合に沿って入射する場合( $C_{3v}$ )と、H-Si-H角の二等分線に沿って入射する場合( $C_{2v}$ )の2通りの入射軌道考えた。各入射方向における $[H^+ + SiH_4]$ 複合系の断熱ポテンシャルと非断熱カップリング項はBuenker教授らのグループが開発した量子化学計算法、MRD-CI(Multireference single- and double-excitation Configuration Interaction)法<sup>[2,3]</sup>で求めた。ここで得られた断熱ポテンシャルと非断熱カップリングをインプットデータとして散乱ダイナミクス計算を行った。

## [結果]

今回用いた系の断熱ポテンシャルを入射粒子と標的分子間の距離の関数として下図に示す。Fig.1(a)はプロトンがSiH<sub>4</sub>分子のSi-H結合に沿って入射する場合、(b)はプロトンがH-Si-H角の二等分線に沿って入射する場合のポテンシャルである。各々の入射軌道においてFig.1に示したすべての状態を考慮したMOCC計算を実行し、電子捕獲および電子励起断面積を求めた。本研究は電子捕獲と衝突励起の衝突ダイナミクスの知見と、それぞれの状態についての衝突断面積の理論値を与えることができる。今回の発表では、以前Janevらが行った計算結果<sup>[4]</sup>との比較・検討を行い、さらにkeV領域の衝突エネルギーにおける標的分子の配向による効果について議論する。

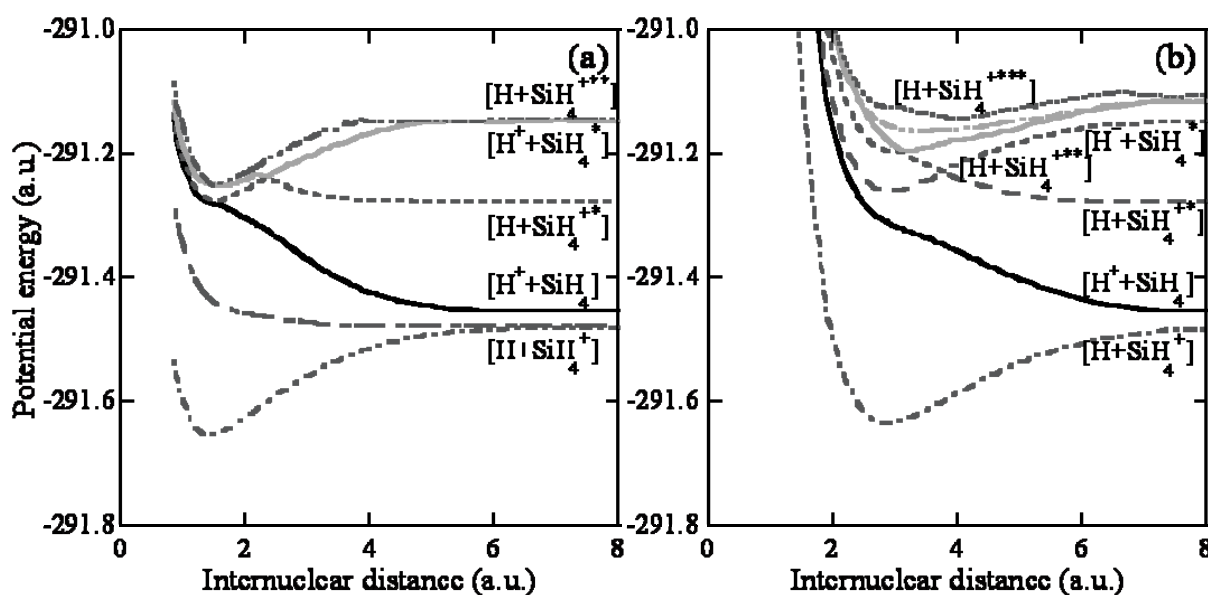


Fig.1 衝突における[H<sup>+</sup> + SiH<sub>4</sub>]系の断熱ポテンシャル曲線 (a)プロトンがSi-H結合に沿って入射する場合, (b)プロトンがH-Si-H角の二等分線に沿って入射する場合

## [参考文献]

- [1] M.Kimura and N.F.Lane, in *Advances for Atomic, Molecular and Optical Physics*, edited by D.R.Bates and B.Bederson (Academic, New York, 1989), **26**, 76.
- [2] R.J.Buenker, *Proceedings of the Workshop on Quantum Chemistry and Molecular Physics*, edited by P.G.Burton, University of Wollongong Press, Wollongong, (1980), 1.5.1.
- [3] S.Krebs and R.J.Buenker, *J.Chem.Phys.*, **103**, 5613,(1995)
- [4] Ratko K.Janev, Detlev Reiter, *Collision Processes of Hydrocarbon Species in Hydrogen Plasmas:III. The Silane Family*(Institute for Plasmaphysik, EUROATOM Association,2003)