

# ナノスケールのスリット内への液体浸入に関する分子動力学解析 (第 2 報: 残留ガスの影響)

## Molecular Dynamics Analysis on the Liquid Infiltration into Nanoscale Slit (2nd Report: Effects of Residual Gas)

阪大院工<sup>1</sup>, オルガノ<sup>2</sup> ○山口 康隆<sup>1</sup>, 中岡 聡<sup>1</sup>, 川上 雅之<sup>2</sup>, 矢野 大作<sup>2</sup>, 山中 弘次<sup>2</sup>  
Osaka Univ.<sup>1</sup>, Organo Corp.<sup>2</sup>, ○Yasutaka Yamaguchi<sup>1</sup>, Satoshi Nakaoka<sup>1</sup>, Masayuki Kawakami<sup>2</sup>,  
Daisaku Yano<sup>2</sup>, Koji Yamanaka<sup>2</sup>

E-mail: yamaguchi@mech.eng.osaka-u.ac.jp

**はじめに** 半導体デバイスの微細化に伴い, その線幅は現状の数十ナノメートルから更に微細化するとみられる. これらの製造プロセスにおいても内部の不純物を除去する洗浄行程が必要となるが, トレンチ内に洗浄液体である水を浸入させる過程を考えた場合, これを連続体を前提とする流体力学の観点から解析することは困難である. 本研究では, これらナノメートルオーダーのトレンチ内部の液体挙動の解析を目的とした分子動力学シミュレーションを行っており, 前報<sup>1)</sup>において, 単純化した固体壁面モデル上における水の濡れ性とスリットへの浸入の可否の関係と内部での水分子の拡散挙動, および浸入する場合の速度について数ナノメートルのスケールでも連続体力学から予想される挙動と大きくは矛盾しないことを示した. 本報では新たに, スリット内に残留したガスの影響についての結果を示す.

**計算モデル** 計算系は前報<sup>1)</sup>をとほぼ同様であり, 図 1(a)に示すように左右と奥行方向に周期境界条件を課した系内に, スリットを有する固体壁面上と水の液相を配置し, 上部から一定の外圧を与える. 水分子中の酸素原子と壁面原子(wall)間の相互作用に L-J ポテンシャルを仮定し, そのポテンシャル深さについて相互作用パラメータ  $\eta$  を用いて  $\varepsilon_{fluid-wall} = \eta \varepsilon'_{fluid-wall}$  と表すことで濡れ性を表現した. これに加え, 本研究では液膜がスリットを覆った状態において単原子分子で構成されるガス分子数個をスリット内に封入することで残留ガスの効果を解析した. なお固体面の中間層を Langevin 法により温度 300 K 一定に制御した.

**残留ガスのシミュレーション** 図 1(b)に親水性の壁面(静的接触角約 60 度)におけるスリットへの水の浸入の結果を示す. 親水性の場合, スリット内部は表面張力による Laplace 圧により 100 気圧以上に圧縮されるため, 実在気体である残留ガスは図 1(b-i)に示すように速やかに水に溶解し, 水中を拡散する過程で上部に至るとそこで気体として外部に溶出することが分かる.

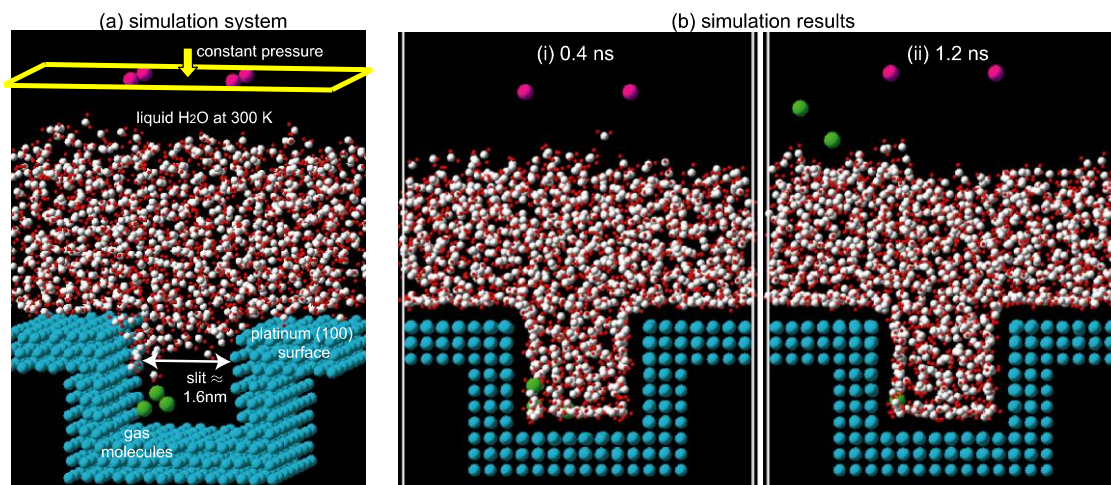


Fig.1 (a) Simulation system of water film on a solid wall with nanoscale slit with residual gas molecules, and (b) simulation results of gas dissolution in water.

1) 山口他, 応物講演会第 73 回応用物理学会学術講演会 28p-G8-10.