

SiO₂ の固体壁面近傍における 水およびアルコールの挙動の分子動力学解析

Molecular Dynamics Analysis on the Microscopic Behavior of Water and Alcohol near SiO₂ Surface

阪大院工¹, オルガノ² °中岡 聡¹, 山口 康隆¹, 川上 雅之², 矢野 大作², 山中 弘次²

Osaka Univ.¹, Organo Corp.², °Satoshi Nakaoka¹, Yasutaka Yamaguchi¹,

Masayuki Kawakami², Daisaku Yano², Koji Yamanaka²

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、線幅の数十ナノメートル以下への微細化が見込まれているが、このサイズでの製造プロセスにおいてもなお、洗浄液体である水をトレンチ内に浸入させることで内部を洗浄する行程が必要となる。これは連続体を前提とする流体力学を用いた理論の限界に近いことから、本研究では、これまで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きた^{2,4)}。既報^{2,3)}において、FCC 構造の単純な固体壁面を用い、また水分子中の酸素原子と壁面原子間の相互作用に L-J ポテンシャルを仮定し、そのポテンシャル深さをパラメータとしてモデル壁面上における水の濡れ性を表現することで、スリットへの浸入の可否、内部での水分子の拡散、浸入速度、および残留ガスの影響について解析した。その結果、接触角やラプラス圧といった効果を勘案すると、連続体解析の限界に近いスケールではあるものの、流体力学やヘンリーの法則などマクロスケールの理論から導かれる結論と大きくは矛盾せず、少なくとも現象予測の段階ではこれらの知見を活用すべきであることを示した。一方で、単純なモデル壁面においても、固体のごく近傍の吸着層ではバルクの液体と大きく物性が異なり、この効果はマクロスケールでは考慮されていないことが示唆された。そこで前報⁴⁾では、固体壁面を単純なモデルから半導体洗浄過程を前提とした SiO₂ の固体面に変更し、平面的な固体表面上の水の挙動を解析した。その結果、OH 基で終端した(111), (100), (110)面において水の濡れ広がり挙動が異なることが分かり、これが OH 基の表面密度と相関を持つことが分かった。本報では、水に加えてアルコール分子を導入し、それらの挙動を解析した。

計算モデル 図 1 は本研究で解析の対象とする水および IPA が OH 基で終端した SiO₂ (111)面に接したときの様子を表す。水と IPA はいずれも表面の OH 基と水素結合を作り、壁面近傍に吸着層を形成するが、図 1 に示したように水と比較して IPA はより明確な層構造を作るため、壁面近傍における IPA の拡散性の変化は水よりも大きく現れると考えられる。

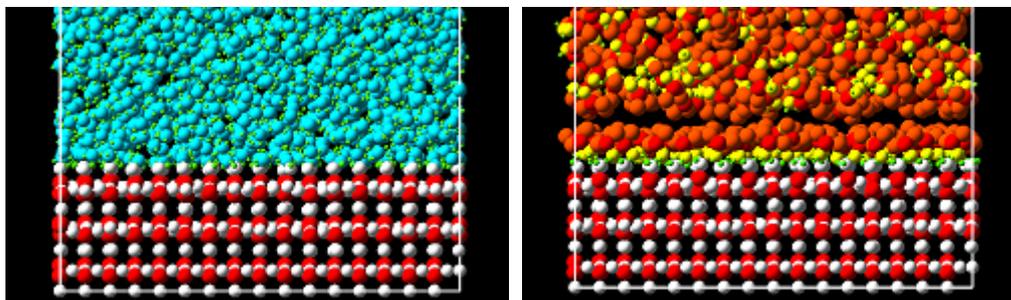


Fig. 1 Simulation systems of (left) water and (right) IPA liquid on OH-terminated SiO₂ (111) solid surface.

- 1) K. Fujiwara, et al., *Nanoscale & Microscale Thermophys. Eng.*, vol.17-1, pp.1-9 (2013).
- 2) 山口他, 第 60 回応用物理学会春季学術講演会, 28p-G8-10 (2013).
- 3) 山口他, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 16p-C11-3 (2013).
- 4) 中岡他, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会, 19a-D9-2 (2014).