

SiO₂ の固体壁面近傍における水の挙動の分子動力学解析

Molecular Dynamics Analysis on the Microscopic Behavior of Water 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、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。このサイズの製造プロセスにおいてもなお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が浸入す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¹⁾。本研究では、図 1(a)に示すように、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いる。既報²⁾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、浸入速度について解析した。また前報³⁾ではスリット内に残留した気体は、水の浸入に伴う Laplace 圧により 100 気圧以上に圧縮され速やかに水に溶解し、液体内部での拡散を経て外部に排出されることが分かり、一般的な気体分子であればその影響は洗浄過程に大きく影響を与えないことが示唆された。これらの結果より、モデル壁面上の水の挙動は、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が示された。本報では、固体壁面をこれまで用いた単純なモデルから、半導体洗浄過程を前提とした SiO₂ の固体面に変更して、表面上の水の挙動を解析した。

計算モデル 図 1(b)は本研究のシミュレーションで用いる SiO₂ 結晶の(111), (100), (110)面の概要である。終端の官能基などを示していないが、図 1(a)で示した FCC の固体壁面と比較して、凹凸が明確で構造も複雑であり、水が接した場合に、単純に壁面方位に依存した濡れ性の違いのみならず、壁面付近での水分子の拡散性にも影響が現れると考えられる。

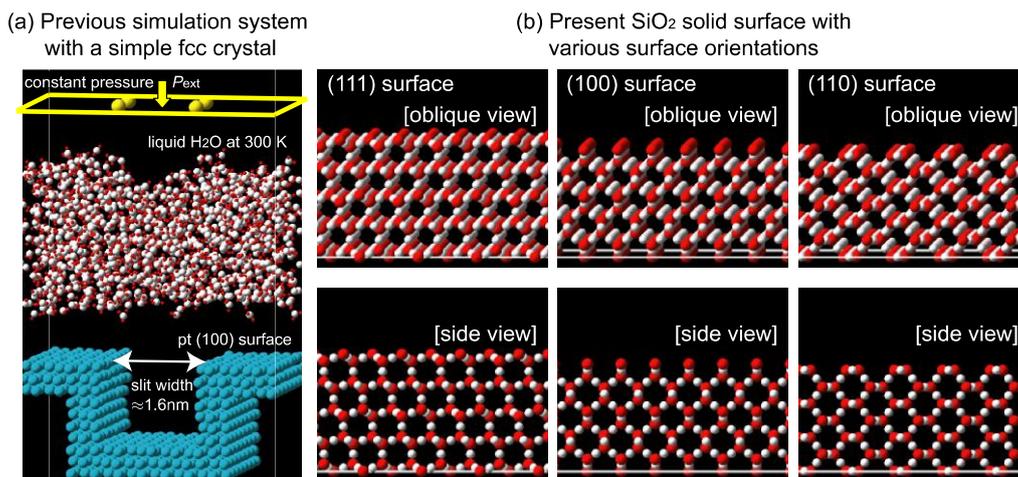


Fig. 1 (a) Previous simulation system of water film on a fcc solid wall with nanoscale slit, and (b) present SiO₂ solid surface with various surface orientations.

- 1) K. Fujiwara, et al., *Nanoscale & Microscale Thermophys. Eng.*, vol.17-1, pp.1-9 (2013).
- 2) 山口他, 応物講演会第 74 回応用物理学会学術講演会, 28p-G8-10.
- 3) 山口他, 応物講演会第 75 回応用物理学会学術講演会, 16p-C11-3.