

SiO₂の固体壁面における水およびアルコールの吸着挙動の分子動力学解析

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

°中岡 聡¹, 山口 康隆¹, 川上 雅之², 矢野 大作², 山中 弘次² (1. 阪大工, 2. オルガノ)

°Satoshi Nakaoka¹, Yasutaka Yamaguchi¹,

Masayuki Kawakami², Daisaku Yano², Koji Yamanaka² (1. Osaka Univ., 2. Organo Corp.)

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

はじめに 半導体デバイスの微細化にともない、製造プロセスにおいて線幅が十数ナノメートル以下という微細な構造の洗浄が必要であり、トレンチへの水の浸入、IPAによる水の置換、IPAの乾燥などの工程が繰り返行われている。このような微細構造中では連続体を前提とする流体力学の理論の限界に近いことから⁽¹⁾、著者らはこれまでに分子動力学シミュレーションを用いてナノメートルオーダーでの液体挙動の解析を行ってきた⁽²⁻⁴⁾。既報^(2,3)において、FCC構造の単純な固体壁面を用い、トレンチへの液浸入の可否や残留ガスの影響について解析したが、その結果は連続体解析の限界に近いスケールではあるものの、流体力学に接触角やラプラス圧、ヘンリーの法則などのマクロの理論を加えて予想されるもの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、固体のごく近傍の吸着層では液体の物性がバルクと異なり、この効果はマクロの理論だけでは考慮できないことが示唆された。また前報⁽⁴⁾では、OH基で終端したSiO₂の(111)面上における水やアルコール分子の挙動の解析を行った。その結果、エタノールとIPAは表面のOH基と水素結合することによって比較的安定な層構造を形成するためそこでの分子の交換が少ないのに対して、水とメタノールは表面近傍であっても分子が拡散し、入れ替わりが頻繁に起きることを示した。また、水とアルコールを混合した場合、エタノール、IPAが作る層構造が水の存在により崩れることを示した。本報では半導体の乾燥工程を主題とし、水とアルコールの乾燥過程および乾燥後の表面に吸着した分子の挙動を解析した。

計算モデル 図1(a)は本研究で用いるシミュレーション系の概要である。初期状態としてSiO₂に接するIPAの液膜を用意し、系の上端に達した分子を計算から取り除くことによって、真空中のIPAの蒸発を模擬する。この条件下でしばらく時間の経った表面付近の様子を図1(b)に示す。表面のOH基とIPAのOH基とが水素結合を形成するため、真空中であっても表面へのIPAの吸着が観察される。

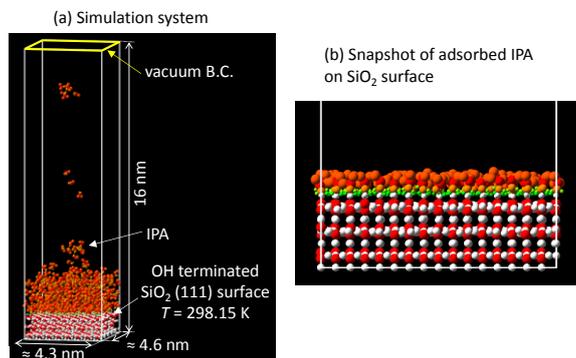


Fig. 1 (a) Simulation system of IPA film on SiO₂ (111) surface with vacuum boundary condition, and (b) snapshot of adsorbed IPA on the surface.

- 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75回応用物理学会秋季学術講演会, 17p-A14-11 (2014).