

SiO₂ 固体壁面上における IPA による水の置換の分子動力学解析

Molecular Dynamics Analysis on the Behavior of Water

Detached by IPA on SiO₂ Surface

阪大工¹, オルガノ² °林 拓弥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, °Takuya Hayashi¹, Yasutaka Yamaguchi¹,

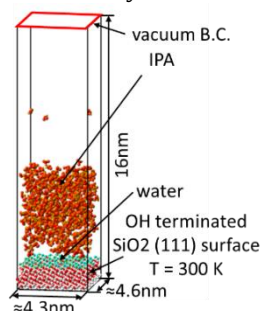
Masayuki Kawakami², Daisaku Yano², Koji Yamanaka²

E-mail: hayashi@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、製造過程において必要となる洗浄工程では、線幅が十数ナノメートル以下の微細な構造に対しトレンチへの水の浸入、IPA による水の置換、IPA の乾燥などが繰り返し行われている。このスケールはマクロの連続体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⁾。解析の初期⁽²⁾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、その結果は前述の限界に近いスケールではあるものの、マクロの理論を外挿して予想されるものと大きくは矛盾せず、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、マクロの理論の範疇から逸脱する部分として、固体近傍の吸着層では液体の物性がバルクと異なることが分かった。これを踏まえ、引き続き OH 基で終端した SiO₂ の(111)面上における水やアルコールの挙動の解析を行った^(3,4)。その結果、エタノールと IPA 分子は表面の 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、前報⁽⁴⁾では半導体の乾燥工程を念頭に、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。本報では新たに水-IPA の置換挙動のシミュレーションを行った。

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 OH 基で終端した SiO₂ の(111)面上に水の吸着層を用意し、その上部に IPA の液膜を配置する。さらに、系の上端に達した水分子を計算から取り除くことによって真空中の水の蒸発を模擬する。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。時間経過後の系内の水の様子を図 1(b)に示す。図 1(b)より、SiO₂ 表面に吸着していた水が置換されていく様子が観察される。

(a) Simulation system



(b) Snapshot of detached water



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

- 1) K. Fujiwara, et al., *Nanoscale & Microscale Thermophys. Eng.*, vol.17-1, pp.1-9 (2013).
- 2) 山口他, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 16p-C11-3 (2013).
- 3) 中岡他, 第 75 回応用物理学会秋季学術講演会, 17p-A14-11 (2014).
- 4) 中岡他, 第 76 回応用物理学会秋季学術講演会, 13p-1B-7 (2015).