J05201

SiO₂ 壁面構造が水の凝固現象に及ぼす影響に関する分子動力学解析Molecular dynamics study on effects of SiO₂ wall structure on solidification of water molecules○正 内田 翔太^{*1,2}, 藤原 邦夫^{*2,3}, 芝原 正彦^{*2}Shota UCHIDA ^{*1,2}, Kunio FUJIWARA ^{*2,3} and Masahiko SHIBAHARA ^{*2}^{*1} 株式会社 SCREEN ホールディングス SCREEN Holdings Co., Ltd.,^{*2} 大阪大学 Osaka University^{*3}(国研)科学技術振興機構 JST, PRESTO**Key Words** : Non-equilibrium molecular dynamics, Solidification, Solid-liquid interface

半導体デバイスの微細化に伴い,その製造工程ではナノメートルスケールで現象を制御する必要が生じている.特に半導体洗浄工程の一つであるウェット洗浄工程においては,ナノメートルスケールに微細化した半導体パターンにダメージを与えることなく異物のみを取り除く必要がある.しかし,パターンの微細化に伴う脆弱化により従来の洗浄方式ではパターンにダメージを与えることなく異物のみを除去することは困難となっている⁽¹⁾.近年では凝固を用いた洗浄方式が提案されているが,微視的な観点において半導体パターンなどの固体壁面近傍での凝固状態や凝固現象が固体壁面に与える影響については不明な点が多い.そこで本研究では, SiO₂ 壁面上での水の凝固状態を明らかにすることを目的とし,結晶とアモルファスの SiO₂ 壁面上の水氷共存系に対して非平衡分子動力学解析を行い,壁面近傍の凝固過程において壁面構造が凝固現象に与える影響を調査した.

本研究では SiO₂ 壁面上に水氷共存系を配置した系を用いた.結晶 SiO₂ 表面の面方位を(100)面とし,表面 Si 原子を 2つの OH 基で修飾した.アモルファス SiO₂ 壁面は昇温による融解後に冷却し,表面の結合手に OH 基を修飾し作成した.水分子モデルを TIP4P/2005, SiO₂ 壁面を Tersoff ポテンシャルで表現し,水-SiO₂ 壁面間の相互作用ポテンシャル関数として 12-6 Lennard-Jones ポテンシャルを用いた.壁面の最下層を固定領域とし,固定領域の直上の領域を phantom 分子層とし Langevin 法で温度制御を行った.計算手順として,最初に 1ns 間で 1K から 233K まで系全体を昇温(Nose-Hoover 法)し,その後液体分子を温度制御せずに 1ns 間の緩和計算を実施した.その後,壁面と氷上側領域を 233K に制御し冷却することで水分子を凝固させた. SiO₂ と水の数値積分のための時間刻み幅をそれぞれ 0.1fs, 2.0fs とし RESPA 法を用いた.計算にはパッケージソフトウェア LAMMPS⁽²⁾を用いた.

図 1 に計算に用いた壁面構造(結晶とアモルファス)を示し,図 2 に結晶壁面上での凝固過程の一例を示す.

Fig. 1 SiO₂ wall structures.

Fig. 2 Snapshots of a solidification process.

文 献

- (1) Uchida, S., Fujiwara, K., and Shibahara, M., “Molecular Dynamics Study of Interactions between the Water/ice Interface and a Nanoparticle in the Vicinity of a Solid Surface”, *Nanoscale Microscale Thermophysical Engineering*, Vol. 24, No. 2 (2020), pp. 53-65
- (2) Plimpton, S., “Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1 (1995), pp. 1-19.