水素化アモルファスシリコンの 表面酸化起因真性応力の分子動力学解析[†]

田村 陽平* 高本 聡* 今泉 俊介*
齋藤 玲子** 伊藤 祥代** 波田野 明日可* 泉 聡志***

Molecular Dynamics Simulation for Intrinsic Stress Caused by Surface Oxidation on Hydrogenated Amorphous Silicon

by

Yohei TAMURA*, So TAKAMOTO*, Shunsuke IMAIZUMI*,
Reiko SAITO**, Sachiyo ITO**, Asuka HATANO* and Satoshi IZUMI***

It was reported that the lack of the structural stability of semiconductor silicon micro-pattern induced the lateral undulation buckling. Our previous report revealed that the intrinsic stress of the oxide film on the surface of amorphous silicon produced the compressive stress which induces the buckling failure. However, actual amorphous silicon contains hydrogen atoms. Therefore, in this study, we realize the surface oxide film fabrication on hydrogenated amorphous silicon and clarify the relationship between hydrogen concentration and intrinsic stress due to surface oxidation.

As a result, regardless the hydrogen concentration, surface oxide layer contains no hydrogen atoms. In addition, it is found that the intrinsic stress is generated in the sub-oxide layer where oxidation process is not completed. As the hydrogen concentration increases, the integral value of the compressive stress decreases linearly. The stress decreases about 30 % when the hydrogen concentration reaches 25 at%. Decrease in the stress would be caused by the sparse silicon structure due to hydrogen atoms and resulting release of the strain due to surface oxidation.

Key words:

Molecular dynamics, Semiconductor device, Intrinsic stress, Micropatterning, Amorphous silicon, Plasma etching, Silicon dioxide film

1 緒 言

シリコン半導体は、トランジスタやメモリなど電子デバイスの基本的な材料として使われており、現代社会では必要不可欠な要素となっている。デバイスの表面のパターンはエッチングにより作られているが、近年では微細化に伴い、構造強度の低下による微細パターンの横うねり座屈不良問題^{1),2)}が報告されている。

半導体微細パターン材の場合、原子構造に起因して発生する真性応力（内部応力）がその座屈因子となる。パターン幅が数 nm に近づくと、エッチングなどの反応プロセスによる表層の変質層の影響が無視できなくなる。例えば、アモルファスシリコンをマスク層に使用する酸素プラズマエッチングプロセスでは、アモルファスシリコン（以下 a-Si）で表面上に形成される 5 nm 程度の酸化膜が高い圧縮応力を持つため、座屈強度に有意に影響を及ぼすことがわかっている³⁾。

アモルファスシリコンの成膜時の真性応力は分圧や放電力による水素濃度の制御によって約 ±1 GPa 程度まで調整可能なことが知られている⁴⁾。水素は a-Si の密度や、

構造欠陥などネットワーク構造に影響を与えており⁵⁾、座屈因子に影響を与えうると考えられる。

前報³⁾では水素を含まない a-Si 表層について古典分子動力学法（Classical Molecular Dynamics Method 以降古典 MD 法）を用いたドライエッチング過程のシミュレーションを行った。本研究では水素に着目し、エッチングプロセスにおける水素化アモルファスシリコン（以下 a-Si:H）の酸化膜形成メカニズムを古典 MD 法を用いて原子レベルで解明し、水素濃度が酸化膜物性と真性応力に及ぼす影響を考察する。

第 2 章では古典 MD 法による a-Si:H バルクモデルの作成法と、作成した結果について述べる。第 3 章では、作成した a-Si:H バルクモデルを用いた表面酸化シミュレーションの方法について述べ、結果とその考察について述べる。第 4 章では本研究の結言を述べる。付録 A には古典 MD 法で用いたポテンシャル関数形およびパラメータを記載する。

2 古典MD法によるa-Si:Hモデル作成

[†] 原稿受理 平成28年12月14日 Received Dec. 14, 2016

©2017 The Society of Materials Science, Japan

* 東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻 〒 113-8656 東京都文京区本郷
Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, the University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656

** (株)東芝 生産技術センター 〒 235-0017 神奈川県横浜市磯子区新磯子町
TOSHIBA CORPORATION Corporate Manufacturing Engineering Center, Isogo-ku, Yokohama, 235-0017.

*** 正会員 東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻 〒 113-8656 東京都文京区本郷
Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, the University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656.

2・1 a-Si:H バルクモデル作成

本研究で用いる古典 MD 法のポテンシャルは、 Tersoff ポテンシャル^{6),7)}を改変した Si-H 系ポテンシャル⁸⁾と Si-O 系ポテンシャル⁹⁾を組み合わせた Si-O-H 系ポテンシャルである。なお、MD 計算は LAMMPS¹⁰⁾を用いた。タイムステップは 0.2 fs である。

バルクモデルの作成は Melt-Quench 法^{11),12)}により行う。Melt-Quench 法で得られた構造は緩和不足の状態であり、多量の構造欠陥を含んでいるため、高温での長時間アニールにより緩和をする。作成手順は (1) 周期境界条件を適用したセルの中に、結晶 Si の隙間に H 原子を配置したものを用意し、温度を 4000 K まで上げ、40 ps の間溶解させる。(NVT アンサンブル) (2) 4000 K から 300 K まで 10^{14} K/s の速度で急冷する。(NVT アンサンブル) (3) 圧力 0 のもと、1200 K で 2 ns の間構造緩和を行う。(NPT アンサンブル)。

まずバルクモデル作成条件の妥当性を調べるため、セルサイズ $2.72 \times 2.72 \times 2.72$ nm³ に Si 原子 1000 個と H 原子 125 個を配置し、MD 計算を行った。結果、結晶シリコンに対する密度比は 0.88 となり、¹⁵N を使う共鳴核反応法などによって得られた実験値⁵⁾と一致した。また、H 原子の結合様相について、大部分 (98.9%) の H 原子が一つの Si 原子と結合しており、残りの H 原子は Si 構造中にわずかに存在する空隙中に H₂ の形で存在することがわかった。これらの結果は、赤外吸収法や水素核磁気共鳴法などによる実験事実⁵⁾や、第一原理計算¹³⁾と一致している。また、Si に結合している H 原子について、Si-H の形で配位しているものが大部分 (約 94.6%) であり、残りは Si-H₂ の形で配位していた。これは第一原理計算¹³⁾や赤外吸収法による実験結果¹⁴⁾とよく一致する。また、125 個あった系のダングリングボンドが H の混入により 23 個まで大幅に減少しており、文献 3) で述べられている傾向に一致する。

水素濃度をシリコン原子数比 0~27.5 原子%まで 2.5% 刻みで変更したモデルを同条件で作成した。密度を比較した結果、Fig. 1 に示す通り、水素濃度が高くなると密度が小さくなり、実験結果⁵⁾と一致した。

Fig. 1 Dependence of the density ratio of hydrogenated amorphous silicon on the hydrogen concentration.

以上のことから、作成した a-Si:H モデルは (1) 密度 (2) H 原子の結合形態 (3) H₂ 分子が Si ネットワークの空隙中に存在すること (4) H 原子が系のダングリングボンドを減らすこと、の点で実験結果との一致が見られ、適切に作成されたと考えられる。

2・2 表面を有する a-Si:H モデルの作成

同様の条件を用いて、一方向に 3 倍大きくしたバルクモデルを作成する。その後、微細パターンマスク層を表現するために、バルクモデルの一方向のみ境界条件を変更することによって表面を有する a-Si:H モデル (Fig. 2) を作成する。作成手順は以下のとおりである。(1) 作成したバルクモデルの z 方向の境界条件を周期境界条件から自由境界条件に変更し、表面を作成 (2) 表面の一端の厚さ 0.2 nm の領域を空間固定し、底面とする (3) 0.2 ns のあいだ 800 K で表面構造の緩和を行う。(NVT アンサンブル)。この操作で表面に多数の構造欠陥が生じているので熱アニールを施した。

3 表面酸化膜形成シミュレーション

3・1 解析モデル

第 2 章で述べた作成法により、Si 原子 3000 個からなる a-Si:H モデルを作成した。H 原子は Si 原子数比率 0~27.5 原子%まで 2.5% 刻みで変えたもの、つまり 12 種類の濃度になっている。

Fig. 2 のモデルを用いて、ドライエッチングプロセスを模した a-Si:H の表面酸化シミュレーションを行う。固定された原子がある方を底面とし、 $z=0$ とする。a-Si:H 表面に O 原子を打ち込む行程は以下のとおりである。(1) O 原子を 1 つ生成する。生成位置は、z 方向は表面から十分離れた位置で固定し、x, y 座標はランダムとする。(2) 生成した O 原子に 50 eV に応じた速度を z 方向下向きに付加する (3) 0.7 ps の間、NVE アンサンブルで計算する。(4) 0.3 ps の間、NVT アンサンブルで計算する。(5) 表面から跳ね返った O 原子や、表面から脱離したとみなした分子は削除する。(6) (1) ~ (5) を繰り返す。

Fig. 2 Schematic drawing of the simulation model of the surface oxidation on a-Si:H.

実際のドライエッチングでは主に O^+ が照射されるが、イオンは Si 表面に到達後ただちに電荷を放出して中性になる¹⁵⁾。そこで本計算では中性である O 原子を照射する簡易モデルを用いる。また、実際のドライエッチングプロセスでは、イオンの入射間隔は系が外部に熱を放出して平衡状態に達するのに十分な時間がある。しかし古典 MD でこのような入射間隔を再現するのは計算コストからみて非現実的であるため、イオン入射後に NVT アンサンブルに切り替えて強制的に冷却する。また、通常ドライエッチングは常温で行われるため、O 原子の拡散は考慮しない。

本解析において計算する物性値を以下のように定義する。原子数分布とは、 $\Delta z = 0.2 \text{ nm}$ で系を領域分割し、各領域において各種原子数を数え上げたものである。酸化膜厚さとは O 原子数分布の半値全幅 (3.2 節において述べる) である。真性応力分布とは $\Delta z = 0.2 \text{ nm}$ で系を領域分割し、各領域における原子応力のアンサンブル平均 ($= (\langle \sigma_{xx} \rangle + \langle \sigma_{yy} \rangle) / 2$) の分布である。原子応力は有限温度において大きく時間変動するため、ここでは原子応力の 2 ps の間の時間平均値を用いた結果を示す。

3・2 解析結果と考察

ここで、O/Si 比が 2 以上の層を酸化膜層、O/Si 比が 2 未満で O 原子が存在する層をサブオキサイド層とする。初めに、水素濃度が 12.5 原子%の系について、O 原子を 1950 個打ち込むシミュレーションの結果を示す。系の様子の時刻歴のスナップショットを Fig. 3 に、系の各種原子数の時刻歴を Fig. 4 に示す。

Fig. 4 は O 原子の打ち込み個数を表面積で割った値と、各原子種の個数を示している。Fig. 4 より O 原子の打ち込み個数が単位表面積 (nm^2) あたり 230 個程度になると系に含まれる O 原子の個数が飽和していることがわかる。この傾向はすべての水素濃度条件で一致した。以降、O 原子を 1 nm^2 単位表面積あたり 227 個打ち込んだ時点での酸化膜の構造について考察する。Fig. 5 は水素濃度 12.5 原子%の系における原子数分布である。Fig. 5 より酸化膜層にほとんど水素が含まれていないことがわかり、すべての水素濃度条件で同様の結果であった。Fig. 6 で示されるように、酸化膜厚さ (O 原子分布の半値全幅であり、Fig. 5 に示す通り、酸化膜層の z 方向の長さとは異なるので注意されたい) は水素濃度によらずほぼ一定であることがわかる。よって、形成される酸化膜層の構造は水素濃度によらずほぼ同じものであると推測される。後に Si 構造の密度を調べ、さらに考察を行う。

Fig. 7 は水素濃度 12.5 原子%の系における原子数分布と、真性応力分布である。応力は正が引張り、負が圧縮を示す。約 2 GPa 程度の圧縮応力が生じており、これは微細パターンの座屈を引き起こす程度の応力である³⁾

Fig. 3 Snapshots of the oxidation process of hydrogenated amorphous silicon film containing 12.5 atoms% H atoms. Gray, white and red atoms indicate silicon, hydrogen and oxygen atoms respectively.

Fig. 4 Time history of the numbers of silicon, oxygen and hydrogen atoms in the case of 12.5 atoms% a-Si:H.

Fig. 5 Distribution of the numbers of silicon, oxygen and hydrogen atoms in the case of 12.5 atoms% a-Si:H. Upper atomic schematics corresponds the x-axis position.

Fig. 6 Dependence of the thickness of oxide film on hydrogen concentration.

Fig. 7 Distribution of the intrinsic stress and the number of the each type of atoms in the case of 12.5 atoms% a-Si:H.

Fig. 8 Dependence of the integral value of the compressive stress on hydrogen concentration.

Fig. 9 Dependence of the density of Si atoms in each layer on hydrogen concentration.

また、真性応力は酸化膜層ではなく、Si 構造が完全に酸化されきっていないサブオキサイド層で主に生じていることがわかる。酸化膜層は O 原子が衝突しながら通り抜けるため十分に構造が緩和されるが、サブオキサイド層は O 原子がエネルギーを失いたどりつく場所であり構造が十分に緩和されず、結果として大きな応力が生じていると考えられる。

Fig. 8 は圧縮応力の積分値 (Fig. 7 の真性応力の谷の面積に相当) を各水素濃度について比較したものである。この値は酸化膜に生じる圧縮応力による、表面応力への寄与の総和を示す。固定した系の下部の影響を取り除くために、

応力が引張りの領域は積分値に含めていない。応力の値はゆらぎが大きいため、 1nm^3 あたり 202~243 個まで、4 個刻みで O 原子を打ち込んだ時点での値の平均値をとっている。Fig. 8 より、水素濃度が高くなると圧縮応力の積分値がほぼ線形に減少し、水素濃度 25% でおおよそ 30% 程度減少することが分かった。Fig. 7 で示したように、圧縮応力は主としてサブオキサイド層で生じることから、H 原子が表面酸化膜形成に与える影響はサブオキサイド層の構造に表れていると考えられる。

Fig. 9 はバルク、サブオキサイド層、酸化膜層の Si のモル密度を水素濃度によって比較したものである。酸化膜層の値は、水素濃度との相関は見られない。また、動径分布関数を a-SiO₂ の実験値¹⁶⁾ と比べたところ、ほぼ同じ構造であることがわかり、水素による影響はほぼ生じないと考えられる。サブオキサイド層とバルクについては、水素濃度が高くなるにつれて Si のモル密度が小さくなり酸化膜層の持つ密度に近づくことがわかった。サブオキサイド層においては未酸化時の Si 構造の影響が残っていると考えられる。これらの結果より、水素濃度の増加による圧縮応力の減少は、水素濃度が高くなると a-Si:H の Si 構造が疎になり、酸化後との Si 構造の密度の差が小さいので構造のひずみが小さくなることによると考えられる。

4 結 言

本研究では、a-Si:H 表面に形成される酸化膜起因真性応力を評価することを目的として、分子動力学解析を行った。本研究で得られた知見を以下に整理する。

酸化初期は、高エネルギーで入射された O 原子が周囲の原子と衝突しながら系の内部に侵入する。エネルギーを与えられた系内では Si-Si や Si-H 結合が切れ、軽い H 原子は系の外に放出される。結果、表面に形成される酸化膜層内には H 原子はほぼ存在しない。O 原子飽和時まで打ち込んだ O 原子数や酸化膜厚に水素濃度との相関は認められなかった。また、酸化膜層の Si 密度は水素濃度によらずほぼ一定であり、系の表面には水素濃度によらずほぼ同じ構造の酸化膜層が形成された。

酸化膜形成によって系は体積膨張をし、1 GPa を超える圧縮の内部応力がサブオキサイド層で生じる。系の表面に近い酸化膜層の応力は小さい。侵入する O 原子によりエネルギーを与えられており、構造が緩和されているためと考えられる。これに対しサブオキサイド層は構造が緩和されていないと考えられ、大きな応力が生じる。

水素濃度が高くなると圧縮応力の積分値がほぼ線形に減少し、水素濃度 25% でおおよそ 30% 程度減少することが分かった。水素が a-Si:H の Si 構造を疎にすることにより、水素濃度が上昇すると酸化膜形成による体積膨張率が減少し、構造のひずみが小さくなることで圧縮応力が減少すると考えられる。

A Si-O-H 系原子間ポテンシャル

本解析で用いた Si-O-H 系修正 Tersoff ポテンシャル関数を (A.1) に, 二体項と三体項を Table 1 と Table 2 に示す. Tersoff ポテンシャル^{6), 7)}を基に作られた Si-H 系ポテンシャル⁸⁾と Si-O 系ポテンシャル⁹⁾を組み合わせたものである. Si-H 系原子間ポテンシャル⁸⁾を利用するため新たなパラメータ m_{α_j} を導入した. また, カットオフ関数を Si-O 系修正 Tersoff ポテンシャル⁹⁾に合わせてある. O-H 間の相互作用は反発力のみ生じるように設定した. Si 熱酸化膜において, Si-OH 結合密度は Si-H の結合密度よりも 1 けた~2 けた程度, Si-O 結合密度よりも 4 けた程度小さく¹⁷⁾, 応力を問題にする上で OH 基は無視し得ると考えられるためである.

Table 1 Two-body potential parameters of Si-O-H potential.

$i-j$	Si-Si	O-O	Si-O	O-Si
A [eV]	1830	137	3990	3990
B [eV]	471	73.2	67	67
λ_1	2.48	2.6	4.88	4.88
λ_2	1.73	1.57	1.21	1.21
n	0.787	1.49	6.16	14
m	1	1	1	1
R [Å]	2.8	2.8	3.55	2.8
D [Å]	0.15	0.15	0.15	0.15
Re [Å]	1.46	1.04	-1.46	0

$i-j$	Si-H	H-H	H-Si	O-H	H-O
A [eV]	537.38	80.07	537.38	3000	3000
B [eV]	193.66	31.38	193.66	0	0
λ_1	2.9117	4.2075	2.9117	10	10
λ_2	1.9898	1.7956	1.9898	1	1
n	0.78734	1	1	1	1
m	1	1.609399	1.609399	1	1
R [Å]	1.95	1.4	1.95	0.95	0.95
D [Å]	0.1	0.3	0.1	0.3	0.3
Re [Å]	0	0	0	0	0

$$\begin{aligned}
\Phi &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} \\
\phi_{ij} &= f_{c, \alpha_i \alpha_j}(r_{ij}) \left[A_{\alpha_i \alpha_j} \exp(-\lambda_{1, \alpha_i \alpha_j} r_{ij}) - b_{ij} B_{\alpha_i \alpha_j} \exp(-\lambda_{2, \alpha_i \alpha_j} r_{ij}) \right] \\
b_{ij} &= \left(1 + \zeta_{ij}^{n_{\alpha_i \alpha_j}} \right)^{-\frac{m_{\alpha_i}}{2n_{\alpha_i \alpha_j}}} \\
\zeta_{ij} &= \sum_{k \neq i, j} f_{c, \alpha_i \alpha_j}(r_{ij}) g_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}(\theta_{ijk}) \exp \left(\lambda_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k} \left((r_{ij} - R_{\alpha_i \alpha_j}) - (r_{ik} - R_{\alpha_i \alpha_k}) \right) \right)^{q_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}} \\
g(\theta) &= a_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k} \left(1 + \frac{c_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}^2}{d_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}^2} - \frac{c_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}^2}{d_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k}^2 + (h_{\alpha_i \alpha_j \alpha_k} - \cos \theta)^2} \right) \\
f_{c, \alpha_i \alpha_j}(r) &= \begin{cases} 1 & (r \leq R_{\alpha_i \alpha_j} - D_{\alpha_i \alpha_j}) \\ \frac{1}{2} - \frac{9}{16} \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{r - R_{\alpha_i \alpha_j}}{D_{\alpha_i \alpha_j}} \right) - \frac{1}{16} \sin \left(\frac{3\pi}{2} \frac{r - R_{\alpha_i \alpha_j}}{D_{\alpha_i \alpha_j}} \right) & (R_{\alpha_i \alpha_j} - D_{\alpha_i \alpha_j} < r \leq R_{\alpha_i \alpha_j} + D_{\alpha_i \alpha_j}) \\ 0 & (R_{\alpha_i \alpha_j} + D_{\alpha_i \alpha_j} < r) \end{cases}
\end{aligned} \tag{A.1}$$

Table 2 Three-body potential parameters of our Si-O-H potential.

$i-j-k$	Si-Si-O	Si-O-Si	Si-O-O	O-Si-Si	O-Si-O	O-O-Si	O-O-O	
λ_3 [1/Å]	2.77	2.77	2.43	2.5	5.92	5.92	1.57	
c	83.4	83.4	4.55	54.6	62.9	62.9	77.9	
d	2.05	2.05	6.6	5.06	10.3	10.3	22.6	
h	-0.494	-0.494	-0.333	-0.946	0.364	0.364	0.851	
a	0.00383	0.00383	6.43	0.71	0.0168	0.0168	1.39	
$i-j-k$	O-O-H	O-H-O	O-H-H	H-O-O	H-H-O	H-O-H		
λ_3 [1/Å]	5.92	1	1	1	3	1		
c	62.9	1	1	1	0	1		
d	10.3	1	1	1	1	1		
h	0.364	1	1	1	-1	1		
a	0.0168	1	1	1	4	1		
$i-j-k$	Si-Si-Si	H-H-Si	Si-H-Si	H-Si-Si	Si-Si-H	H-H-H	Si-H-H	H-Si-H
λ_3 [1/Å]	0	3	0	0	0	3	0	3
c	100390	0	100390	477620	100390	0	100390	0
d	16.217	1	16.217	632.14	16.217	1	16.217	1
h	-0.59825	-1	-0.59825	-1	-0.59825	-1	-0.59825	-1
a	1.1E-06	4	0	0.6999	1.65E-06	4	4.4E-07	4
$i-j-k$	Si-O-H	Si-H-O	O-Si-H	O-H-Si	H-Si-O	H-O-Si		
λ_3 [1/Å]	2.77	0	2.5	1	3	1		
c	83.4	100390	54.6	1	0	1		
d	2.05	16.217	5.06	1	1	1		
h	-0.494	-0.59825	-0.946	1	-1	1		
a	0.00383	4.4E-07	0.71	1	4	1		

参考文献

- 1) M. Darnon, T. Chevolleau, O. Joubert, S. Maitrejean, J. C. Barbe and J. Torres, "Undulation of sub-100 nm porous dielectric structures : A mechanical analysis", *Applied Physics Letters*, Vol. 91, No. 19, 94103 (2007).
- 2) H. Tanaka, T. Hidaka, S. Izumi and S. Sakai, "Onset of wiggling in a microscopic patterned structure induced by intrinsic stress during the dry etching process", *ASME Journal of Applied Mechanics*, Vol.81, No.9, 091009 (2014).
- 3) H. Tanaka, M. Inoue, S. Takamoto, A. Hatano and S. Izumi, "Analysis of oxidized film formation and evaluation of intrinsic stress in a-Si layer of semiconductor microscopic patterned structures using molecular dynamics method", *Journal of the Society of Materials Science, Japan*, Vol. 65, No.2, pp. 127-134 (2016).
- 4) Eric Johlin, Nouar Tabet, Sebastian Castro-Galnares, Amir Abdallah, Mariana I. Bertoni, Tesleem Asafa, Jefferey C. Grossman, Syed Said and Tonio Buonassisi, "Structural origins of intrinsic stress in amorphous silicon thin films", *Physical Review B*, Vol. 85, 075202 (2012).
- 5) K. Tanaka, E. Maruyama, T. Shimada, H. Okamoto, "Amorphous silicon", (1993), Ohmsha.
- 6) J. Tersoff, "New empirical approach for the structure and energy of covalent systems", *Physical Review B*, Vol. 37, 6991 (1988).
- 7) J. Tersoff, "Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties", *Physical Review B*, Vol. 38, 9902 (1988).
- 8) T. Ohira, O. Ukai and M. Noda, "Fundamental processes of microcrystalline silicon film growth: A molecular dynamics study", *Surface Science*, vol. 458, pp. 216-218 (2000).
- 9) T. Kumagai and S. Izumi, "Development of a software to optimize parameters of interatomic potentials for solid systems", *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers Series A*, Vol. 77, No. 783, pp. 2026-2040 (2011).
- 10) S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics", *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19 (1995).
- 11) M. D. Kluge, J. R. Ray and A. Rahman, "Amorphous-silicon formation by rapid quenching: A molecular-dynamics study", *Physical Review B*, Vol. 36, No. 8, pp. 4234-4237 (1987).
- 12) M. Ishimaru, S. Munetoh and T. Motooka, "Generation of amorphous silicon structures by rapid quenching: A molecular-dynamics study", *Physical Review B*, Vol. 56, No. 23, pp. 15133-15138 (1997).
- 13) F. Buda, Guido L. Chiarotti, R. Car and M. Parrinello, "Structure of hydrogenated amorphous silicon from ab initio molecular dynamics", *Physical Review B*, Vol. 44, No. 11, pp. 5908-5911 (1991).
- 14) J. Shirafuji, M. Kuwagaki, T. Satoa and Y. Inuishi, "Effect of substrate temperature on properties of glow-discharged hydrogenated amorphous silicon", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 23, Part 1, No. 10, 1278 (1984).
- 15) H. D. Hagstrum, "Theory of auger neutralization of ions at the surface of a diamond-type semiconductor", *Physical Review*, Vol. 122, No. 1, pp. 83-113 (1961).
- 16) A. C. Wright, "Neutron scattering from vitreous silica. V. The structure of vitreous silica: What have we learned from 60 years of diffraction studies?", *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 179, No. 0, pp. 84-115 (1994).
- 17) A. G. Revesz, "The role of hydrogen in SiO₂ films on silicon", *Journal of The Electrochemical Society*, Vol 126, pp.122-130 (1979).