LP-CVD シリコンウェーハプロセスの表面反応と 吸着粒子の挙動に関する MD 解析*

加藤 征三^{*1}, 胡 杭 湘^{*2}

MD Analyses of Surface Reaction and Adsorbed Free Particle Behavior in LP-CVD Silicon Wafer Processing

Seizo KATO and Hangxiang HU

By using the molecular dynamics method (MD) and computer graphics (CG), the surface processing mechanism of $\text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si} + 2\text{H}$ in LP-CVD Silicon wafer fabrication is analyzed, in which we introduce a chemical reaction model consisting of the activating energy and attack angle between SiH_2 gaseous molecules and Si atoms monocrystalline. The atom surface adsorption and inelastic collision are discussed considering energy exchange between the particles and surface. Moreover, the potential state and behavior of hydrogen atom adsorbed as a free particle are also calculated and discussed. The relevant potential surface of H free particle in the Si crystal lattice is found to be useful to understand its potential state and behavior.

Key Words: Molecular Dynamics, LP-CVD, Surface Reaction, Silicon Wafer, Adsorbed Hydrogen Behavior

1. 緒 言

計算機等の進展に関連して、半導体ウェーハ製造装置には高生産性・高品質・低コスト化のためのより高度なプロセス制御技術の進展が工業的に強く求められている。ウェーハ製造には良好な経済性の利点をもつ低圧化学蒸発(LP-CVD)法が多く用いられている⁽¹⁾ことを考えると、LP-CVDにおけるウェーハプロセスング、特にウェーハ成長に重要な影響を及ぼす表面反応を分子レベルの観点から解析し、表面反応を最適制御する方策を検討することが本質的に重要であると思われる。また、表面反応の際に吸着される自由粒子(通常は水素原子およびそれを含むラジカルが多い⁽²⁾)は格子欠陥の原因ともなり、半導体性能に悪影響を及ぼすことが考えられるため、吸着自由粒子の挙動をあらかじめ把握しておく必要がある。このような表面反応のプロセスと吸着自由粒子の挙動を分子レベルで解明する手法としては分子動力学(MD)法によるシミュレーションが有用であるが、反応を考慮したMDモデリングはまだ確立していないようである。ま

た、表面に吸着された自由粒子の挙動をポテンシャル面から存在位置を特定することはなされていないようである。

本研究は、シリコンウェーハをLP-CVDで作成する際の表面反応 $[\text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si} + 2\text{H}]$ のメカニズムをMD法によって解析し、表面反応を最適制御できる製造装置の設計に資することを検討したものである。この際、表面反応のMDモデルとして、表面に入射する SiH_2 分子のSi結晶格子に対するエネルギーと作用角度の二つを反応生起の判定に用いる手法を新たに導入した。また、反応時に表面に吸着される水素原子Hの自由粒子としての振る舞いをMDシミュレートし、その挙動特性を明らかにした。従来、HおよびHを含むラジカルが半導体プロセス場で多く存在する⁽²⁾ことから、それらを含むシリコン材料がデバイス性能に及ぼす影響を実験的に調べた研究が多い⁽³⁾⁻⁽⁷⁾が、ここではHの挙動を追求してSi結晶格子における水素のポテンシャル面から自由粒子の存在位置が特定できることを示した。

2. MD計算の概要と表面反応モデル

図1に本MD計算において対象とする SiH_2/Si 結晶表面システムを示す。シリコンウェーハの結晶格子

* 原稿受付 1997年5月26日。

^{*1} 正員, 三重大学工学部 (☎514-8507 津市上浜町1515)。

^{*2} 正員, 三重大学大学院。

Fig. 1 SiH₂/Si surface system

はダイヤモンド構造であり⁽⁸⁾, Miller インデックス $\langle 111 \rangle$ で配置され, 表面から 3 層(層間格子間隔はそれぞれ 0.78 Å, 2.35 Å と 0.78 Å)までの Si 原子を計算対象とする. この Si 結晶の基板表面に SiH₂ 気体分子が入射してくるが, ここでは表面反応として

で表される熱分解反応によるプロセスを考える. ここで, Q は反応を生起させるのに必要なエネルギーであり, $Q = 2.4 \times 10^{-19} \text{ J}$ 程度の値をもつ⁽⁹⁾. この SiH₂ 入射分子と基板を構成する Si 原子系のそれぞれの粒子 i の挙動は, 量子効果が無視できるとともに, それぞれ質点とみなすことができるものと近似すれば,

$$\frac{d^2(m_i \mathbf{r}_i)}{dt^2} = \mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}_{ij})}{\partial \mathbf{r}} \quad \text{..... (2)}$$

なる Newton の運動方程式によって記述される. 入射気体分子 SiH₂ は図 1 の計算領域の上端境界(表面から 15 Å 上方)にセットされるが, その位置と飛行角度は一様乱数によって, また速度, すなわち並進運動エネルギーはマクスウェル分布に従う乱数によってそれぞれ決定される. MD 法においては式(2)のポテンシャル $\Phi_2(\mathbf{r}_{ij})$ のモデルが重要である. ここでは, SiH₂-Si 間および H₂-Si 間のような中性粒子間のポテンシャルとしては Lennard-Jones(L-J)ポテンシャル

$$\Phi(\mathbf{r}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad \text{..... (3)}$$

を用いた. 表 1 に本 MD 計算で採用した SiH₂-Si 間および H₂-Si 間の L-J ポテンシャルパラメータである ϵ と σ の値を示す⁽¹⁰⁾. 一方, 結晶の Si-Si 間は共有結合であることを考慮して, 二体 $\Phi_2(\mathbf{r}_{ij})$ と三体 $\Phi_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)$ の両ポテンシャルを併用した Stillinger-Waber(S-W)ポテンシャル⁽¹¹⁾

$$\Phi = \sum_i \sum_{j < k} \Phi_2(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_i \sum_{j < k} \Phi_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) \quad \text{..... (4)}$$

を採用した. ここで, 各関数系は

$$\Phi_2(\mathbf{r}_{ij}) = \epsilon f(\mathbf{r}_{ij}/\sigma) \quad \text{..... (5)}$$

Table 1 Interaction potential parameters of L-J and S-W models

Interaction Pair	ϵ [J]	σ [Å]	Others (Non-dim.)
SiH ₂ -Si (L-J)	3.51×10^{-20}	3.50	—
H ₂ -Si (L-J)	1.66×10^{-20}	4.98	—
Si-Si (S-W)	3.4723×10^{-19}	2.0951	$A=7.0496, B=0.6022,$ $p=4, q=0, \alpha=1.8,$ $l=21, g=1.2$

$$\Phi_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = \epsilon g\left(\frac{\mathbf{r}_i}{\sigma}, \frac{\mathbf{r}_j}{\sigma}, \frac{\mathbf{r}_k}{\sigma}\right) \quad \text{..... (6)}$$

$$f(x) = \begin{cases} A \left(\frac{B}{x^p} - \frac{l}{x^q} \right) \exp\left(\frac{l}{x-a}\right) & x < a \\ 0 & x \geq a \end{cases} \quad \text{..... (7)}$$

$$g(x_i, x_j, x_k) = h(x_{ij}, x_{ik}, \theta_{jik}) + h(x_{ji}, x_{jk}, \theta_{ijk}) + h(x_{ki}, x_{kj}, \theta_{ikj}) \quad \text{..... (8)}$$

$$h(x_{ij}, x_{ik}, \theta_{jik}) = \begin{cases} \lambda \exp\left(\frac{\gamma}{x_{ij}-a} - \frac{\gamma}{x_{ik}-a}\right) \left(\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 & x_{ij} < a \text{ and } x_{ik} < a \\ 0 & x_{ij} \geq a \text{ or } x_{ik} \geq a \end{cases} \quad \text{..... (9)}$$

で表される. なお, 表 1 には S-W ポテンシャルパラメータに関連する諸値が示してある⁽¹²⁾. この S-W ポテンシャルに従う Si 粒子に対する式(2)の外力 $\mathbf{F}_i$ は

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i} \text{grad} \Phi_2(\mathbf{r}_{ij}) - \sum_{j < k \neq i} \text{grad} \Phi_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) \quad \text{..... (10)}$$

で表される.

さて, 式(1)で示される表面反応が生起する条件として以下に示す二つの要件を考え, 両者を満たす場合に反応(1)が起こるものとした. 第1の要件は反応エネルギーに関するものであり, ここでは, SiH₂ 入射分子が基板表面に衝突する際に有するエネルギー $E_{\text{SiH}_2\text{-Surface}}$ が SiH₂ 分子自体の結合を切断することができるエネルギー $E_{\text{SiH}_2} = 2.723 \times 10^{-19} \text{ J}$ より大きい場合にのみ SiH₂ 分子の分解が生ずるものとした. すなわち,

$$\text{反応生起条件①: } E_{\text{SiH}_2\text{-Surface}} > E_{\text{SiH}_2} \quad \text{..... (11)}$$

第2の要件は反応の際に問題となる立体配置的な作用角度に関するものであり, ここでは, SiH₂ 分子の中心軸と表面に衝突する際の基板表面とのなす角 $\theta_{\text{SiH}_2\text{-Surface}}$ が臨界角度 θ_{crit} より小さい場合にのみ反応が生起するものとした. すなわち

$$\text{反応生起条件②: } \theta_{\text{SiH}_2\text{-Surface}} < \theta_{\text{crit}} \quad \text{..... (12)}$$

本計算では第1近似として $\theta_{\text{crit}} = 45^\circ$ と設定した. こ

れは、著者らの分子軌道法による反応解析⁽¹³⁾によれば反応系の直中心衝突 ($\theta=0$) の場合が反応生起の確率が最大であり、おもに $\theta < 45^\circ$ ではポジティブに寄与する確率をもつことを考慮したためである。式(1)の表面反応は SiH_2 分子が式(11)と(12)の両要件を満たすときのみ起きるとし、この場合、 SiH_2 は Si と二つの H に分解されるが、Si は表面上を動きながら(モービリティ運動)運動エネルギーを失って、やがて共有結合の形でシリコンウェーハの成長に貢献する。H の大部分は表面から飛び出すが、一部が自由粒子となって表面をさまよってやがて吸着され、デバイスの性能に悪影響を及ぼす。

本 MD 計算においては、Si 結晶表面の基板温度を 600 K 一定に設定するとともに、図 1 に示す表面の計算領域には Si 原子をダイヤモンド構造(格子間隔 3.13 Å)に配置し、それを越える領域には周期境界条件を適用した。計算は一つの状態に対し 50 回行い、それらの平均をその状態の結果とした。1 回の計算は 40 000 ステップで行った。なお、計算処理の詳細については文献(8)を参照されたい。

3. 表面反応の計算結果と考察

3.1 SiH_2 入射気体分子の挙動 図 2 に、表面へ入射する SiH_2 気体分子の表面近傍における典型的な振る舞いの一例を示す。図 2 (a) は、Si 表面へ入射する気体分子 SiH_2 と表面の状態が条件(11)、(12)を満足しない場合で、気体分子はまず表面のポテンシャルエネルギーにより加速されながら接近し、表面と複数

回衝突してエネルギーを表面に伝達した後に、減速しながら表面から離れる。図 2 (b) は、表面反応条件(11)、(12)を満足する場合で、反応で生成した Si 原子は徐々にエネルギーを失い、やがて界面結晶原子と同じレベルになって結晶表面の一原子として残る。水素原子は界面の原子から受けるポテンシャルを振り切って表面から飛び出している。

図 3 に分解反応をしない図 2 (a) に対応する場合の SiH_2 分子が有するエネルギーの時間変化過程の例を示す。入射速度が $V_z=4.5 \text{ Å/ps}$ の場合で、典型的な散乱過程を示している。すなわち、 SiH_2 分子は結晶表面の Si 原子のポテンシャルによって位置エネルギー $\langle PE \rangle$ を失い、代わりに運動エネルギー $\langle KE \rangle$ を得て加速される。次いで、エネルギーは SiH_2 気体分子と Si 表面原子の間を移動するエネルギー交換段階と呼ばれる時間 t_1 から t_2 を経て、気体分子は運動エネルギーを失ってポテンシャルエネルギーが増加する。このケース(a)の場合には、時間 t_2 後に気体分子が有する総エネルギー $\langle TE \rangle$ が L-J ポテンシャル井戸のエネルギー ϵ より十分大きいため、そのまま表面から遠ざかっていく。一方、ケース(b)では、気体分子の入射速度が $V_z=4.0 \text{ Å/ps}$ で、エネルギー交換期間後の総エネルギーがポテンシャル井戸エネルギーより小さい $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2} < \epsilon$ の場合である。この場合には、気体分子が Si 表面原子からの反力を受ける程度に固体表面近くに存在する間は位置エネルギーが増加して、運動エネルギーは減少するが、そのまま飛散せず、表面の Si 原子のポテンシャルによって再び位置エネルギーが減少(運動エネルギーが増加)して固体表面に

(a) without reaction ($V_z=4.5 \text{ Å/ps}$)

(b) with reaction ($V_z=5.1 \text{ Å/ps}$)

Fig. 2 Behavior of intrusion particle SiH_2

Case (a) $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2} > \epsilon$

Case (b) $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2} < \epsilon$

Fig. 3 Time history of SiH_2 energy without reaction

Fig. 4 Time history of a SiH_2 potential with reaction ($V_z = 5.1 \text{ \AA/ps}$)

接近する。すなわち、最初の位置エネルギーの極小値をとる時間 t_1 と 2 番めのそれ t_2 との間のエネルギー交換段階(時間)において、気体分子は表面の近傍を往復移動し、最終的には表面に吸着される。吸着分子は表面上で束縛されることなく、限られた領域でモービリティ運動していると考えられる。これが、いわゆる物理吸着(Physical Adsorption)のメカニズムであるが、この吸着現象は引き続き起こる気体分子-固体表面間の干渉に影響を与えるため、良好なシリコン膜成長には不都合であると思われる。入射エネルギーあるいは壁温を増加させることにより物理吸着現象を回避することができる。

3.2 表面反応プロセス 図 2 (b) に示したように反応条件式(11), (12)を満足する場合、表面反応(1)が生起する。図 4 は、表面反応の際の SiH_2 気体分子の位置エネルギー $\langle PE \rangle_{\text{SiH}_2}$ と総エネルギー $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2}$ の時間変化の例を示す。図 4 中の時間 t_c は表面反応が生ずる瞬間の時間である。反応が生起する前の $t < t_c$ におけるエネルギー変化は図 3 と同じ形態であるが、 $t = t_c$ に SiH_2 の反応(1)が表面で生ずると、Si と 2 H に分解されそれぞれ異なる位置エネルギーを有するようになる。2 H はエネルギー交換段階(時間)を経て、減速しながらポテンシャル井戸から逃れる(表面から散逸する)。一方、Si は初め加速されるが、次第に S-W ポテンシャルに従って減速する。さらに、Si 原子は運動エネルギーを徐々に失い、共有結合によって表面結晶の中に溶け込むような振る舞いを呈する。なお、 SiH_2 の総エネルギー $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2}$ の変化をみると、表面反応時において $\langle TE \rangle_{\text{SiH}_2}$ が飛躍しているが、この飛躍エネルギーが反応エネルギー Q にほぼ相当していることがわかる。

4. 水素自由粒子挙動の計算結果と考察

4.1 解析モデルと計算方法 3 章で扱った表面

Fig. 5 Model crystal consisting of 14 Si atoms in a cubic

反応によって生ずる水素原子が結晶表面上を自由粒子として動き回る場合、それがウェーハ結晶における格子欠陥の要因となり、生産性に悪影響を及ぼしうることから、その振る舞いと最終的な停留位置を把握することは工業的にも重要である。したがって、シリコンウェーハプロセスにおける水素自由粒子の振る舞いに関する研究は多く報告されているが、ダイヤモンド構造のシリコンウェーハにおける水素原子の自由粒子の振る舞いについては十分には解明されていないようである⁽⁶⁾。

本 MD 解析において採用したシリコン結晶モデルは図 5 に示したような六角形の格子点 P_{Hex} (Hexagonal interstitial site) を中心として配置された 14 個の Si 原子からなるクラスタであり、20 個の表面を形成する。図 5 中に示す点 P_{Td} は完全な Si 格子において H が最小のポテンシャルで存在する四面体の格子位置 (Tetrahedral interstitial site) である。点 P_c は図 5 に示されたひし形格子の中心点 (Rhombus) である。

MD 計算において水素自由粒子の初期配置はこれら P_{Hex} , P_{Td} , P_c 点から若干離れた任意位置に配し、表面のポテンシャルの影響を受けないようにした。

本結晶モデルの総エネルギーは水素自由粒子 H の位置関数である H ポテンシャルで表されるが、本計算においては表面に吸着状態で存在する自由粒子 H の速度が小さいこと、および Si 結晶中の H 原子の状態と安定性をよりよく理解したいことから、運動エネルギーを考慮しないことにした。本計算で用いたポテンシャルモデルは 2 章で既述した L-J と S-W を採用した。なお、MD 計算で得たシリコンクラスタ中における水素自由粒子 H の振る舞いとその最終的な停留位置などはそのポテンシャルによって検討した。

4.2 計算結果と考察 図 6 に、 $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ などの主要な軸に沿った Si 格子における水素自由粒子のポテンシャルの変化を示す。横軸は H の

Fig. 6 Potentials of H in Si lattice along $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ axes

存在位置を表すが、 $\langle 111 \rangle$ 軸に関しては前述の点 P_{Hex} を原点に、 $\langle 110 \rangle$ と $\langle 100 \rangle$ 軸に関してはそれぞれ点 P_C と P_{Td} を原点にして示してある。

$\langle 111 \rangle$ 軸に関する横軸の点 P_{AB} は H ポテンシャルが極小値となる反接着点 (Antibonding site) で、結晶モデル中の Si から $1.6 \text{ \AA}$ の位置にある。 $\langle 111 \rangle$ に沿った方向においては、この反接着点 P_{AB} の位置で H のポテンシャルが極小であり、逆に点 P_{Hex} と P_{Td} においては極大であることがわかる。 $\langle 111 \rangle$ 方向には局所的に 4 箇所において H ポテンシャルが極小となり、これらの点に H 自由粒子が滞在しやすいことを明示している。

一方、 $\langle 110 \rangle$ と $\langle 100 \rangle$ 軸に関する H ポテンシャルをみると、 $\langle 111 \rangle$ 方向の P_{AB} における極小値よりもはるかに低い P_C 近傍で最小値をとることがわかる。このポテンシャル差は 1 eV 程度にも達する。点 P_C は、

Fig. 7 Potential map of H on Si(110) plane
(values: potential in eV, $d_{\text{Si-Si}\langle 111 \rangle} = 2.35 \text{ \AA}$, $d_{\text{Si-C}\langle 100 \rangle} = 13.5 \text{ \AA}$, $d_{\text{Si-C}\langle 110 \rangle} = 1.92 \text{ \AA}$)

図 5 でその幾何学的位置が示されているように、3 個の Si 原子と P_{Td} から形成されるひし形の重心であることを考えると、 P_C 近傍における H ポテンシャルが $\langle 111 \rangle$ の点 P_{AB} よりかなり低いことを示している。

図 7 は、Si(110) 平面において H 自由粒子が移動する場合の H ポテンシャル図を示す。このポテンシャルマップ図によってシリコンウェーハ結晶における水素自由粒子の振る舞いが以下のように容易に理解できる。図 7 からわかるように、図 5 に示した $\langle 100 \rangle$ 方向に沿った近接の二つの点 P_C の中点 P_M 所のポテンシャルが最小値 (-1616.04 eV) となり、この点 P_M に停留する H 自由粒子とそれと最も近い二つの Si 原子との間の距離はともに $1.52 \text{ \AA}$ と等しく、それらが 3 体中心結合 (Three-center bond)⁽¹⁴⁾ 構造を形成している。その位置は Si(440) 平面にある。また、H 自由粒子は格子欠陥 P_C , P_M などにおけるダングリングボンド (Dangling bond) を飽和状態にさせ、その結果、結合エネルギーを ($-14.0 \sim -15.8 \text{ eV}$) という最低レベルの Si-H 結合を形成する。さらに、H 原子は一つの平衡点である点 P_M から点 P_C を通過して次の点 P_M まで移動することが可能である。ポテンシャル障壁がおよそ 0.32 eV と非常に小さく、水素原子の自由粒子としての移動が実際に比較的容易に起こりうる事が理解できる。

以上のことから、ダイヤモンド構造をもつ c-Si 結

晶ウェーハにおいて自由粒子としての H 原子の平衡位置は点 P_M , すなわち $\langle 100 \rangle$ 軸に沿った隣接する二つの点 P_C 間の中点, 言い換えると, 図 5 に示す三つの隣接する Si 原子と P_{Td} によって形成されるひし形の重心となる位置であること, Si 原子と点 P_{Td} および P_C に存在する H 原子は単純立方格子であること, 点 P_M とそれに最も近接する二つの Si 原子間の距離はともに $1.52 \text{ \AA}$ であることが明らかとなった. また, 水素原子に対応するバンドオーダーマトリックス (Bond-order Matrix) 要素から, 点 P_M において, H 自由粒子とそれと最も近い二つの Si 原子と 3 体中心結合を形成することを示した.

5. 結 論

シリコンウェーハを LP-CVD で作成する際の表面反応 $[\text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si} + 2 \text{H}]$ を MD 法で解析した. その際, 反応生起モデルとしてエネルギーと作用角度に関する二つの判定条件を導入した. その LP-CVD プロセスにおける結晶過程のシミュレーション結果から, 全プロセスを三つのステップに分けることができる. すなわち, 第 1 段階は入射する気体分子の運動エネルギーが時間に従って増加する加速期, 第 2 段階は気体分子と表面の間でエネルギー交換され新しい分子・原子が生ずる反応期, 第 3 段階は新しい結晶格子が格子サイトで減衰振動を伴いながら形成される緩和期, である. また, 非反応気体粒子が表面をモービリティ運動しながらエネルギーを失って物理吸着される現象のメカニズムを明らかにした.

次に, 表面反応で生ずる水素の自由粒子の振る舞いとその最終停留位置を理解するために, 14 個 Si クラスタ結晶モデルを対象として, 水素原子 H のポテン

シャル計算を行った. その結果, 水素自由粒子は格子欠陥におけるダングリングボンドを飽和状態にさせ, 最低位レベルの Si-H 結合を形成させること, 自由粒子としての水素原子は最小ポテンシャル状態にある点 P_M に平衡位置をもつこと, などを明らかにした. 特に後者については, 従来, 最小ポテンシャル位置が P_{AB} または P_{Hex} にあると考える通常概念とはかなり異なることが興味深い. また, c-Si における水素自由粒子の存在状態は動的な平衡状態であることがわかった.

文 献

- (1) Rosler, R. S., *Solid State Technol.*, **20** (1977), 63-68.
- (2) Picraux, S. T., ほか 2 名 (Albany, J. H. ed.), *Defects and Radiation Effects in Semiconductors*, *Inst. Phys.*, (1979), 31.
- (3) 吉信淳・田中慎一郎・西嶋光昭, 応用物理, **60** (1991), 1196-1206.
- (4) Daum, W., ほか 3 名, *Phys. Rev. Lett.*, **71** (1993), 1234-1237.
- (5) 米沢富美子・坂本昇一, 応用物理, **60** (1991), 984-989.
- (6) Shi, T., ほか 5 名, *Sci. Sinica, Ser. A*, **27** (1984), 98-101.
- (7) 宇田毅・井原茂男, 固体物理, **25** (1990), 867-873.
- (8) Kato, S. and Hu, H., *Surface Sci.*, 357-358 (1996), 891-895.
- (9) Zellama, K., ほか 5 名, *Phys. Rev.*, **B23** (1981), 6648-6667.
- (10) 東誠二, *JCPE Newslett.*, **4** (1997), 13-23.
- (11) Stillinger, F. and Weber, T., *Phys. Rev.*, **B31** (1985), 5262-5271.
- (12) 岡田勲・大澤映二, 分子シミュレーション入門, (1989), 28, 海文堂.
- (13) 山本昌弘・加藤征三, 第 74 期通常総会講演会講演論文集 (I), No. 97-1 (1997), 76-77.
- (14) Appelbaum, J. A., ほか 2 名, *Phys. Rev. Lett.*, **39** (1977), 1487-1490.