

## 自動化超高速化量子 MD 法による Si 表面酸窒化反応シミュレーション

坪井秀行<sup>1</sup>、稲葉賢二<sup>1</sup>、鈴木 愛<sup>2</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、  
遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、久保百司<sup>3</sup>、宮本 明<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

<sup>3</sup>東北大学大学院工学研究科付属エネルギー安全科学国際研究センター  
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

【緒言】次世代 CMOS ゲート絶縁膜にはオングストロームレベルの薄膜化と低リーク電流化の両立がもてられており、シリコン酸窒化膜による高誘電率化技術の高度化が期待されている。しかし成膜過程における原子レベルでの考察は十分ではなく、NO 分子によるシリコン表面の酸窒化反応のメカニズムの解明はプロセス設計において基礎的な知見としても極めて有用である。本研究では当研究室で新たに開発した自動連続シミュレーションを実装した超高速化量子分子動力学法(UA-QCMD)プログラムを駆使して、量子計算に立脚したシリコン表面上への NO ガスによる酸窒化膜の成膜反応プロセスのダイナミクスを解析したのでその一端を報告する。

【方法】当研究室で開発した量子計算とダイナミクス計算の自動連続シミュレーションを実現した超高速化量子 MD プログラムを用いた。

【結果】本手法では、分子動力学シミュレーションの途中で適宜量子化学計算を実行し、分子動力学計算で用いるパラメータを更新することで量子論に基づいた分子動力学シミュレーションの高速化を図っており、今回、図 1 に示したフローチャートのとおり、このスキームをコンピュータ上で連続してシミュレーションできるように自動化した。シミュレーションではシリコン(100)表面に 2 量体が形成された状態から NO 分子を衝突させるように行った。800 K での計算結果を図 2 に示す。図 2 から最初に表面に到達した NO 分子は最表面のダングリングボンドに捕捉され、解離吸着する様子が観察された。

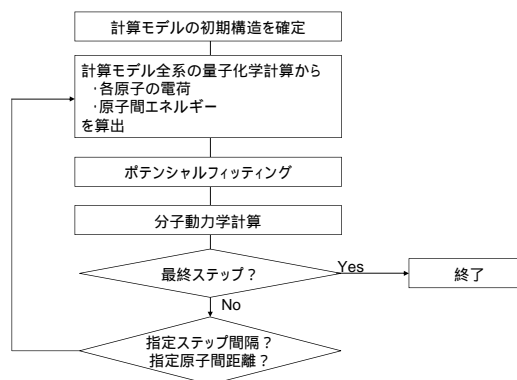


図 1 超高速化量子分子動力学の自動連続シミュレーションフローチャート

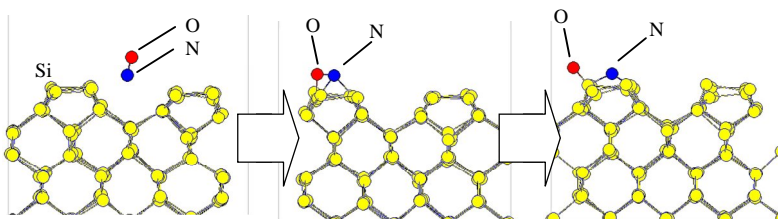


図 2 シリコン(100)表面上での酸窒化膜形成の初期プロセスのシミュレーション結果