

氏名	青木学聡
学位(専攻分野)	博士(工学)
学位記番号	工博第1891号
学位授与の日付	平成12年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	工学研究科電子物性工学専攻
学位論文題目	Molecular Dynamics Simulation of Cluster Ion Impact on Solid Surface (クラスターイオンの固体表面衝突過程の分子動力学シミュレーション)

論文調査委員 (主査) 教授 山田 公 教授 今西信嗣 助教授 高岡義寛

### 論文内容の要旨

本論文は、数個から数千個の粒子の集合体であるクラスターイオンと固体表面との衝突過程を、計算機シミュレーションを用いて解析したものである。クラスターイオンの衝突現象は単原子イオンの場合の線形和で表すことのできない非線形性を示すことが実験等で示されているが、その衝突理論については明らかにされていない。一方、このような非線形性を利用した、ナノスケールの表面加工や、高品位の薄膜形成は、新しいイオンビームプロセスとして注目を集めている。したがって、クラスターイオンの衝突過程の解明は物理学・工学の両分野において極めて重要な課題になっている。

本研究では、クラスターイオンと固体表面との相互作用の解析に、分子動力学法による計算機シミュレーションを用いている。分子動力学法は系内の個々の粒子に対し、ニュートンの運動方程式を立て、それらを逐次的に解くことにより、各粒子の運動を高い時間分解能で追跡する方法である。このため本手法は、時間 ps, 長さ nm 単位の極短時間、微小領域で生じるイオンビームと固体表面原子との衝突ダイナミクスを解析することができる。

本論文は7章からなり、各章の内容は以下の通りである。

第1章は序論であり、イオンビームをはじめとする原子と固体表面との相互作用、計算機による原子シミュレーション法、クラスターイオンビームプロセスの研究背景と現況について述べている。

第2章では、分子動力学シミュレーションの原理と、高エネルギー粒子の衝突過程の計算を効率よく行うために開発した、専用の分子動力学シミュレーションプログラムについて述べている。

第3章以降では、アルゴン、炭素、ホウ素、フッ素等のクラスターをそれぞれ固体表面に衝突させた場合について、計算機シミュレーションを行いその非線形効果の解析を行っている。第3章ではクラスター構成原子数(クラスターサイズ)10~1000程度アルゴンクラスターをシリコン基板に衝突させ、その衝突過程を明らかにしている。クラスターの衝突時には、粒子が高密度に入射することにより多体衝突が生じ、クラスターの持つ運動エネルギーが等方に伝搬することによってクレーター状の損傷が形成されること、このような衝突過程はモノマーの衝突とは大きく異なることを示している。また、衝突過程の入射エネルギー依存性を調べ、クラスターの注入深さが入射エネルギーの1/3乗に比例することを明らかにしている。

第4章ではC<sub>60</sub>をはじめとする炭素クラスターをダイヤモンド、グラファイト表面に数keV/atomの高エネルギーで衝突させた場合についてシミュレーションを行っている。数keV/atomのC<sub>60</sub>クラスターの衝突では、注入深さは1原子あたりの入射エネルギーが等しいモノマーイオンに一致するが、1原子あたりの損傷形成率は数倍大きいことを明らかにしている。また、このような損傷形成に関する非線形性はクラスターサイズが10以上の領域で生じることがシミュレーションで示され、この結果はSTMによる観察結果と一致している。

第5章では浅いホウ素注入層の形成手法としてホウ素クラスターイオン注入法を提案し、注入シミュレーションを行い、その特性について検討している。サイズ10のホウ素クラスターをシリコン基板に、200eV/atom程度の低エネルギーで注

入させるシミュレーションを行った結果、1原子あたり等しいエネルギーを持つホウ素モノマーイオンと等しい注入深さになることを示している。また、基板表面に高効率でアモルファス層が形成されることを示し、このような高効率の損傷形成効果がアニール時の増速拡散を抑えることを明らかにしている。この計算結果は、実在する安定なホウ素クラスターであるデカボラン ( $B_{10}H_{14}$ ) の注入実験結果とも一致し、工学的応用上重要な基礎現象を明らかにすることができた。

第6章では、フッ素クラスターをシリコン基板に衝突させるシミュレーションを行い、クラスターイオンによる反応性スパックリング効果について解析を行っている。フッ素クラスターを照射することにより基板表面に高密度で反応前駆体が形成されることを明らかにしている。この結果、1 eV/atom の低エネルギー領域においても反応性スパックリングが生じ、単原子・分子に比べ高いスパック率が得られることを示している。

第7章では本研究で得られた結果をまとめ、クラスターイオンビームの入射エネルギー、クラスターサイズ、入射粒子種の違いによる非線形効果について総括している。

### 論文審査の結果の要旨

本論文は、数個から数千個の原子集団であるクラスターの固体表面への衝突過程の計算機シミュレーションを行い、クラスターイオンによる非線形照射効果を明らかにしたものである。本研究により得られた成果を要約すると次の通りである。

1. サイズ数十から千程度のアルゴンクラスターの衝突過程を調べた結果、クラスターの衝突過程が単原子イオンの場合とは大きく異なることを示した。「露払い効果」、「多体衝突効果」の2種類の非線形衝突モデルを提案し、クラスターイオンの衝突過程がこの2つのモデルの組み合わせにより説明されることを示した。また、衝突過程の入射エネルギー依存性を調べ、クラスターの注入深さが入射エネルギーの1/3乗に比例することを明らかにした。

2. クラスターの衝突により、固体表面にクレーター状の大規模な損傷が形成されることを明らかにした。また、その損傷形成過程において、クレーターの縁の部分の基板原子がスパッタされる、クラスターイオン特有のラテラルスパッタリング現象が生じることを示した。

3. サイズ100以下の炭素及びホウ素クラスターの注入過程のシミュレーションを行い、非線形衝突過程を示す入射エネルギー、及びクラスターサイズの領域について解析を行った。この中で、入射エネルギーが230 eV/atomの $B_{10}$ クラスターが、1原子あたりのエネルギーの等しい単原子イオンと等しい注入深さを与えることを示し、クラスターイオンビームによる極浅注入層の形成が可能であることを示した。

4. フッ素クラスターをシリコン表面へ衝突させた結果、クラスターの持つ高密度粒子入射効果・エネルギー付与効果により、基板表面での反応前駆体の生成・励起が促進されることを明らかにした。この結果、1原子あたり数eVの低エネルギーのクラスター照射によっても高効率のスパッタリングが可能であることを示した。

以上要するに本論文は、クラスターイオンが固体表面に衝突した際に生じる特異な非線形相互作用を分子動力学シミュレーションにより解析し、クラスターイオンビームプロセスにおける重要な基礎現象を明らかにするものであり、得られた成果は学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認められる。また、平成12年1月21日、論文内容とそれに関連した試問を行った結果、合格と認められた。