

## シリコンクラスター解離過程の分子動力学シミュレーション

(東大院工) 井上知洋, 丸山茂夫

【序】 原子・分子クラスターのレーザー励起や衝突励起による解離現象の解明は、理論的興味とともに半導体製造プロセス制御などの工学的な観点からも極めて重要である。特にシリコンクラスターの解離過程については、半導体材料との関点から多くの注目を集めており、現在までにレーザー照射によるクラスターの解離実験、バッファガスとの衝突による解離実験<sup>(1)</sup>などが行われ、クラスターサイズによって特徴的な解離パターンが存在することが明らかになっている。本研究では分子動力学法 (MD) を用いてシリコンクラスターの解離過程を直接シミュレートし、動的なプロセスが解離パターンに与える影響の評価を試みた。また、クラスターの幾何学形状や解離特性をよく表現する原子間ポテンシャルについても検討を加えた。

【方法】 Jarrold らによる CID (Collision-Induced Dissociation) 実験<sup>(1)</sup> を想定して古典 MD シミュレーションを行った。400 × 200 × 200 の周期境界セルの中に 100 個の Ne バッファ分子とシリコンクラスターを配置し、クラスターに大きな並進運動エネルギー (50 ~ 140 eV) を与えてバッファガスと衝突させ、解離させた (Fig. 1)。シリコン原子間のポテンシャルには Tersoff Si(B), Si(C)ポテンシャルと Gong による修正 Stillinger-Weber ポテンシャルを用い比較した。

【結果】 Tersoff Si(B)ポテンシャルではシリコンクラスターの解離パターンをおおよそ再現できたが、Gong ポテンシャルの結果は実験と一致しなかった (Fig. 2)。また、解離パターンに単分子崩壊に関する統計理論を適用したところ、小さいサイズのクラスターの解離過程はある程度動力学的要因に支配されることがわかった。

(1) Jarrold, M. & Honea, E., *J. Phys. Chem.*, **95** (1991), 9181.

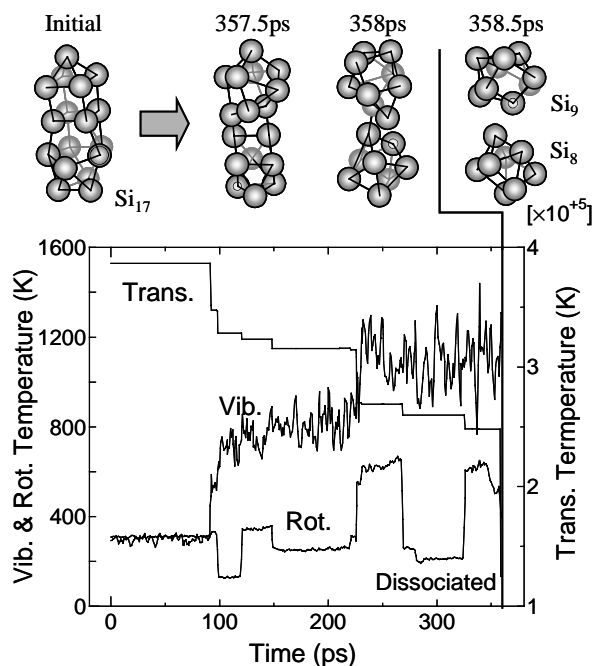


Fig. 1 Dissociation process of Si<sub>17</sub>.

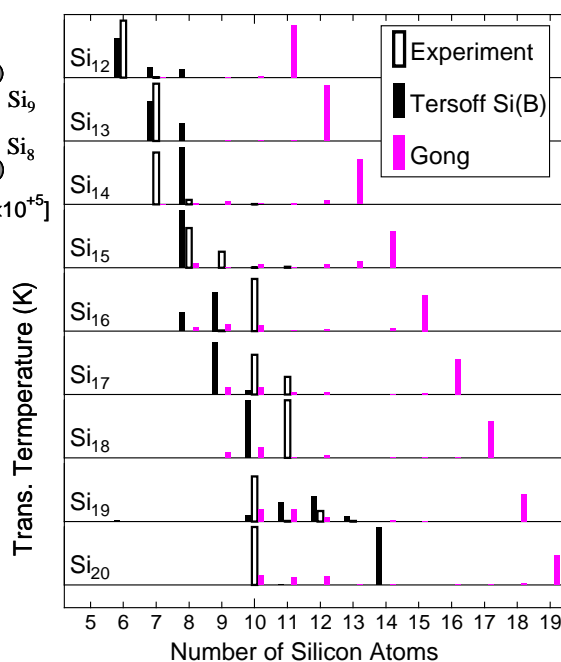


Fig. 2 Fragment Patterns.