

## プラズマ・ハイブリッド・モジュール(PHM)

### PHM の概要

PHM はプラズマ CVD 装置、プラズマエッチング装置、機能性薄膜の製造装置などの CCP/ICP 装置内における非平衡低温プラズマの挙動を解析するためのモジュールです。装置内のプラズマ密度が高い ( $10^{10}$  [cc]程度以上) 場合のプラズマ解析に適したモジュールです。

### PHM のメリット

- PHM は電子温度分布、電子衝突による各種反応レート分布を求める方法として、1) 電子のエネルギー分布関数 (EEDF) を未知とした電子モンテカルロシミュレーション (EMCSM) による方法、2) EEDF をマクスウェル分布と仮定した電子エネルギー方程式 (EEEM) をもちいる方法のいずれかを選択することができます。
- DSMCM、NMEM (中性粒子種流れ計算モジュール) とのカップリングにより、荷電粒子 (電子・イオン) だけでなく、原料ガスやラジカル種などの流れも考慮にいたしたシミュレーションを行うことが可能です。

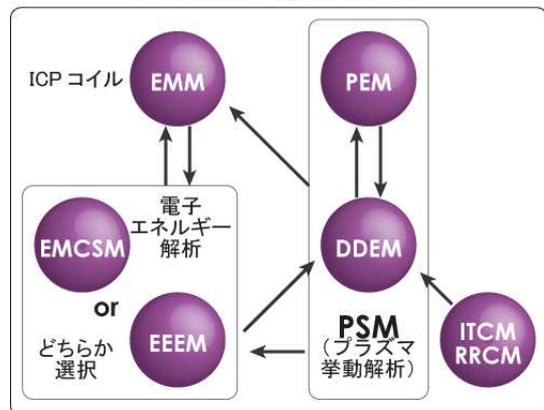
### PHM の詳細

PHM が採用しているハイブリッドモデルでは電子に関してモンテカルロシミュレーションをおこない、電子温度 (平均エネルギー)、電子衝突反応レート、電子衝突周波数、電子移動度・拡散係数を求めます。電子とイオンの密度分布は、ドリフト - 拡散フラックスモデルをもちいた連続の式により計算します。また電位に関するポアソン方程式を同時に解く事によって、self-consistent に解を求めています。

PHM は、大きく分けて以下のサブモジュールから構成されています。

- 電子モンテカルロシミュレーション (EMCSM)
  - ✧ EMCSM は、電子と中性粒子の衝突現象 (弾性衝突、非弾性衝突 / 電離 / 励起 / 解離など) を扱います。
- 電子エネルギー方程式モジュール (EEEM)
  - ✧ EEEM は、電子エネルギー分布関数をマクスウェル分布と仮定してエネルギーバランス方程式を解きます。
- 荷電粒子シミュレーションモジュール (PSM)
  - ✧ ドリフト - 拡散モデルに基づく荷電粒子密度計算 (DDEM)
    - DDEM は、荷電粒子のフラックスにドリフト - 拡散モデルを適用し、連続の式を解きます。
  - ✧ ポアソンソルバ (PEM)
    - PEM は、semi-implicit 法で Poisson 方程式を解いて、ある時刻における静電ポテンシャルおよび静電界を計算します。
- 誘導電界計算 (EMM)
  - ✧ EMM は、ICP 装置の周方向の誘導電界に関するマクスウェル方程式を解きます。

### PHM 概念図



各サブモジュールはそれぞれ独立な物理モデルを取り扱っています。PHM はそれらを組み合わせて (各サブモジュールを適切に繰り返し呼びながら) プラズマのシミュレーションを行うモジュールです。

## PHM の機能一覧

応用分野	非平衡低温プラズマ (プラズマ CVD 装置、プラズマエッチング装置、スパッタリング装置、機能性薄膜の製造装置)	
モデリング手法	ハイブリッドモデル (電子エネルギー分布関数は粒子法もしくは電子エネルギー方程式、電子・イオン密度分布は流体近似 / ドリフト・拡散モデル)	
解析手法	電子モンテカルロシミュレーション、電子エネルギー方程式解法、ドリフト拡散モデルに基づくプラズマ密度計算、ポアソン方程式解法、誘導電界計算	
対象次元	2次元 (デカルト座標系、軸対称座標系)	
ソルバー	ドライバー	PHM
	モジュール	EMCSM、EEEM、DDEM、PSM、PEM、EMM、ECSDB、(NMEM)、(DSMCM)
座標系	デカルト (xy 直交) 座標系 / 円筒 (rz 直交) 座標系	
メッシュ形状	直交メッシュ (可変ピッチ可能)	
境界条件	印加電圧境界 (1つの電極につき2周波までの RF 電圧・周期、DC 電圧)、ノイマン境界 / 対称境界、荷電粒子の反射率、2次電子放出係数、誘電体の表面電荷を考慮可能、(ICP 装置計算の場合; コイルパワー、周波数)	
静磁場	MSSM による計算結果の取り込み、他の静磁場計算コードによる計算結果の取り込み (弊社指定フォーマットで静磁場データファイルを作成)	
GUI 機能	付属の GUIM を使用 (任意の断面グラフ表示、PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	電離、励起などの反応断面積データを内蔵、DSMCM や NMEM とのカップリング計算、リスタート計算、任意分布の初期値からの計算、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限 (実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨 (主に作業領域、プログラムは 200MB)
	その他	Java 実行環境

## PHM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	2次元直交メッシュで定義される任意の電極 / 誘電体 (比誘電率、比透磁率、導電率[S/m]) / コイル / アースの配置	
	対称境界、誘電体面、壁面温度 [eV]、2次電子放出係数、反射係数、電圧設定 (直流 [V] / 交流 [V][Hz][degree])	
ガス種、反応式	直交メッシュの設定、モニタリング点の設定	
	対象粒子種の設定および、反応式設定 (反応断面積データの入力; データベースとして組み込まれている以外はテキストファイル入力)、周期境界	
制御パラメータ	PHM	最大反復回数、粒子種毎の初期密度 [ $/m^3$ ] / 初期温度 [eV]
	PSM	周期数
	PEM	最大反復回数、収束条件
	EMCSM	電子のサンプル粒子最大数、周期数、電子の初期温度 [eV]、最大エネルギー [eV]、エネルギー分割数
	ECSDB	断面積データファイル
	EMM	入力パワー [W]、周波数 [Hz]

## 出力データ

ガス種物理量	各粒子種の各粒子種の密度分布 [ $/m^3$ ] (コンター図)、ソースレート [ $/sec m^3$ ] (コンター図)、温度分布 [eV] (コンター図)、速度分布 [m/sec] (ベクトル図)、フラックス分布 [ $/sec m^2$ ] (ベクトル図)、壁面へのフラックス分布 [ $/sec m^2$ ] (フラックス図)、電子エネルギー分布関数 (1D グラフ図)
電磁場	電位分布 [V] (コンター図)、電界分布 [V/m] (ベクトル図)、磁束密度分布 [Tesla] (ベクトル図)、水平 / 垂直成分磁束密度分布 [Tesla]、磁力線分布 (コンター図)、パワー吸収率分布 (コンター図)
時刻歴データ	モニタリング点における密度時刻歴 [ $/m^3$ ] (1D グラフ図)、電子温度時刻歴 [eV] (1D グラフ図)、ソースレート時刻歴 [ $/sec m^3$ ] (1D グラフ図)、密度ピーク値の時刻歴 [ $/m^3$ ] (1D グラフ図)、電位時刻歴 [V] (1D グラフ図)

# プラズマ PIC モンテカルロ衝突モジュール (PIC-MCCM)

## PIC-MCCM の概要

PIC-MCCM は、プラズマ CVD 装置、プラズマエッチング装置、スパッタリング装置、機能性薄膜の製造装置といった装置内の、非平衡低温プラズマの挙動を解析が可能で、装置内のプラズマ密度が、比較的低い ( $10^{16}$  [#/ $m^3$ ];  $10^{10}$  [#/ $cc$ ]程度以下) 場合のプラズマ解析を得意とするモジュールです。また、電磁場中での電子ビーム、イオンビームの軌道解析などといった荷電粒子挙動解析も可能です。

## PIC-MCCM のメリット

PIC-MCCM は、粒子法を用いた計算モジュールです。荷電粒子 (電子およびイオン) が電磁場中で受ける電磁力、衝突過程、電離過程といった素過程を、一つ一つ忠実に追跡していきます。そのため、

- 物理モデルが比較的簡単である
- シミュレーションの際に持ち込まれている物理モデルの仮定や近似が少ない
- 計算の精度が高い

などといった利点があります。一方で、計算負荷がかなり大きいといったデメリットもありますが将来的には計算の並列化や、計算機自体の高速化によって解決できるものと考えています。

また、DSMCM とのカップリングにより、電子・イオンといった荷電粒子だけでなく、バッファガス・ラジカル種の影響も考慮にいたれた連成シミュレーションを行うことが可能であるという点も大きな利点です。

## PIC-MCCM の詳細

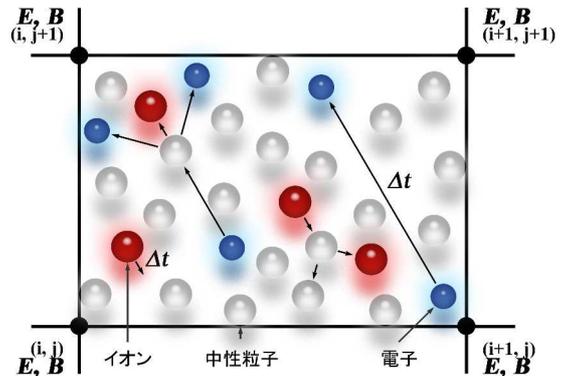
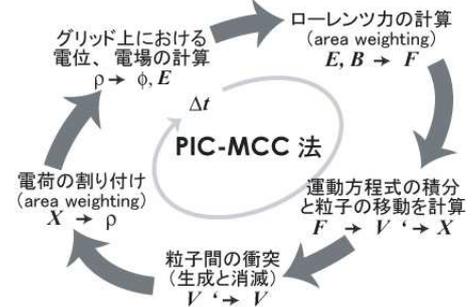
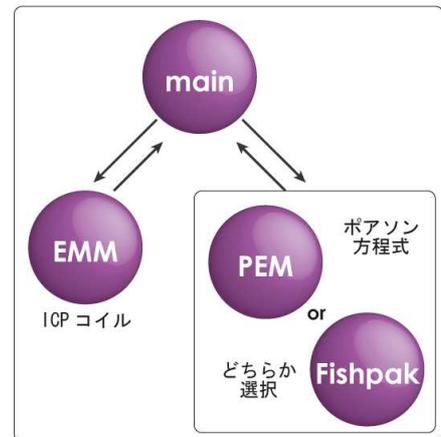
荷電粒子の移動は Particle-In-Cell Method (PIC 法) でモデル化し、荷電粒子と中性粒子の衝突現象 (弾性衝突、非弾性衝突 (電離、励起、電荷交換、解離など) は Monte Carlo Collision Method (MCC 法) で模擬しています。RF 電極および DC 電極、アース、誘電体の配置および荷電粒子自身の分布により決まるポテンシャル場の中での荷電粒子の運動を、短い時間ステップ (大よそ  $10^{-10} \sim 10^{-12}$  [sec] 刻み) で追跡していくことで、プラズマの挙動を計算します。

はじめに荷電粒子 (電子とイオン) と中性原子・分子間の衝突の種類に応じてエネルギー依存断面積を用意し、内部電極を含む境界条件や初期条件として電荷密度分布を、またこれらに静磁界がある場合はその分布を与えます。次に初期ポテンシャルおよび電界を計算します。これらをもとに時間間隔  $t$  内の超粒子の挙動を計算します。

1. セル境界上の電界、磁界を粒子位置に内挿して粒子の速度と位置を計算
2. 壁面での粒子の吸収、2次電子放出など境界上での粒子の計算
3. 荷電粒子と中性原子・分子間の衝突の種類、衝突後の速度を計算
4. ポテンシャル計算のために各セルの電荷密度を計算
5. 各セルのポテンシャルと電界の計算

ここで1、4、5が強電離プラズマのシミュレーションに用いられてきたPIC法です。2を加えることにより粒子に関する境界条件を含んだモデルになります。グロー放電 (特に直流グロー放電) ではカソードからの2次電子放出が放電の維持と、プラズマの構造に重要な影響を及ぼすので、2のようなモデリングが必要となります。荷電粒子と中性原子・分子間の衝突は3のMCCモデルによって考慮されています。

## PIC-MCCM 概念図



## PIC-MCCM の機能一覧

応用分野	非平衡低温プラズマ(プラズマ CVD 装置、プラズマエッチング装置、スパッタリング装置、機能性薄膜の製造装置)、イオンビームや電子ビームの軌道解析	
モデリング手法	粒子法	
解析手法	Particle-In-Cell Monte Carlo Collision (PIC-MCC) 法	
対象次元	2次元(デカルト座標系、軸対称座標系)	
ソルバー	ドライバー	PIC-MCCM
	モジュール	PEM、ECSDB、EMM
座標系	デカルト(xy直交)座標系/円筒(rz直交)座標系	
メッシュ形状	直交メッシュ(可変ピッチ可能)	
境界条件	印加電圧境界(2周波までのRF電圧・周期、DC電圧、任意の電圧時間変化)、ノイマン境界/対称境界、荷電粒子の反射率、2次電子放出係数、誘電体の表面電荷を考慮可能、(ICP装置計算の場合;コイルパワー、周波数)	
静磁場	MSSM 計算結果の取り込み/他の静磁場計算コードによる計算結果の取り込み(弊社指定フォーマットで静磁場データファイルを作成)	
GUI機能	付属のGUIMを使用(任意の断面グラフ表示、PNGファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト	付属のGUIMを使用	
付属機能	電離、励起などの反応断面積データを内蔵、DSMCMとのカップリング計算、リスタート計算、任意分布の初期値からの計算、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限(実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit版, x64版) Linux (32bit版, x64版, IA64版)
	メモリー容量	512MB以上推奨
	ディスク容量	20GB以上推奨(主に作業領域、プログラムは200MB)
	その他	Java実行環境

## PIC-MCCM の入力/出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	2次元直交メッシュで定義される任意の電極・誘電体(比誘電率、比透磁率、導電率[S/m])/コイル/アースの配置	
ガス種、反応式	対称境界、誘電体面、移動壁、壁面温度[eV]、2次電子放出係数、反射係数、流入粒子束[ $\text{m}^2/\text{sec}$ ]、流入温度[eV]、流入速度[m/sec]、電圧設定(直流[V]/交流[V][Hz][degree]) 直交メッシュの設定、モニタリング点の設定	
制御パラメータ	PIC-MCCM	最大ステップ数[nsec]、最大粒子数、時刻歴出力間隔、物理量出力間隔、粒子種毎の初期密度[#/ $\text{m}^3$ ]、外部磁場(データファイル名)中性ガスモジュール選択およびその計算間隔、リスタート出力間隔、ICP計算、電荷密度スムージング。ポアソンソルバとして BiCG-Stab と FISHPAK を選択可能
	ECSDB	断面積データファイル
	EMM	入力パワー[W]、周波数[Hz]

## 出力データ

ガス種物理量	各粒子種の各粒子種の密度分布[個/ $\text{m}^3$ ](コンター図)、ソースレート[個/sec $\text{m}^3$ ](コンター図)、温度分布[eV](コンター図)、速度分布[m/sec](ベクトル図)、フラックス分布[個/sec $\text{m}^2$ ](ベクトル図)、壁面へのフラックス分布[個/sec $\text{m}^2$ ](フラックス図)、壁面へきた粒子の平均エネルギー[eV/sec $\text{m}^2$ ](フラックス図)、壁面への平均入射角[度](フラックス図)、エネルギー分布[eV](1Dグラフ図)、生成率[個/sec](1Dグラフ図)、消滅率[個/sec](1Dグラフ図)	
電磁場	電位分布[V](コンター図)、電界分布[V/m](ベクトル図)、磁束密度分布[Tesla](ベクトル図)、水平/垂直成分磁束密度分布[Tesla]、磁力線分布(コンター図)、パワー吸収率分布(コンター図)	
時刻歴データ	各粒子種の超粒子の個数時刻歴[個](1Dグラフ図)	
	モニタリング点における密度時刻歴[個/ $\text{m}^3$ ](1Dグラフ図)、電子温度時刻歴[eV](1Dグラフ図)、ソースレート時刻歴[個/sec $\text{m}^3$ ](1Dグラフ図)、電位時刻歴[V](1Dグラフ図)	
	プラズマに吸収された電力[W](1Dグラフ図)	
	電流値[A](1Dグラフ図)	



## 中性粒子連続体モジュール(NMEM)

### NMEM の概要

NMEM は複数種の原子・分子（電荷を持たない粒子）からなる混合気体の流れ場を計算します。プラズマプロセッシングにおいては、プラズマの原料となるガス成分についてはもちろん、装置内で生成されるラジカル種の流量や密度分布等を把握することが装置設計の際に重要な要素となります。

NMEM では中性粒子種各成分の拡散を考慮した流体の基礎方程式を解くことにより、各成分の流量と密度を計算しています。この基礎方程式は気体を連続体とみなしたものですので、Kn（クヌーセン数；流れの希薄度を評価する無次元数  $Kn = \text{平均自由行程長} / \text{流れの代表長さ}$ ）がおよそ  $Kn < 0.01$  の場合に対して適用できます。

### NMEM のメリット

- ・ ガス成分の種類ごとに密度と流量（フラックス）の空間分布が求められます。
- ・ 圧縮性と粘性を考慮した流れの計算ができます。
- ・ プラズマとカップリングした計算が可能です。（PHM または PIC-MCCM とのカップリング）

### NMEM の詳細

**【基礎方程式】** NMEM の基礎方程式は、（１）各成分に関する連続の式、（２）混合気体に関する連続の式、（３）混合気体に関する運動方程式、（４）混合気体に関するエネルギーバランス式です。気体は理想気体と仮定しています。未知変数は成分ごとの数密度  $n_k$ （ $k$  は成分の種類）、混合気体の流速ベクトル  $v$ 、圧力  $p$ 、温度  $T$  で、これらは位置座標と時間の関数です。

**【境界条件】** 流入・流出に関しては流量規定/圧力規定、壁面に関しては slip/no-slip および等温/断熱を指定できます。流量規定の場合は流量を [scm] 単位で与えます。また壁面における反応も考慮できます。

**【数値解法】** 空間の離散化に有限体積法をもちい、時間積分については FLIC 法（FLuid In Cell 法）をもちいています。離散化により計算セルごとに得られる差分方程式は、物理的に次のような内容を表します。

[セル内の物理量 の時間変化率] = [セル界面をよぎるフラックスの総和] + [セル内の生成率]  
フラックスはさらに、混合気体の流れにより生じる[移流フラックス] ( $n\mathbf{v}$ ) と、物理量の空間勾配に比例する[拡散フラックス] ( $- \text{grad}$ ) の和として表されます。移流フラックスは未知量である流速  $v$  を含むので、非線形方程式です。FLIC 法では[時間変化率] = [時間変化率 1] + [時間変化率 2] と分離して考えます。ただし、

[時間変化率 1] = [セル界面をよぎる拡散フラックスの総和] + [セル内の生成率]

[時間変化率 2] = [セル界面をよぎる移流フラックスの総和]

です。そして次の手順で  $(t)$  から  $(t + \Delta t)$  を求めます。ここで  $(t)$  は時刻  $t$  における物理量 の値、 $\Delta t$  は時間増分です。

- 1)  $(t)$  をもちいて拡散フラックスを計算し、[時間変化率 1] を求める。
- 2)  $\hat{\phi} = \phi(t) + [\text{時間変化率 1}] \times \Delta t$  により の中間値  $\hat{\phi}$  を求める。
- 3)  $\hat{\phi}$ 、 $n$ 、 $v$  をもちいて移流フラックス  $n\hat{\mathbf{v}}\hat{\phi}$  を計算し、[時間変化率 2] を求める。
- 4)  $(t + \Delta t) = \hat{\phi} + [\text{時間変化率 2}] \times \Delta t$  により  $(t + \Delta t)$  を求める。

**【プラズマとのカップリング】** プラズマ中で電子やイオンとの衝突により生成される成分を考慮する場合には、別モジュール（PHM または PIC-MCCM）で計算された生成レートをもちいて計算をおこないます。その場合 NMEM はこれらのモジュールからサブルーチンとして使用されます。

## NMEM の機能一覧

応用分野	各種装置内における気体の流れ解析（層流）	
モデリング手法	連続体モデル	
解析手法	FLIC 法	
対象次元	2次元（デカルト座標系、軸対称座標系）	
ソルバー	ドライバー	NMEM
	モジュール	NMEM
座標系	デカルト（xy 直交）座標系 / 円筒（rz 直交）座標系	
メッシュ形状	直交メッシュ（不等間隔）	
境界条件	流量規定、圧力規定、壁面摩擦有無、等温壁、断熱壁、壁面反応、周期境界	
GUI 機能	付属の GUIM を使用（任意の断面グラフ表示、PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小）	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	PHM または PIC-MCCM とのカップリングによりガスの生成 / 消滅を考慮した計算が可能、リスタート計算、自動的に時間間隔を設定、任意分布の初期値からの計算、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限（実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます）	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨（主に作業領域、プログラムは 200MB）
	その他	Java 実行環境

## NMEM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	2次元直交メッシュで定義される任意の装置形状	
	対称境界、周期境界、流入/流出境界（流入流量、圧力）、壁面境界（壁面温度、反応） 直交メッシュの設定、モニタリング点の設定	
ガス種、反応式	対象粒子種の設定および、反応式設定（反応断面積データの入力；データベースとして組み込まれている以外はテキストファイル入力）	
制御パラメータ	NMEM	タイムステップ数、時間刻みの上限 / 下限 [sec]、ファイル出力の頻度、物性値更新の頻度、エネルギー方程式の on/off、初期温度 [eV]、粒子種ごとの初期分圧 [Pa]、定積比熱 [J/kg/K]、プラントル数 各種境界条件に対するパラメータ：流入量 [sccm] / 流入温度 [eV] / 境界圧力 [Pa] / 壁面温度 [eV] / 壁面における反射率

## 出力データ

ガス種物理量	各粒子種の密度分布 [個/m <sup>3</sup> ]（コンター図）、流量分布 [個/m <sup>2</sup> /sec]（ベクトル図）、混合気体の温度分布 [eV]（コンター図）、速度分布 [m/sec]（ベクトル図）、圧力分布 [Pa]（コンター図）
時刻歴データ	モニタリング点における密度時刻歴 [個/m <sup>3</sup> ]、温度時刻歴 [eV]、圧力時刻歴 [Pa]（1D グラフ図）

## 中性粒子 DSMC モジュール(DSMCM)

### DSMCM の概要

DSMCM は、多数のサンプル粒子を配置し、それらの粒子の衝突を物理モデルに従って確率的に引き起こして挙動を追跡していくといった DSMC 法（粒子モデル）を用い、いろいろな真空装置内の希薄気体の流れ場を解析するためのモジュールです。気体を連続体であるとして取り扱うナビエ・ストークス方程式の適用限界を超える、 $Kn$ （クヌーゼン数；流れの希薄度を評価する無次元数、 $Kn = \text{平均自由行程長} / \text{流れの代表長さ}$ ）が  $Kn > 0.01$  場合の流れ場の解析を得意としたモジュールです。エッチング装置、薄膜製造装置、スパッタリング装置内の電荷を持たない中性粒子（バッファガス、ラジカル種、スパッタリング粒子）の挙動を解析することができます。

### DSMCM のメリット

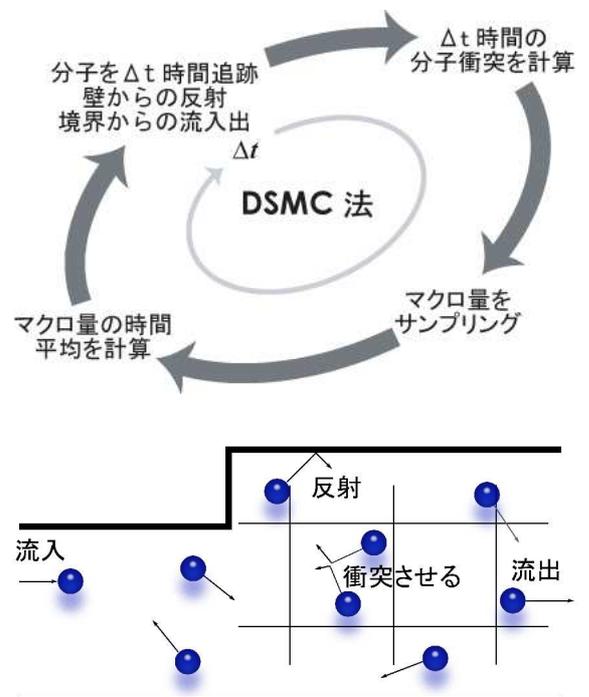
- DSMC 法は、原理的には自由分子流から常圧の気体の流れ場までを解析できます。実際には計算量の問題から、低圧の流れ場に適用するのが最も有効です。
- PIC-MCCM や PHM とカップリングすることにより、バッファガスの流れ場だけでなくラジカル種やスパッタリング粒子の挙動も（テスト粒子モンテカルロ法を用いて）高速に計算することが可能です。

### DSMCM の詳細

一般に希薄気体について解析する場合、気体を連続体であるとみなして取り扱うナビエ-ストークス方程式は適用できず、Boltzmann 方程式にまでさかのぼって考えなくてはなりません。ところが、この Boltzmann 方程式は複雑な非線形積分微分方程式であり、その取扱いは非常に難しいです。DSMC 法は Boltzmann 方程式を直接解くのではなく、Boltzmann 方程式の基になっているそれぞれの粒子の衝突過程を確率的に取り扱うことによって流れ場を解析するといった方法です。

DSMC 法の基本的な考え方は、気体を多数の粒子で表すことです。これらの、計算機内に配置された粒子（サンプル粒子）は、現実の体系内の非常に多数の、たとえばアボガドロ数程度の粒子の代表であると考えます。数万～100万個程度の粒子を取り扱い、各粒子の位置、速度、内部状態等をメモリー内に記録し、衝突や境界の影響によってそれらの値を更新していくという手続きを繰り返すこととなります。衝突過程については、与えられた衝突断面積に従って確率的に引き起こし、衝突後の2粒子の速度もその衝突物理モデルに従い確率的に決定します。具体的には、流れ場を適当な大きさのセルに分割し、同一セル内の2個の粒子を物理モデルに基づいた確率則に従って衝突対として選択するというものです。衝突後の粒子対の速度は、エネルギー、運動量等が保存されるように決められ、必要であれば各粒子の内部状態も変化させます。希薄気体の場合、流れ場の物理量の変化の代表的な長さは平均自由行程程度であることから、セルのサイズは平均自由行程程度の大きさとし、セルの大きさが平均自由行程程度のとき、セル内での物理量はほとんど一様と考えてよいことになります。DSMC 法により直接得られるものは、多数の粒子の位置、速度等のサンプルデータです。このデータを加工することにより、粒子の速度分布関数、温度分布、流速分布、密度分布などを得ることができます。統計誤差はサンプル数の  $1/2$  乗に反比例しますので、時間平均のゆらぎが小さくなり、十分な精度を持つまでサンプリングを行うことになります。

衝突対の選び方は Nanbu の方法（Boltzmann 方程式から厳密に導かれた確率則）に従っています。



## DSMCM の機能一覧

応用分野	真空装置・ポンプを含む装置内での希薄気体流れ ・一般的な希薄気体条件下での中性粒子の気体流れ解析 ・スパッタリング粒子挙動解析（スパッタ装置内の基板堆積）	
モデリング手法	粒子法	
解析手法	DSMC 法およびテスト粒子モンテカルロ法	
対象次元	2次元（デカルト座標系、軸対称座標系）	
ソルバー	ドライバー	DSMCM
	モジュール	DSMCM
座標系	デカルト（xy 直交）座標系 / 円筒（rz 直交）座標系	
メッシュ形状	直交メッシュ（可変ピッチ可能）	
境界条件	反射率(吸着率)の指定、拡散反射条件、鏡面反射条件、Maxwell 型反射条件の指定、対称境界、壁面温度の指定、壁面移動速度、回転数の指定	
GUI 機能	付属の GUIM を使用（任意の断面グラフ表示、PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小）	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	PIC-MCCM とのカップリング計算、PHM のカップリング計算、SPUTSM の計算結果の取り込み、任意分布の初期値からの計算、解析したいガス種以外の密度分布、温度分布、速度分布を固定した解析、リスタート計算、任意分布の初期値からの計算、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限（実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます）	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨（主に作業領域、プログラムは 200MB）
	その他	Java 実行環境

## DSMCM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	2次元直交メッシュで定義される任意形状 対称境界、移動壁、壁面温度[eV]、反射係数、流入フラックス[#/m <sup>2</sup> /sec]、流入分子の速度分布(Maxwell、単速度、任意分布)、流入温度[eV]	
ガス種、反応式	直交メッシュの設定、モニタリング点の設定 対象粒子種の設定、衝突の分子モデル(剛体球、VHS、GHS)	
制御パラメータ	DSMCM	最大ステップ数、サンプリング間隔、時刻歴出力間隔、物理量出力間隔、最大粒子数、リスタート出力間隔、粒子種毎の初期密度[#/m <sup>3</sup> ] / 初期温度[eV] / 初期超粒子数、重力設定

## 出力データ

ガス種物理量	各粒子種の各粒子種の密度分布[個/m <sup>3</sup> ]（コンター図）、温度分布[eV]（コンター図）、速度分布[m/sec]（ベクトル図）フラックス分布[個/sec m <sup>2</sup> ]（ベクトル図）、壁面へのフラックス分布[個/sec m <sup>2</sup> ]（フラックス図）、壁面へきた粒子の平均エネルギー[eV/sec m <sup>2</sup> ]（フラックス図）、壁面への平均入射角[度]（フラックス図）、エネルギー分布[eV]（1D グラフ図）	
時刻歴データ	各粒子種の超粒子の個数時刻歴[個]（1D グラフ図） モニタリング点における密度時刻歴[個/m <sup>3</sup> ]（1D グラフ図）、温度時刻歴[eV]（1D グラフ図）	

## 静磁場解析モジュール(MSSM)

### MSSM の概要

永久磁石、磁場コイルによる静磁場解析を行う 2次元静磁場解析専用モジュールです。そして解析手法として有限要素法 (FEM) を用いています。有限要素法では、空間や物体など電磁界が存在するところをある形状の決まった要素で細かく分割していき、その要素の中でポテンシャルなどの未知変数を補間します。

通常の場合、電界および磁界の強さを直接未知変数にすることはあまりなく、ポテンシャル (A-) 法を用います。有限要素法では、ポテンシャルを未知変数にとる場合が多いですが、電磁界の強さを求めるときはポテンシャルを微分して計算します。一次補間を用いると場の強さは要素内で一定になりますので、高い精度で場の分布を求める場合メッシュ分割も細かくしなければなりません。

### MSSM のメリット

2次元 (デカルト座標、軸対称) 専用モジュールですので、高速に計算を行います。またプラズマ解析モジュールへの磁束密度分布の受け渡しが同一 GUI で行えますので、操作が簡単です。

また、MSSM のメッシュ分割とプラズマ解析でのメッシュ分割が異なっていますが、プラズマ解析モジュール内で自動的に補間しますので、プラズマ解析でのメッシュ分割を意識しなくても構いません。また、有限要素法の一般的な特徴として、マトリックスの正定値性、対称性およびスパース性があげられます。これらの性質によって解き易い形になっており、さらに記憶容量や計算時間が少なくて済みます。

### MSSM の詳細

マクスウェル方程式からの静磁界方程式に基づき、(A-) 法を 2次元用に適用しています。

3次元計算ではベクトルポテンシャル A の 3成分全てが未知数となりますが、2次元デカルト座標では A の z 成分  $A_z$ 、軸対称系では A の成分 A のみで済みます。この  $A_z$ 、A を用いて磁束密度  $B_x$ 、 $B_y$  もしくは  $B_r$ 、 $B_z$  が得られます。

境界条件については、2次元の場合、

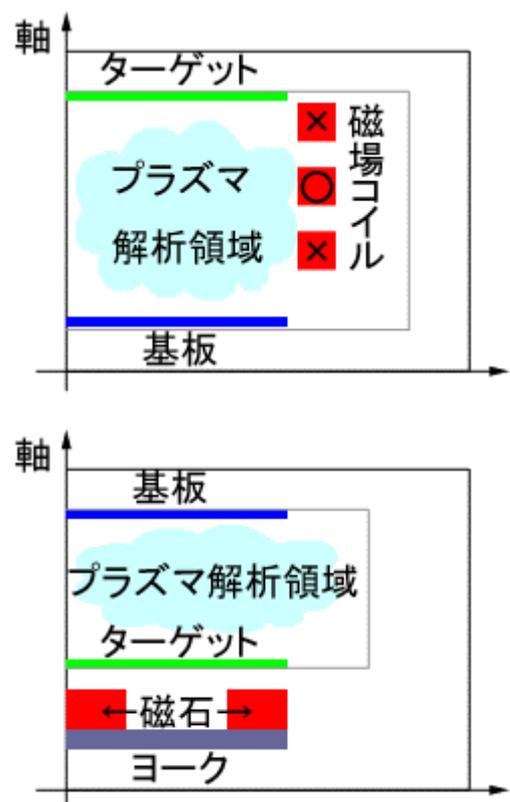
- 1) 磁界が境界に平行なとき、固定境界条件:  $A=0$
- 2) 磁界が境界に垂直なとき、自然境界条件:  $n_x H=0$

それ以外の遠方境界のとき、磁界の接線成分を与えます。A の境界条件は、対称面 (1/2、1/4 モデルなどの場合) または遠方境界面に対して、磁束密度 B の方向によって次のように決められます。

- 1) 対称面もしくは境界面に対して、A の条件
  - 2) 磁束密度 B が平行なとき、 $A_z$  もしくは A を固定する (固定境界条件)
  - 3) 磁束密度 B が垂直なとき、何も与えない (自然境界条件)
- こととなります。

MSSM では、は導体 (電気伝導度 0 の領域) の中で定義されています。導体表面上では、電流密度の法線成分が 0 になることから、入力として条件を付与する必要はありません (自然境界条件)。

材料特性については、MSSM では、線形および非線形磁性材料についての解析が可能です。



## MSSM の機能一覧

応用分野	永久磁石、磁場コイルによる静磁場解析	
モデリング手法	A- 法	
解析手法	有限要素法	
対象次元	2次元（デカルト座標系、軸対称座標系）	
ソルバー	ドライバー	MSSM
	モジュール	MSSM
座標系	デカルト（xy 直交）座標系 / 円筒（rz 直交）座標系	
メッシュ形状	直交メッシュ（可変ピッチ可能）	
境界条件	対称境界、自然境界	
静磁場	静磁場解析の出力	
GUI 機能	付属の GUIM を使用（任意の断面グラフ表示、PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小）	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	磁性体ライブラリ、BH テーブルデータ	
解析規模	無制限（実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます）	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨（主に作業領域、プログラムは 200MB）
	その他	Java 実行環境

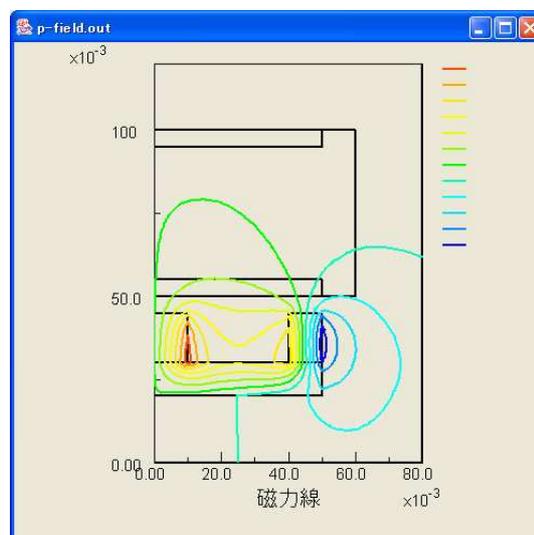
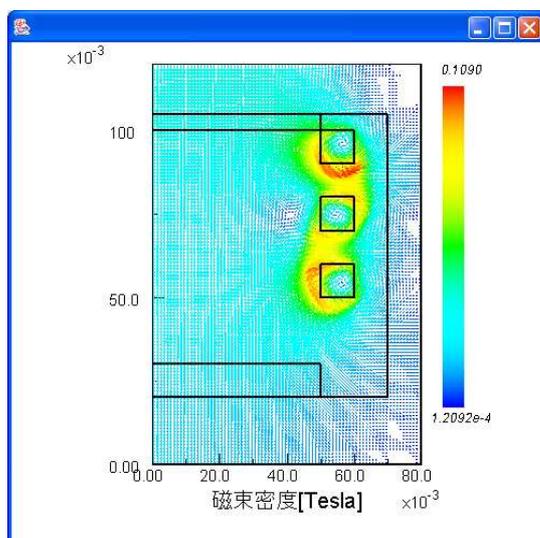
## MSSM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	2次元直交メッシュで定義される任意の永久磁石（残留磁束密度、保持力）/ 磁場コイル（アンペアターン、電流の向き）の配置	
	プラズマ解析領域の設定	
	直交メッシュの設定	
制御パラメータ	MSSM	なし
BH テーブル	S17C、SS400、S45C、SPCC、STEEL	

## 出力データ

電磁場	磁束密度 [Tesla]（ベクトル図）、水平 / 垂直成分磁束密度分布 [Tesla]（コンター図）、磁力線図（ラインコンター図）
磁束密度分布ファイル	プラズマ解析用入力ファイルの出力（既定値ファイル名：bfield.ext）



## 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア (RGS3D)

### RGS3D の概要

RGS3D は、多数のサンプル粒子を配置し、それらの粒子の衝突を物理モデルに従って確率的に引き起こして挙動を追跡していくといった DSMC 法（粒子モデル）を用い、いろいろな真空装置内の希薄気体の流れ場を解析するためのモジュールです。気体を連続体であると見なして取り扱うナビエ・ストークス方程式の適用限界を超える  $Kn$ （クヌーゼン数；流れの希薄度を評価する無次元数、 $Kn = \text{平均自由行程長} / \text{流れの代表長さ}$ ）が、 $Kn > 0.01$  の場合の流れ場の解析を得意としています。また、 $Kn > 1$  となる場合は、高速なモンテカルロ法の選択が可能です。各種プラズマ装置、真空装置、そして真空ポンプ内、また、一般的な希薄気体条件下での電荷を持たない中性粒子の挙動を解析することができます。

### RGS3D のメリット

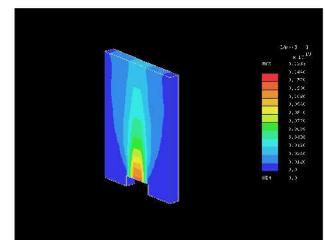
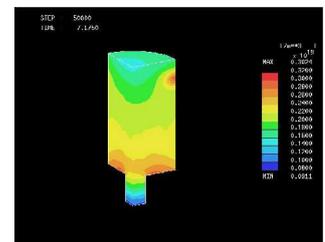
- RGS3D で用いている DSMC 法は、原理的には非常に圧力の低い気体の流れ場（自由分子流）から常圧の気体の流れ場までを解析できます。ですが、計算量の問題から、実用的には低圧の流れ場に適用するのが最も有効です。
- 任意形状の構造物、空間メッシュ分割による解析が可能です。付属のプリポストもありますが、メッシュ形状の入力として NASTRAN データフォーマットを、ポスト処理用に解析結果の I-deas のユニバーサルファイル、FEMAP のニュートラルファイル出力をサポートし、既存のプリポストを利用することが可能です。
- 重み付法の採用により、各粒子種の密度差に無関係にほぼ同程度のサンプル粒子数での解析を行いますので、どのような混合ガスでも精度の良い解析が可能です。
- 自由分子流のように分子間衝突が殆ど無く、壁との衝突が支配的な場合は、高速なモンテカルロ法の選択が可能です。

### RGS3D の詳細

一般に希薄気体について解析する場合、気体を連続体であるとみなして取り扱うナビエ-ストークス方程式は適用できず、Boltzmann 方程式にまでさかのぼって考えなくてはなりません。ところが、この Boltzmann 方程式は複雑な非線形積分微分方程式であり、その取扱いは非常に難しいです。DSMC 法は Boltzmann 方程式を直接解くのではなく、Boltzmann 方程式の基になっているそれぞれの粒子の衝突過程を確率的に取り扱うことによって流れ場を解析するといった方法です。

DSMC 法では、解析領域内に多数のサンプル粒子を配置し、それらの粒子の衝突を物理モデルに従って確率的に引き起こして挙動を追跡します。また、2種以上の粒子種を扱うとき、各粒子種の密度差が大きくてもサンプル粒子の重みを考慮したアルゴリズムを採用しているため、密度差に無関係に、各粒子種とも同数程度のサンプル粒子数で計算が可能です。

衝突過程については、与えられた衝突断面積に従って確率的に引き起こし、衝突後の2粒子の速度もその衝突物理モデルに従い確率的に決定します。具体的には、流れ場を適当な大きさのセルに分割し、同一セル内の2個の粒子を物理モデルに基づいた確率則に従って衝突対として選択するというものです。衝突後の粒子対の速度は、エネルギー、運動量等が保存されるように決められ、必要であれば各粒子の内部状態も変化させます。希薄気体の場合、流れ場の物理量の変化の代表的な長さは平均自由行程長程度であることから、セルのサイズは平均自由行程長程度の大きさとします。セルの大きさが平均自由行程長程度のとき、セル内での物理量は殆ど一様と考えてよいことになります。DSMC 法により直接得られるものは、多数の粒子の位置、速度等のサンプルデータです。このデータを加工することにより、粒子の速度分布関数、温度分布、流速分布、密度分布などを得ることができます。統計誤差はサンプル数の  $1/2$  乗に反比例しますので、時間平均のゆらぎが小さくなり、十分な精度を持つまでサンプリングを行うことになります。RGS3D での衝突モデルは、最大衝突数法を用いています。また、気相反応、表面反応も考慮可能です。



## RGS3D の機能一覧

応用分野	真空装置・ポンプを含む装置内での希薄気体流れ 一般的な希薄気体条件下での中性粒子の気体流れ解析	
モデリング手法	粒子法	
解析手法	DSMC 法、モンテカルロ法	
対象次元	3次元デカルト座標系	
ソルバー	ドライバー	RGS3D
	モジュール	RGS3D
座標系	3次元直交座標系	
メッシュ形状	任意形状メッシュ(4面体、5面体、6面体)	
境界条件	表面反応の指定、反射率(吸着率)の指定、拡散反射条件、鏡面反射条件、COS分布反射条件、壁面温度の指定	
GUI機能	3次元直交メッシュ生成、制御データ、境界条件 付属のプレポストを使用	
プレポスト	NASTRAN データフォーマットによる入力をサポート 解析結果のユニバーサルファイル、ニュートラルファイル出力をサポート	
付属機能	粒子の初期配置機能、リスタート計算、粒子種毎に境界壁反射条件の設定が可能(気相反応(反応確率を定数とした、 $A + B \rightarrow C + D$ )、壁面反応(反応確率を定数とした、 $A + W \rightarrow B$ 、 $W$ は壁面物質))	
解析規模	無制限(実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit版, x64版) Linux (32bit版, x64版, IA64版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨(主に作業領域、プログラムは200MB)
	その他	Java 実行環境

## RGS3D の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

形状データ	3次元任意形状メッシュで定義される、任意の容器形状、流入・流出口(面、円形穴)そして構造物の配置を指定
	表面反応の指定、反射率(吸着率)の指定、拡散反射条件、鏡面反射条件、COS分布反射条件、壁面温度の指定
ガス種、反応式	流入気体の温度、圧力、フラックスの指定、流入気体の速度分布の指定
制御パラメータ	対象粒子種の設定(粒子種毎の質量数、直径(剛体球モデル))、反応式設定 最大ステップ数、サンプリング間隔、サンプリング回数、時間刻み幅など

## 出力データ

ガス種物理量	各粒子種の各粒子種の密度分布[個/m <sup>3</sup> ](コンター図)、温度分布[eV](コンター図)、速度分布[m/sec](ベクトル図)、圧力分布[Pa](コンター図)、壁面へのフラックス分布[個/sec m <sup>2</sup> ](フラックス図)、壁面へきた粒子の平均エネルギー[J/sec m <sup>2</sup> ](フラックス図)
時刻歴データ	各粒子種の超粒子の個数時刻歴[個](1Dグラフ図) モニタリング点における密度時刻歴[個/m <sup>3</sup> ](1Dグラフ図)、温度時刻歴[K](1Dグラフ図)、圧力時刻歴[Pa](1Dグラフ図)

## 表面形状・シミュレーション・モジュール(FPSM2D)

### FPSM の概要

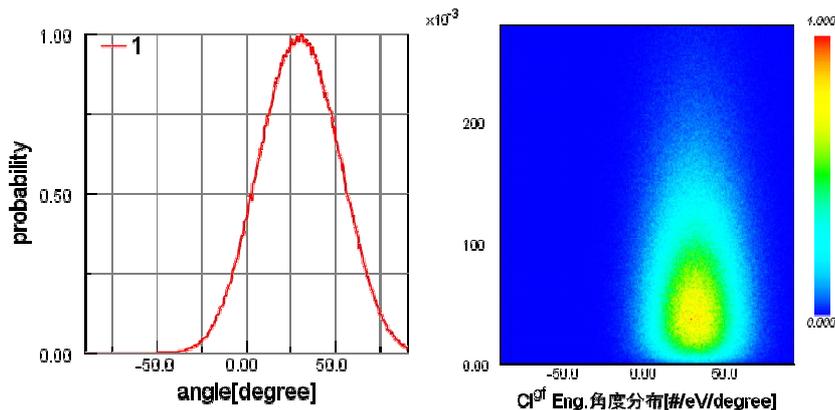
表面形状シミュレーションモジュール FPSM2D (Feature Profile Simulation Module-2D; FPSM2D) は、粒子モンテカルロ法により、基板表面での様々な反応を考慮し、基板、堆積膜の経時変化を計算するモジュールです。PVD、プラズマ CVD、そしてエッチングなどのような反応にも対応可能です。

### FPSM2D の詳細

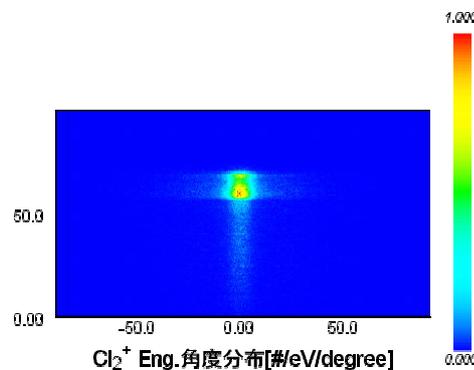
FPSM2D は、粒子モンテカルロ法を用い、セル法により固体層占有率、表面被覆率を考慮し形状を表現します。このときセル法特有のシャープな境界面は用いず、固体層占有率による勾配から入射角を決定し、入射角依存の鏡面反射確率、反応確率に適用します。ガス種、反応式、錯体、そしてポリマーなどの数には制限はありません。2次元直交メッシュで定義されますが、初期形状は任意形状で与えることが可能です。入射粒子情報(粒子フラックス、入射エネルギー・角度分布)は PEGASUS 気相モジュール、PEGASUS 表面科学系モジュールからの出力を使用するか、もしくは FPSM2D が備えている入力方法で使用者が指定します。反応式は使用者が定義します。鏡面反射確率、反応確率は入射角度および入射エネルギーに依存する関数を使用します。

流入境界においては、幾つかの流入オプションがあります。

使用者が指定する 1、2次元分布



PEGASUS 気相・表面科学系シミュレータからの入力



## FPSM2D の機能一覧

応用分野	PVD、プラズマ CVD、そしてドライエッチングなどのプロセスにおける表面形状シミュレーション	
解析手法	モンテカルロ法、セル法	
対象次元	2次元	
ソルバー	ドライバー	FPSM2D
	モジュール	FPSM2D
座標系	2次元デカルト座標	
メッシュ形状	矩形	
境界条件	拡散反射、鏡面反射、物理・化学反応	
GUI 機能	付属の GUIM を使用 (PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト		
付属機能	-	
解析規模	無制限 (実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨 (主に作業領域、プログラムは 200MB)
	その他	Java 実行環境

## FPSM2D の入力 / 出力のデータ一覧

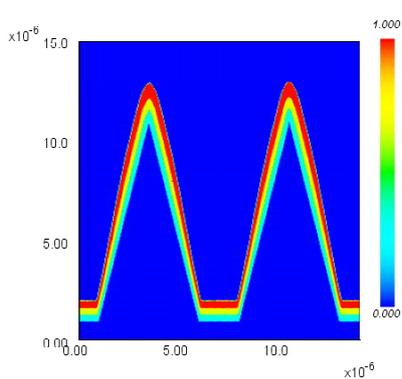
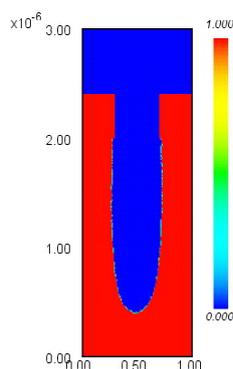
## 入力データ

メッシュ分割データ、形状出力時間、粒子種の定義、反応式の定義、使用者が指定する入射粒子情報、PEGASUS 気相モジュールおよび表面科学系モジュールからの出力ファイル
-------------------------------------------------------------------------------------

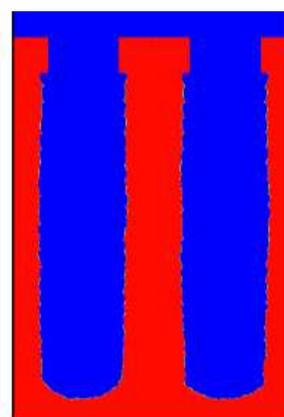
## 出力データ

dens_?.out	気相粒子の密度分布、速度分布および固体層のセル占有率 (コンター図)
lead_?.out,?.gtd	入射粒子のエネルギー分布、角度分布 (1、2次元分布図)

多層膜 PVD

Ar/Cl<sub>2</sub> の Si エッチング

ボッシュプロセス



## シース内モンテカルロ・シミュレーション・モジュール (SMCSM)

### SMCSM の概要

このモジュールの機能は、プラズマシース端からシースを通してシース底部（ターゲット表面）に達するイオン、電子のエネルギー分布、角度分布等を計算することです。このモジュールの主な用途は2つあります。

- 現在の PHM は、装置内のプラズマ分布等を計算しますが、計算モデル上、イオンのエネルギーについては何も計算できません。ですが、基板 / ターゲット表面のイオンエネルギーを推測したい場合が多いと考えられます。SMCSM は、PHM の計算結果（シース電位差等）を用いて、基板 / ターゲット表面のイオンエネルギー分布等を計算します。
- PIC-MCCM、PHM とも、計算時間がかかります。ターゲット表面のイオンのエネルギーについての評価をしたい場合、SMCSM は内蔵のシースモデルを用いて短時間で計算することが可能です。

### SMCSM のメリット

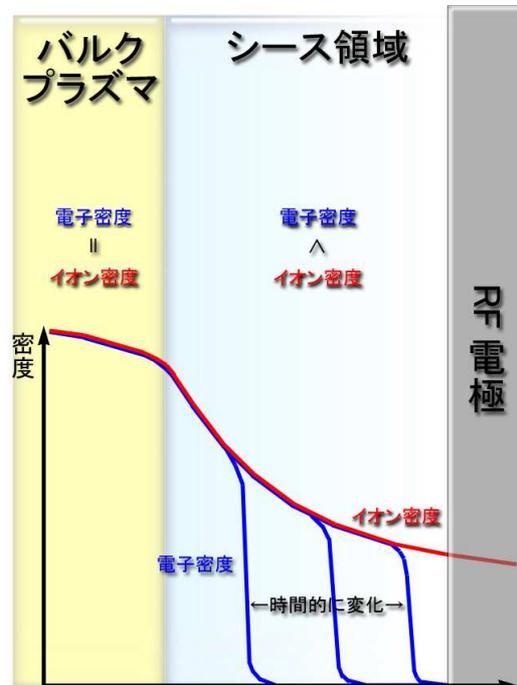
SMCSM の計算モデルは単純なため、計算時間がかかりません。

内蔵のシースモデルを用いることにより、RF 放電装置内の基板へのイオンのエネルギー分布（IED）を簡単に推測することが出来ます。また PHM の計算結果を用いれば、装置の電圧、ガス圧等のパラメータと IED の関係などが評価できます。

### SMCSM の詳細

SMCSM の目的は、シース端からシースを通してシース底部に達する荷電粒子（イオンや電子）のエネルギー分布、角度分布等を計算することです。計算手順の概略はつぎの通りとなります。

1. Lieberman シースモデル（あるいは PHM の計算）により、1 RF 周期の電界（1次元、時間依存）を計算しておく
2. シース境界から荷電粒子（イオンまたは電子）を入れる。このとき、粒子は指定した速度分布（電子であれば、Maxwell-Boltzmann 分布、イオンであれば、Bohm 速度 + Maxwell-Boltzmann 分布）を持つものとする。また、シース境界に入射する時刻は RF 周期内での一様乱数で決める
3. シース底部（ターゲット表面）に達するまで、時間変化する電界中での荷電粒子の運動を追跡する
4. シース底部（ターゲットや基板の表面）に達した荷電粒子のエネルギー、入射角等をサンプリングする



SMCSM 自体は特に複雑な計算モデルを用いているわけではなく、Liebermann シースモデルより1次元の時間依存電界  $E(x, t)$  を決め、その電解中での荷電粒子の運動の追跡のみ行っています。

## SMCSM の機能一覧

応用分野	プラズマシース端からシースを通してシース底部に達する電子およびイオンのエネルギー / 角度分布	
モデリング手法	Lieberman のシースモデル	
解析手法	モンテカルロ法	
対象次元	1 次元	
ソルバー	ドライバー	SMCSM
	モジュール	SMCSM
座標系	-	
メッシュ形状	-	
境界条件	-	
GUI 機能	付属の GUIM を使用 (PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	-	
解析規模	無制限 (実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨 (主に作業領域、プログラムは 200MB)
	その他	Java 実行環境

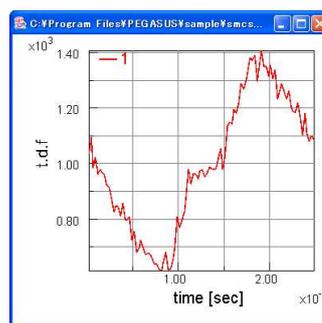
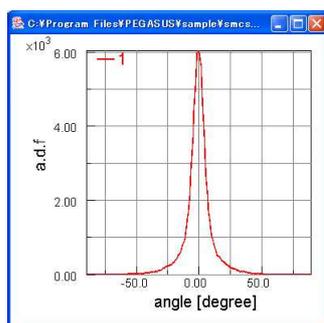
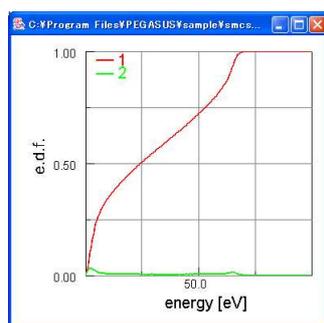
## SMCSM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

モデル選択	Lieberman シースモデル / PHM 計算結果
制御パラメータ	電流、周波数、密度、シース内分割数、1 周期分割数 (PHM 結果から自動入力)
	電子温度、粒子の質量、粒子の電荷、サンプリング数、サンプリングの最大エネルギー、サンプリングの解像度 (エネルギー)、サンプリングの解像度 (時間)、サンプリングの解像度 (角度)、バッファガスと対象粒子の弾性衝突断面積、バッファガスの圧力
	PHM 出力ファイル (PHM モデル選択のみ)

## 出力データ

edf データ	シース底部に到達した粒子のエネルギー分布 (1D グラフ図)
angle データ	シース底部に到達した粒子の角度分布 (1D グラフ図)
time データ	シース底部に到達した粒子の時刻分布 (1D グラフ図)



## 動的モンテカルロシミュレーションソフトウェア (SASAMAL)

### SASAMAL の概要

SASAMAL (Simulation of Atomic Scattering in Amorphous MATERIAL based on Liquid model および、dynamic-SASAMAL) は、産業技術総合研究所 (中部センター) 基礎素材研究部門の宮川佳子主任研究員らが開発した、2体衝突近似に基づくモンテカルロ法によるシミュレーションコードです。アモルファスタターゲットに高エネルギーのイオンが入射した際の、

- スパッタリング率
- スパッタリング原子の放出角度分布、エネルギー分布
- 入射粒子の後方散乱する割合、角度分布、エネルギー分布
- イオンのターゲットへの侵入深さ (Depth Profile)

を計算します。各種材料のスパッタリング率の、イオンの入射エネルギー依存性や入射角度依存性の評価、イオン注入による材料の表面改質プロセスの評価などに利用できます。

### SASAMAL のメリット

SASAMAL 単体のみを用いた場合でも、イオン注入、あるいはスパッタリング現象そのものに関する計算を行うことが可能です。さらに、PIC-MCCM や DSMCM と組み合わせて (実際には SPUTSM を介したカップリング計算) 用いた場合、広い範囲の装置パラメータの影響を調べることも可能です。

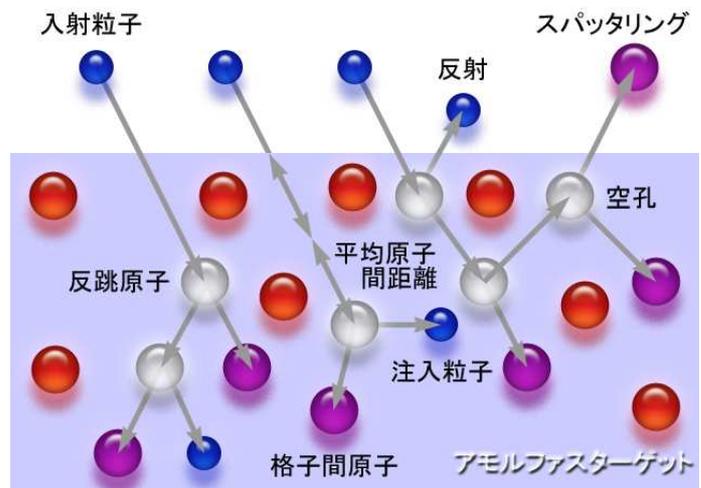
例えば、SASAMAL 単体として用いた場合では、入射イオンのエネルギーはユーザーが与えるパラメータに過ぎませんが、PIC-MCCM と組み合わせることで、それは装置内のガス圧、電極の電圧、磁石の強さなどをパラメータとして与えた上で計算される量となります。つまり、装置のガス圧とスパッタリング率の関係なども評価することが可能となります。

### SASAMAL の詳細

2体衝突近似 (Binary Collision Approximation; BCA) とは、固体内を運動するイオン、及びイオンによって弾き出された原子 (反跳原子) の運動を追跡する際に、固体内の複雑なポテンシャル場中の衝突 (多体衝突) を考慮することをせずに、2体衝突の連続として取り扱う近似法です。

入射粒子 (中性の原子あるいはイオン) が、入射粒子が固体ターゲットに侵入するとき、ターゲット原子との弾性衝突によってエネルギーを失い方向を変えます。また入射粒子は、電子との衝突に起因する非弾性衝突によってもエネルギーを失います。入射粒子が全てのエネルギーを失ったとき、その入射粒子は固体のどこかに停止することになります。弾性衝突によって入射粒子が失ったエネルギーは、ターゲット原子 (反跳原子) に伝達され、反跳原子はそれ自身他の原子と衝突し、別の反跳原子を生み出します。反跳原子のいくつかは、固体から抜け出すほど十分大きなエネルギーを得て、スパッタリングと呼ばれる現象が生じます。結晶のターゲットでは、原子はその格子位置から弾き出され、空孔を残して格子間原子となります。

この近似は、固体内を運動する粒子の運動エネルギーが比較的高い (数 10[eV] 以上) 場合に妥当なものとなります。単なる弾性衝突だけでなく、非弾性エネルギー損失、弾き出しエネルギーによる損失、表面結合エネルギーによる損失などを考慮して粒子の運動を追跡していきます。また、高線量のイオン注入したときのターゲット組成の動的な変化 (ダイナミック計算) を考慮に入れてシミュレーションを行っています。



## SASAMAL の機能一覧

応用分野	イオン注入による表層拳動、イオンビームミキシング、DLC 膜形成拳動、スパッタリング現象解析	
モデリング手法	粒子法	
解析手法	2 体衝突近似に基づく動的モンテカルロ法	
対象次元	1 次元	
ソルバー	ドライバー	SASAMAL
	モジュール	SASAMAL
座標系	-	
メッシュ形状	-	
境界条件	-	
GUI 機能	付属の GUIM を使用 (PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	表面結合エネルギーのデータベースを内蔵、弾き出しエネルギーのデータベースを内蔵、反跳カスケード追跡、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限 (実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨 (主に作業領域、プログラムは 200MB)
	その他	Java 実行環境

## SASAMAL の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

Control データ	乱数の種、入射サンプル粒子数、閾エネルギー [eV]、散乱関数のパラメータセット
Atom データ	元素選択 (データベースから自動入力; 原子番号、原子質量、表面結合エネルギー [eV]、弾き出しエネルギー閾値 [eV]、非弾性エネルギー損失係数)
Inject データ	入射原子、入射原子のエネルギー [eV]、入射角度、照射線量
Target データ	ターゲット層の設定 (層の名前、密度 [g/cm <sup>3</sup> ]、層の厚さ [ =1.0 × 10 <sup>-10</sup> m ] )、形成元素、元素構成比、原子数比の限界値

## 出力データ

sput_num データ	後方散乱された入射粒子の放出角度分布 (1D グラフ)
	スパッタリング粒子の放出角度分布 (1D グラフ)
sput_eng データ	後方散乱された入射粒子の放出角度ごとの平均エネルギー [eV] (1D グラフ)
	スパッタリング粒子の放出角度ごとの平均エネルギー [eV] (1D グラフ)
dept データ	ターゲット深さ方向の分布 [/m <sup>3</sup> ] (1D グラフ)
yelid データ	後方散乱率
	スパッタリング率

## スパッタリング・シミュレーション・モジュール (SPUTSM)

### SPUTSM の概要

SPUTSM は、PIC-MCCM の計算結果（ターゲットへの入射イオンのフラックス、エネルギー、入射角）を参照し、SASAMAL を用いて、スパッタリング粒子の放出フラックスや角度分布、エネルギーを計算するモジュールです。スパッタリング解析を行う際には、

1. プラズマ解析
2. スパッタリング率の評価
3. スパッタされた粒子の、基板への堆積量の評価

といった流れで解析を行います。1. は PIC-MCCM、3. は DSMCM で解析しますが、SPUTSM は 1. と 3. をつなぐ 2. の解析を行うためのモジュールです。

### SPUTSM のメリット

SASAMAL では入射粒子のデータを入力する必要があります。この際に、物理的意味合いがないデータを入れた計算をおこなった場合、その結果に対して真実味が欠けるといふ欠点があります。

SPUTSM では粒子法を取り入れたプラズマ解析をおこなう PIC-MCCM で計算できる入射イオンのデータを入力データとして用いることができ、より真実味のある入力データでスパッタリング解析をおこなうことが可能です。また、入力方法もデータフォルダーの指定をするだけで簡単に取り込めます。

### SPUTSM の詳細

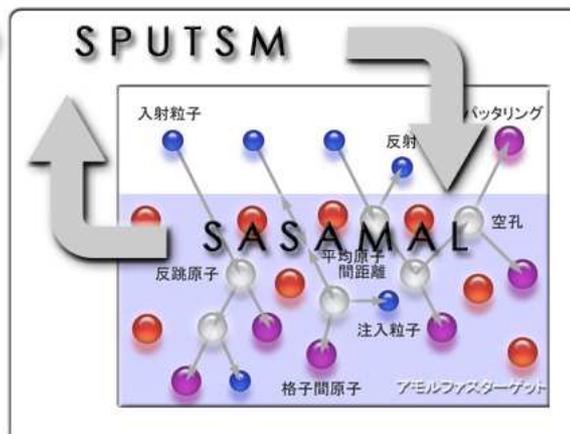
SPUTSM は計算エンジンとして SASAMAL を用いているので計算の手法としては SASAMAL と全く同様です。（詳細は SASAMAL のリーフレットをご参照ください）

SPUTSM の役割は、PIC-MCCM の計算結果（ターゲット各位置での入射イオンのフラックス、エネルギー、入射角）を自動的に取り込み、その情報を SASAMAL に引き渡すことです。また、SASAMAL の出力を解析してターゲットのエロージョン分布を推測するといったことができます。



PIC-MCCM

- PIC-MCCM で計算された  
ターゲット各位置でのイオンの
- 入射フラックス
  - 入射角
  - 入射エネルギー



## SPUTSM の機能一覧

- PIC-MCCM の計算結果取り込み機能
- SASAMAL の機能（以下 SASAMAL と同様）

応用分野	スパッタリング現象解析	
モデリング手法	粒子法	
解析手法	2 体衝突近似に基づく動的モンテカルロ法	
対象次元	1 次元	
ソルバー	ドライバー	SPUTSM
	モジュール	SASAMAL
座標系	-	
メッシュ形状	-	
境界条件	-	
GUI 機能	付属の GUIM を使用（PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小）	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	PIC-MCCM の計算結果取り込み機能、表面結合エネルギーのデータベースを内蔵、弾き出しエネルギーのデータベースを内蔵、反跳カスケード追跡、バックグラウンド計算	
解析規模	無制限（実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます）	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨（主に作業領域、プログラムは 200MB）
	その他	Java 実行環境

## SPUTSM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

Control データ	乱数の種、入射サンプル粒子数、閾エネルギー[eV]、散乱関数のパラメータセット
Atom データ	元素選択（データベースから自動入力；原子番号、原子質量、表面結合エネルギー[eV]、弾き出しエネルギー閾値[eV]、非弾性エネルギー損失係数）
Inject データ	入射原子、入射原子のエネルギー[eV]、入射角度、照射線量 PIC-MCCM の計算結果取り込みによりデータ自動入力 （ターゲット各位置の入射イオンのフラックス / エネルギー / 入射角）
Target データ	ターゲット層の設定（層の名前、密度[g/cm <sup>3</sup> ]、層の厚さ[ =1.0 × 10 <sup>-10</sup> m ]）、形成元素、元素構成比、原子数比の限界値

## 出力データ

sput_num データ	後方散乱された入射粒子の放出角度分布（1D グラフ）
	スパッタリング粒子の放出角度分布（1D グラフ）
sput_eng データ	後方散乱された入射粒子の放出角度ごとの平均エネルギー[eV]（1D グラフ）
	スパッタリング粒子の放出角度ごとの平均エネルギー[eV]（1D グラフ）
dept データ	ターゲット深さ方向の分布[ /m <sup>3</sup> ]（1D グラフ）
yelid データ	後方散乱率
	スパッタリング率
sputsm データ	スパッタリング粒子の放出フラックス分布（1D グラフ）



## イオンモンテカルロ・シミュレーション・モジュール(IMCSM)

### IMCSM の概要

このモジュールの機能は、プラズマ解析領域全体にわたり、イオンのエネルギー分布、また境界セルでの入射エネルギー / 角度分布を計算することです。このモジュールの用途は以下のようになります。

- 現在の PHM は、装置内のプラズマ分布等を計算しますが、計算モデル上、イオンのエネルギーは一律としています。ですが、基板 / ターゲット表面のイオンエネルギーを求めたい場合が多いと考えられます。IMCSM は、PHM の計算結果 ( 空間分布物理量 ) を用いて、プラズマ解析領域全体、および基板 / ターゲット表面のイオンエネルギー分布等を計算します。

### IMCSM の詳細

IMCSM の目的は、プラズマ解析領域全体におけるイオンのエネルギー分布、角度分布等を計算することです。計算手順の概略はつぎの通りとなります。

<IMCSM のメインパネル>

サンプリングする最大粒子数	1000000
サンプリングするRF周期	500
角度分割数	180
エネルギー分割数	50
E <sub>0</sub>	0
E <sub>1</sub>	100

5. PHM での計算結果である各セルでのイオン密度、イオン生成率、時間依存電界などの分布を読み込む。
6. イオン生成率分布に従い、イオンのサンプル粒子を発生させる。
7. 時間依存電界を用い、反応データベースに存在するイオンと中性粒子との衝突を考慮した各サンプル粒子の自由行程飛行時間による、テスト粒子モンテカルロ法で計算を行う。
8. モニタリングセルでのイオンエネルギー分布、境界セルでの入射エネルギー / 角度分布などの計算を行う。

## IMCSM の機能一覧

応用分野	プラズマ解析領域内のイオンのエネルギー分布および基板へ入射するイオンのエネルギー / 角度分布	
解析手法	モンテカルロ法	
対象次元	2次元	
ソルバー	ドライバー	IMCSM
	モジュール	IMCSM
座標系	-	
メッシュ形状	-	
境界条件	-	
GUI 機能	付属の GUIM を使用 (PNG ファイル出力、印字出力、テキストデータ入出力、表示画面の任意拡大縮小)	
プレポスト	付属の GUIM を使用	
付属機能	-	
解析規模	無制限 (実際にはメモリー容量と計算時間で制限されます)	
動作環境	OS	Windows NT/2000/XP/Vista (32bit 版, x64 版) Linux (32bit 版, x64 版, IA64 版)
	メモリー容量	512MB 以上推奨
	ディスク容量	20GB 以上推奨 (主に作業領域、プログラムは 200MB)
	その他	Java 実行環境

## IMCSM の入力 / 出力のデータ一覧

## 入力データ

制御パラメータ	最大粒子数、RF 周期数、入射角度分割数、入射エネルギー分割数、サンプリングエネルギーの上下限 PHM 出力ファイル
---------	---------------------------------------------------------------

## 出力データ

Temp_?.out	イオンの温度分布 (コンター図)
edf_?.gtd	モニタリングセルのイオンエネルギー分布 (1D グラフ図)
energy_dist_?.gtd	境界の接するモニタリングセルのイオン入射エネルギー分布 (1D グラフ図)

