

日本真空協会SP部会 第一回技術交流会

# PEGASUS

Plasma Enhanced materials processing and  
rarefied GAS dynamics Unified Simulation tools

プラズマ材料プロセス / 希薄気体統合シミュレーションツール

2004年12月2日



ペガサスソフトウェア株式会社

# PEGASUSとは

- プラズマプロセス, 真空技術における
  - 装置の設計・開発・改良・評価
  - 材料、デバイスの開発・製造
  - プロセス技術の予測・開発・改良

の効率化、実験および試作コストの軽減を目的とした装置シミュレータ

- 装置内のプラズマ挙動 / 中性粒子挙動解析
  - 真空装置内の中性粒子挙動解析
  - プラズマ装置 (PECVD装置、ドライエッチング装置、マグネトロンスパッタ装置) 内のプラズマ・中性粒子挙動解析
  - 荷電粒子ビーム解析

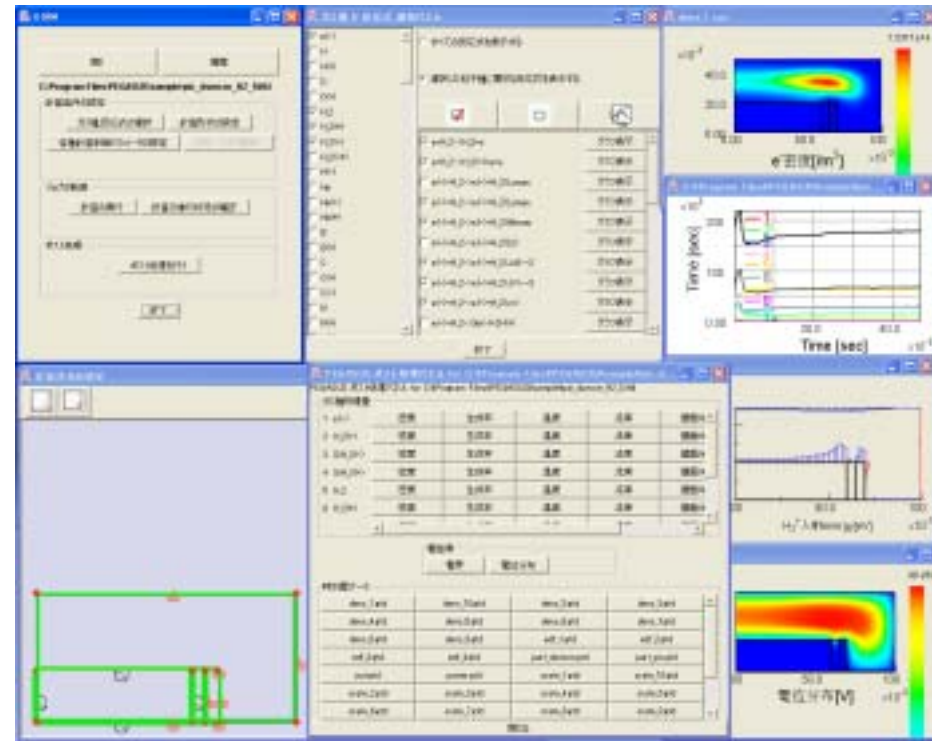


# PEGASUSの構成モジュール

- 2次元気相シミュレータ
  - プラズマPICモンテカルロモジュール (PIC - MCCM)
  - プラズマ・ハイブリッド・モジュール (PHM)
  - 中性粒子希薄気体モジュール (DSMCM)
  - 中性粒子連続体モジュール (NMEM)
  - 静磁場解析モジュール (MSSM)
  
- 表面科学系シミュレータ
  - 動的モンテカルロシミュレーションソフトウェア (SASAMAL)
  - スパッタリング・シミュレーション・モジュール (SPUTSM)
  - シース内モンテカルロ・シミュレーション・モジュール (SMCSM)
  
- 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア (RGS3D)

# ユーザーインターフェイス GUIM

- PEGASUS専用のグラフィカルユーザーインターフェイス  
(標準装備)
- ガス種、反応式、装置形状などの計算条件を直感的な操作で指定できる  
(プリプロセッサー)
- 計算結果を簡単な操作で確認、検討できる  
(ポストプロセッサー)



## 2次元気相シミュレータの構成モジュール

- 2次元(R - Z)もしくは(X - Y)座標の装置形状に対して
  - PHM(Plasma Hybrid Module)
    - プラズマ・ハイブリッド・モジュール (ハイブリッドモデル)
  - PIC-MCCM(Particle-in-Cell Monte Carlo Collision Module)
    - プラズマ PIC-MCC モジュール (粒子モデル)
  - NMEM(Neutral Momentum Equation Module)
    - 中性粒子 運動量保存式 モジュール (流体モデル)
  - DSMCM(Direct Simulation Monte Carlo Module)
    - 中性粒子希薄気体 モジュール (粒子モデル)
  - MSSM(Magneto-Static Simulation Module)
    - 静磁場解析モジュール

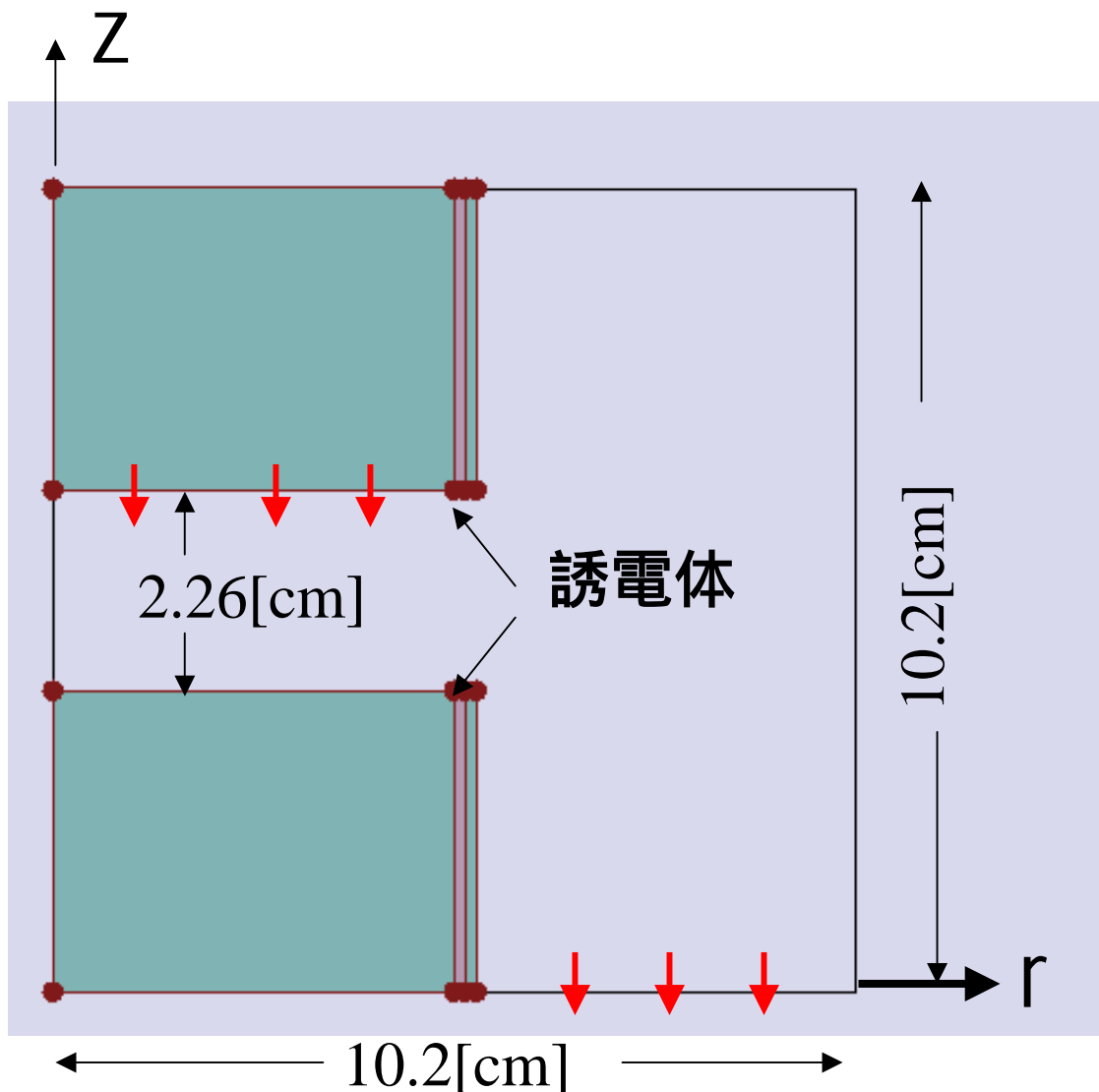
# CCP装置

高ガス圧(10[Pa]以上)

---

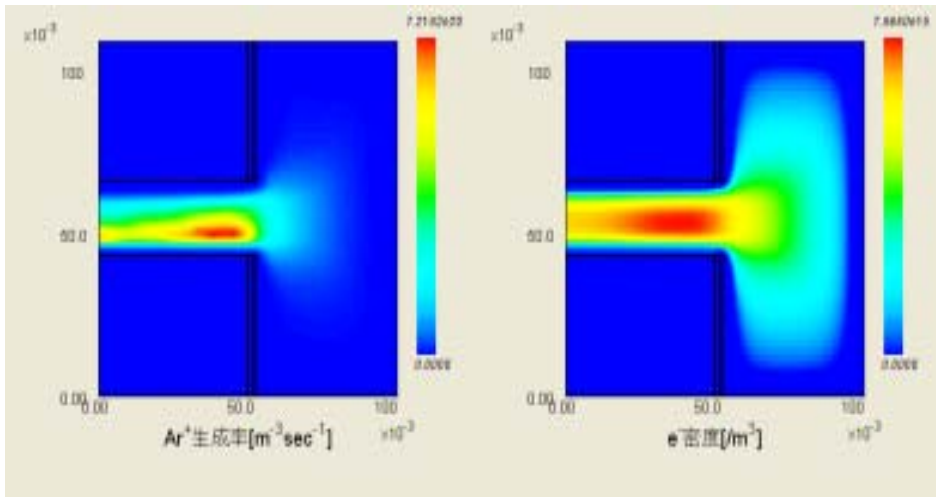
PHM

NMEM



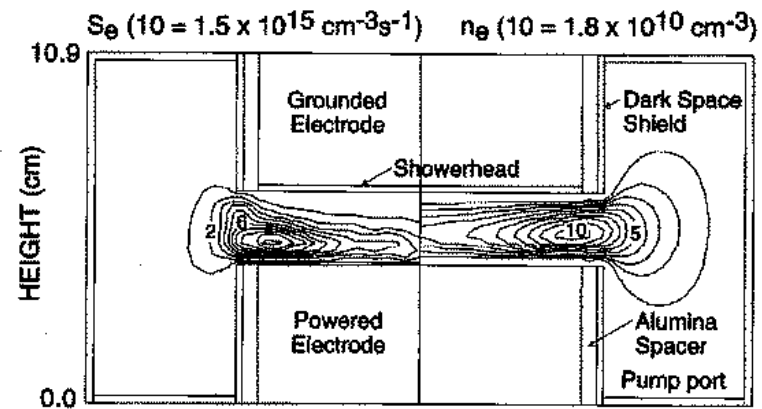
## 検証例:

- ・ 上部電極: 接地
- ・ 下部電極:  
 $V_{pp}$ : 200 [V]  
 周波数: 13.56 [MHz]
- ・ ガス種: Ar
- ・ ガス圧: 250 [mTorr]
- ・ ガス流量: 10 [sccm]



Ar(+)<sub>電離レート</sub>

<sub>電子密度</sub>



## 論文結果



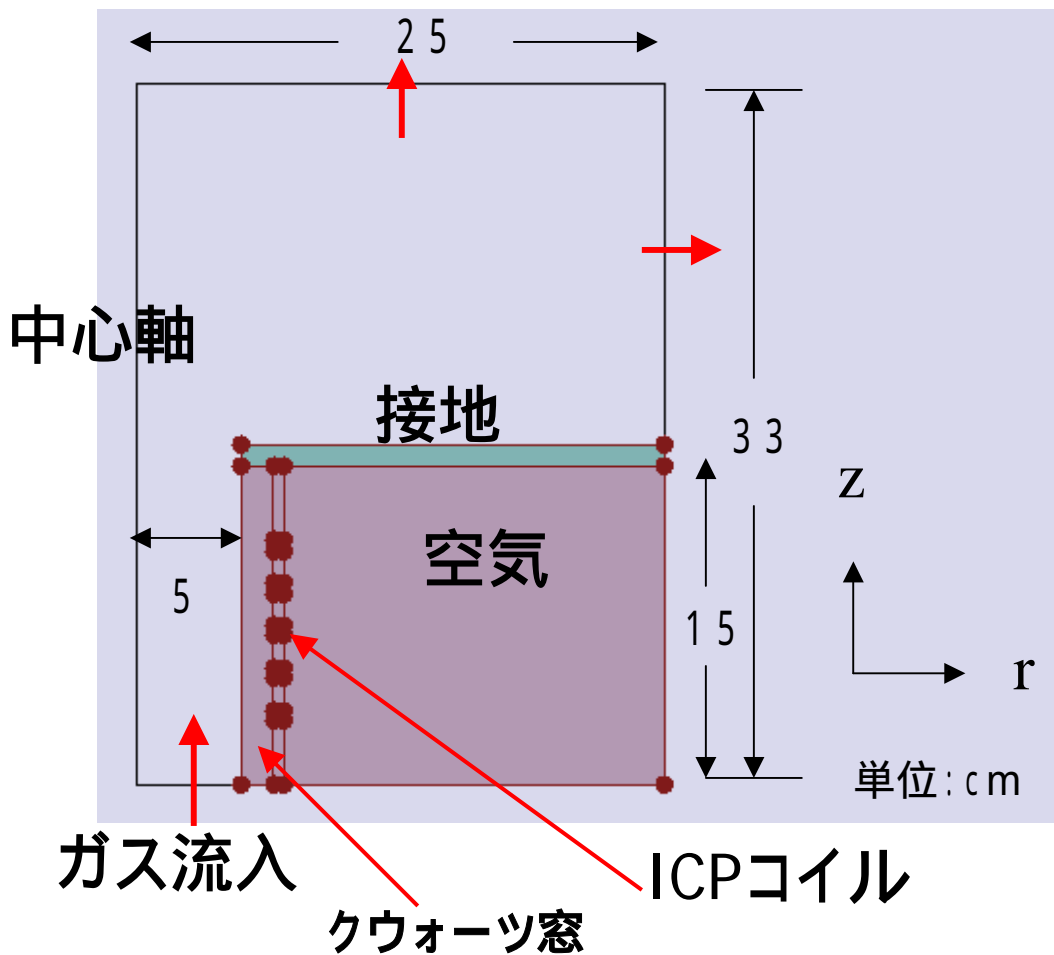
# ICP装置

## 高密度プラズマ

---

PHM

DSMCM



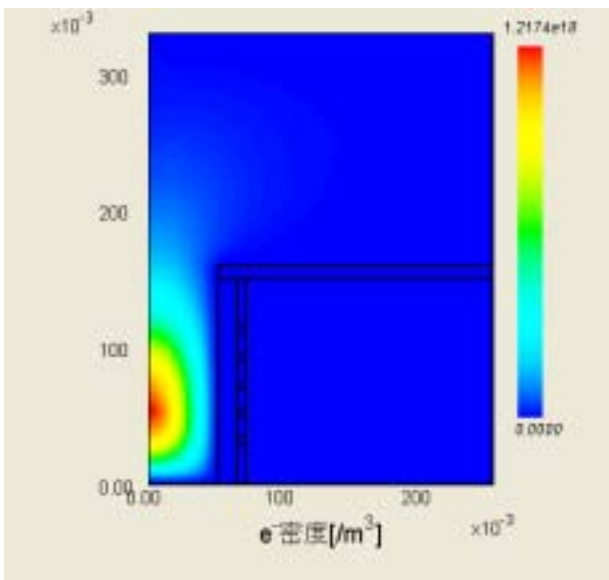
## ■ ガス種

- $C_2H_2$  (アセチレン)
- 40 [sccm]
- 2 [Pa]

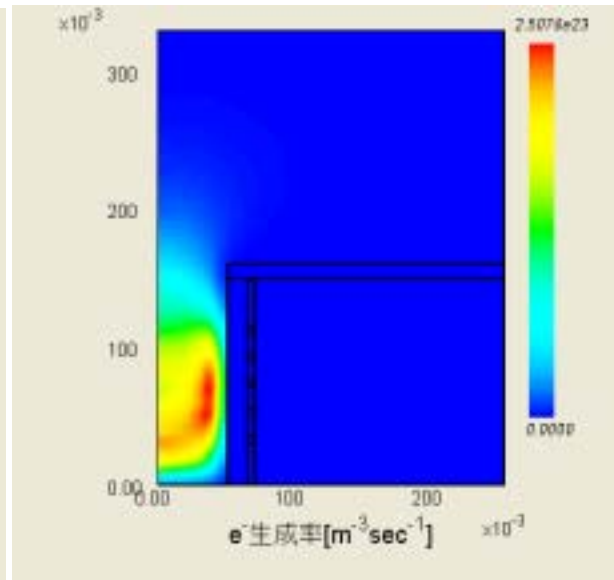
## ■ ICPコイル

- 5ターン、
- 400 [W]、  
13.56 [MHz]

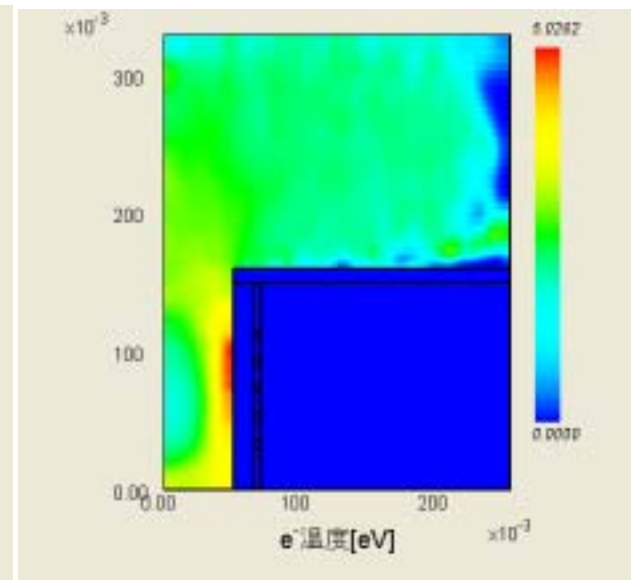
# 電子に関する物理量



電子密度

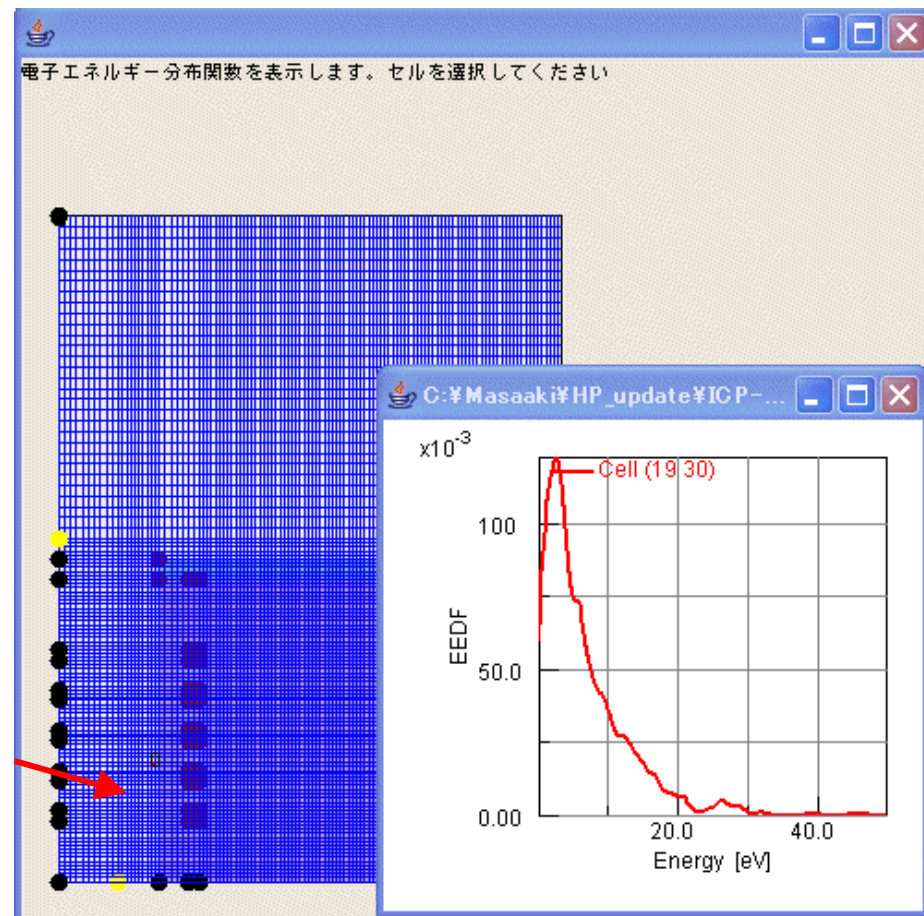
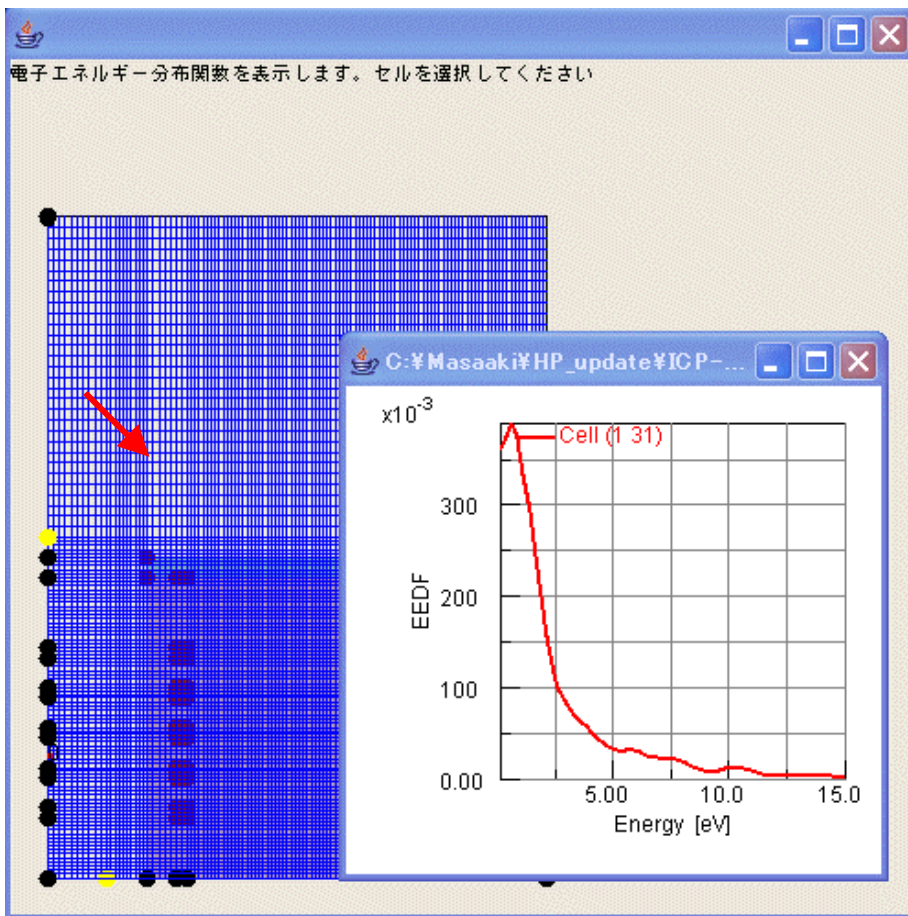


電子生成率



電子温度

# EEDF (電子エネルギー分布関数)



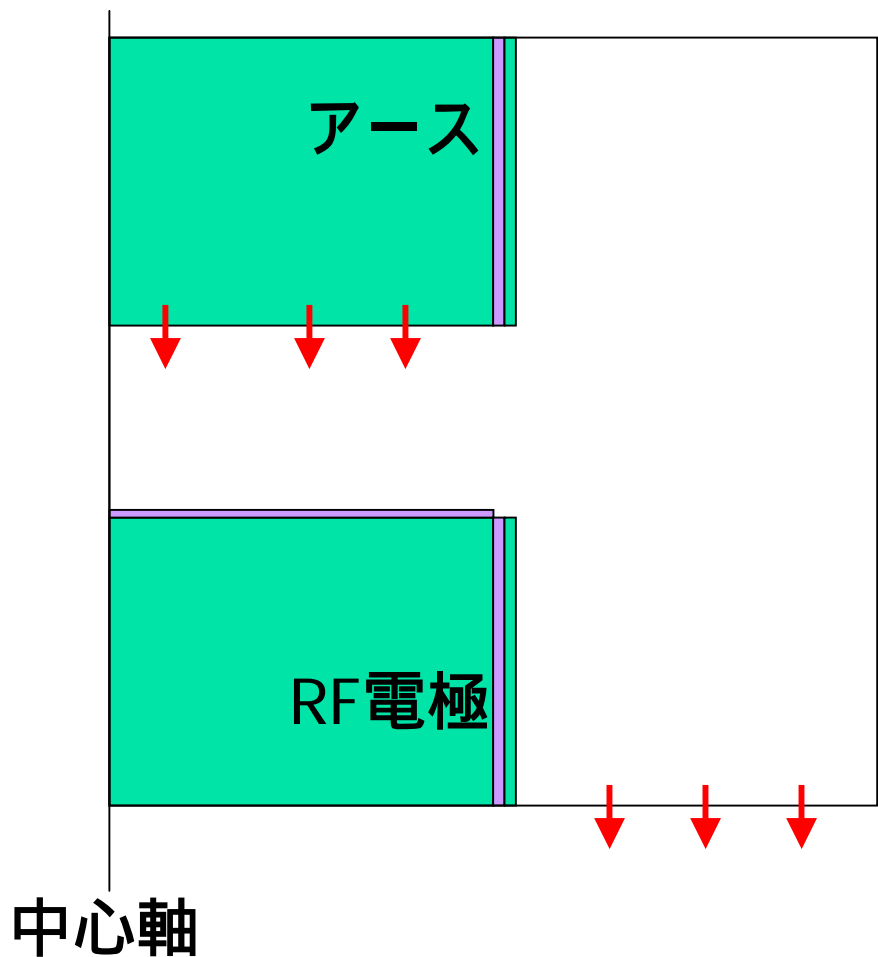
# CCP装置

低ガス圧(10[Pa]以下)

---

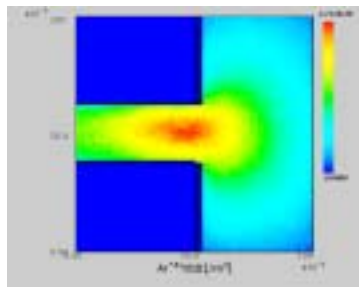
PIC-MCCM

DSMCM

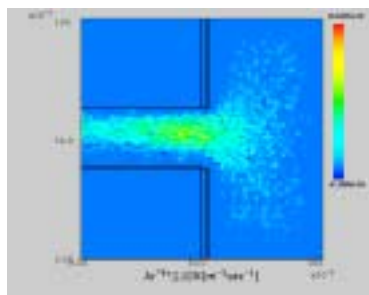


- 印加電圧  $V_{rf}=100[V]$
- ガス圧 およそ $5[Pa]$   
(DSMCMで計算)
- 反応式
  - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar$  (弾性散乱)
  - $e^- + Ar \rightarrow 2e^- + Ar^+$  (電離)
  - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^*$  (励起)
  - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^{4s}$  (励起)
  - $e^- + Ar^{4s} \rightarrow 2e^- + Ar^+$  (電離)
  - $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar^+ + Ar$  (弾性散乱)
  - $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar + Ar^+$  (電荷交換)

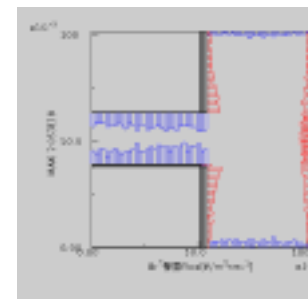
# 中性粒子に関する物理量



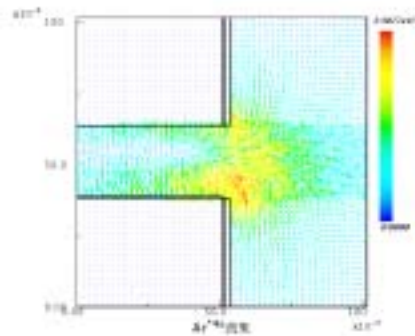
Ar<sup>4s</sup>密度分布



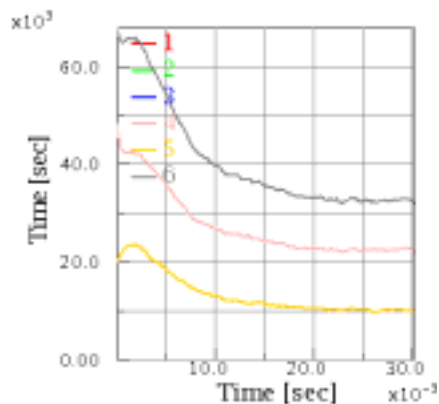
Ar<sup>4s</sup>生成率分布



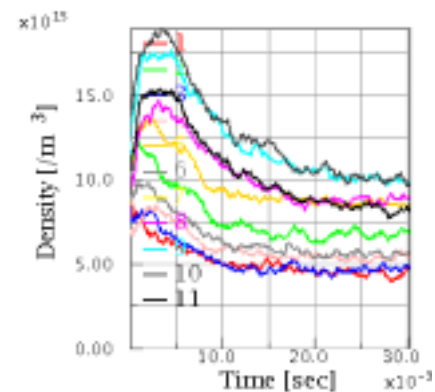
基板へのフラックス



Ar<sup>4s</sup>空間フラックス

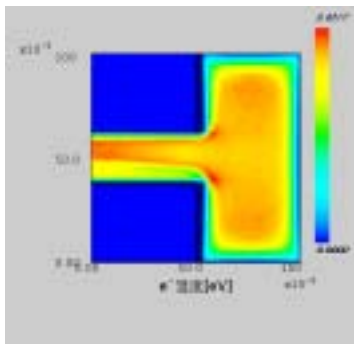


サンプル粒子数の時間変化

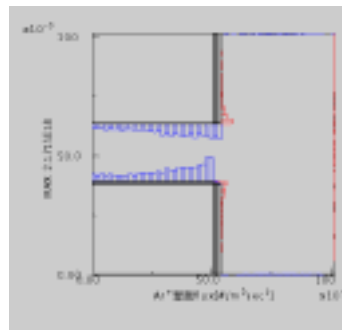


密度の時間変化

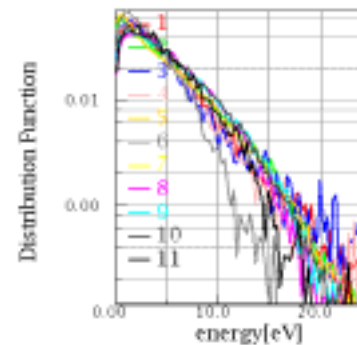
# 荷電粒子に関する物理量



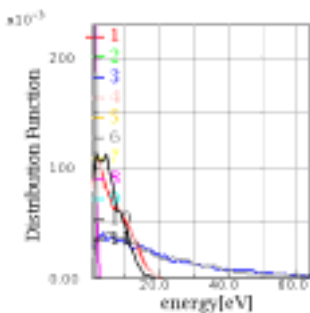
電子温度空間分布



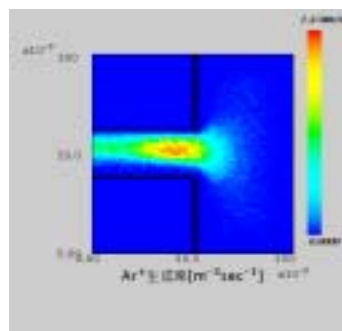
基板へのイオンフラックス



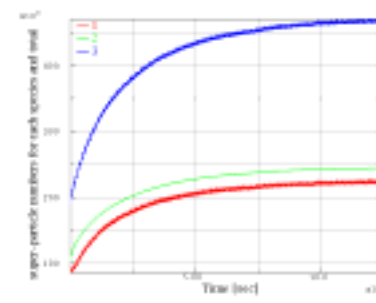
電子エネルギー分布



イオンエネルギー分布



電離率空間分布



サンプル粒子数の時間変化



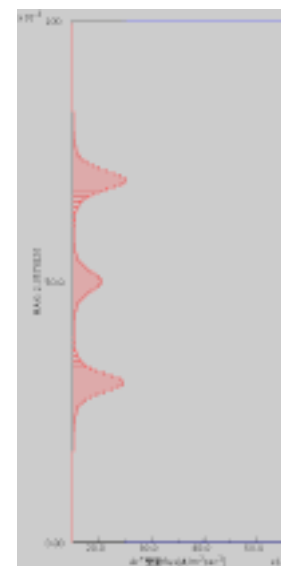
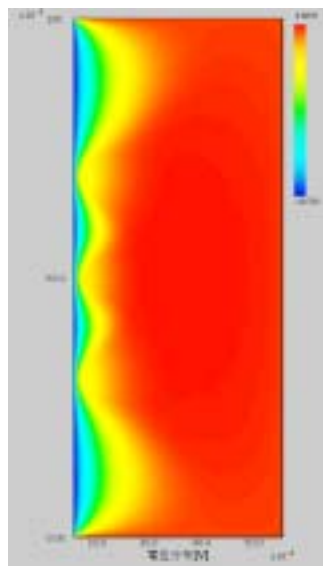
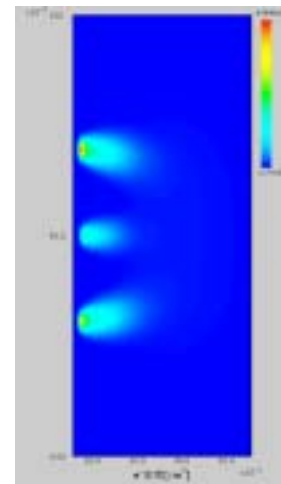
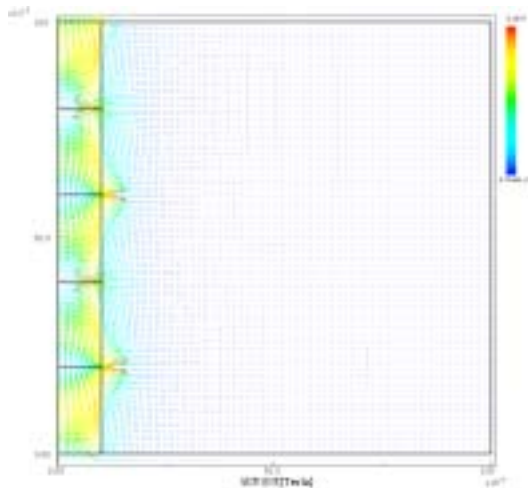
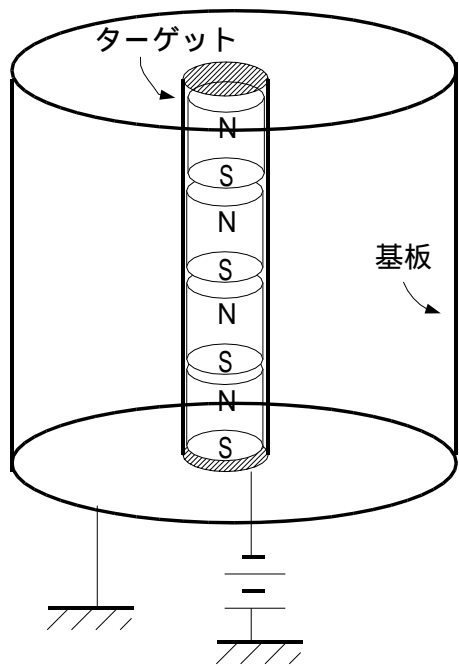
# マグネトロンスパッタ装置

---

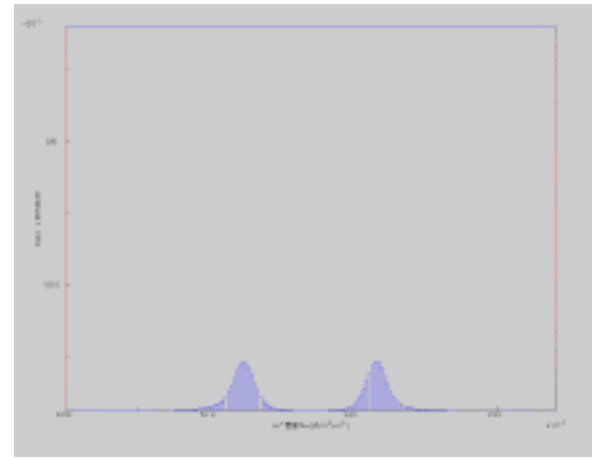
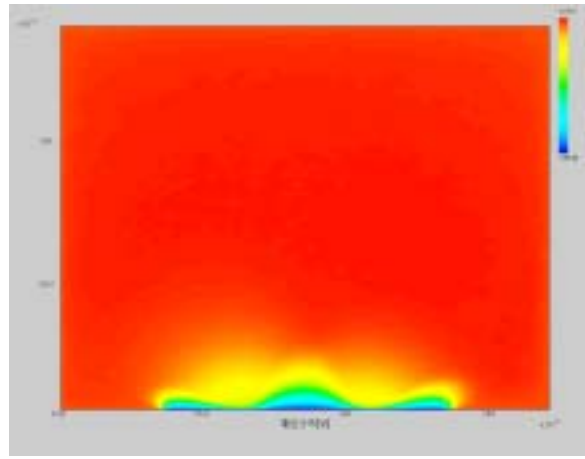
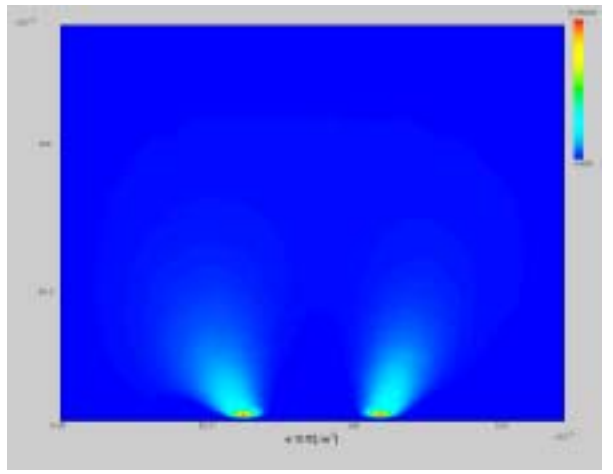
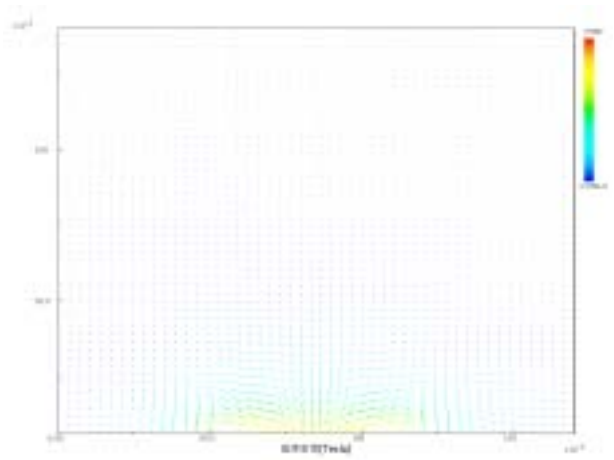
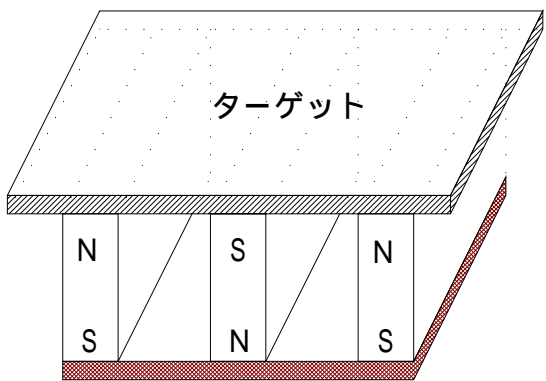
**MSSM**

**PIC-MCCM**

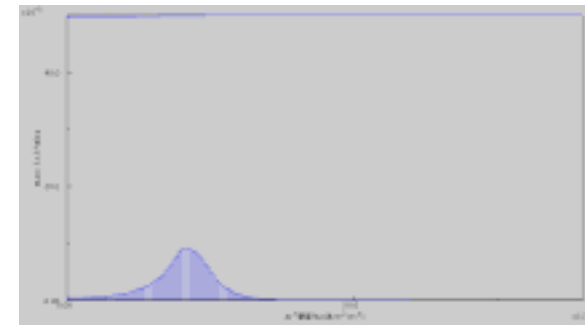
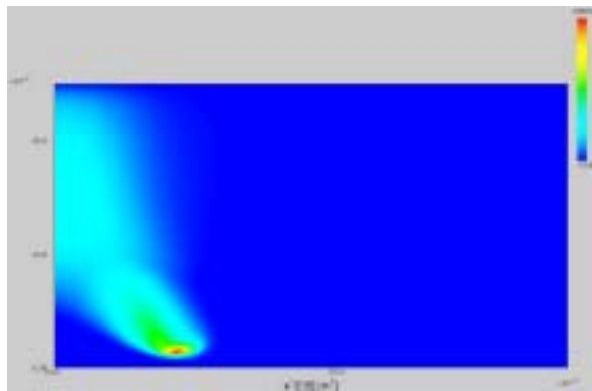
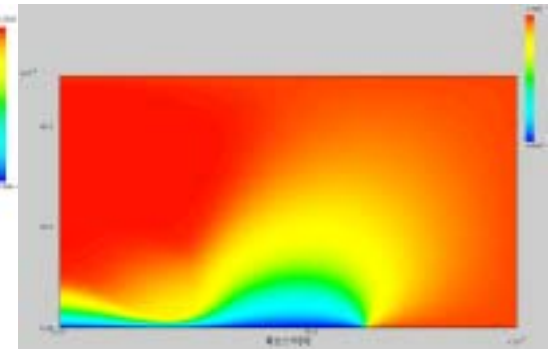
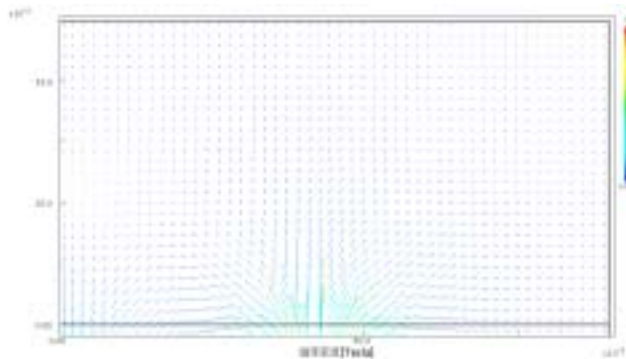
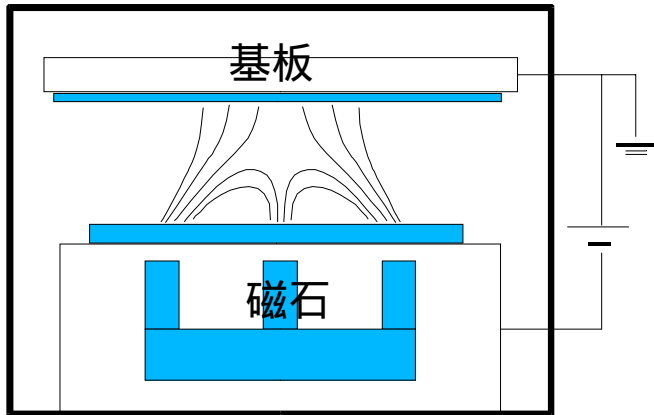
# 同軸円筒型



# プレナー型



# UBM 型の磁場配置 (アンバランスド・マグネトロン)



# マグネトロンスパッタ装置

## スパッタリングシミュレーション

---

MSSM

PIC-MCCM

SPUTSM (表面科学系)

DSMCM

動的モンテカルロシミュレーションソフトウェア

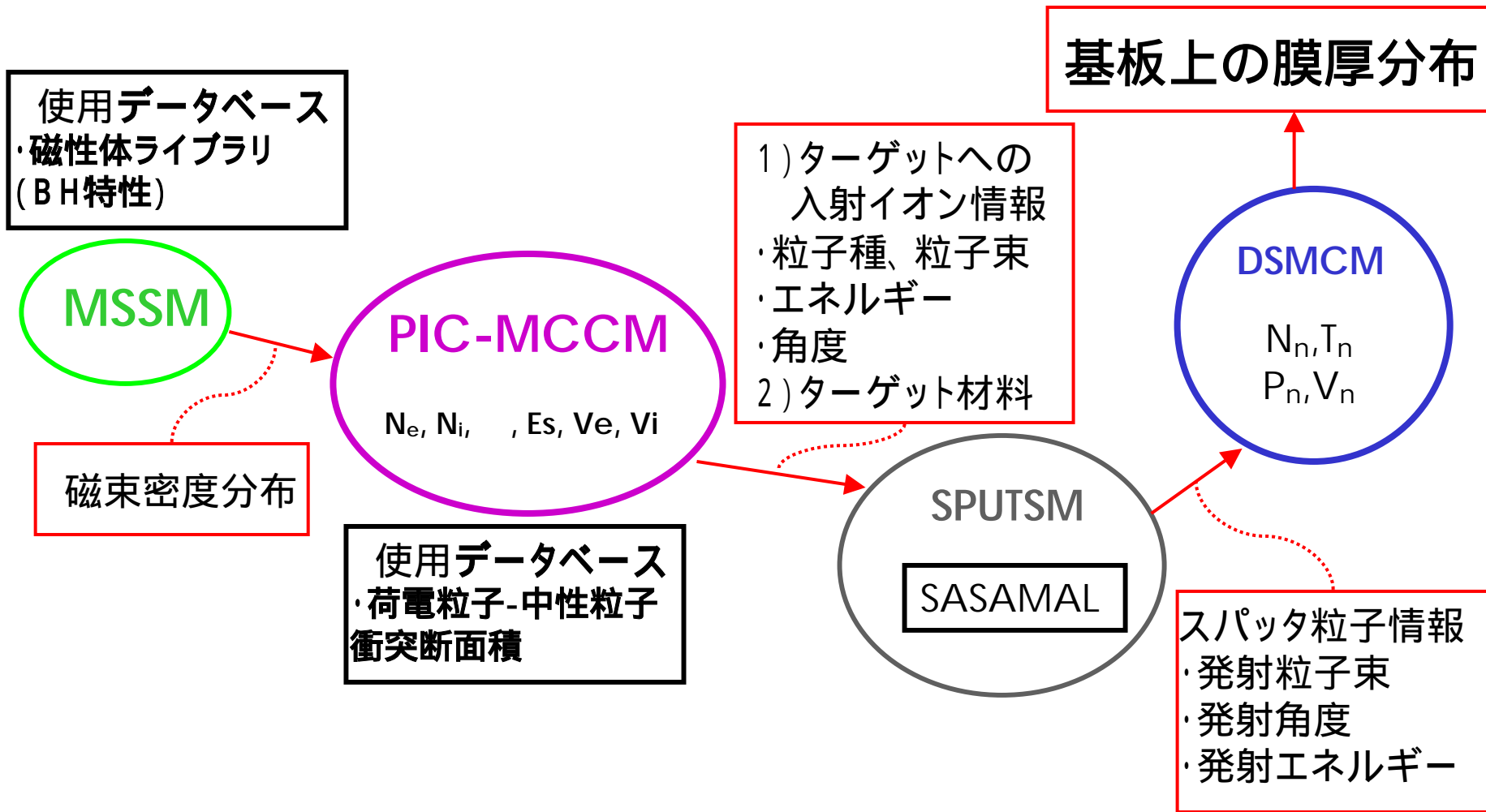
dynamic-SASAMAL

Simulation of Atomic Scattering in Amorphous MAterials  
based on Liquid model

宮川佳子・宮川草児

産業技術総合研究所 中部センター（名古屋）  
サステナブルマテリアル研究部門

# 2次元マグネトロンスパッタシミュレーション概略図



# 表面科学系シミュレータ概要

---



# 表面科学系シミュレータ

- 材料表面で生じる物理現象
  - スパッタリング現象、イオン注入
    - SASAMAL, SPUTSM
      - スパッタリング率やDepth Profile を求める。
  - イオン注入
  - シースを通過して表面に達する荷電粒子
    - SMCSM(シース内モンテカルロシミュレーションモジュール)
      - シース内の荷電粒子の運動を追跡してエネルギー分布関数等を求める。

についてシミュレーションを行うモジュール群

# 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア

## RGS3D

---

# RGS3Dの概要

- 希薄気体となる条件下で、  
気体分子運動論の支配方程式をDSMC法により数値的に解く  
シミュレーションソフトウェア (計算手法はDSMCMと同様)
- 適用分野
  - 各種真空容器、装置内の流れ解析
  - 真空ポンプ内の流れ解析
  - 真空蒸着シミュレーション
- 特長
  - Weight Algorithm により、密度差が大きい多種粒子種の計算が可能
  - 分子流領域のとき、高速なモンテカルロ法計算機能

# RGS3D 解析例

---

# 真空蒸着における膜厚分布の検証例

## 解析モデル

蒸発物質 : Al

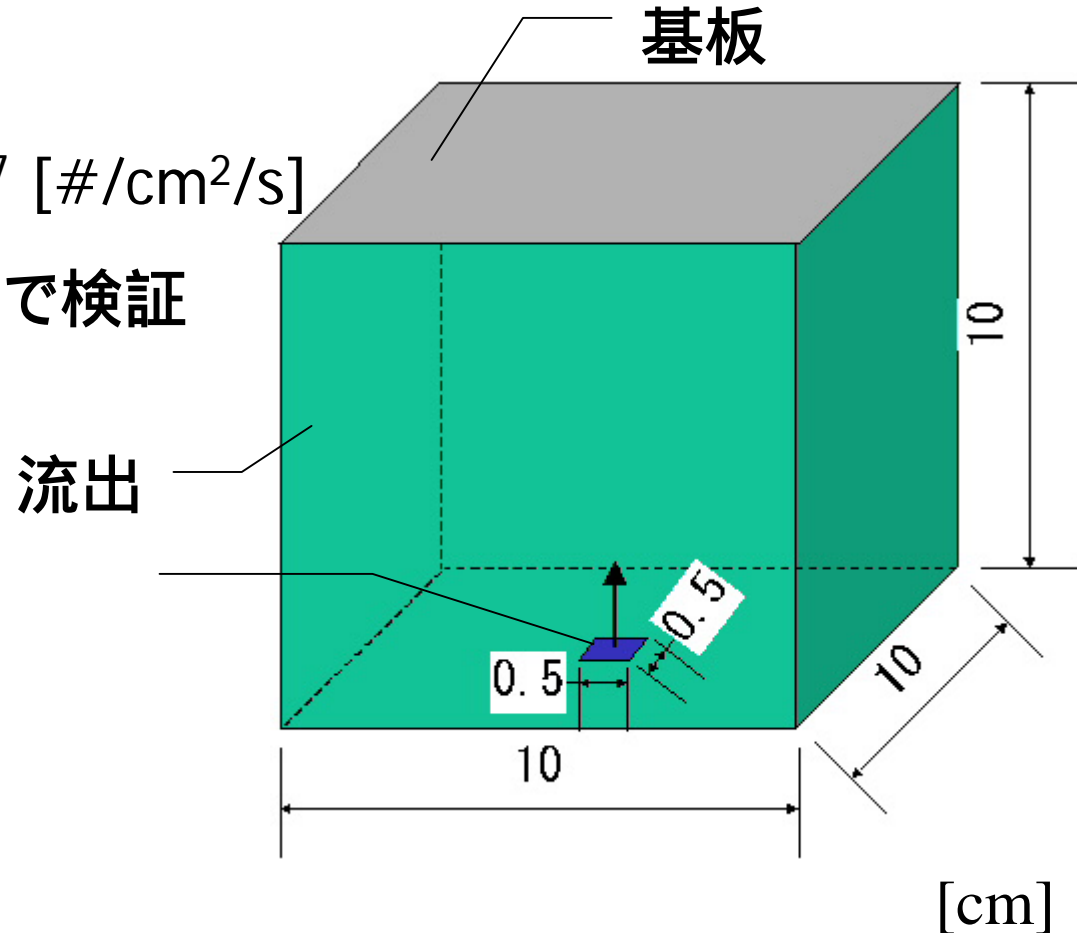
蒸発温度 : 1000 [K]

蒸発速度 :  $1.8 \times 10^{17}$  [# / cm<sup>2</sup> / s]

基板上での膜厚分布で検証

蒸発源

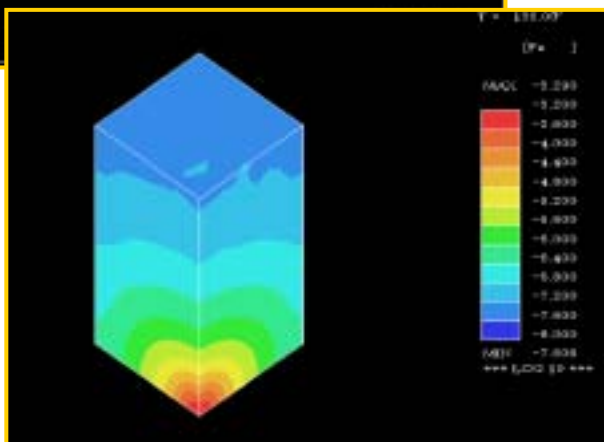
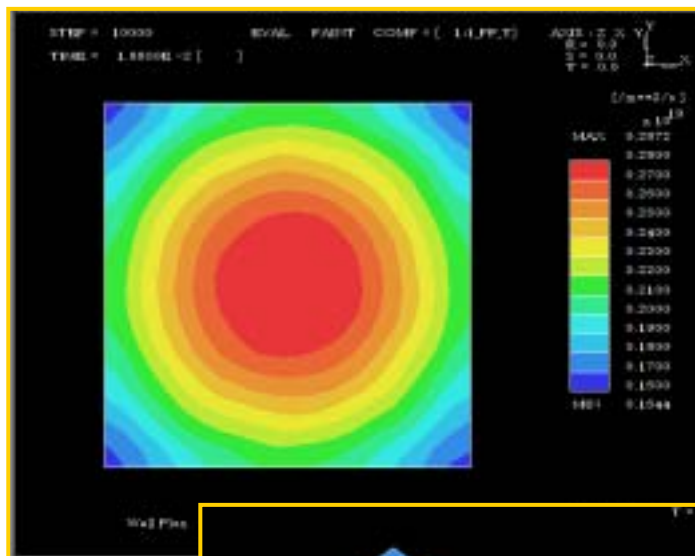
- 1) 点蒸発
- 2) 面蒸発 (5mm角)



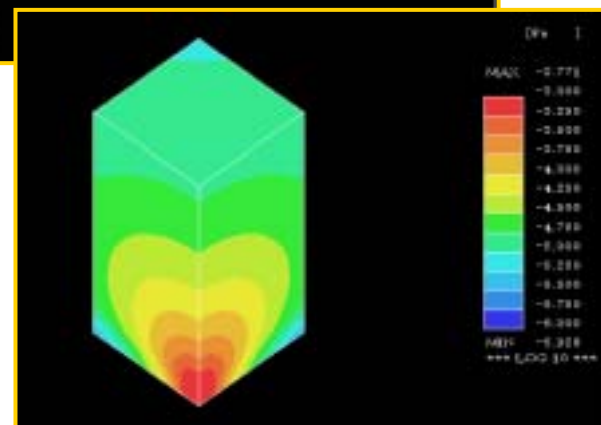
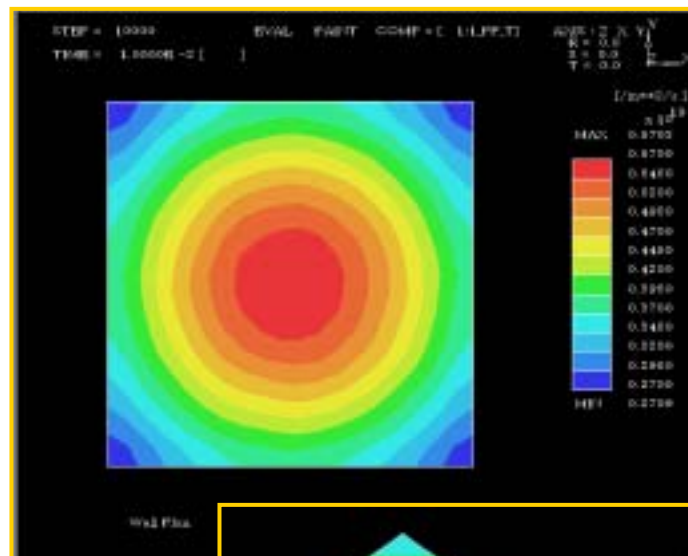
# 真空蒸着における膜厚分布の検証例

## 粒子フラックス分布、圧力分布

### 点蒸発源

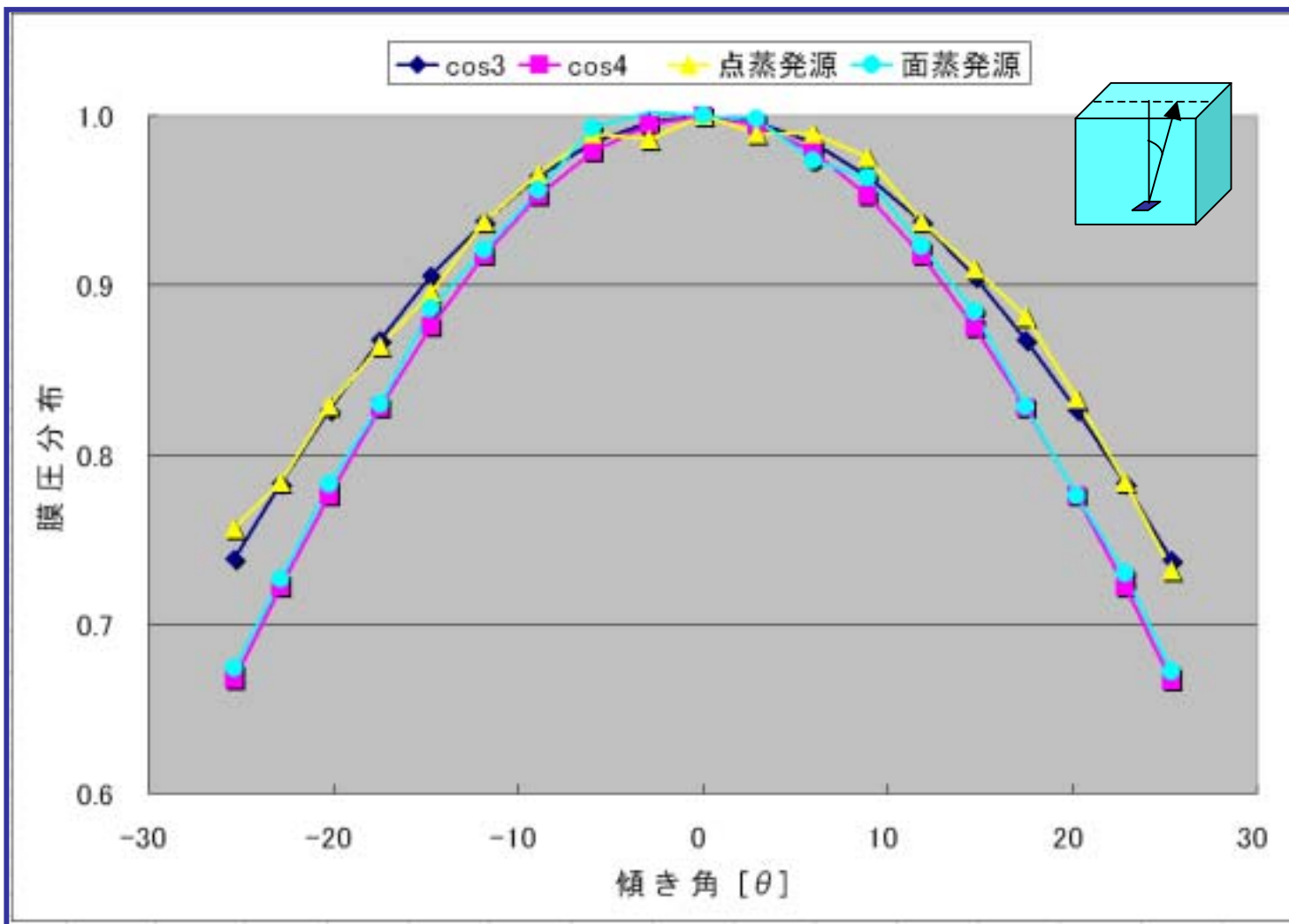


### 面蒸発源



# 真空蒸着における膜厚分布の検証例

## 粒子フラックス分布 (薄膜工学、丸善、2003)



# 協同事業

- 東北大学、宮本研究室が開発したソフトウェアの  
販売代理店
  - コンビナトリアル計算化学ソフトウェア
    - 量子分子動力学法、分子動力学法、モンテカルロ法などによるシミュレーションソフトウェア群
    - 弊社との関連分野としては、基板・薄膜表面反応、膜質などに関する分子・原子シミュレーション