

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

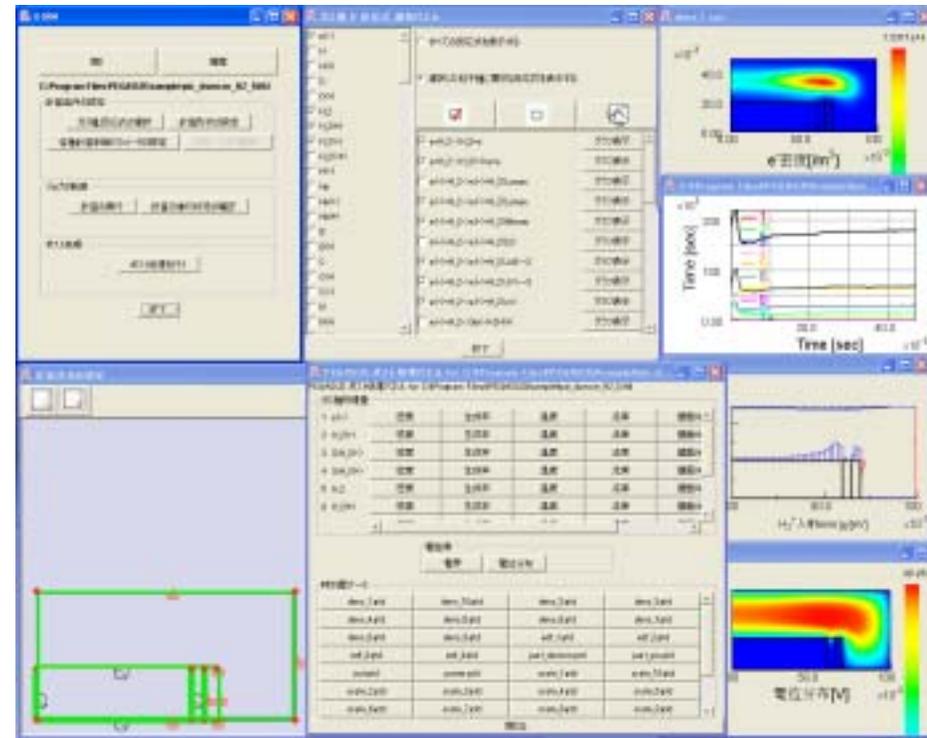
- 2次元気相シミュレータ
 - プラズマPICモンテカルロモジュール (PIC - MCCM)
 - プラズマ・ハイブリッド・モジュール (PHM)
 - 中性粒子希薄気体モジュール (DSMCM)
 - 中性粒子連続体モジュール (NMEM)
 - 静磁場解析モジュール (MSSM)

- 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)
- 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)



2次元気相シミュレータの構成モジュール

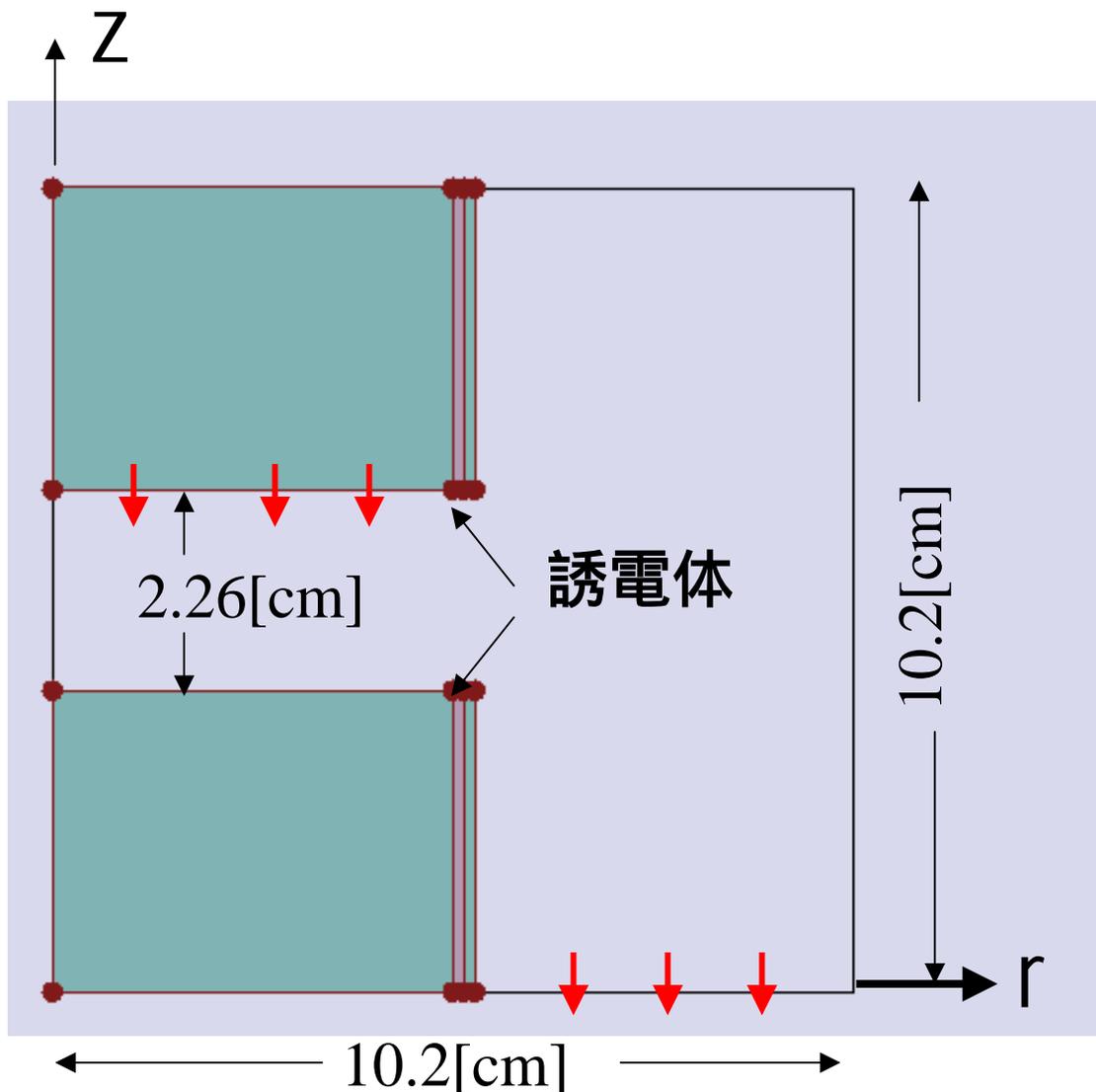
- 2次元(R - Z)もしくは(X - Y)座標の装置形状に対して
 - PHM(Plasma Hybrid Module)
 - プラズマ・ハイブリッド・モジュール (ハイブリッドモデル)
 - PIC-MCCM(Particle-in-Cell Monte Carlo Collision Module)
 - プラズマ PIC-MCC モジュール (粒子モデル)
 - NMEM(Neutral Momentum Equation Module)
 - 中性粒子 運動量保存式 モジュール (流体モデル)
 - DSMCM(Direct Simulation Monte Carlo Module)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

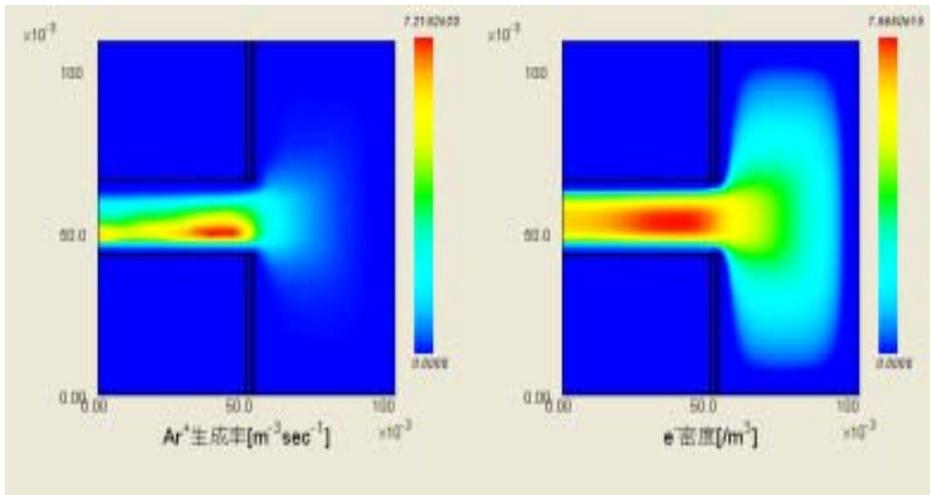
PHM

NMEM



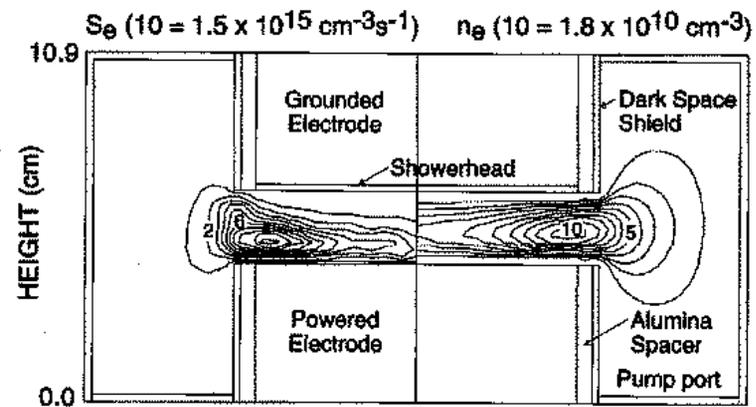
検証例:

- ・ 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(+)電離レート

電子密度



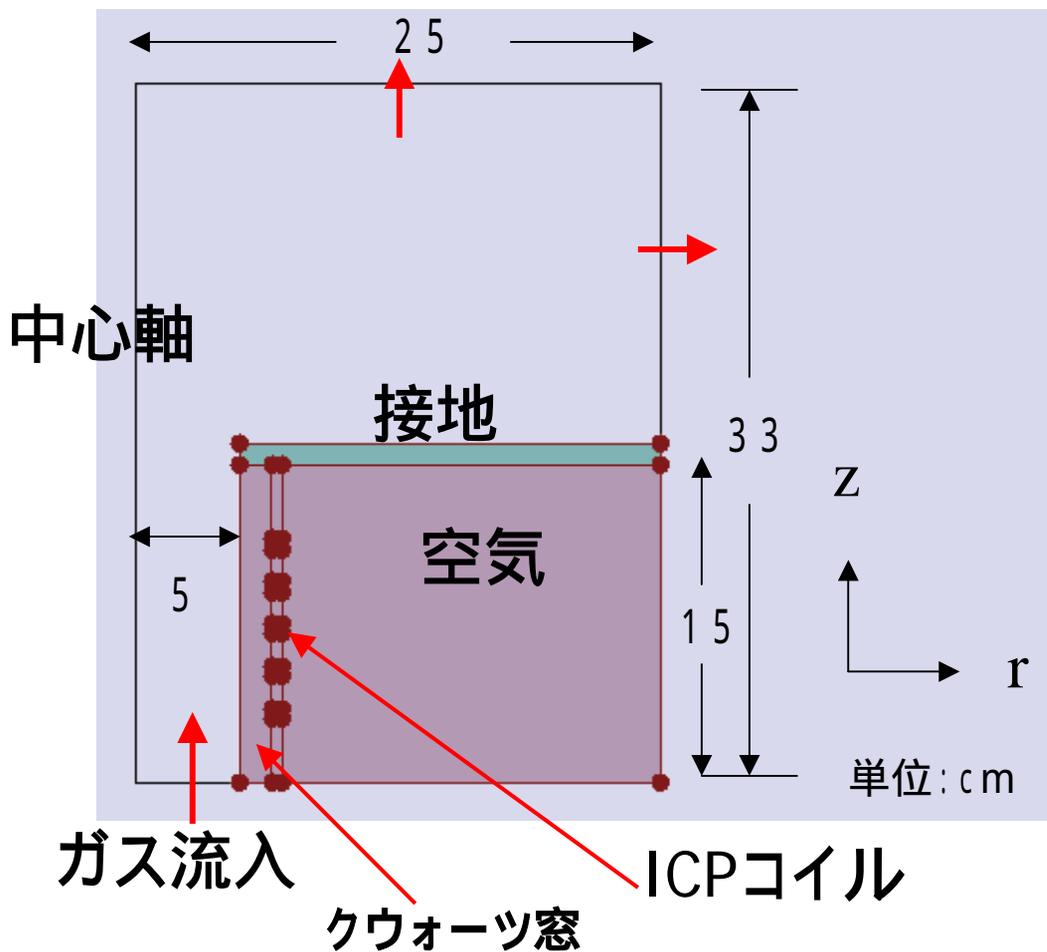
論文結果

ICP装置

高密度プラズマ

PHM

DSMCM



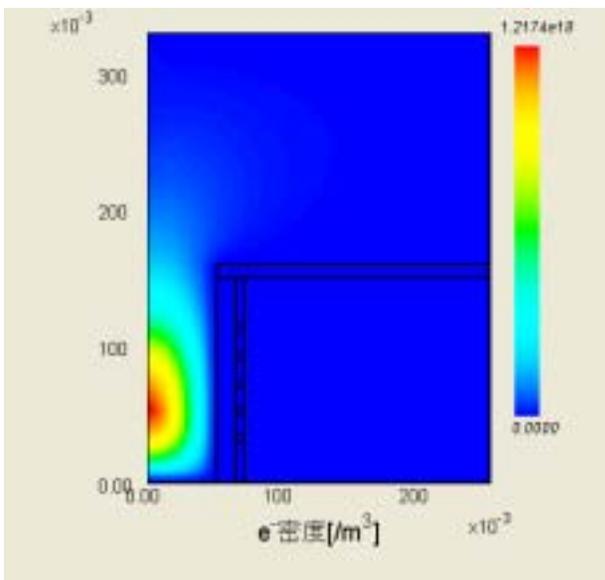
■ ガス種

- C_2H_2 (アセチレン)
- 40 [sccm]
- 2 [Pa]

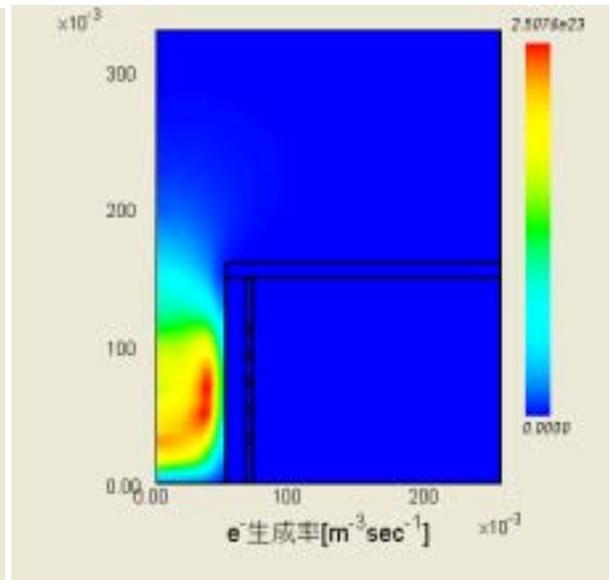
■ ICPコイル

- 5ターン、
- 400 [W]、
13.56 [MHz]

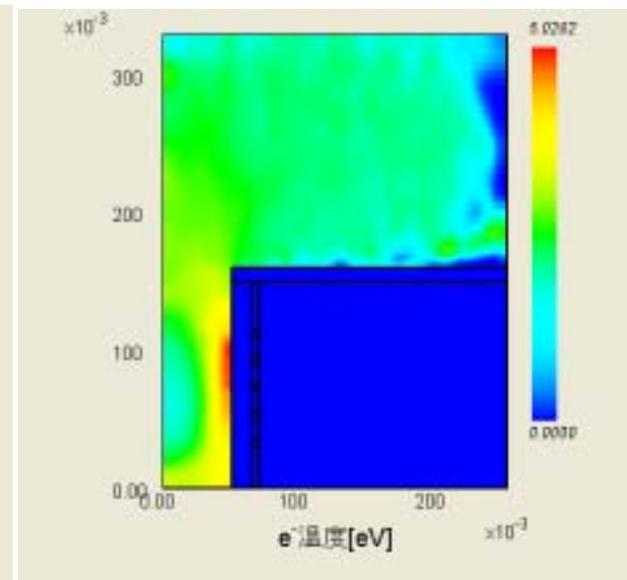
電子に関する物理量



電子密度

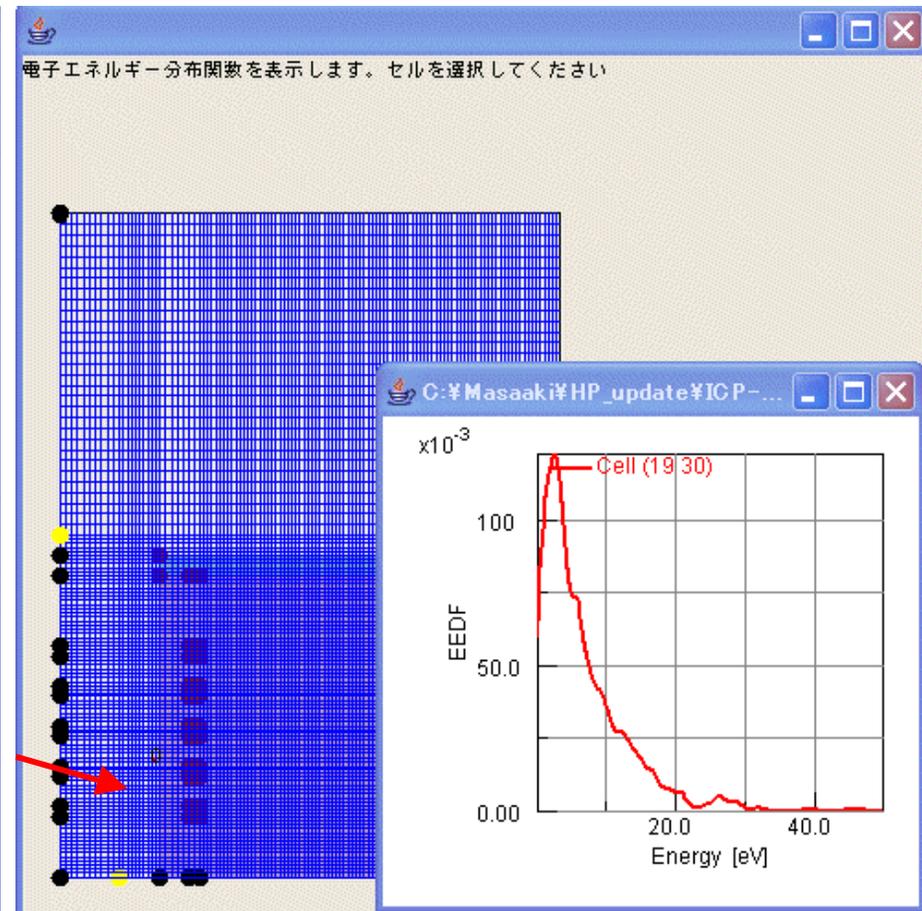
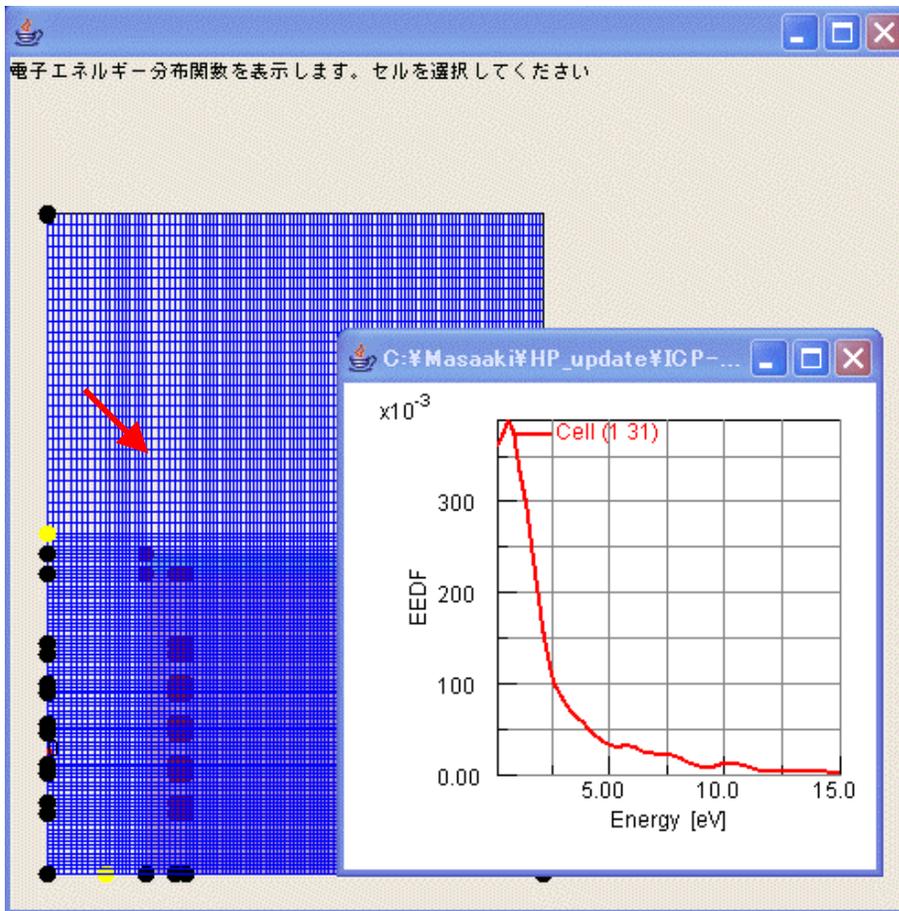


電子生成率



電子温度

EEDF (電子エネルギー分布関数)

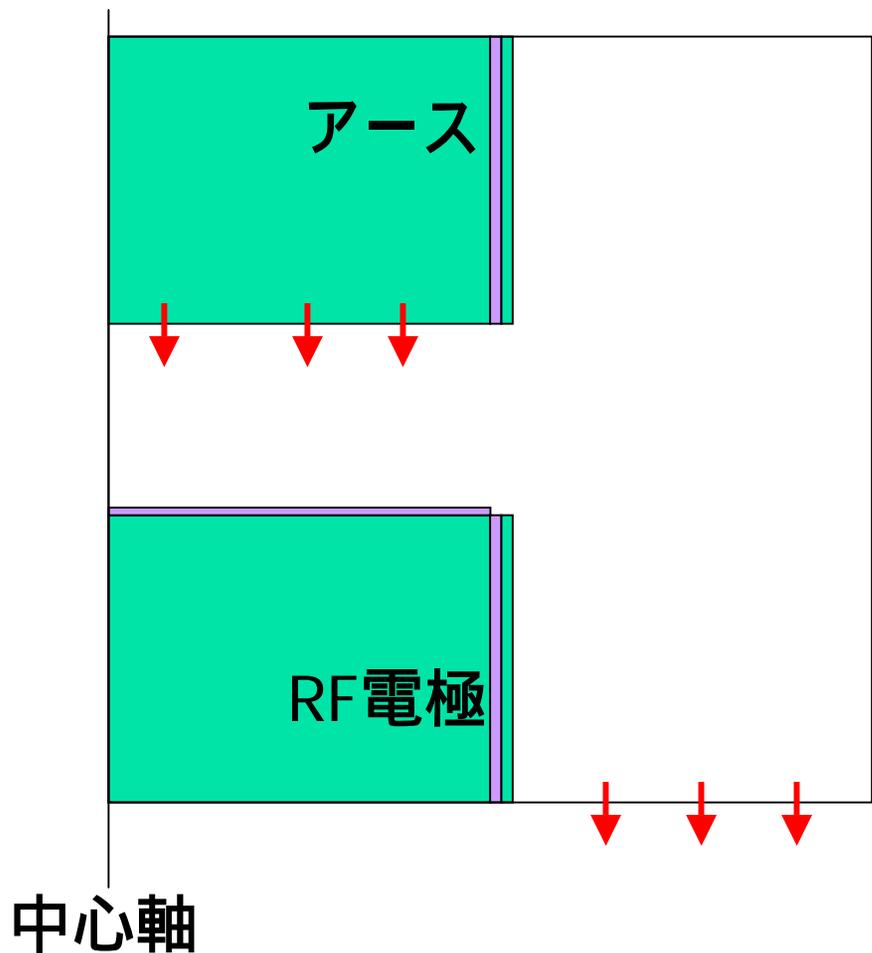


CCP装置

低ガス圧(10[Pa]以下)

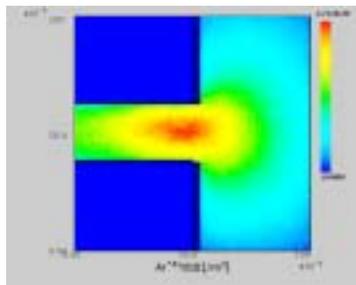
PIC-MCCM

DSMCM

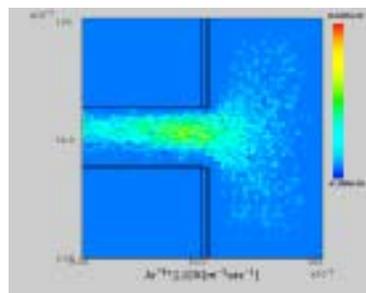


- 印加電圧 $V_{rf}=100[V]$
- ガス圧 およそ $5[Pa]$
(DSMCMで計算)
- 反応式
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar$ (弾性散乱)
 - $e^- + Ar \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^*$ (励起)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^{4s}$ (励起)
 - $e^- + Ar^{4s} \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $Ar^+ + Ar \rightarrow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

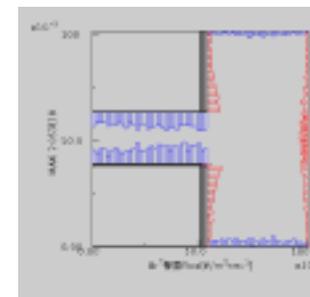
中性粒子に関する物理量



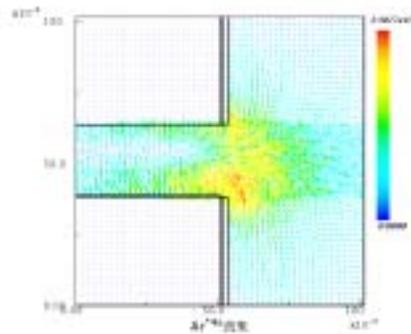
Ar^{4s}密度分布



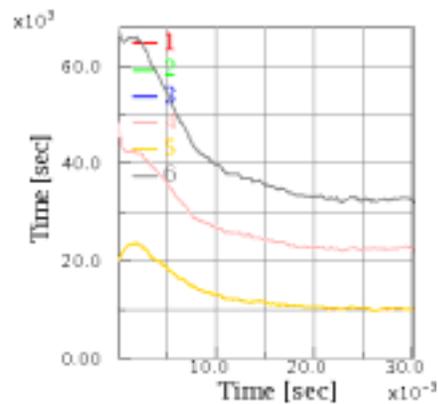
Ar^{4s}生成率分布



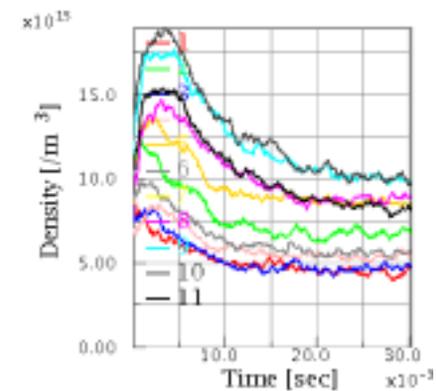
基板へのフラックス



Ar^{4s}空間フラックス

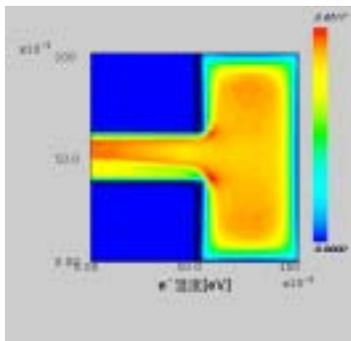


サンプル粒子数の時間変化

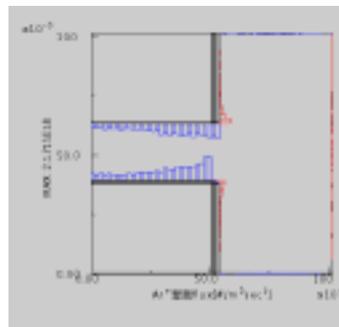


密度の時間変化

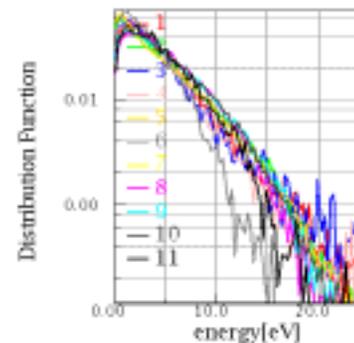
荷電粒子に関する物理量



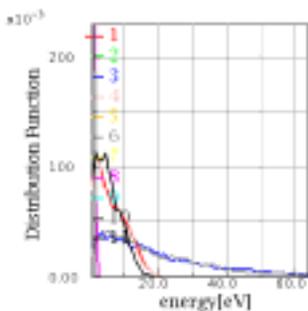
電子温度空間分布



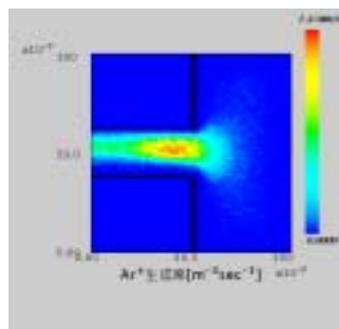
基板へのイオンフラックス



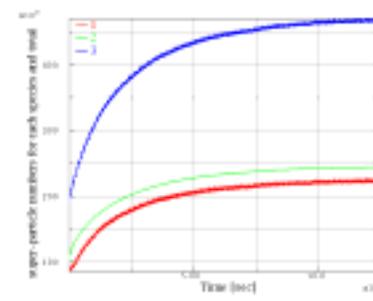
電子エネルギー分布



イオンエネルギー分布



電離率空間分布



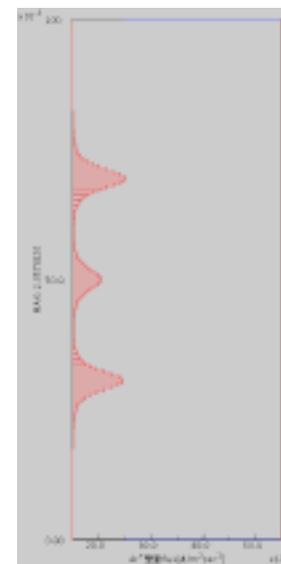
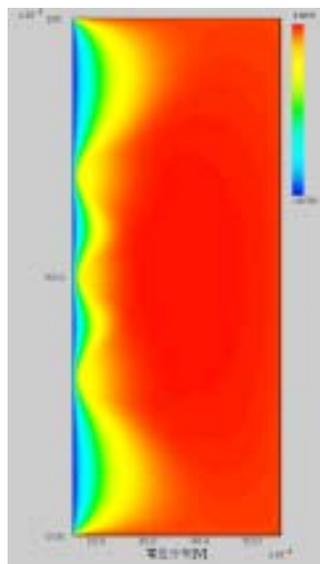
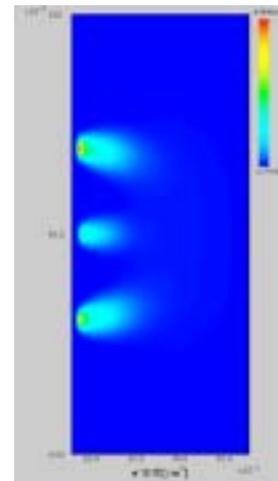
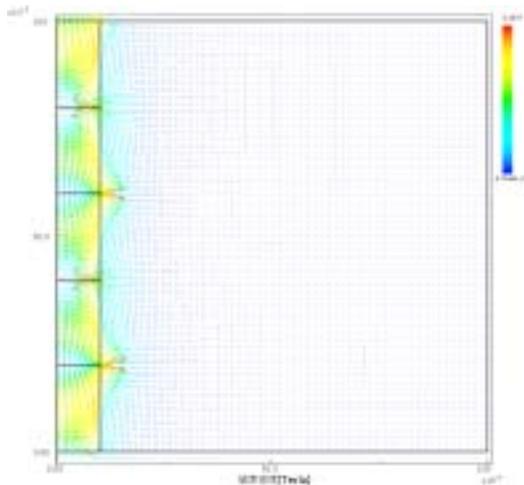
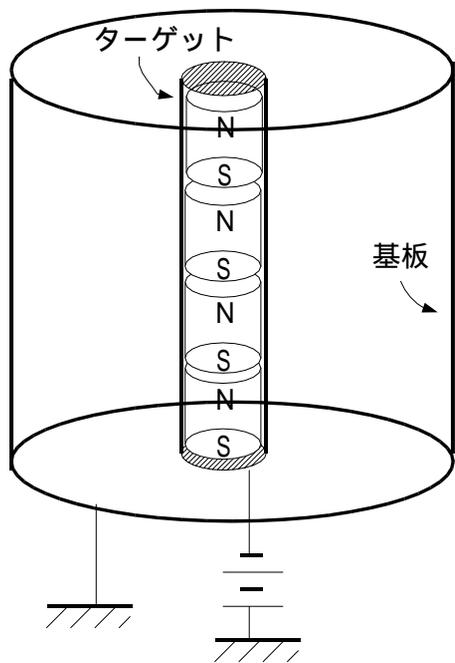
サンプル粒子数の時間変化

マグネトロンスパッタ装置

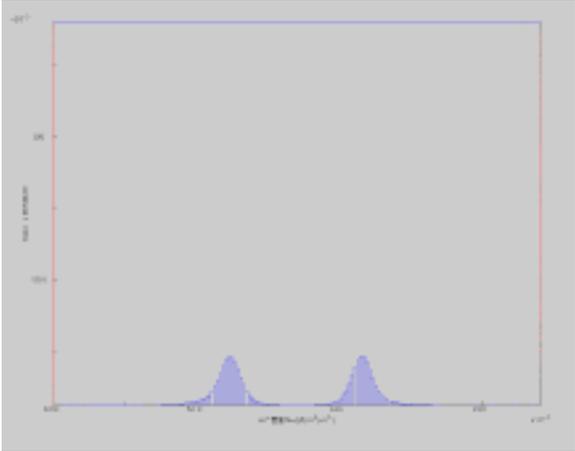
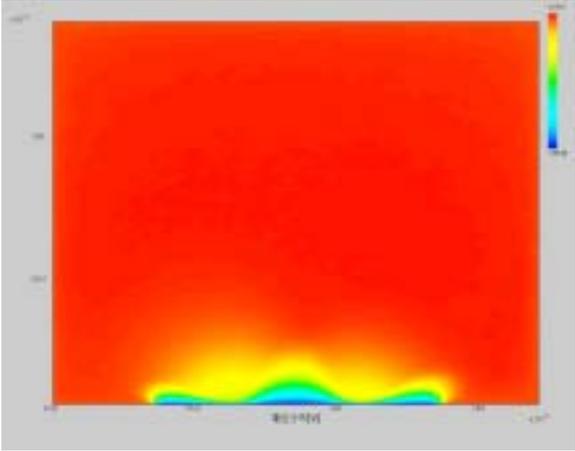
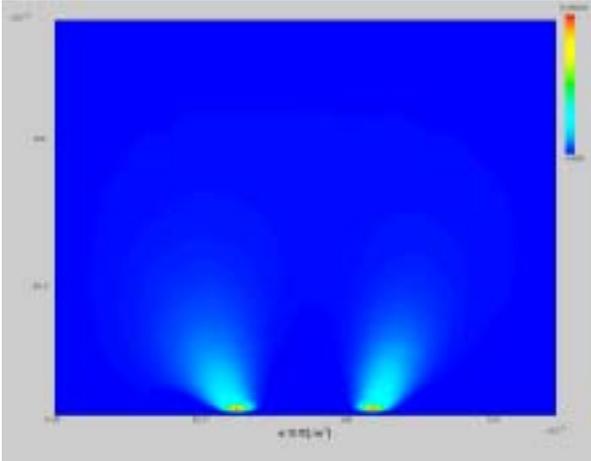
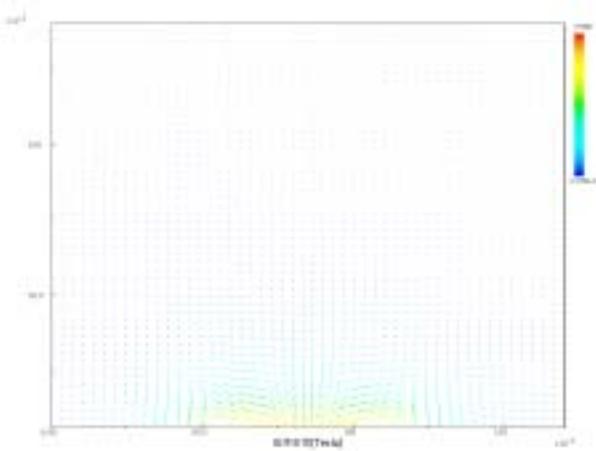
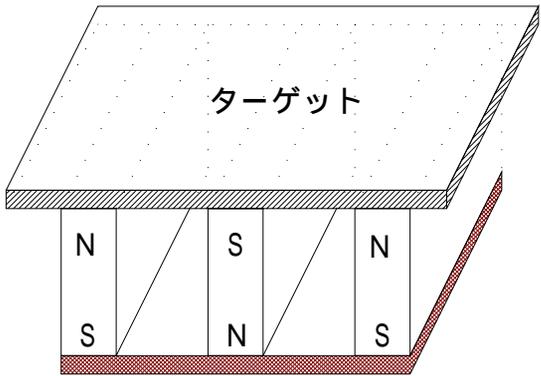
MSSM

PIC-MCCM

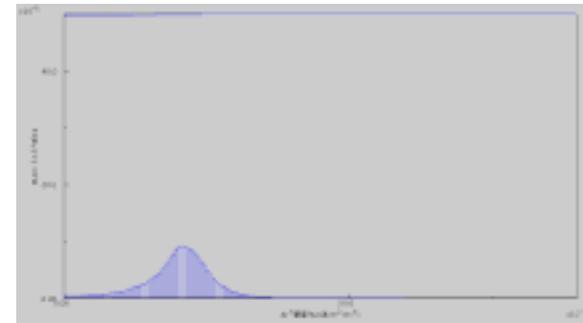
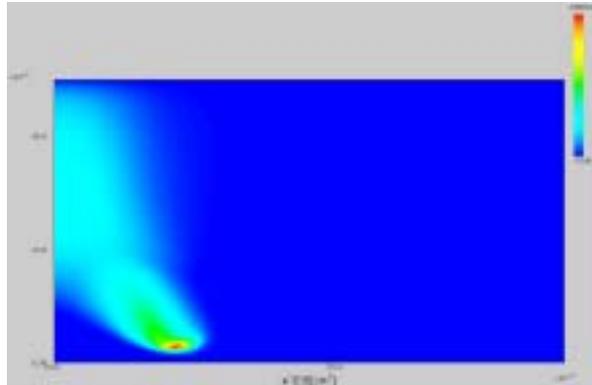
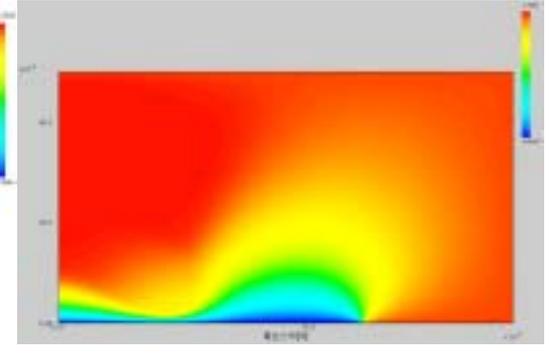
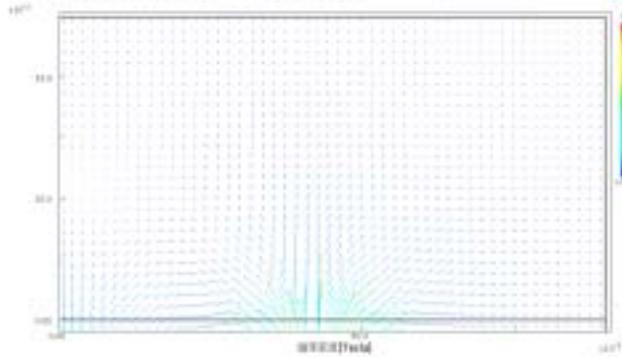
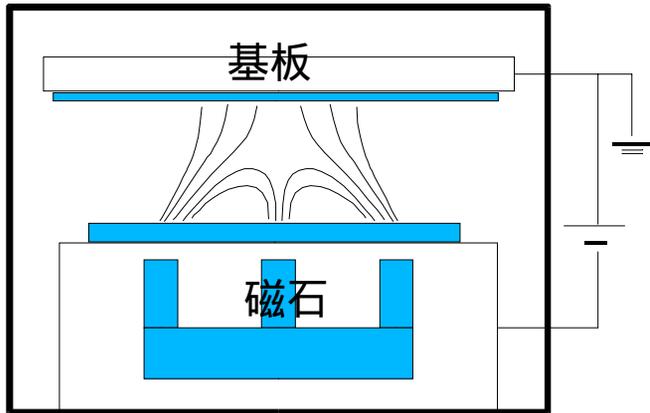
同軸円筒型



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

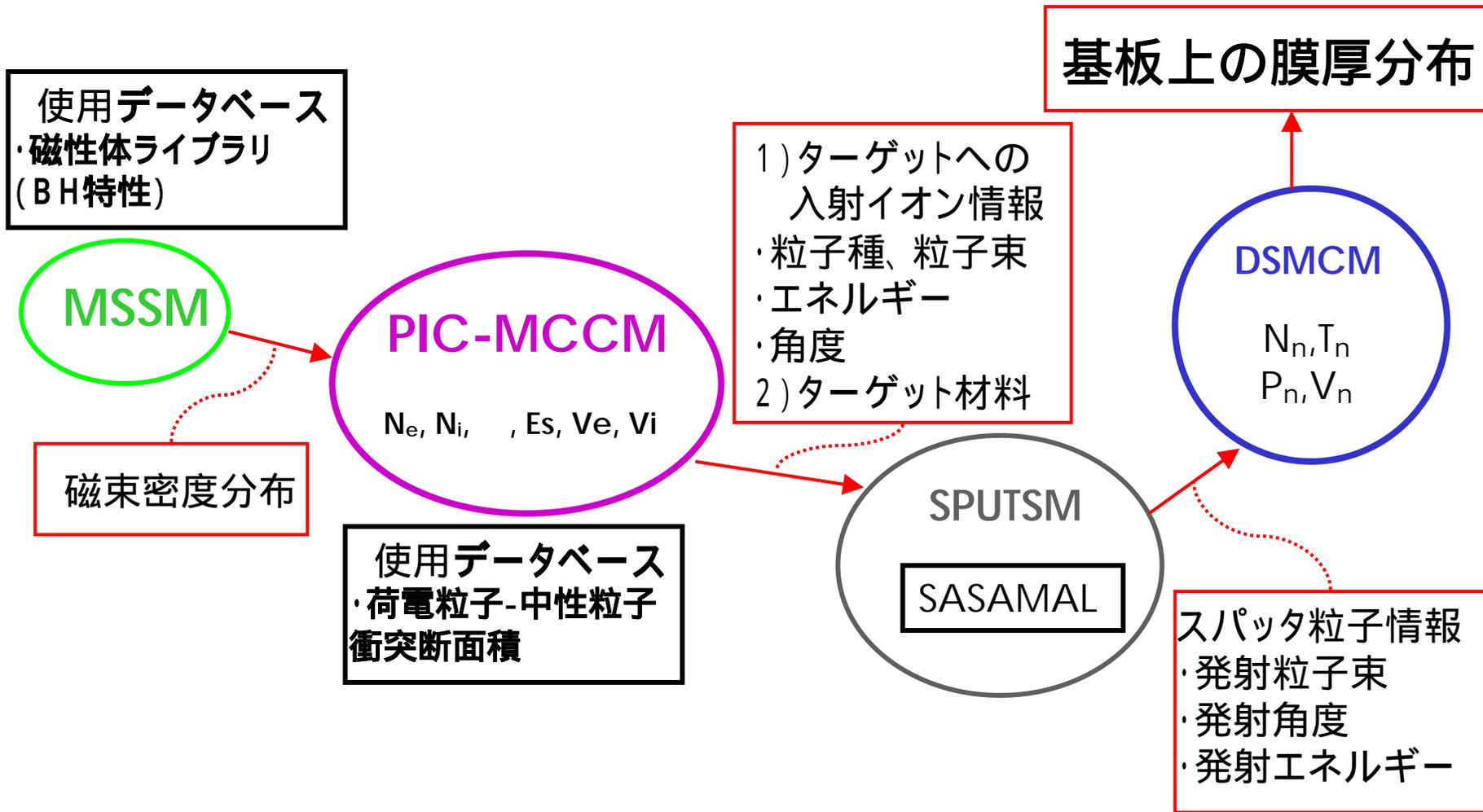
dynamic-SASAMAL

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

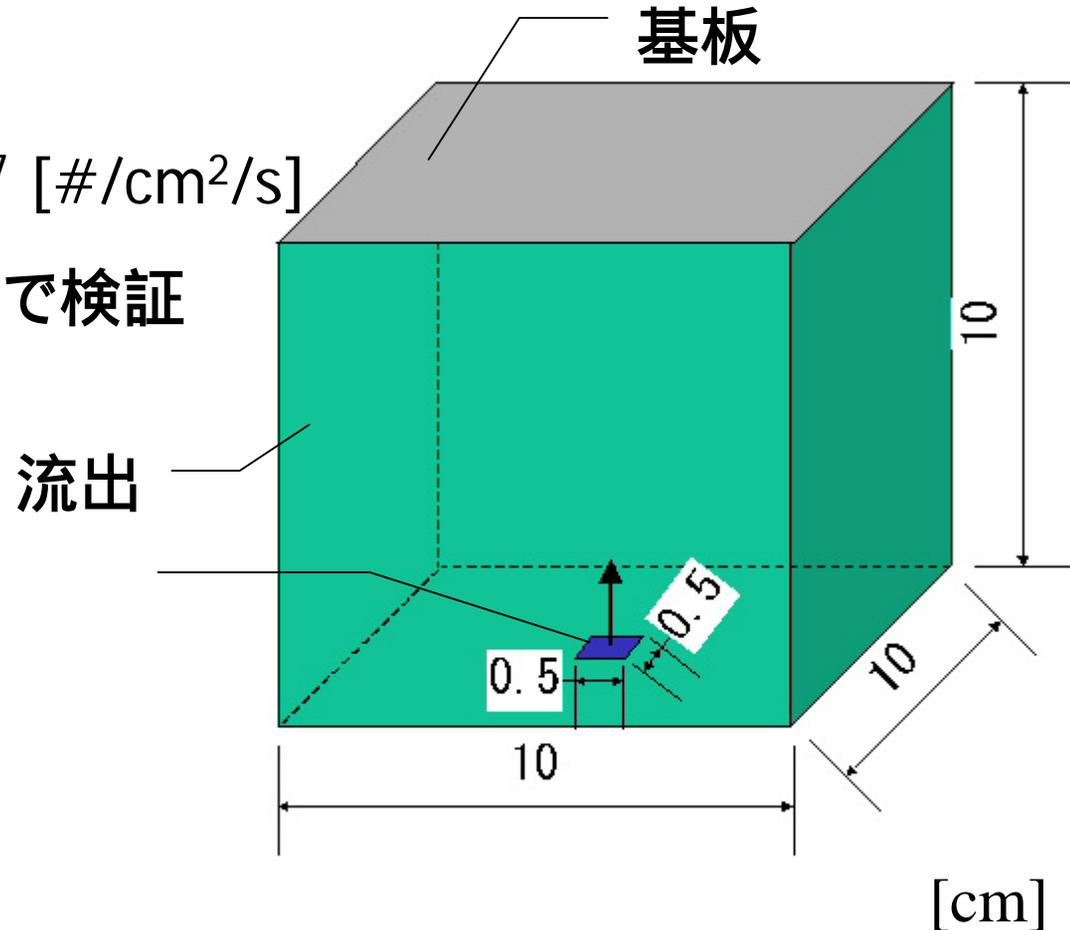
蒸発温度 : 1000 [K]

蒸発速度 : 1.8×10^{17} [# / cm² / s]

基板上での膜厚分布で検証

蒸発源

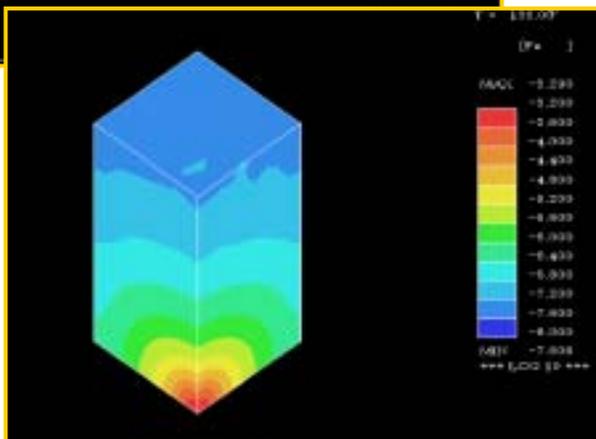
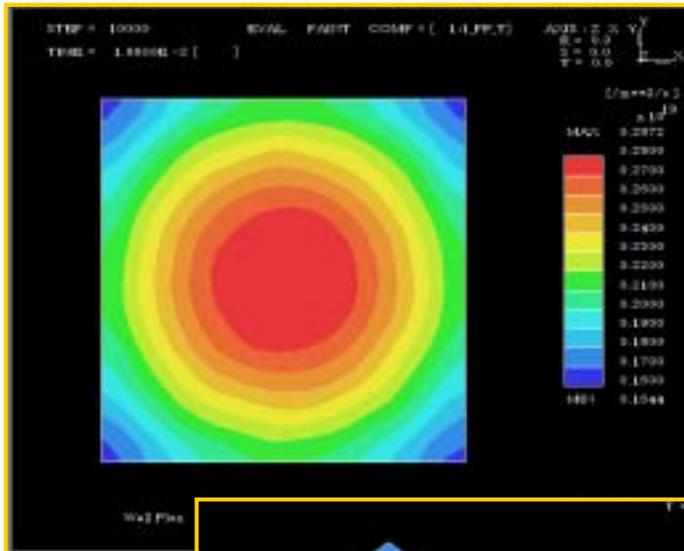
- 1) 点蒸発
- 2) 面蒸発 (5mm角)



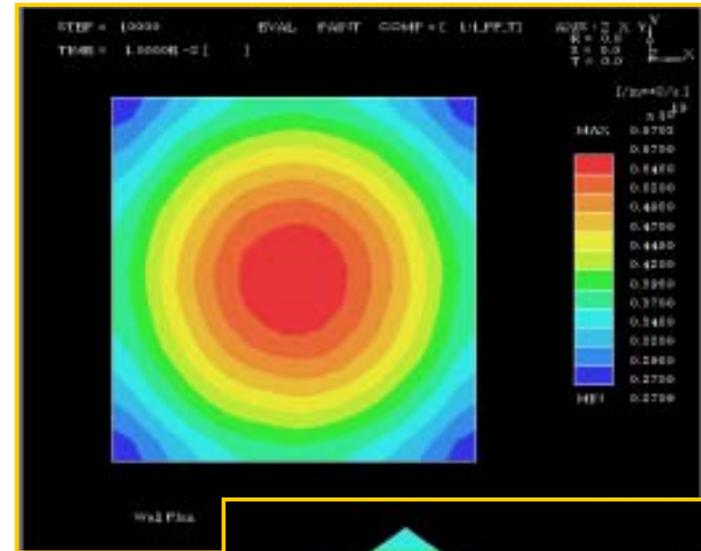
真空蒸着における膜厚分布の検証例

粒子フラックス分布、圧力分布

点蒸発源

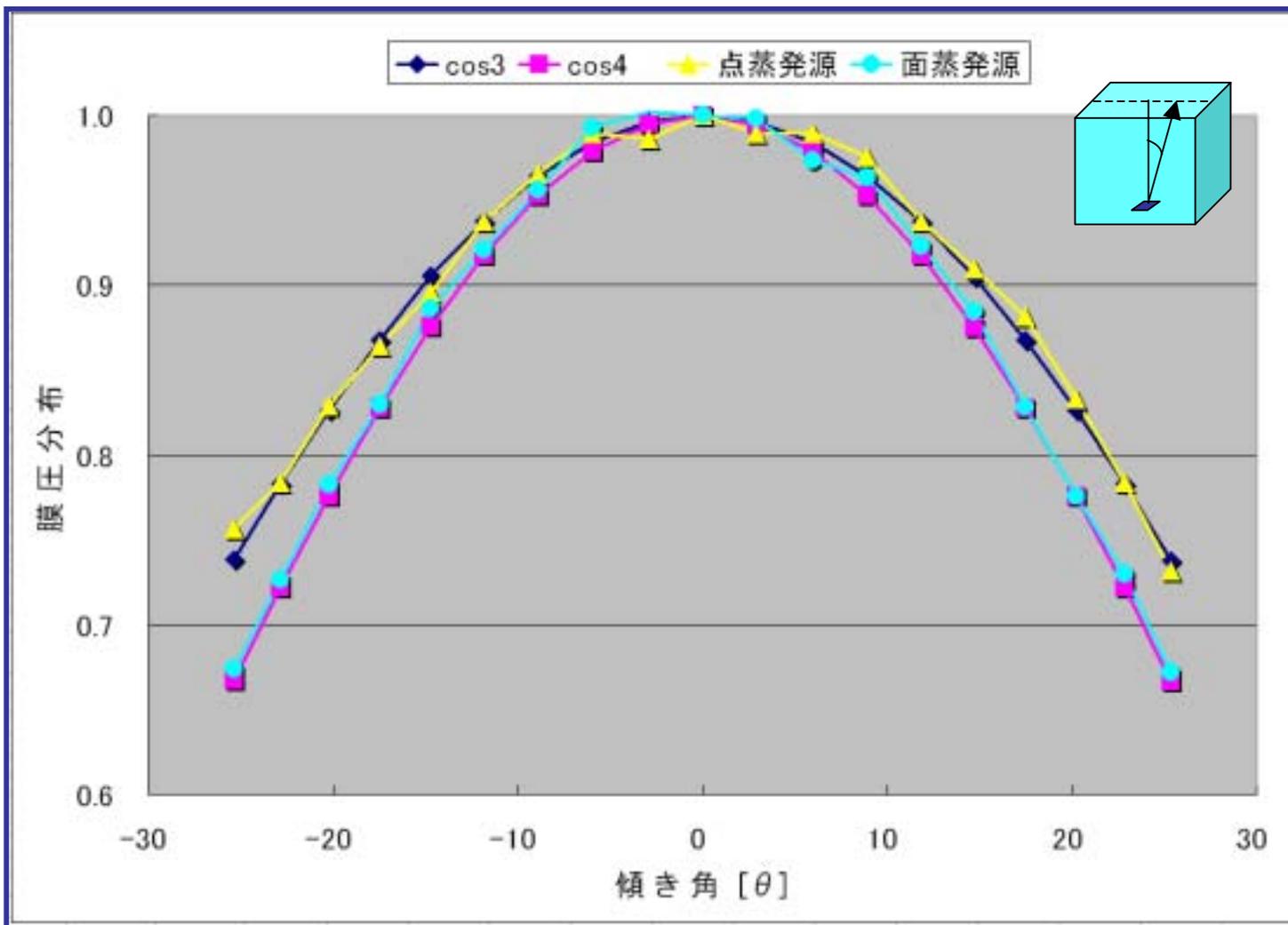


面蒸発源



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