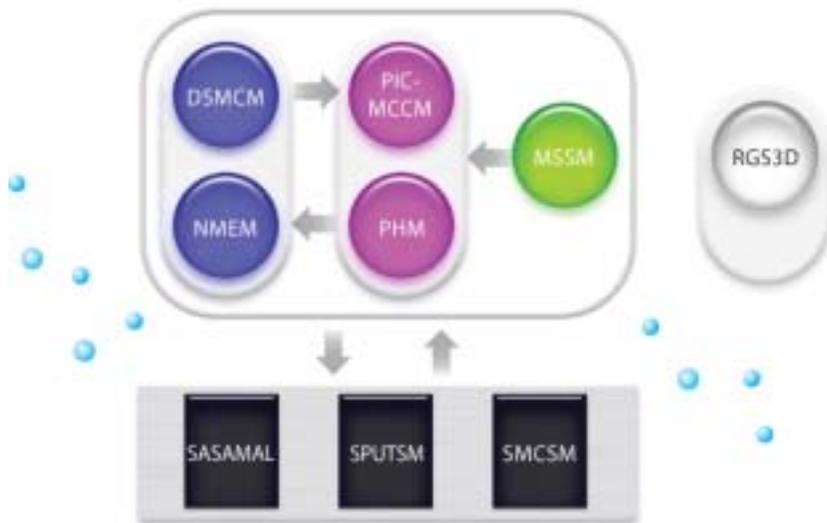


PEGASUS

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

ペガサスソフトウェア株式会社



目次

■ PEGASUSとは	-----	3
■ PEGASUS構成モジュール	-----	4
■ ユーザーインターフェイス(GUIM)	-----	5
■ 2次元気相シミュレータ概要	-----	13
(PHM, PIC-MCCM, NMEM, DSMCM, MSSM)		
■ 各モジュール概要	-----	15
■ 2次元気相シミュレーション概略図	-----	20
■ PHM 計算例 (CCP装置検証計算2例、ICP計算)	-----	21
■ PIC-MCCM 計算例	-----	46
(GEC-RC型装置計算、各種マグネトロンスパッタ装置計算、スパッタリング計算)		
■ 表面科学系シミュレータ概要	-----	64
■ 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア概要	-----	75
■ RGS3D 解析例	-----	79
(混合希薄気体解析、真空蒸着膜圧検証例、クラウジング係数検証例)		
■ 事業紹介	-----	97

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
を目的とした支援シミュレータ

- 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

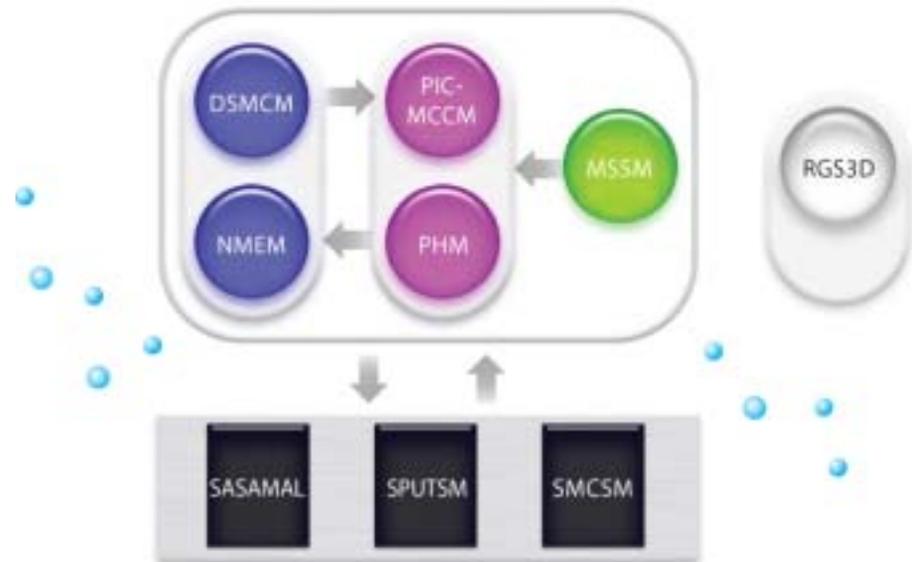
■ 2次元気相シミュレータ

- 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DSMC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)

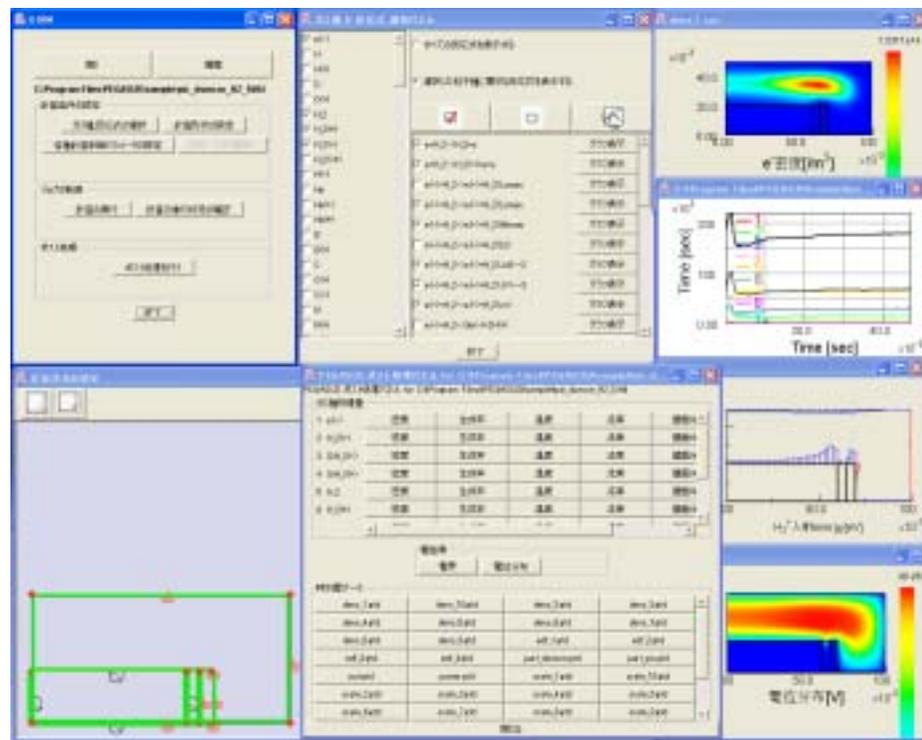
■ 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア (RGS3D)



ユーザーインターフェイス GUIM

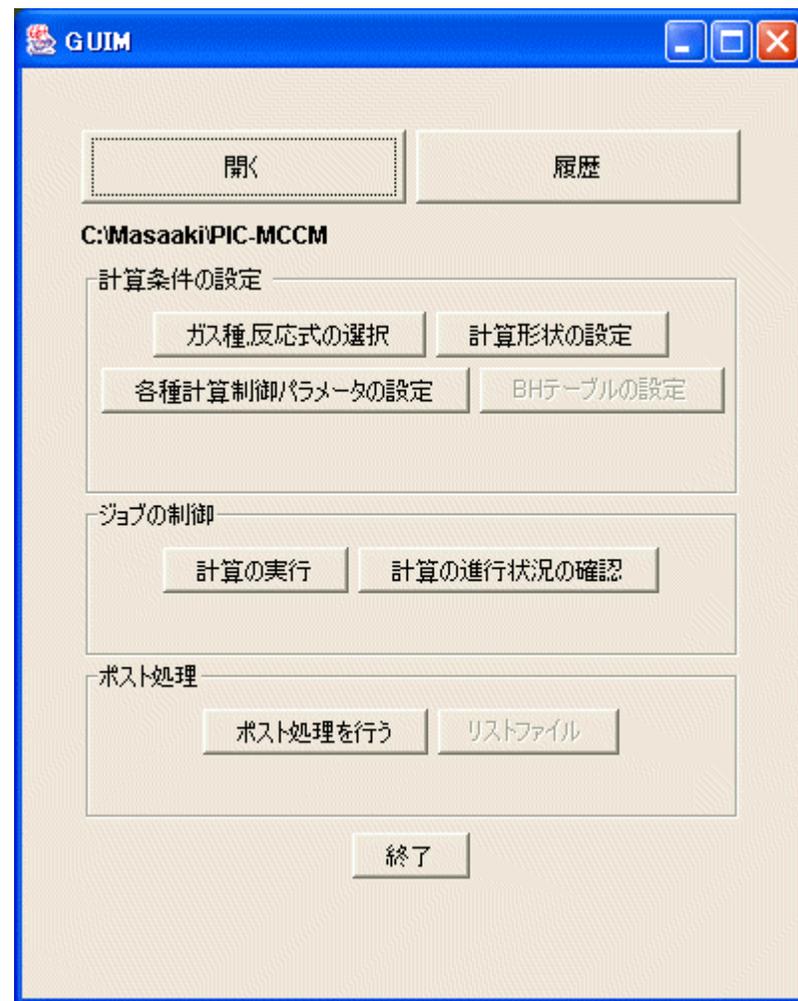
ユーザーインターフェイス GUIM

- 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)



PEGASUS / GUIM (メインパネル)

- 計算条件の設定
 - 入力データ作成
- ジョブの制御
 - モジュールの実行
 - 停止
 - ログファイル出力
- ポスト処理
 - 時刻歴データ
 - 空間分布表示



ガス種、反応式の選択

ガス種 & 反応式 選択パネル

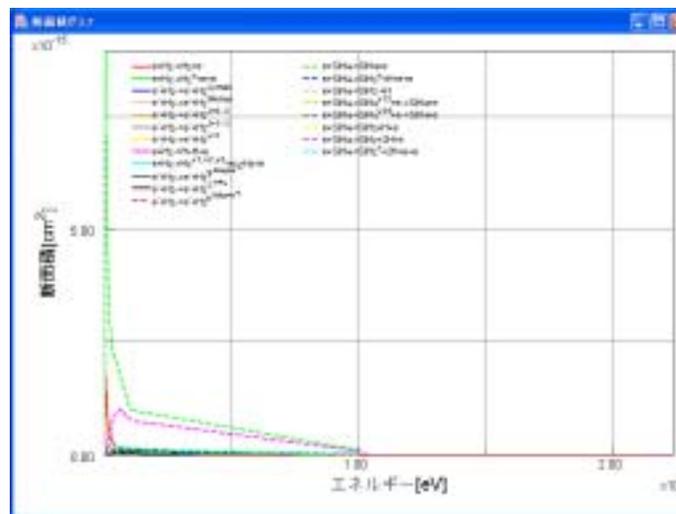
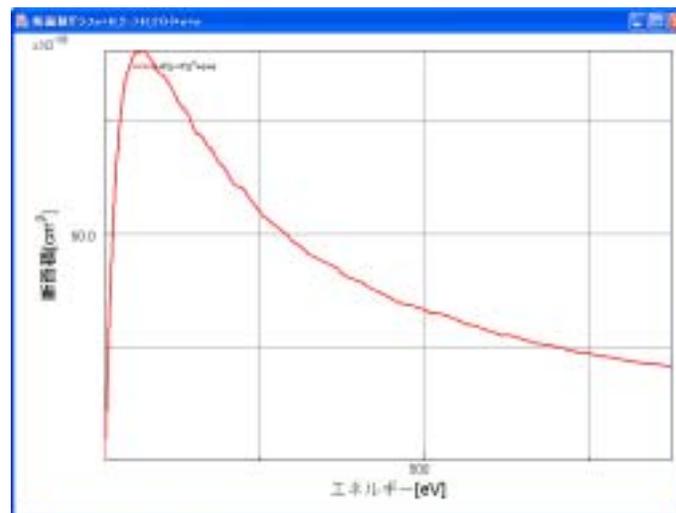
$e(-)$
 H
 H(+)
 D
 D(+)
 H₂
 H₂(*)
 H₂(+)
 H₂(+*)
 H(-)
 He
 He(+)
 He(*)
 B
 B(+)
 C
 C(+)
 C(-)
 N
 N(+)
 ...

すべての反応式を表示する
 選択した粒子種に関する反応式を表示する



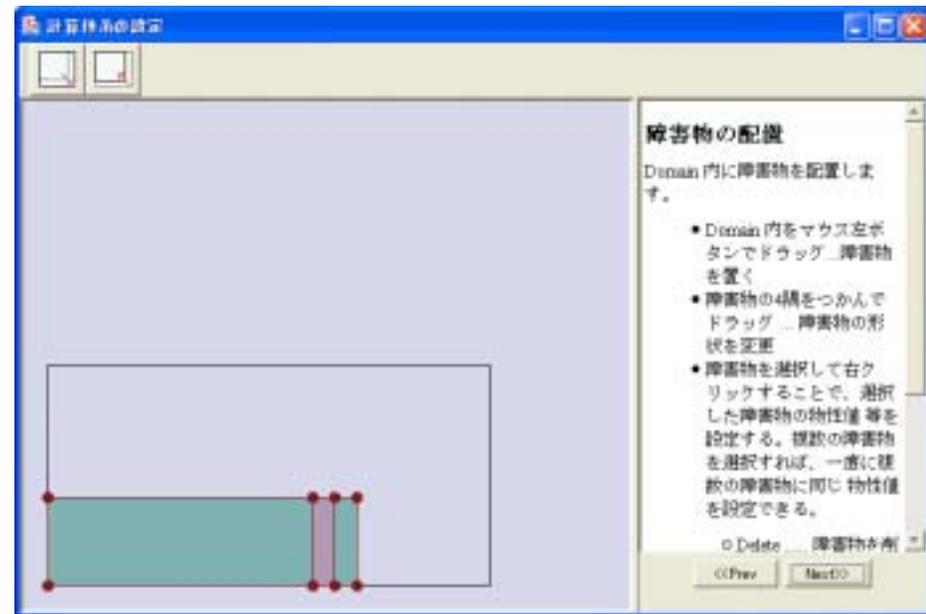
<input checked="" type="checkbox"/> $e+H_2 \rightarrow H_2+e$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e+H_2 \rightarrow H_2(+)+e+e$	グラフ表示
<input type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(Lyman)$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(Lyman)$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(Werner)$	グラフ表示
<input type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(2s)$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(J=0 \rightarrow 2)$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(J=1 \rightarrow 3)$	グラフ表示
<input checked="" type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow e(-)+H_2(v=1)$	グラフ表示
<input type="checkbox"/> $e(-)+H_2 \rightarrow 3e(-)+2H(+)$	グラフ表示

終了

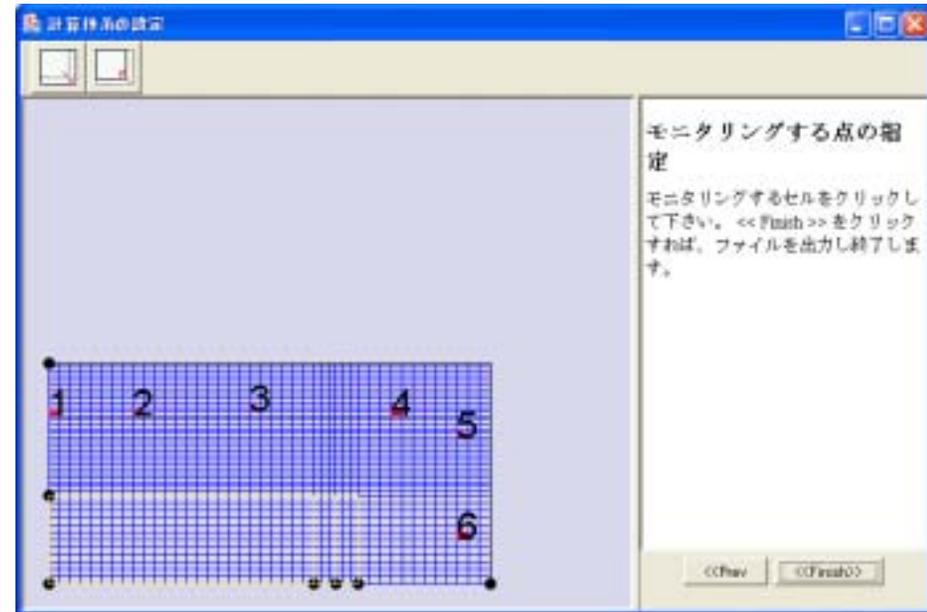
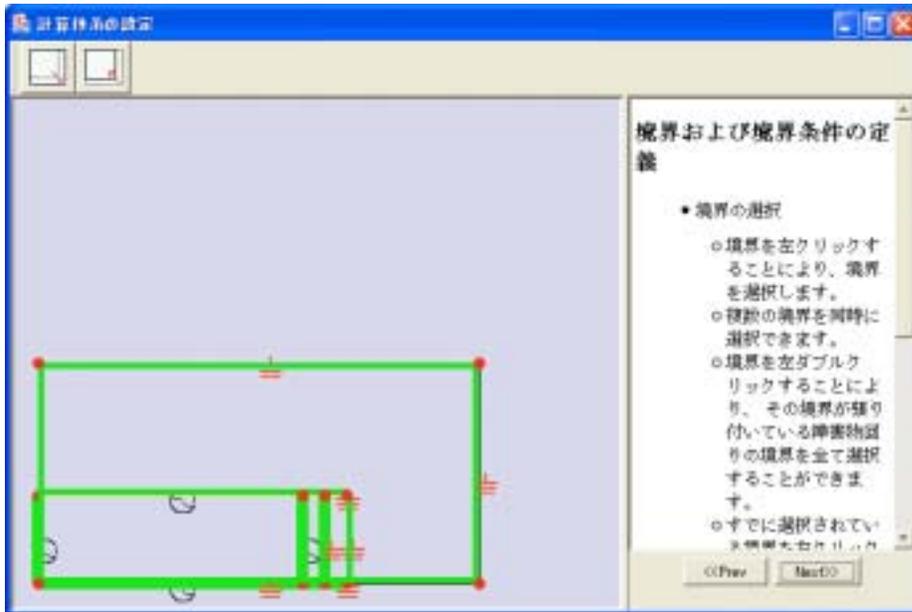


計算領域の設定

電極、誘電体、コイルそして磁石などの配置



境界条件の設定 メッシュ分割



制御パラメータの設定

各モジュールの制御パラメータを指定します

PHM | NMEM | DSMCM | PSM | PEM | EMCSM | ECSDSDB | EMM

最大ステップ数: 10000000
 最大超粒子数: 1000000
 etd 出力間隔: 100
 out 出力間隔: 1

粒子種	初期密度	初期超粒子数
e ⁺	1.0e15	10000
N ⁺	0	0
N ₂ ⁺	1.0e15	10000
N	0.0	0
N ₂	3.2e20	0

外部磁場の指定: 磁場無し
 磁場データファイル名: bfield.txt 選択
 中性ガスモジュール選択: なし
 中性粒子との衝突: 10
 リスタート計算を行う
 PHM_dump_interval: 10000
 EMM計算を行う
 曲を fix する: 1.0e-10
 smooth type2: 4
 角度分布: dvar1 70.0 kvd 110.0 dvar 40

OK Cancel

制御パラメータの設定

各モジュールの制御パラメータを指定します

PHM | NMEM | DSMCM | PSM | PEM | EMCSM | ECSDSDB | EMM

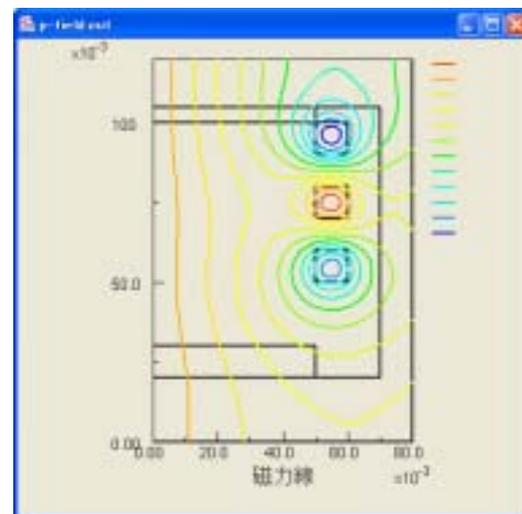
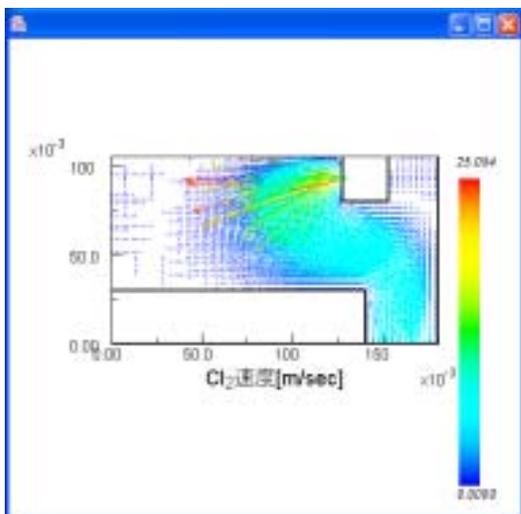
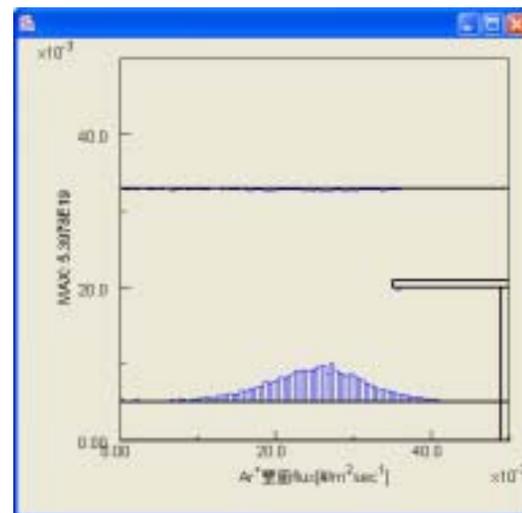
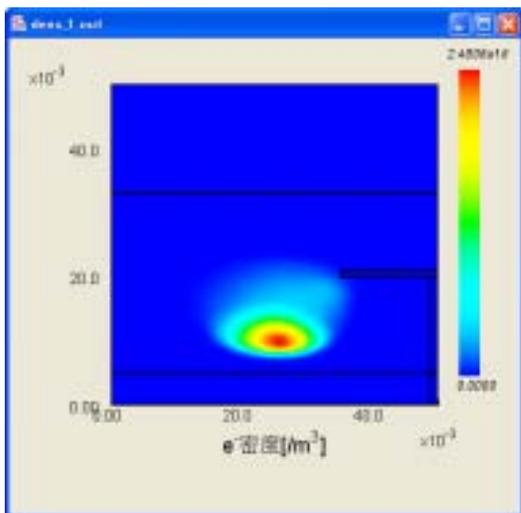
最大ステップ数: 10000
 サンプリング間隔: 10
 etd 出力間隔: 1000
 out 出力間隔: 10000
 最大粒子数(Major): 300000
 最大粒子数(Minor): 800000
 restart 出力間隔: 10000

初期密度の単位: [#/m³] 初期温度の単位: [eV]

粒子種	初期密度	初期温度	初期超粒子数	マイナー?
H ₂	8.0e21	0.03	50000	<input type="checkbox"/>
H ₂ (*)	1.0e18	0.03	10000	<input checked="" type="checkbox"/>

OK Cancel

ポスト処理



2次元気相シミュレータ概要

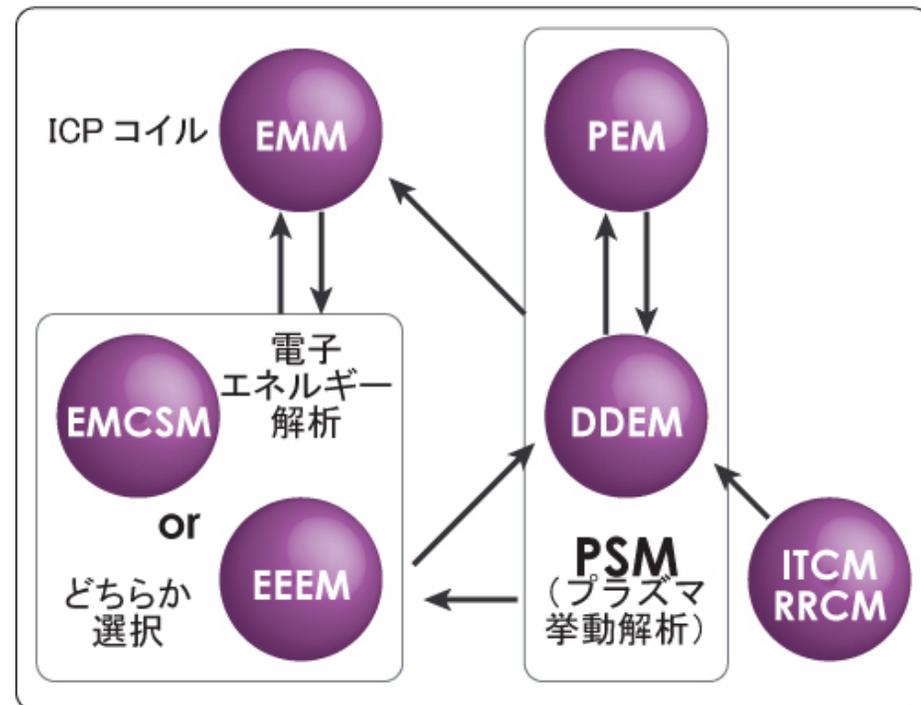
2次元気相シミュレータの構成モジュール

- 2次元 rz もしくは xy 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DSMC 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

PHM

- PHMは、ガス圧またはプラズマ密度の高いプラズマの挙動解析を得意とするモジュールです。
- 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により、電子温度を計算します。荷電粒子の密度と流束は、ドリフト拡散モデルを用いて計算します。
- 以下のモジュールで構成されています。
 - 電子モンテカルロシミュレーションモジュール (EMCSM)
 - 電子エネルギー方程式解法モジュール (EEEM)
 - 荷電粒子シミュレーションモジュール (PSM)
 - ポアソン方程式モジュール (PEM)
 - ドリフト・拡散モジュール (DDEM)
 - イオン輸送係数計算モジュール (ITCM)
 - 荷電粒子生成・消滅レート計算モジュール (RRCM)
 - 誘導電界モジュール (ICPの場合) (EMM)
- 2次元直交座標または2次元円柱座標(軸対称)上で、上記モジュールを交互に用いながらプラズマの挙動を計算します。
- DSMCM及びNMEMとのカップリングにより、荷電粒子だけではなく、バッファガス、ラジカル種の挙動も考慮した結合シミュレーションが可能です。

PHM 概念図



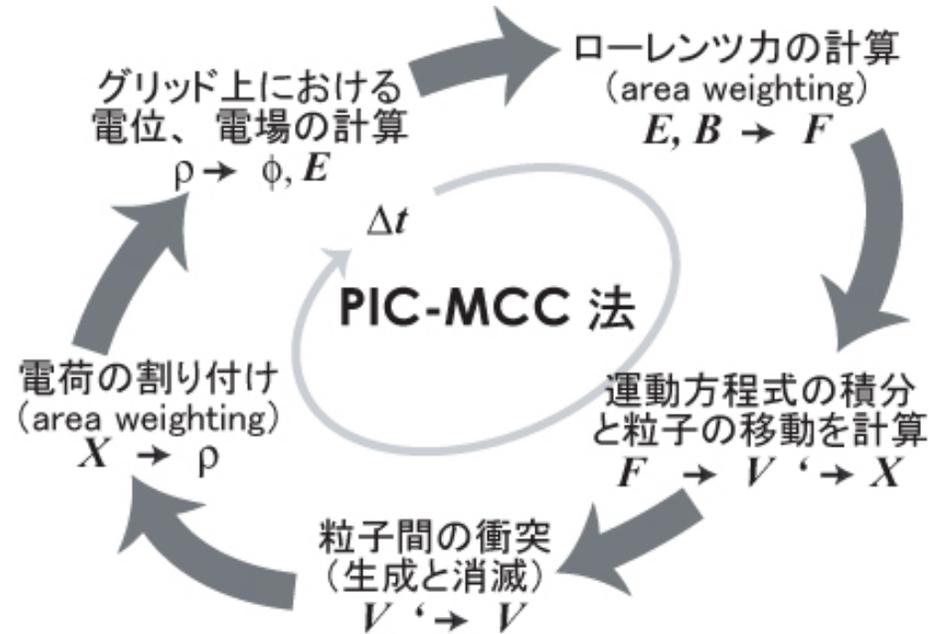
PIC-MCCM

- PIC-MCCMは、ガス圧又はプラズマ密度の比較的低いプラズマ挙動解析を得意とするモジュールです。電子とイオン共に『粒子法』でモデル化し、それぞれの受ける電磁力、衝突過程を忠実に追跡します。

- 物理モデルが比較的簡単
- シミュレーションの際に持ち込まれる物理モデルの仮定や近似が少ない
- 計算精度が高い
- 電子もしくはイオンのみの荷電粒子挙動解析も可能

といった利点があります。

- DSMCMとのカップリングにより、荷電粒子だけではなく、バッファガス、ラジカル種の挙動も考慮した結合シミュレーションが可能です。



NMEM

- NMEMは、電荷を持たないガス種の流れ場を求めるためのモジュールです。対象とする気体は理想気体であって連続体近似が成り立つと仮定し、各ガス種の質量保存則(連続の式)、運動量保存則(ナビエ・ストークス方程式)を解くことにより各ガス種の圧力場、密度場、および速度場を求めます。空間の離散化には有限体積法を用い、計算アルゴリズムはSIMPLE法を圧縮性流体用に変形して用いています。
- プラズマ拳動解析モジュールとのカップリングが可能です。

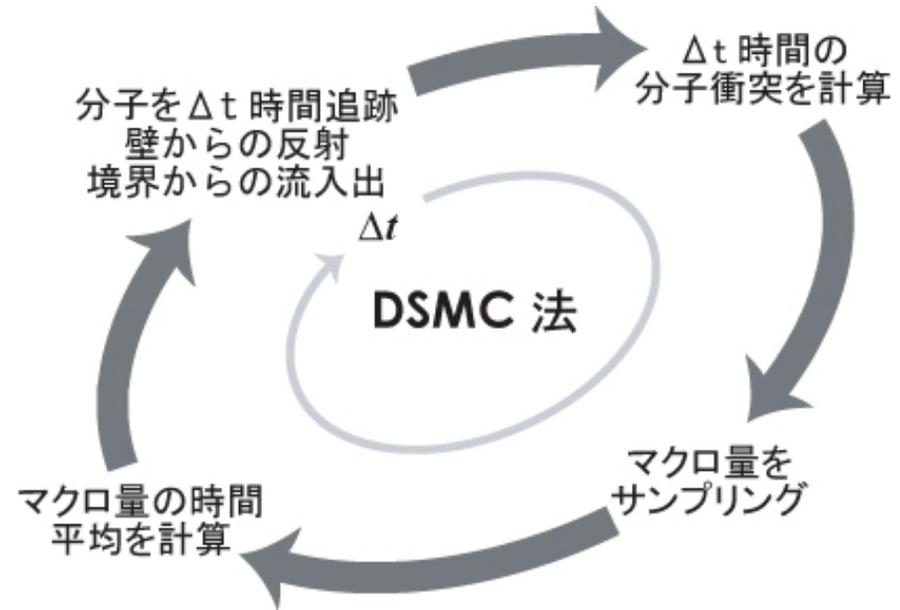
$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -\nabla \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha + R_\alpha$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} &= -\nabla P_\alpha + \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T) \\ &\quad + \rho_\alpha \sum_\alpha \nu_{\alpha\beta} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) + R_\alpha \mathbf{u}_\alpha \end{aligned}$$

$$P_\alpha = R_\alpha \rho_\alpha T_\alpha$$

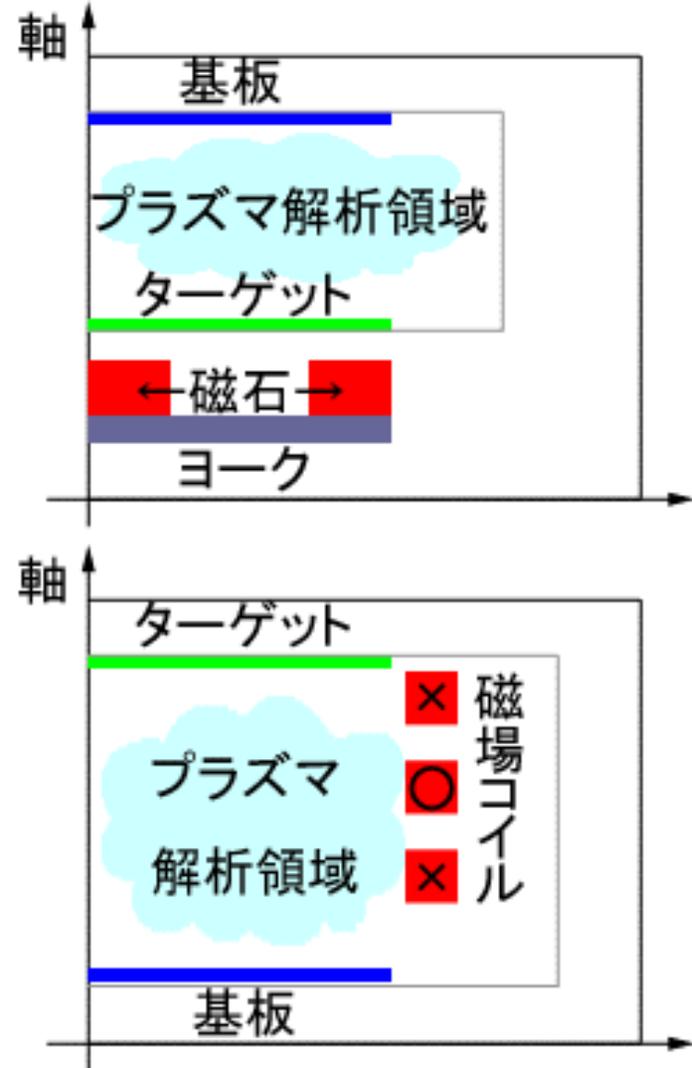
DSMCM

- DSMCMは、気体分子運動論の支配方程式であるボルツマン方程式を直接的に確率論的手法で解くDSMC法に基づき、希薄気体の中性ガスやラジカル種の挙動を解析するモジュールです。
- 気体の希薄度を示すKn(クヌーセン数)が大きな流れ場 (> 0.01 、中間流、自由分子流)の解析を得意としています。
- DSMC法は、原理的に $Kn < 0.01$ となる、気体の流れ場を解析できますが、計算量の問題から $Kn > 0.01$ での解析が実用的です。
- プラズマ挙動解析モジュールとのカップリングが可能です。

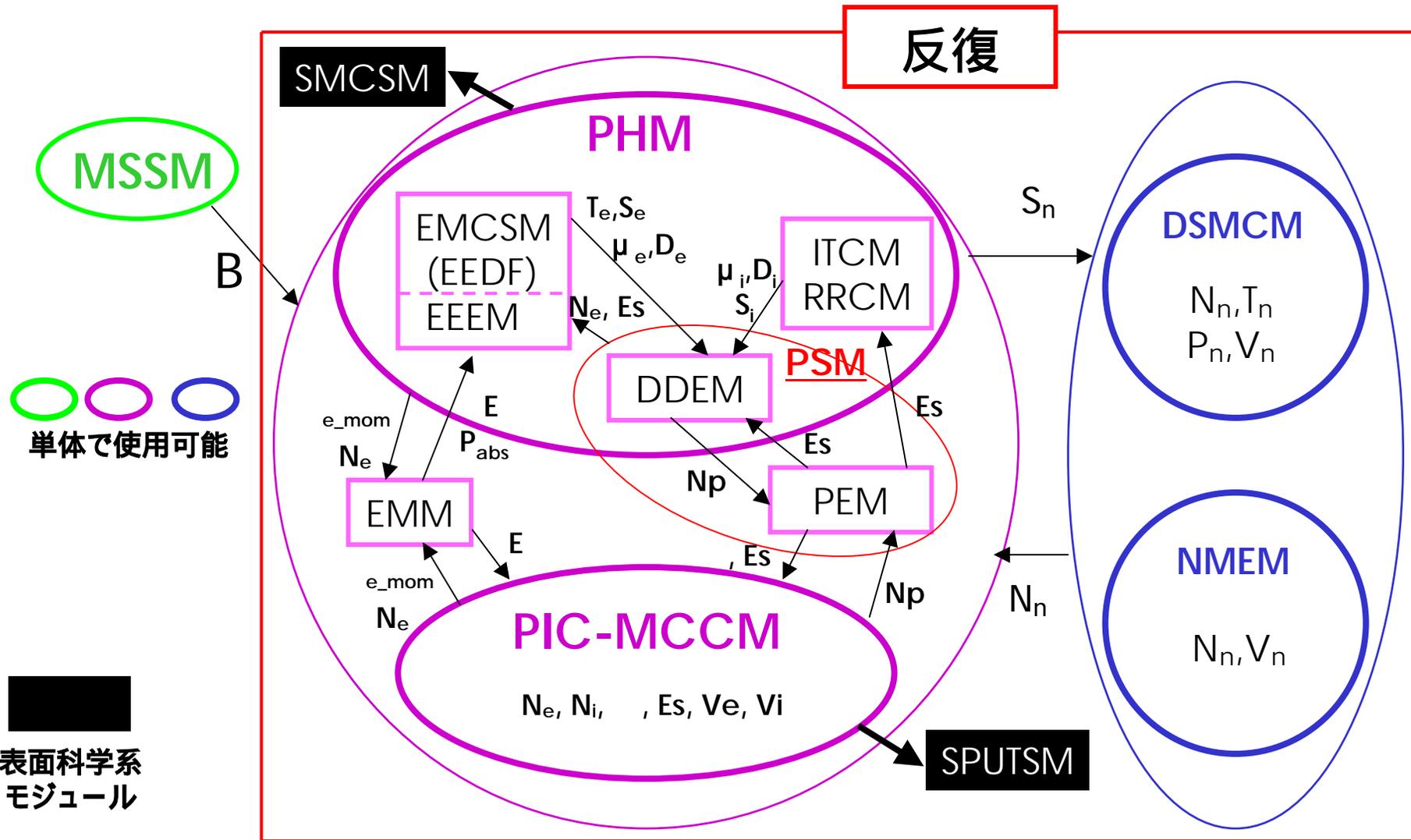


MSSM

- MSSMは、永久磁石やコイルによる静磁場を2次元体系で高速に解析するモジュールです。マグネトロンスパッタ装置内や磁場コイルを持つ装置内の静磁場を計算し、その結果をプラズマ解析モジュールに容易に引き渡すことができます。
- MSSMは、株式会社ミュートックとの共同開発です。
- マグネトロンスパッタ装置内や磁場コイルをもつ装置内の静磁場解析
- 磁石、コイルがある系一般の静磁場解析



2次元気相シミュレーション概略図



PHM 計算例

CCP検証計算(1)

検証論文:

D. P. Lymberopoulos and D. J. Economou,

"Two-Dimensional Self-Consistent Radio Frequency Plasma Simulations Relevant to the Gaseous Electronics Conference RF Reference Cell",

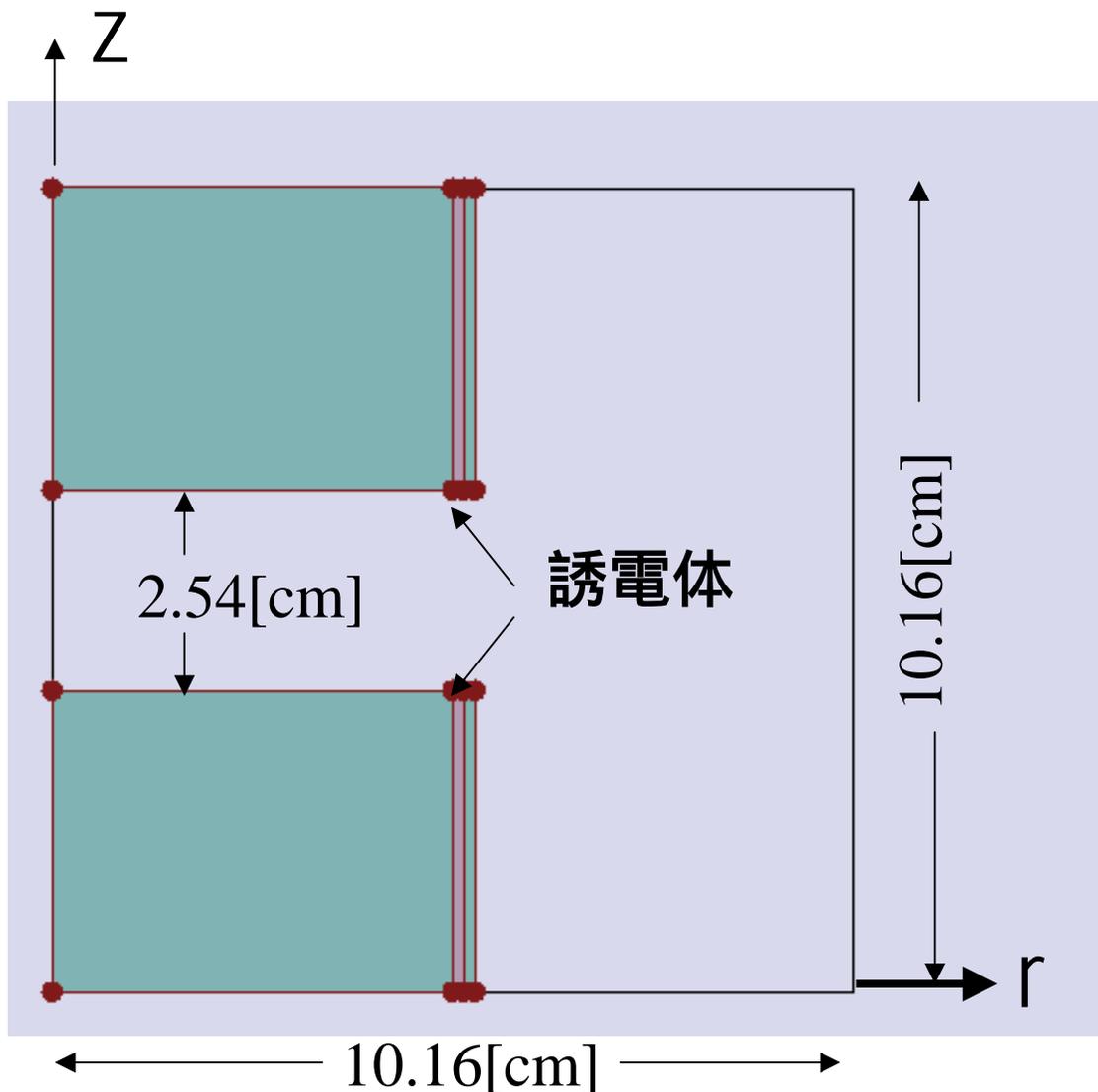
Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology,

Vol.100, No.4,1995.

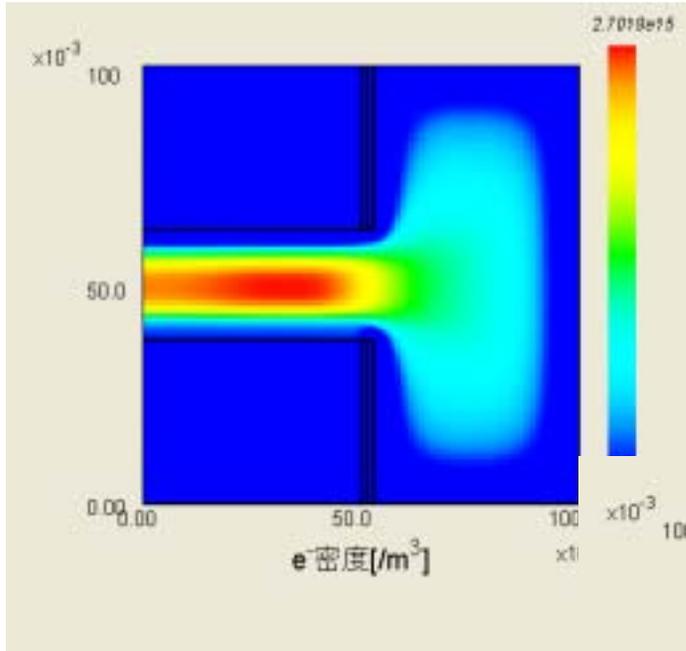
(流体モデル)

GEC-RC型装置

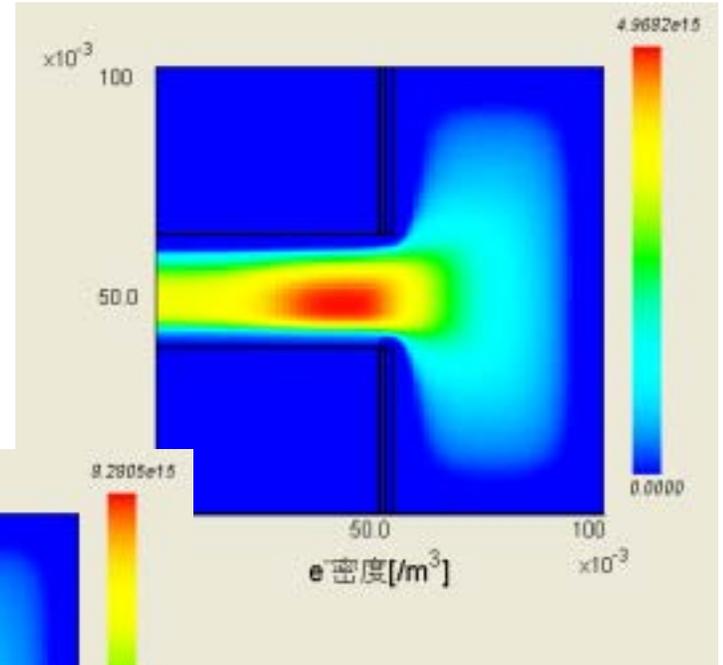
PHM



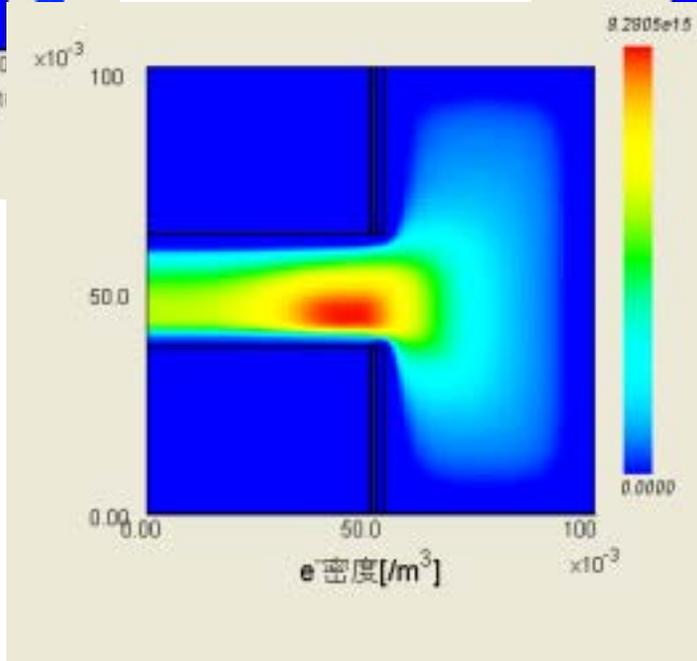
- ・ガス種: Ar
- ・上部電極: 接地
検証例(1):
- ・下部電極:
Vpp: 200 [V]
周波数: 13.56 [MHz]
- ・ガス圧: 13.33, 33.33,
66.67 [Pa]
検証例(2)
- ・下部電極:
Vpp: 100, 200, 300 [V]
周波数: 13.56 [MHz]
- ・ガス圧: 13.33 [Pa]



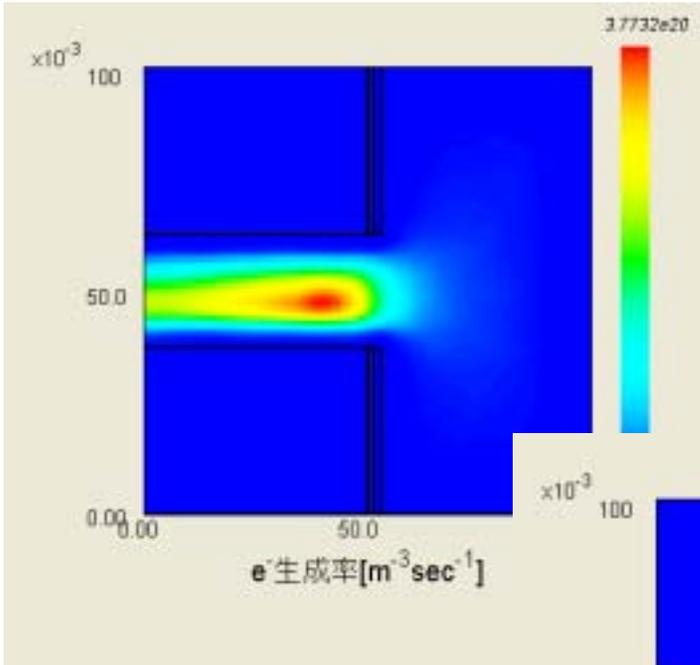
13.33[Pa]



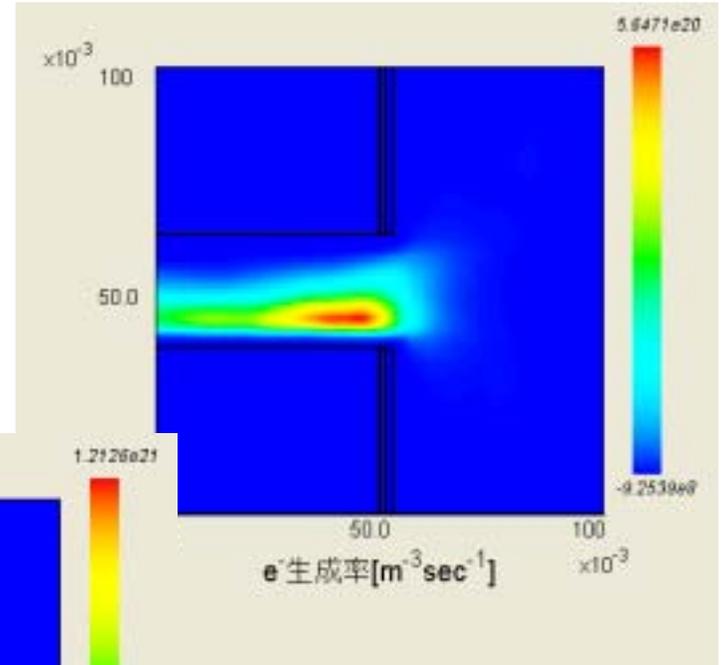
33.33[Pa]



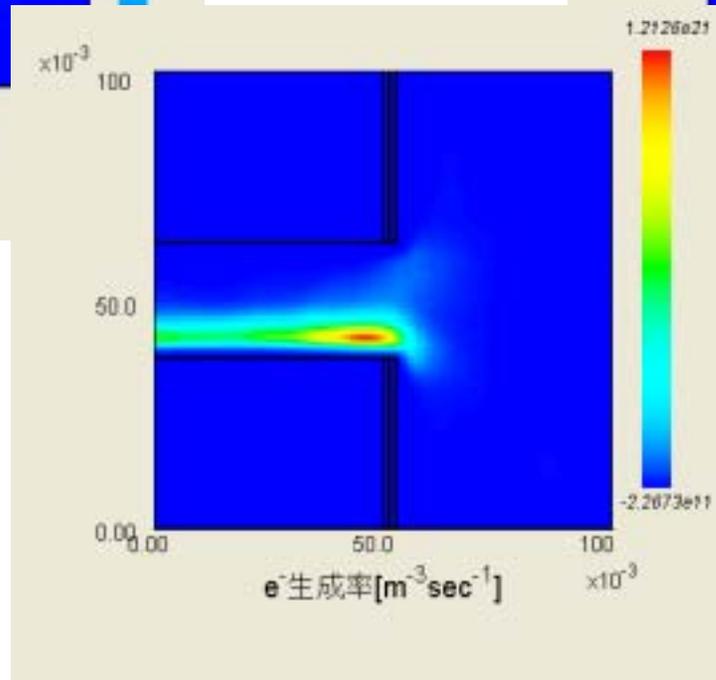
66.67[Pa]



13.33[Pa]



33.33[Pa]

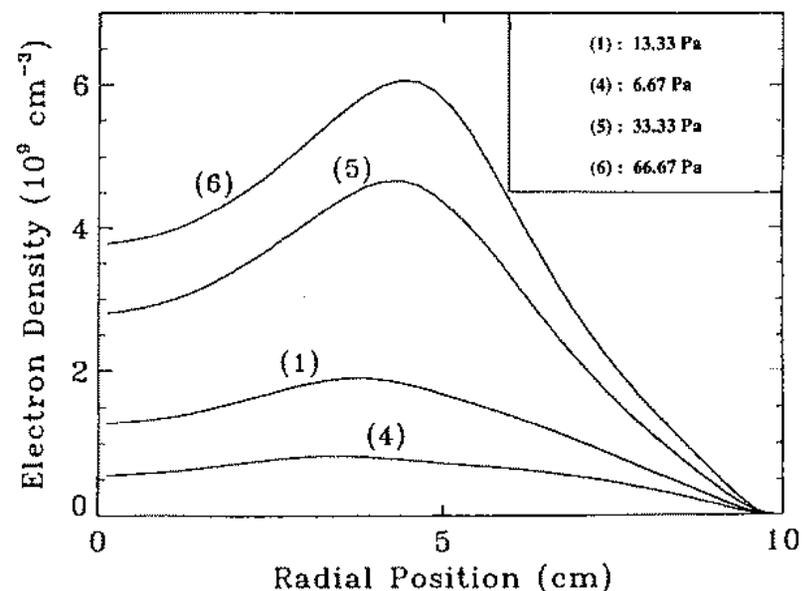
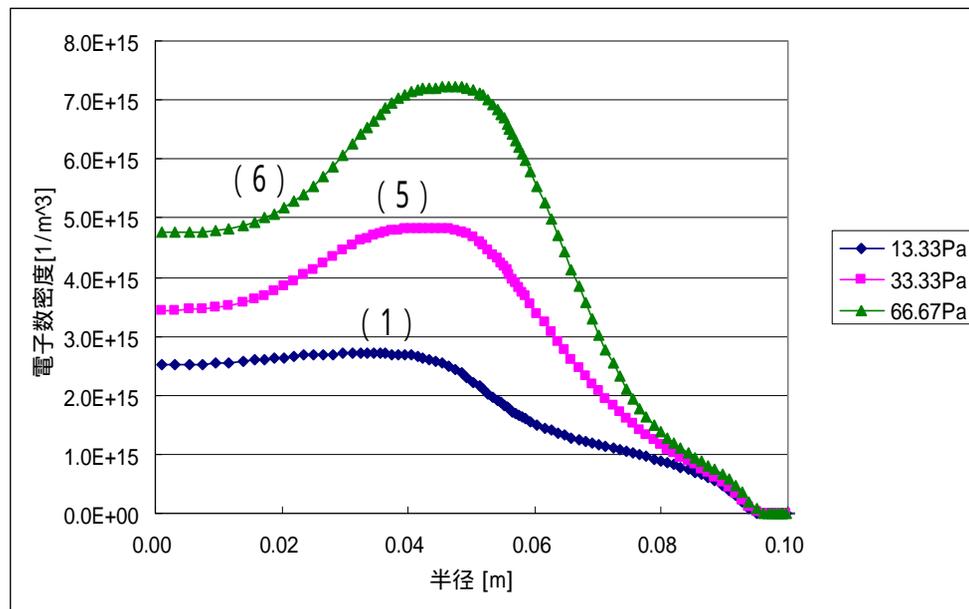


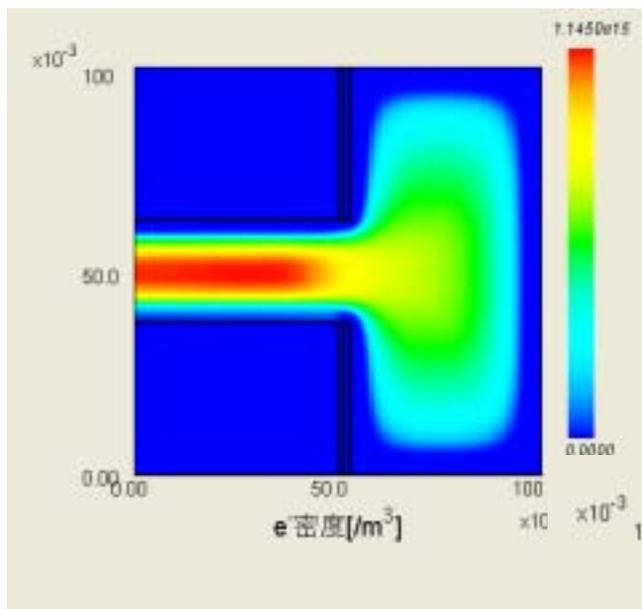
66.67[Pa]

$V_{pp} : 200 [V]$

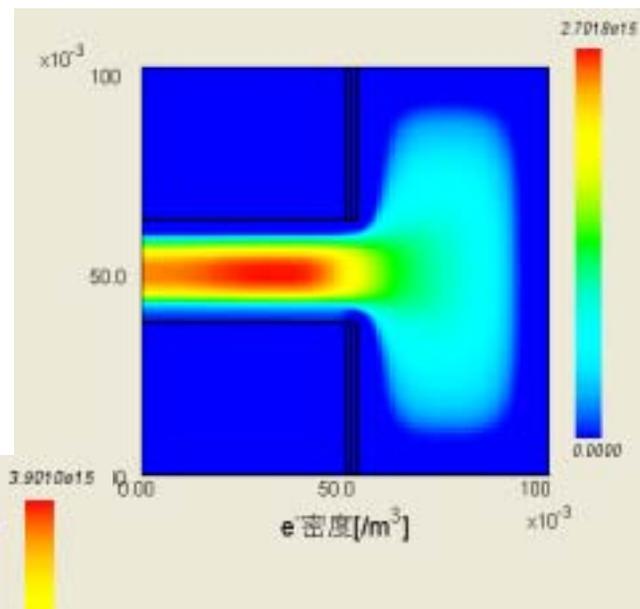
(1) 13.33[Pa], (5) 33.33[Pa], (6) 66.67[Pa]

電極間中央一径方向電子密度分布

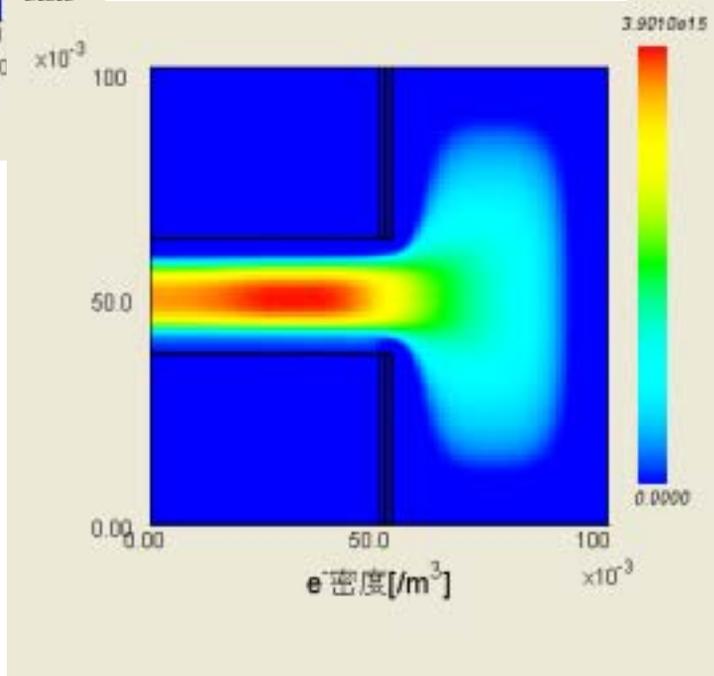




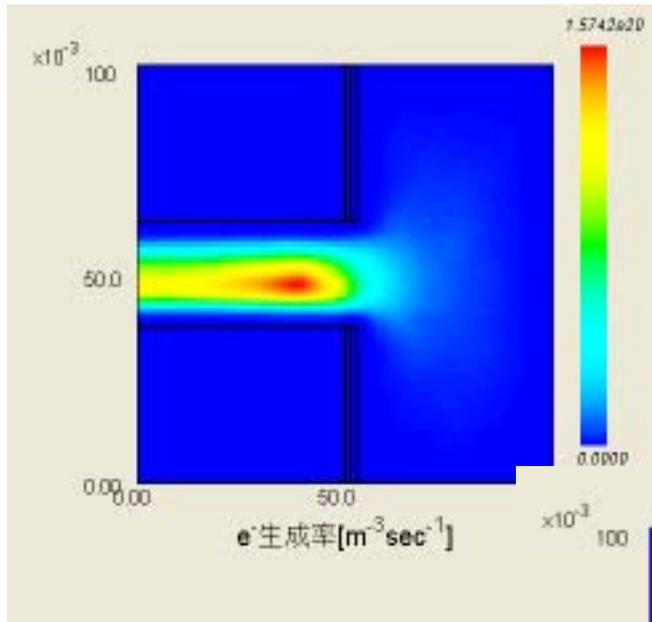
100[V]



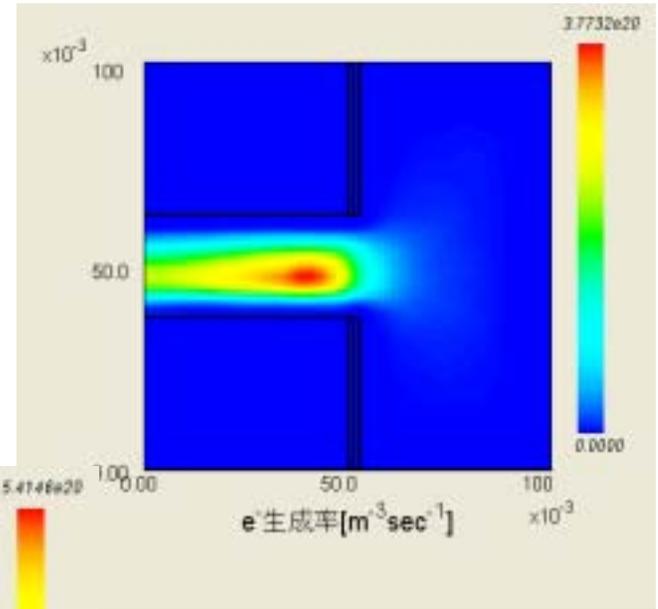
200[V]



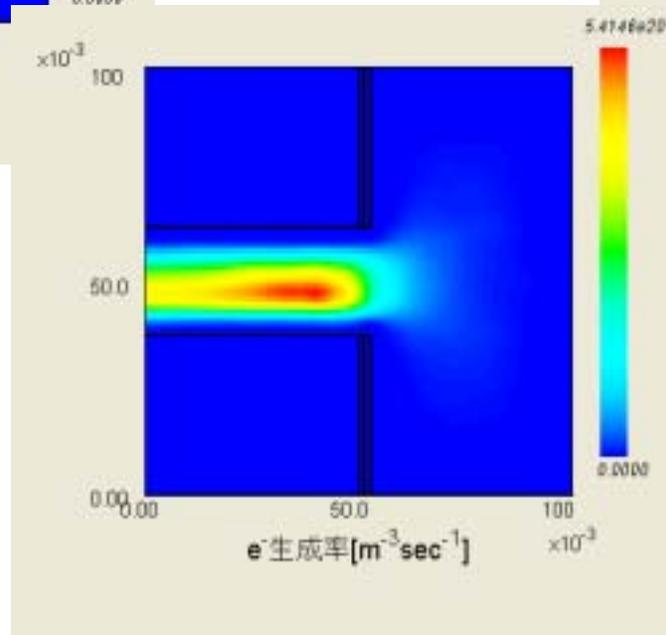
300[V]



100[V]



200[V]

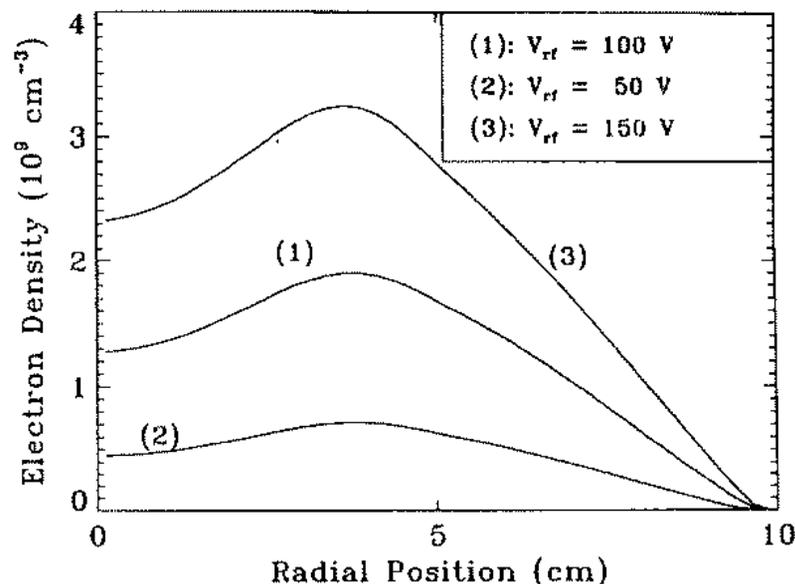
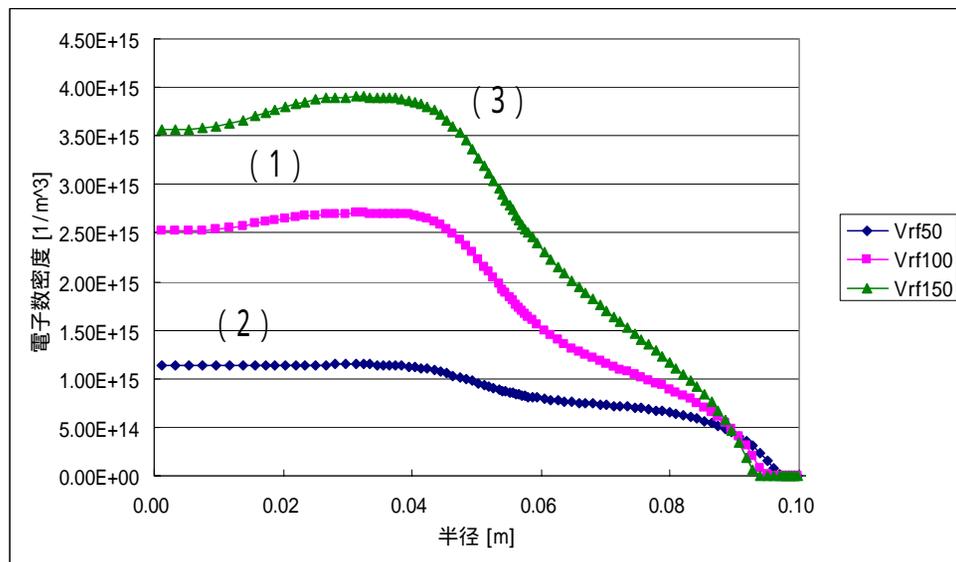


300[V]

13.33[Pa]

(1) 100[V], (2) 50[V], (3) 150[V] 結果比較

電極間中央一径方向電子密度分布



CCP検証計算(2)

検証論文:

Shahid Raul and Mark J. Kushner,

"Argon metastable densities in radio frequency Ar, Ar/O₂ and Ar/CF₄ electrical discharges",

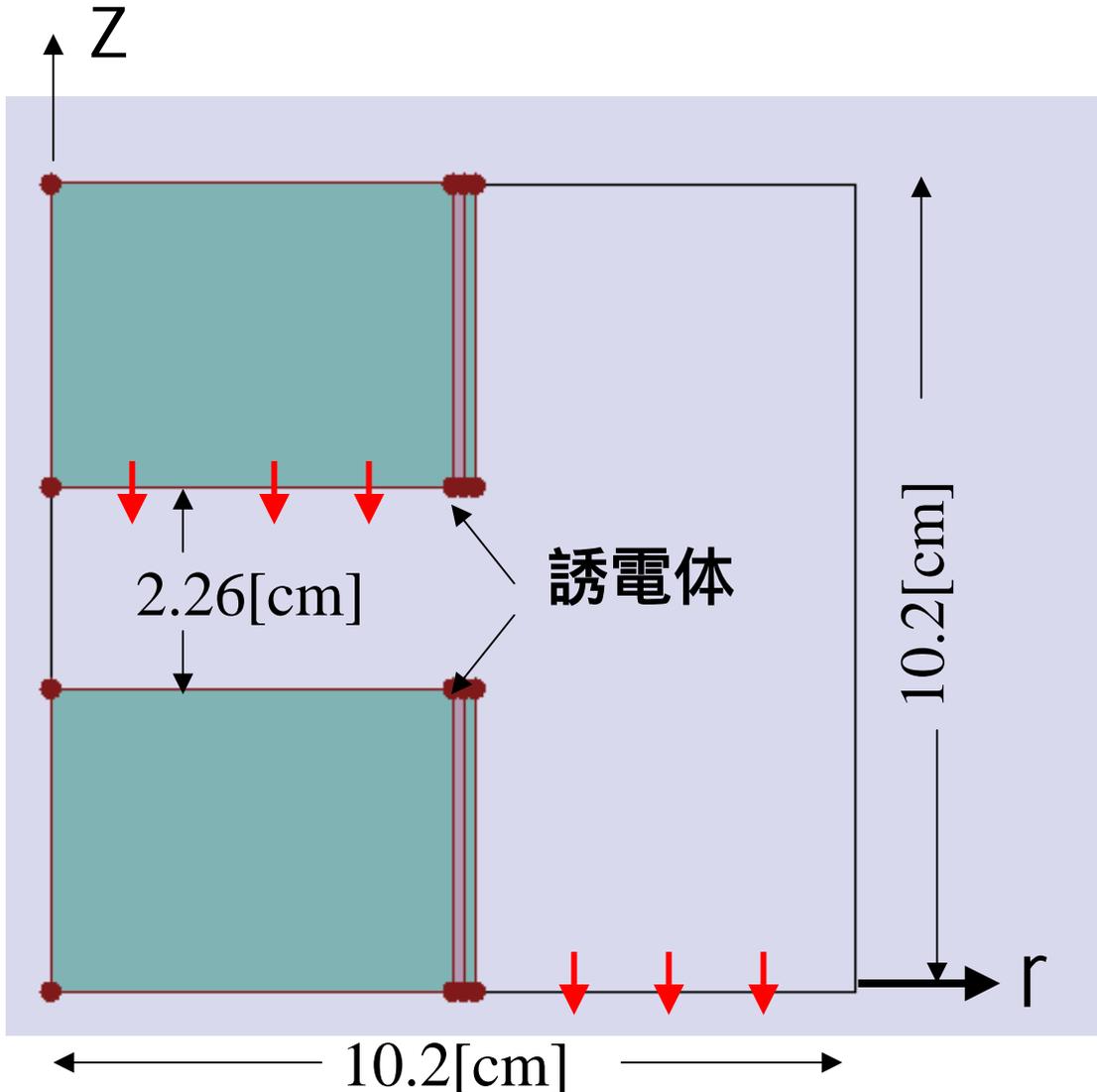
Journal of Applied Physics, Vol.82, No.6,1997.

(流体モデル)

GEC-RC型装置

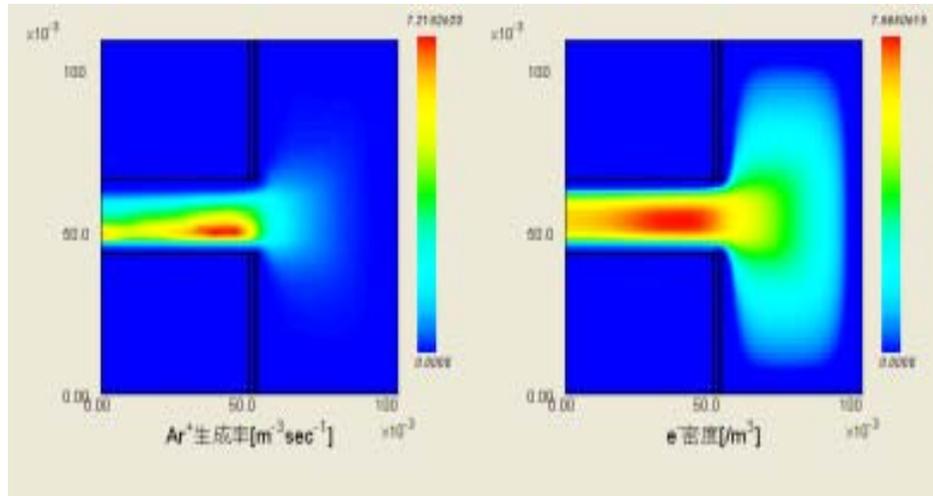
PHM

NMEM



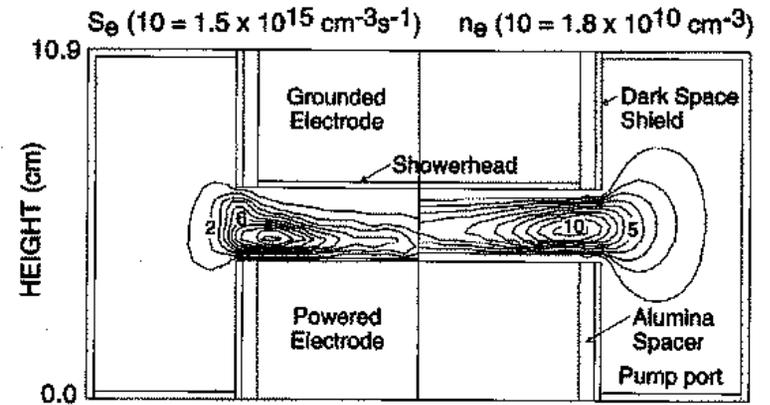
検証例:

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



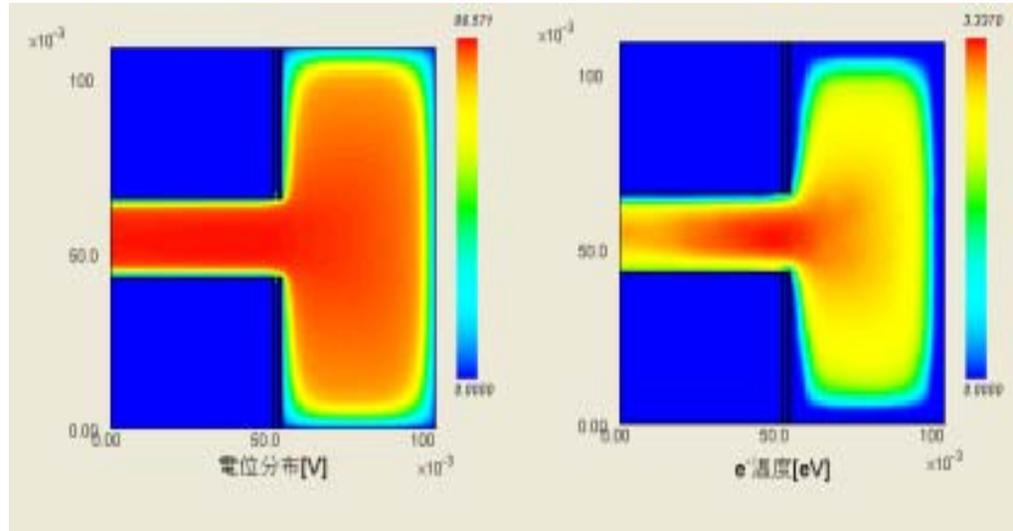
Ar(+)_{電離レート}

_{電子密度}



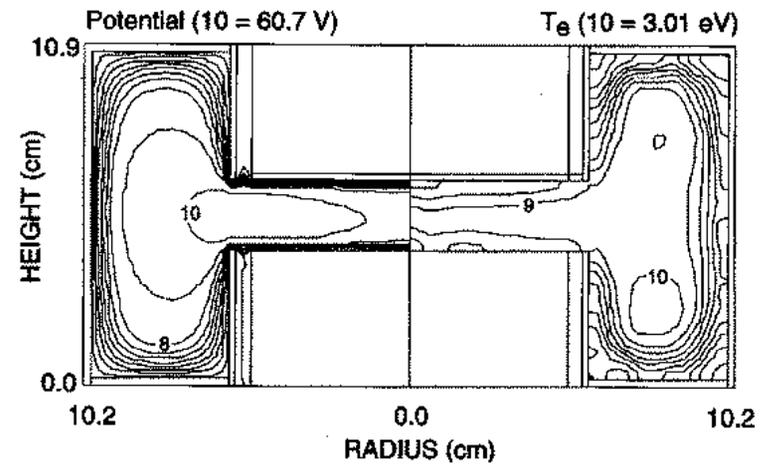
論文結果

結果比較(2)

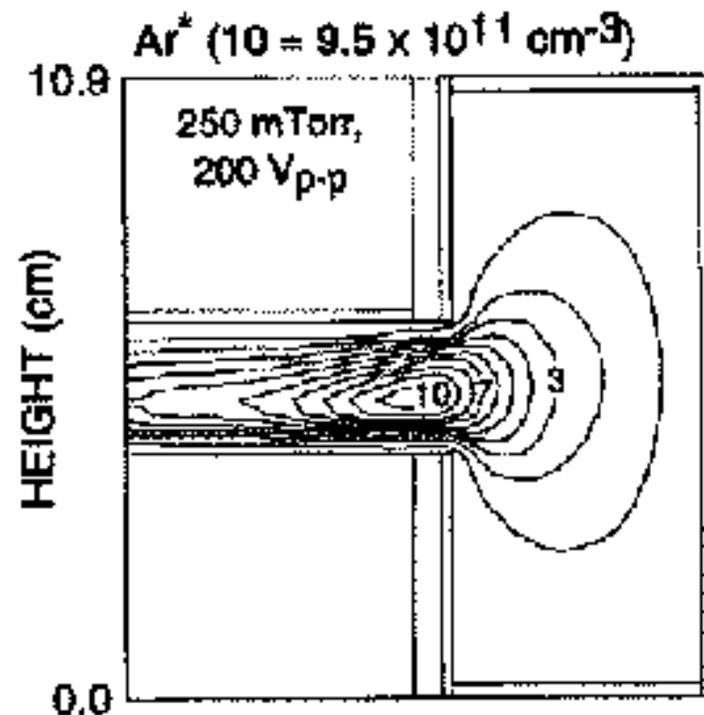
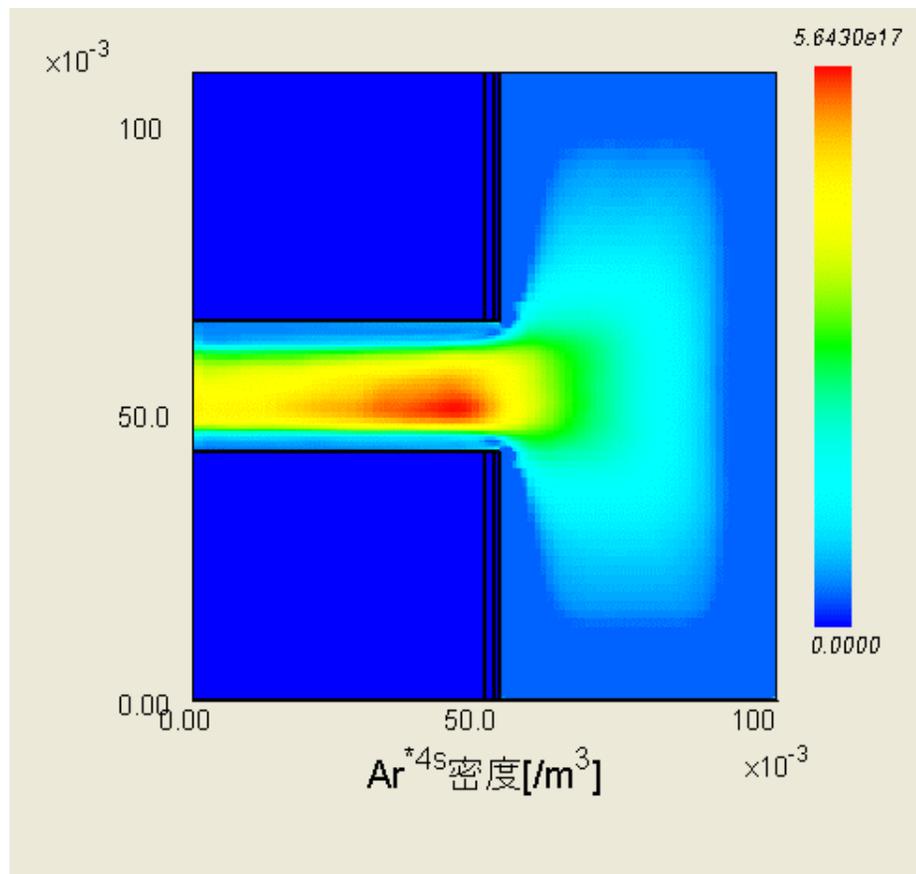


静電位

電子温度

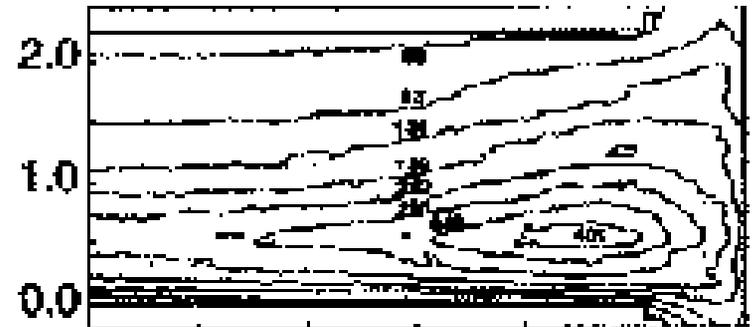
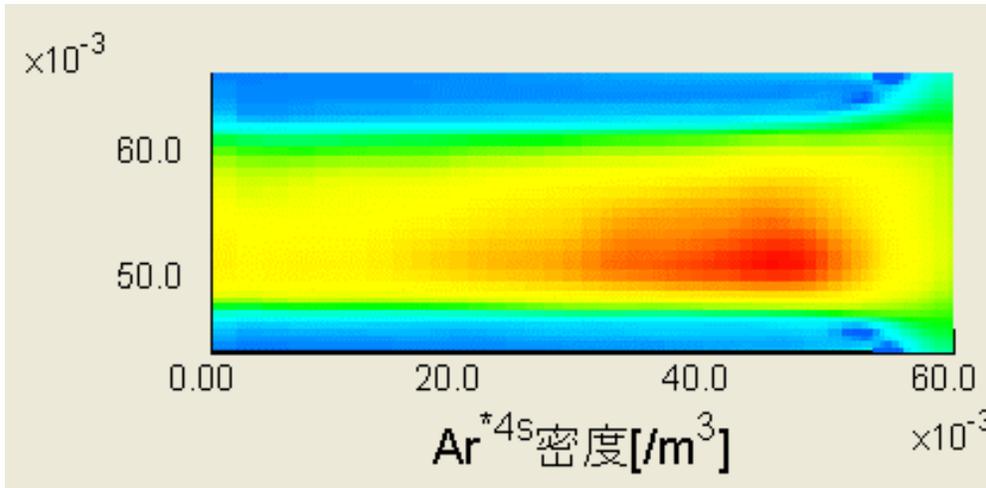


論文結果



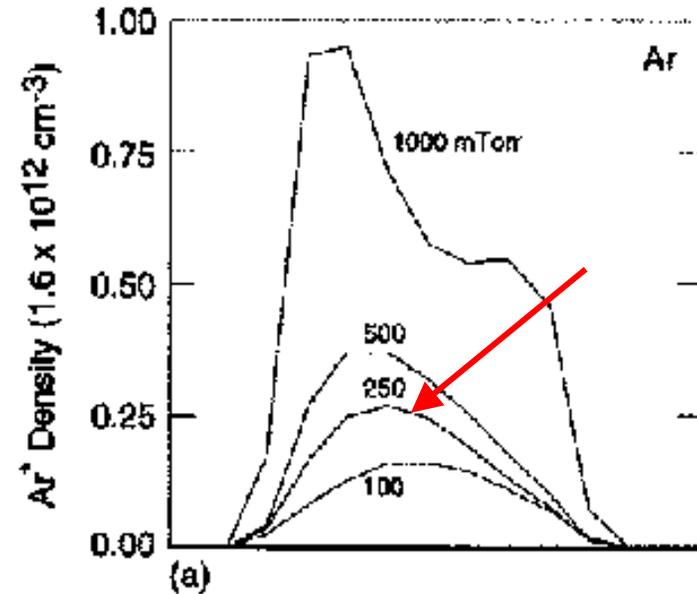
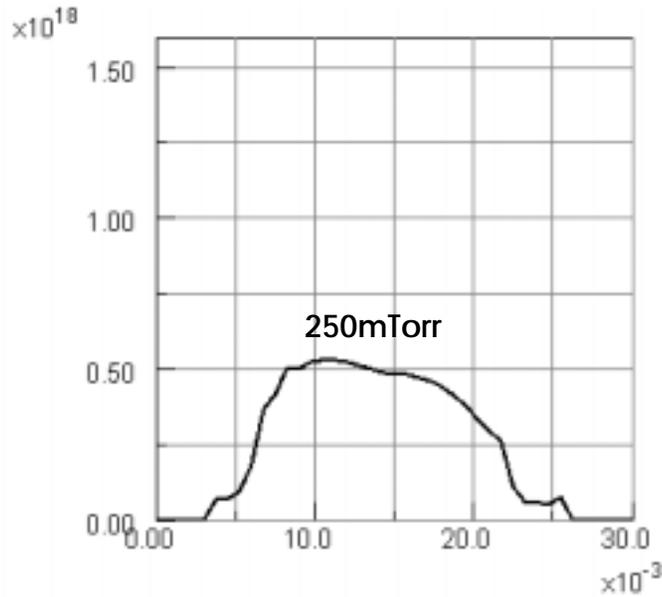
論文結果

Ar(4S)の密度分布



実験データ

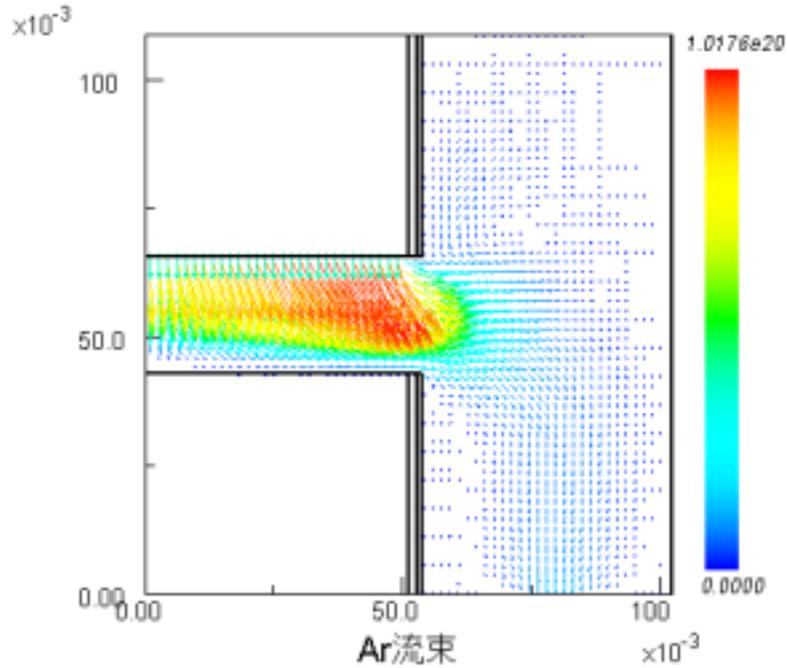
Ar(4S)の密度分布(拡大図)



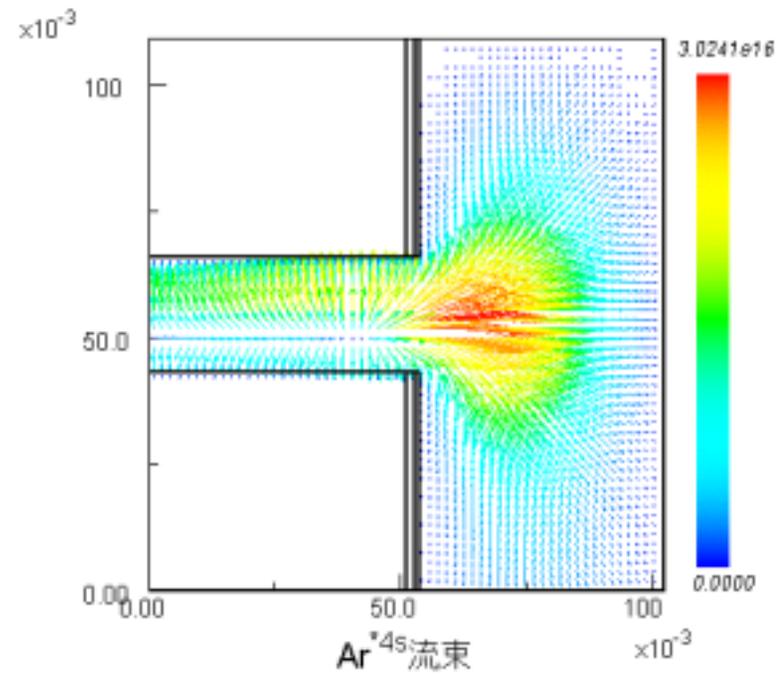
論文結果

Ar(4s)の電極端上z軸方向分布

PHM+NMEM GEC-RC型装置



Arの流束ベクトル



Ar(4s)の流束ベクトル

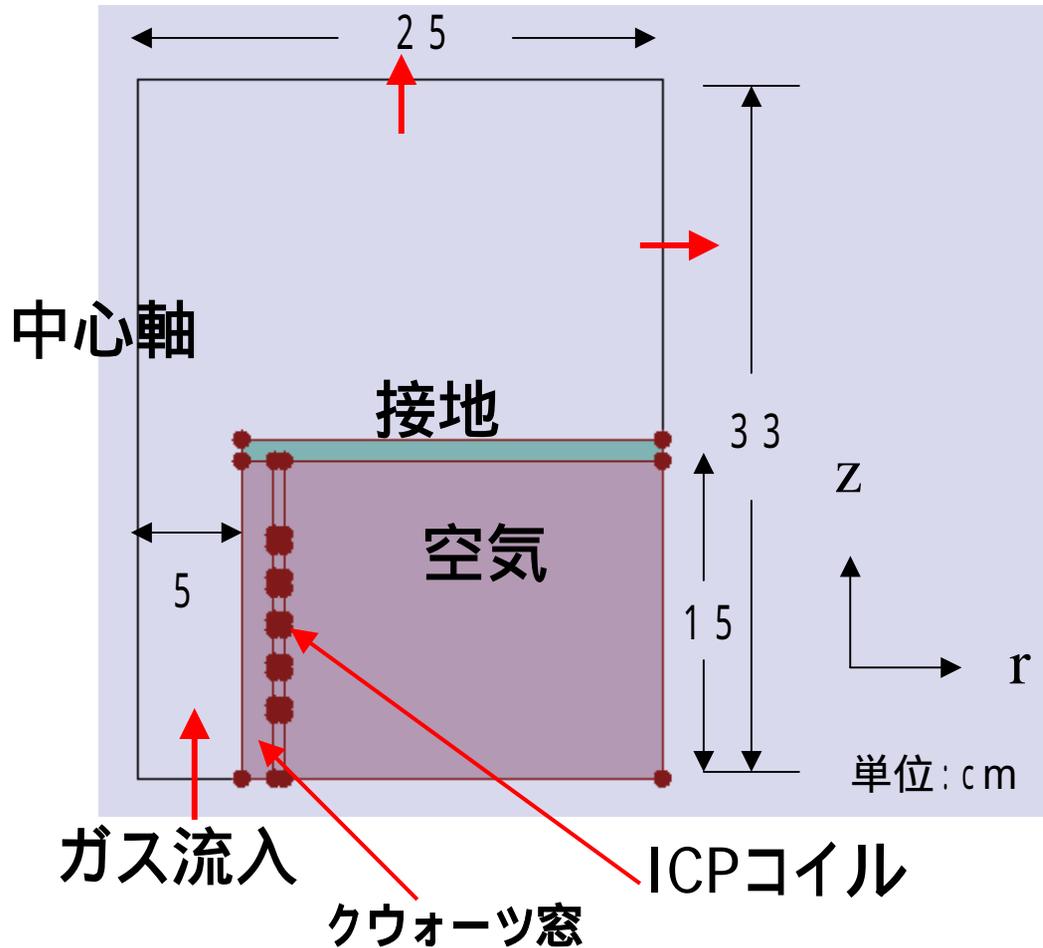
ICP計算例

ICP型装置

PHM

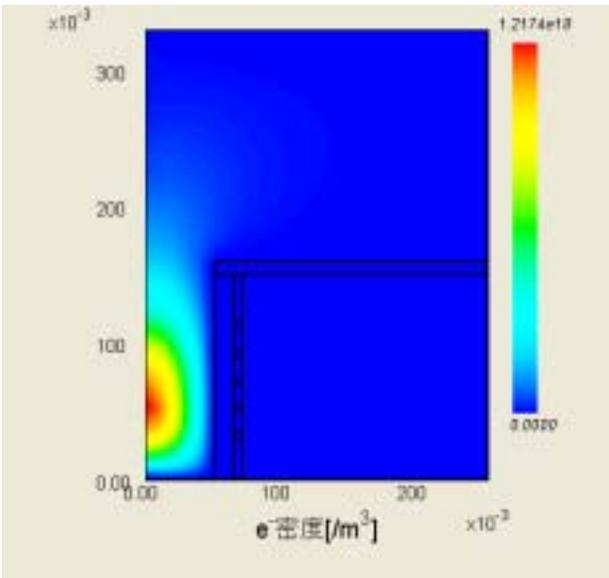
DSMCM

PHM+DSMCM ICP型装置

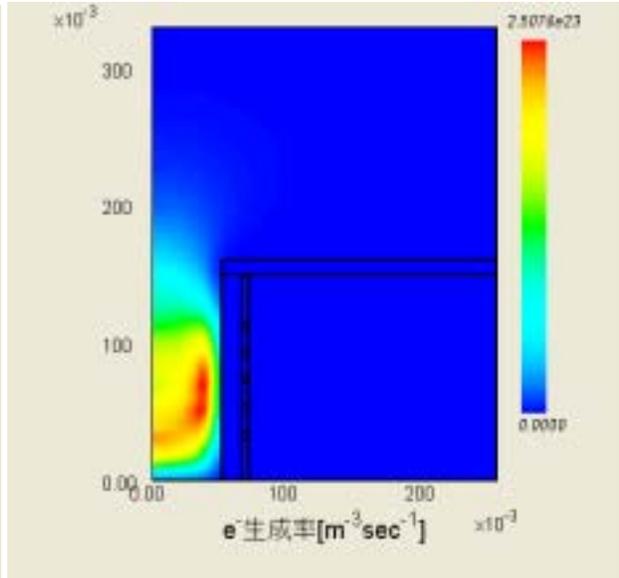


- ガス種
 - C_2H_2 (アセチレン)
 - 40 [sccm]
- ICPコイル
 - 5ターン、
 - 400 [W]、13.56 [MHz]

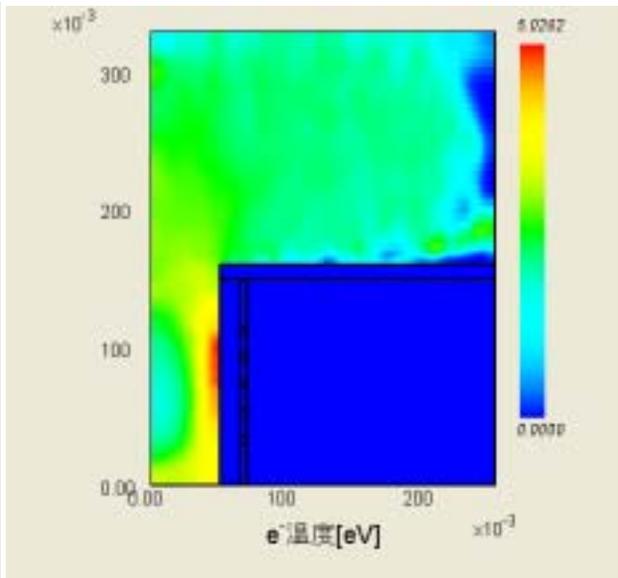
PHM+DSMCM ICP型装置



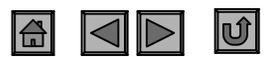
電子密度



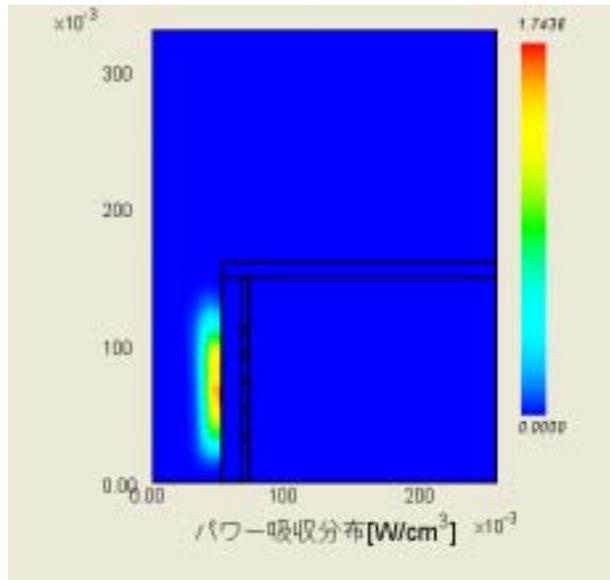
電子生成率



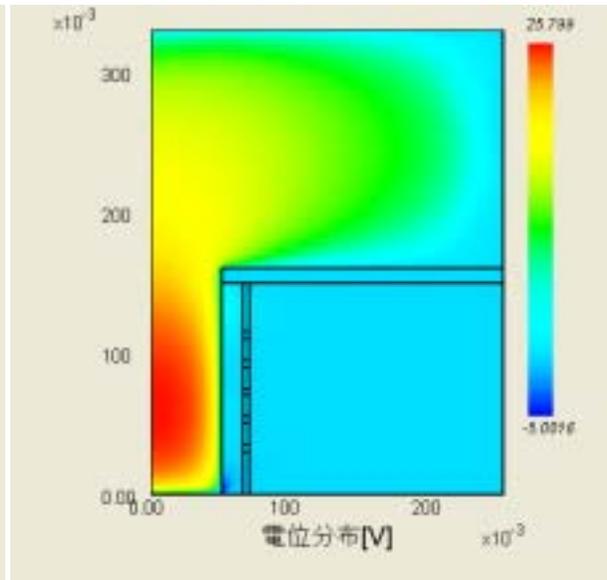
電子温度



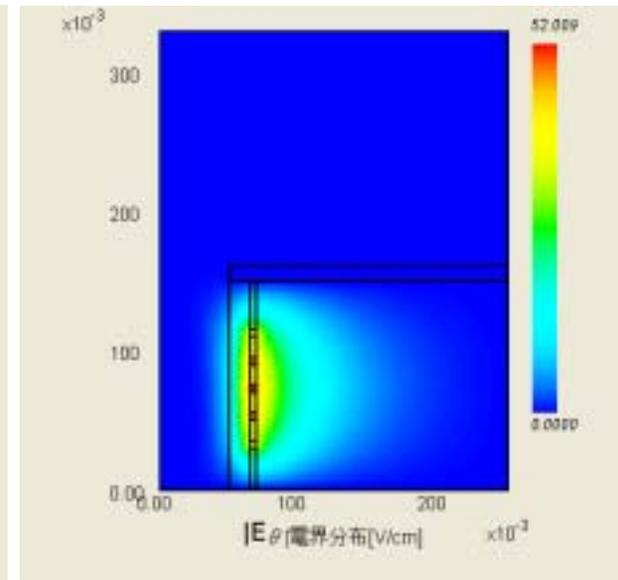
PHM+DSMCM ICP型装置



ICPコイル
パワー吸収分布

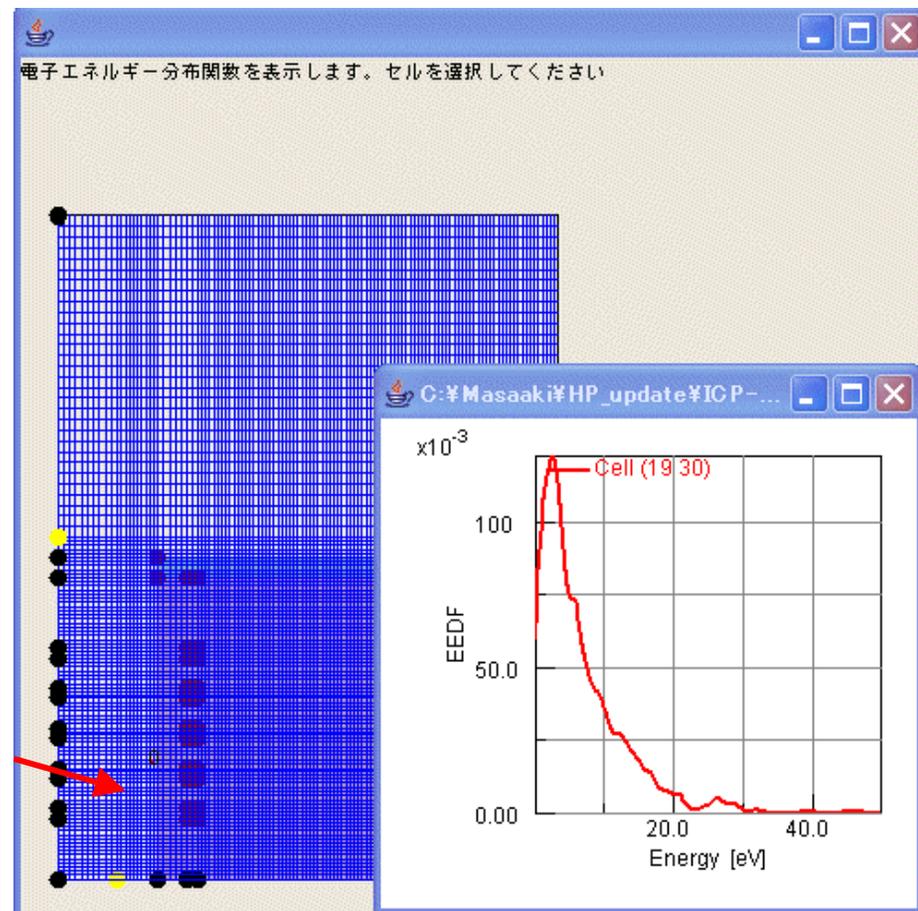
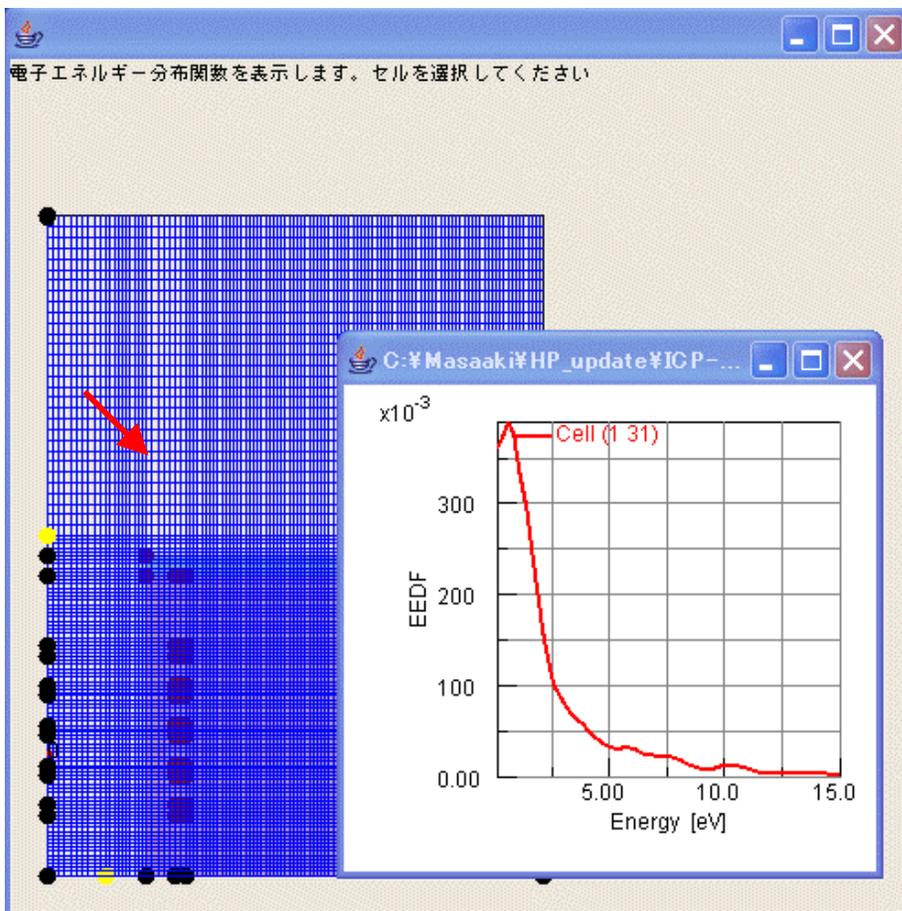


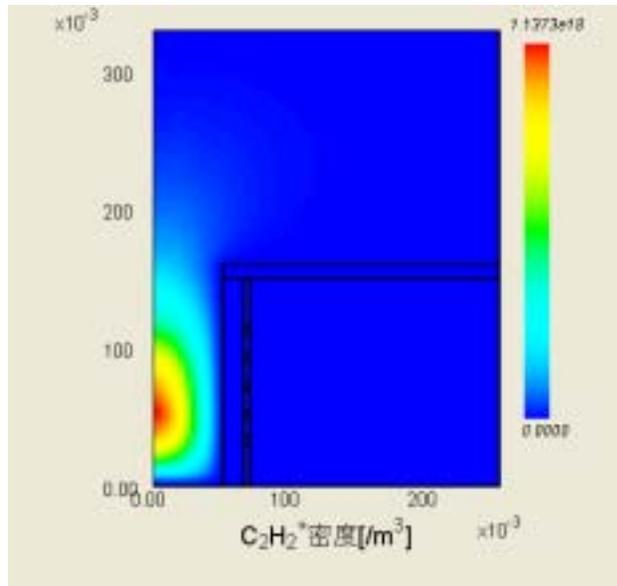
1周期平均静電位



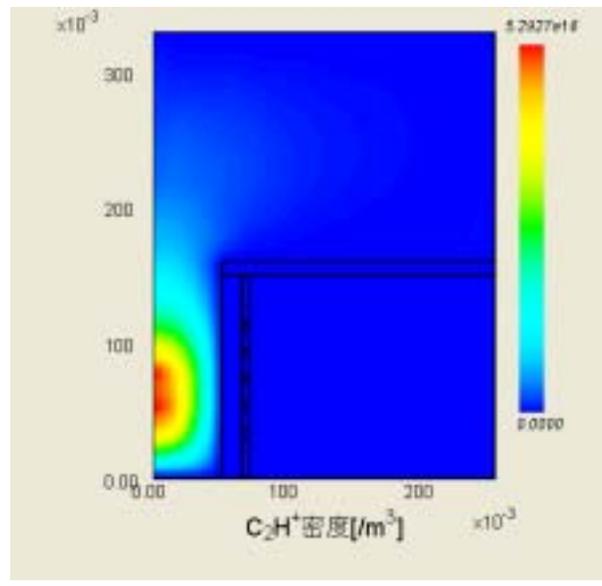
ICPコイルによる
誘導電界の絶対値

EEDF(電子エネルギー分布関数)

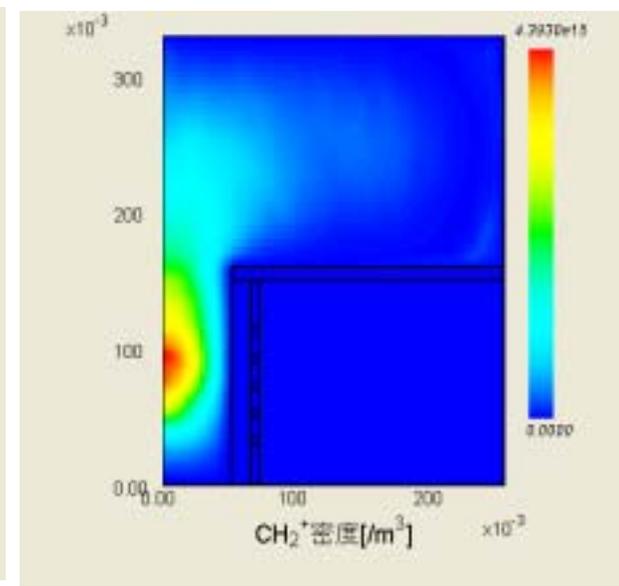




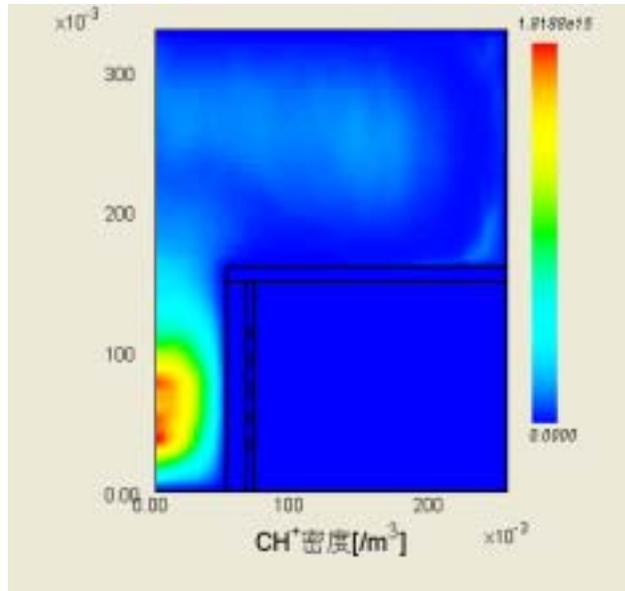
$C_2H_2^+(+)$



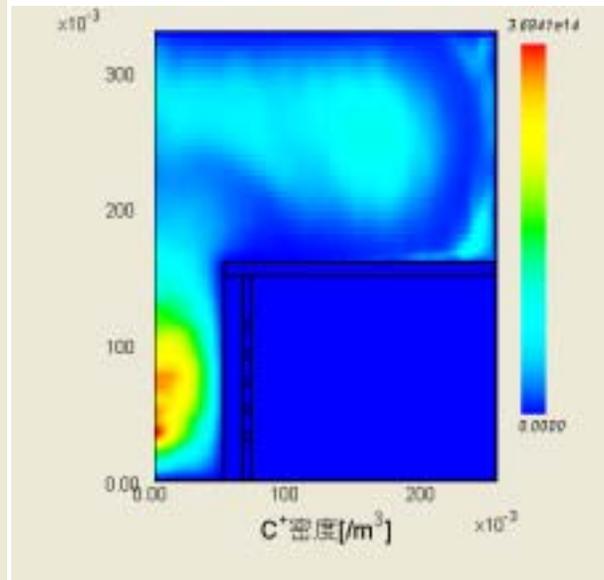
$C_2H^+(+)$



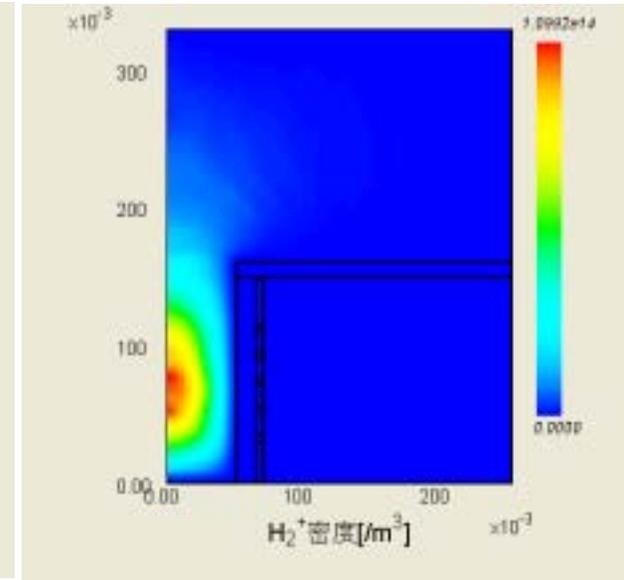
$CH_2^+(+)$



CH(+)

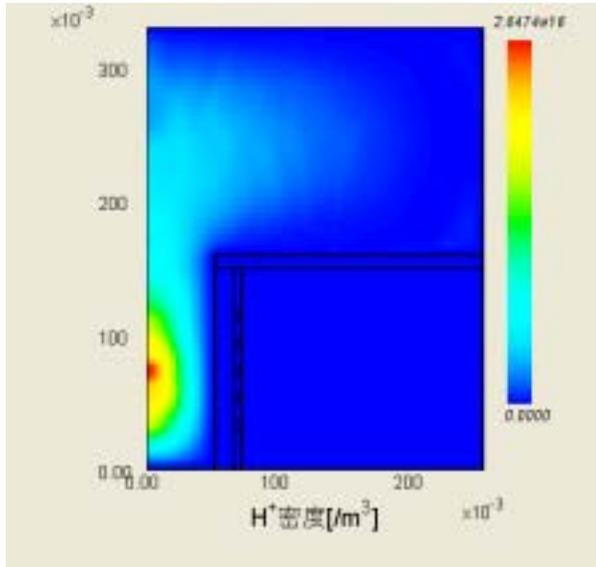


C(+)

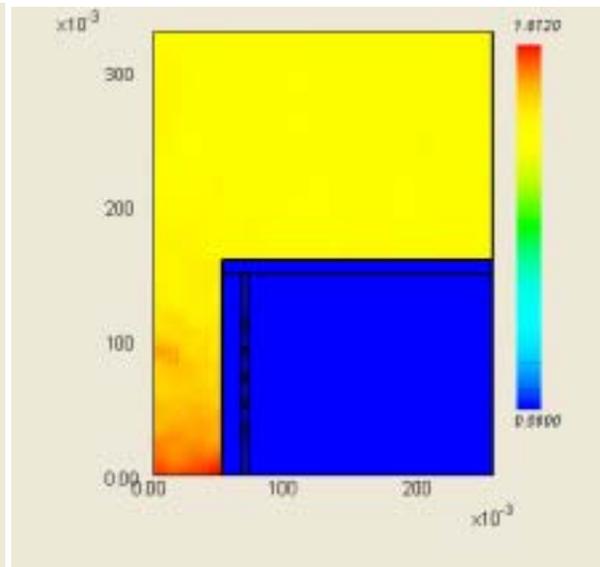


H₂(+)

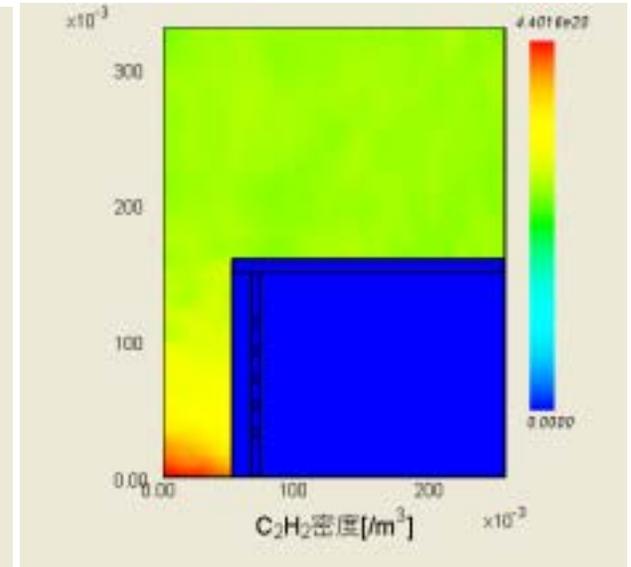
PHM+DSMCM ICP型装置



H(+)
密度



中性粒子種
全圧力



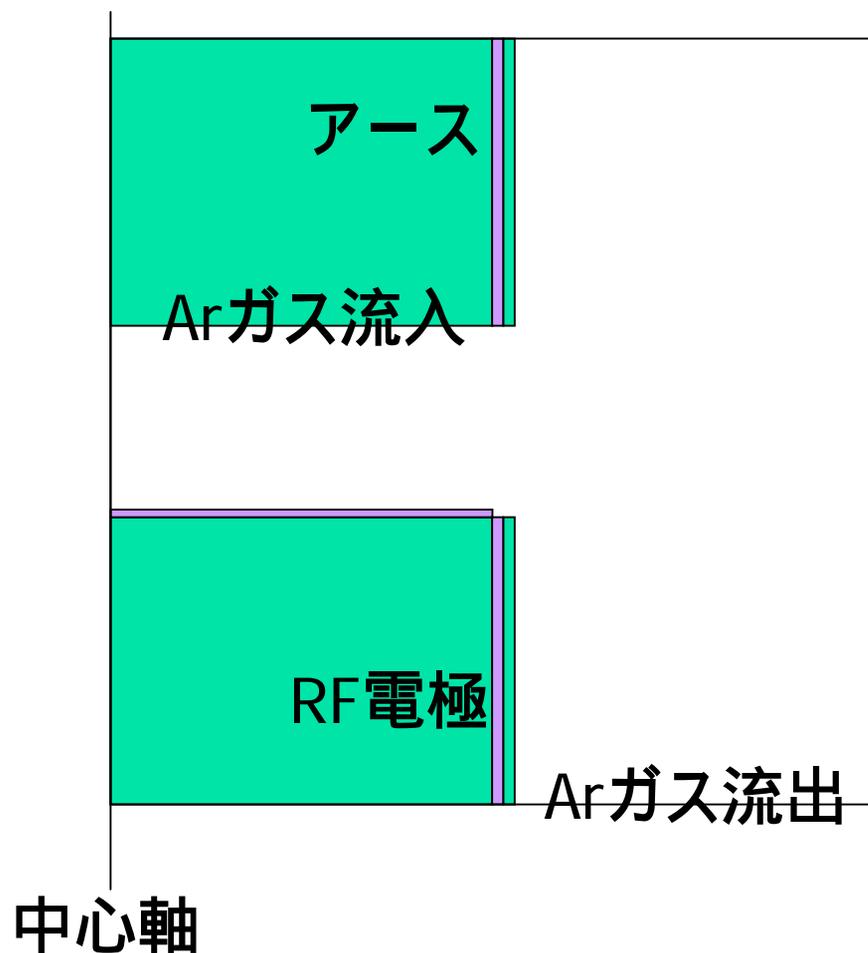
流入ガス密度

PIC-MCCM 計算例

PIC-MCCM 計算例 (1)

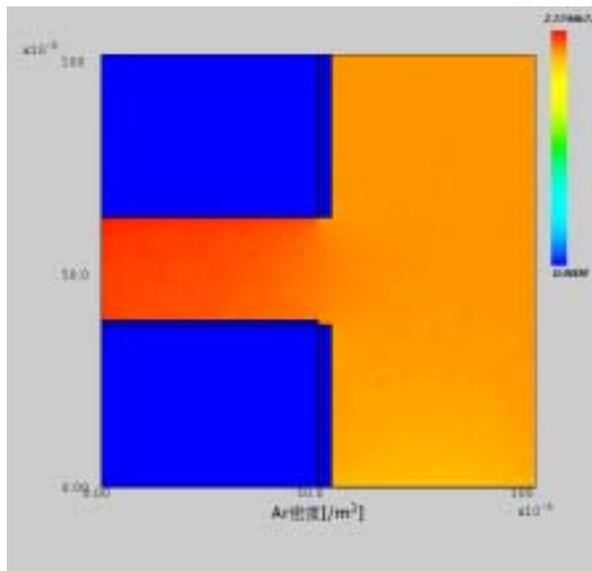
GEC-RC型装置
PIC-MCCM
DSMCM

PIC-MCCM + DSMCM GEC-RC型装置

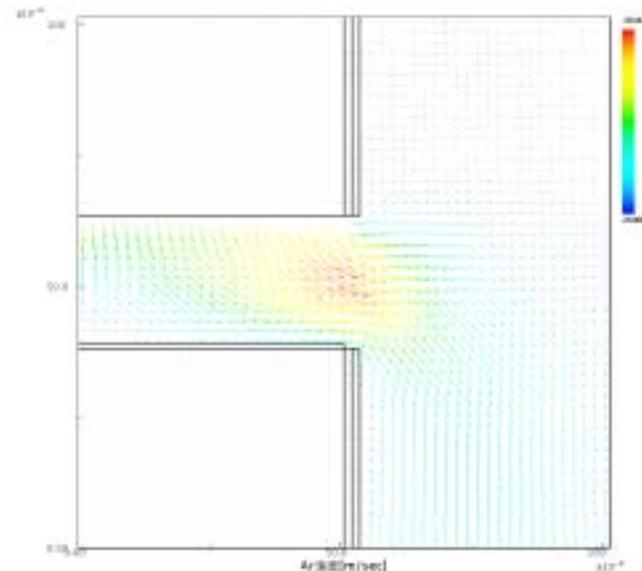


- 印加電圧 $V_{rf}=100[V]$
- ガス圧 およそ40[mTorr]
(DSMCMで計算)
- 反応式
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar$ (弾性散乱)
 - $e^- + Ar \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^*$ (励起)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^{4s}$ (励起)
 - $e^- + Ar^{4s} \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar^+ + Ar$ (弾性散乱)
 - $Ar^+ + Ar \rightarrow Ar + Ar^+$ (電荷交換)

Step1. DSMCM によるArバッファガスの流れ場の計算

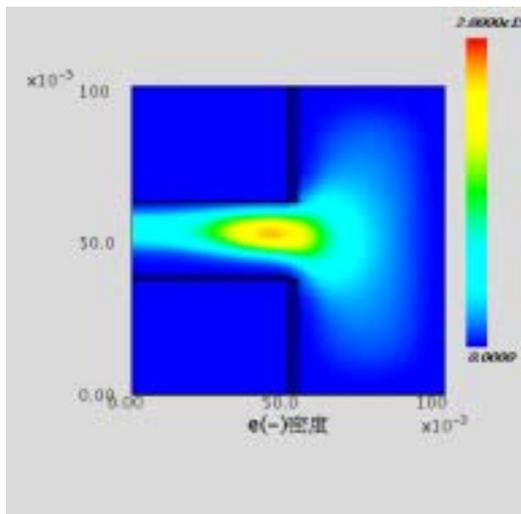


Ar密度分布

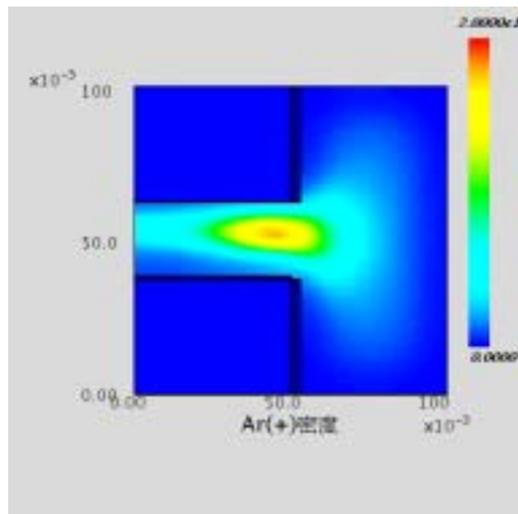


Ar速度分布

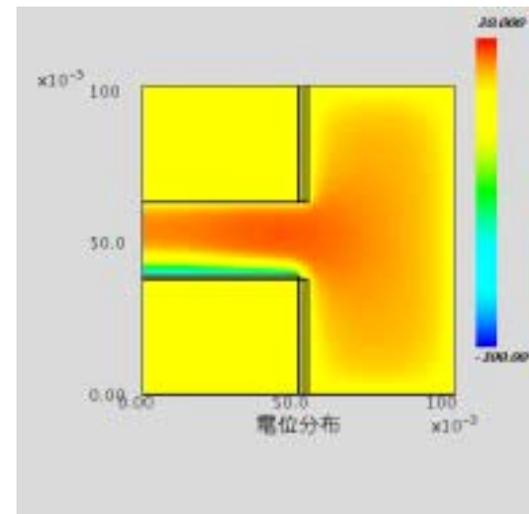
Step2. PIC-MCCM+DSMCM による プラズマ、励起種の計算



電子密度分布

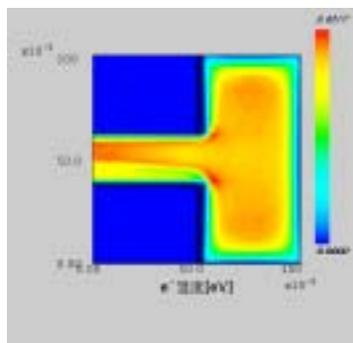


イオン密度分布

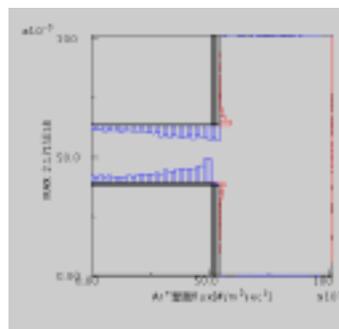


電位分布

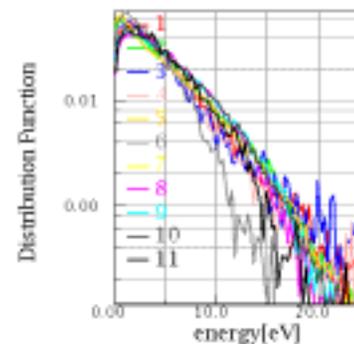
PIC-MCCM 単体で計算できる物理量の一例



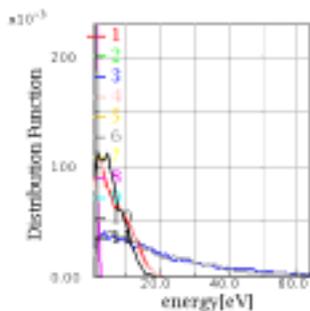
電子温度空間分布



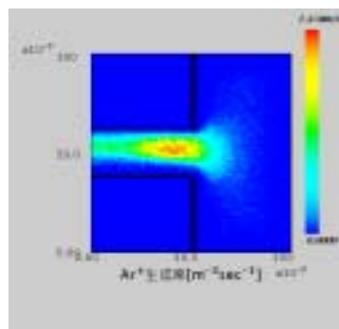
基板へのイオンフラックス



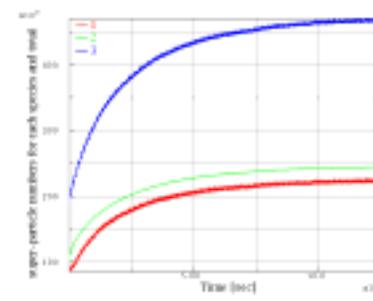
電子エネルギー分布



イオンエネルギー分布



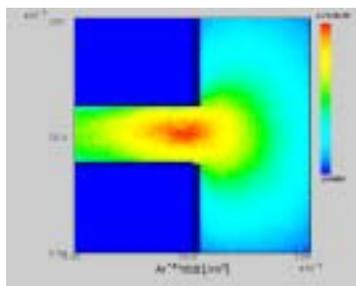
電離率空間分布



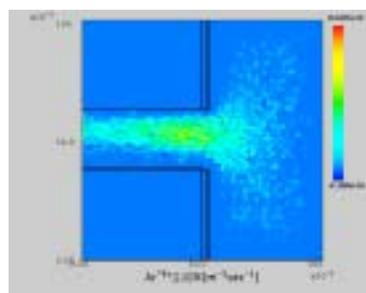
サンプル粒子数の時間変化

PIC-MCCM + DSMCM GEC-RC型装置

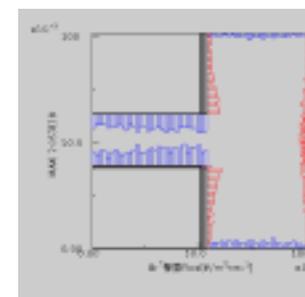
PIC-MCCMとDSMCMを組み合わせたときに計算できる物理量の一例



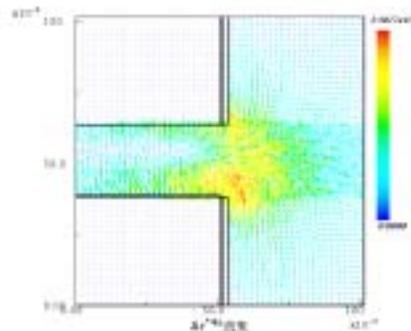
Ar^{4s}密度分布



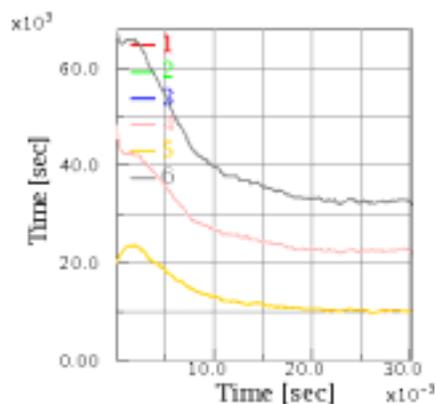
Ar^{4s}生成率分布



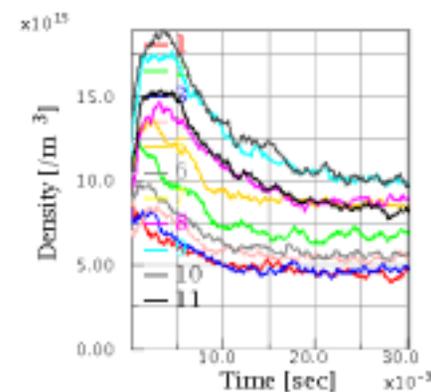
基板へのフラックス



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

PIC-MCCM計算例 (2)

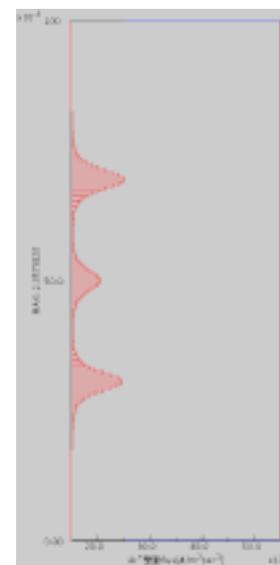
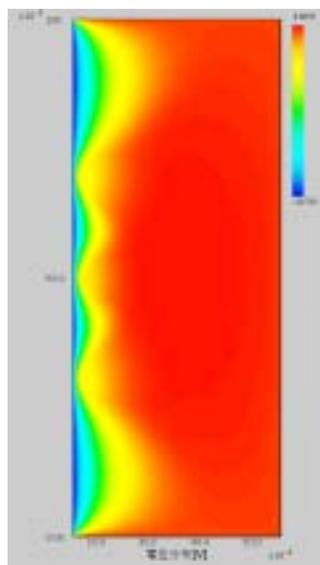
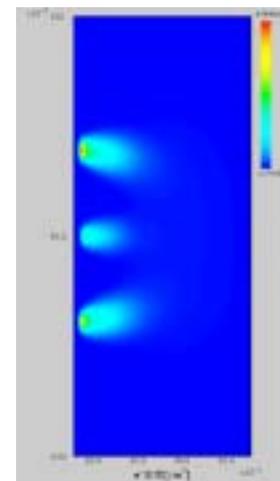
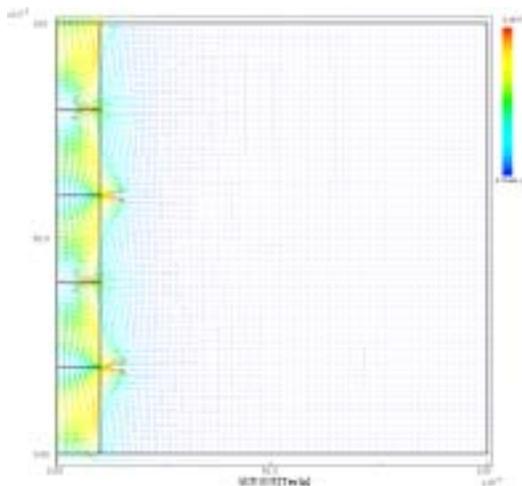
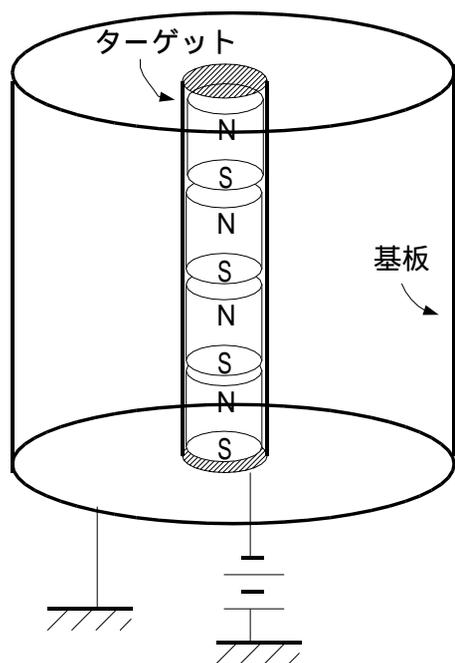
各種マグネトロンスパッタ装置

MSSM

PIC-MCCM

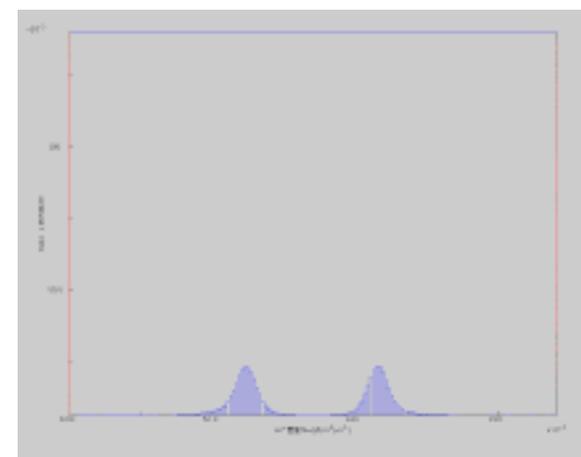
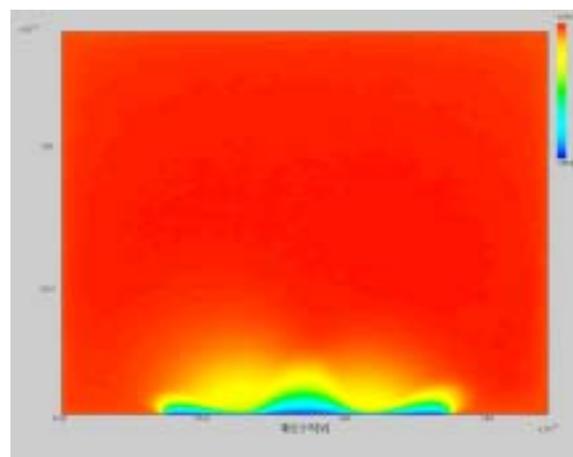
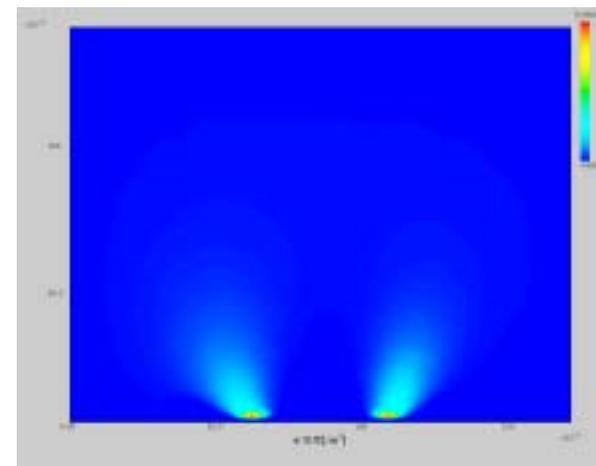
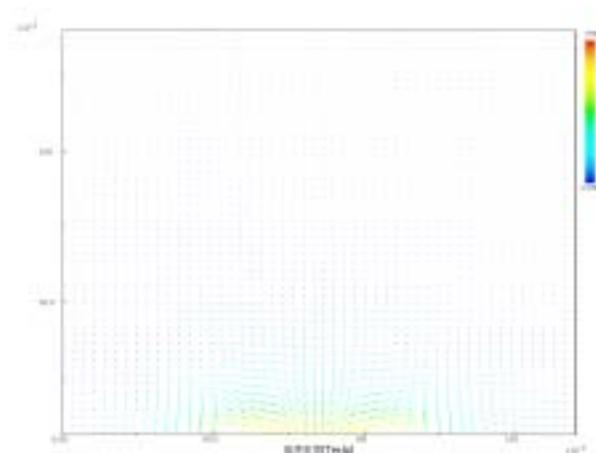
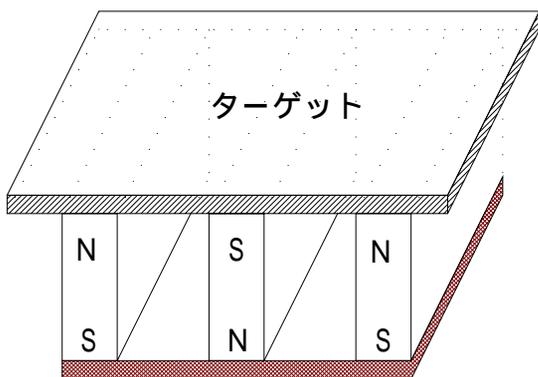
MSSM+PIC-MCCM マグネトロンスパッタ装置

同軸円筒型



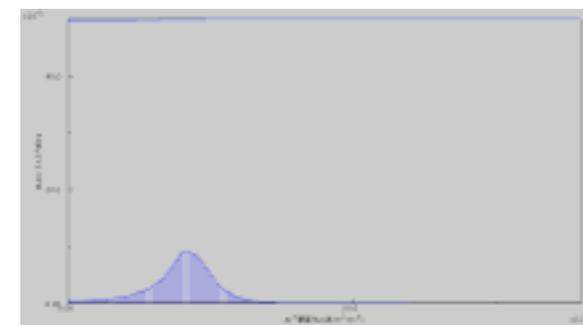
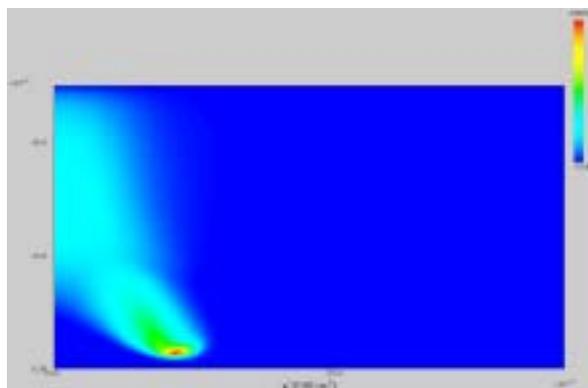
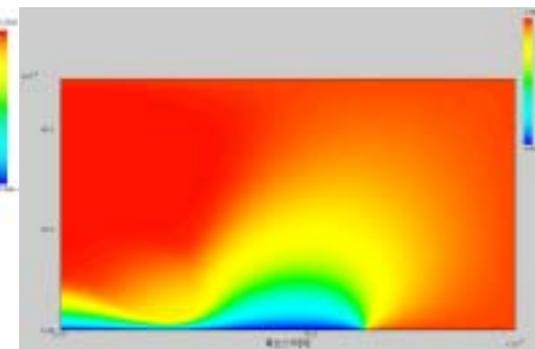
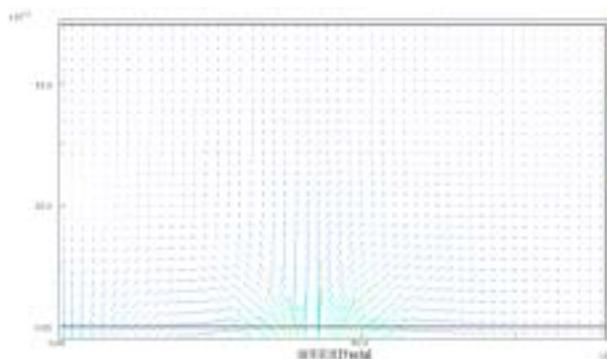
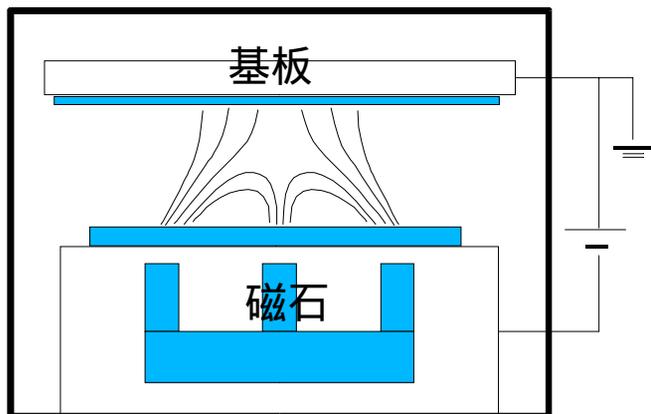
MSSM+PIC-MCCM マグネトロンスパッタ装置

プレナー型



MSSM+PIC-MCCM マグネトロンスパッタ装置

UBM 型の磁場配置
(アンバランス・マグネトロン)



PIC-MCCM 計算例 (3)

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

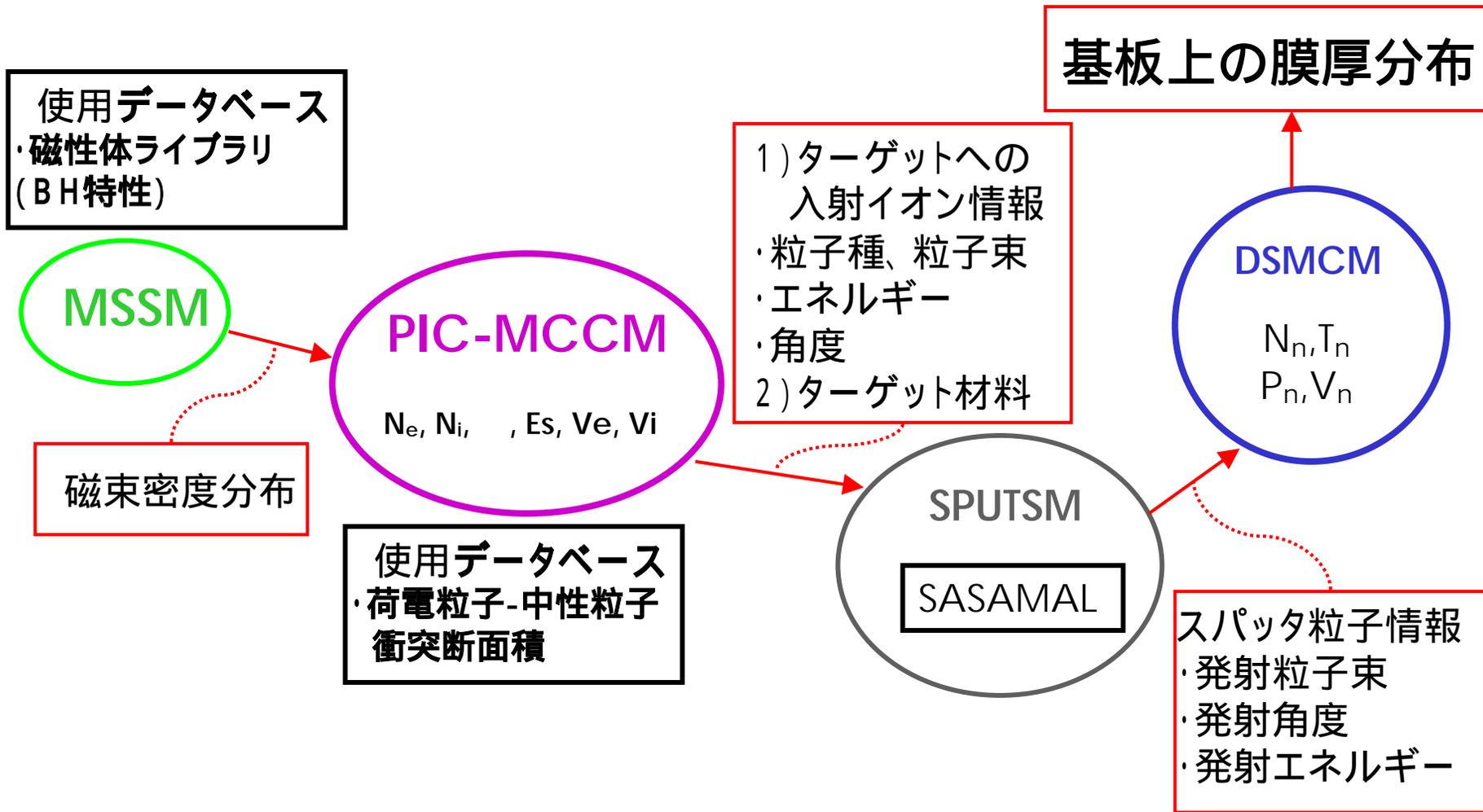
MSSM

PIC-MCCM

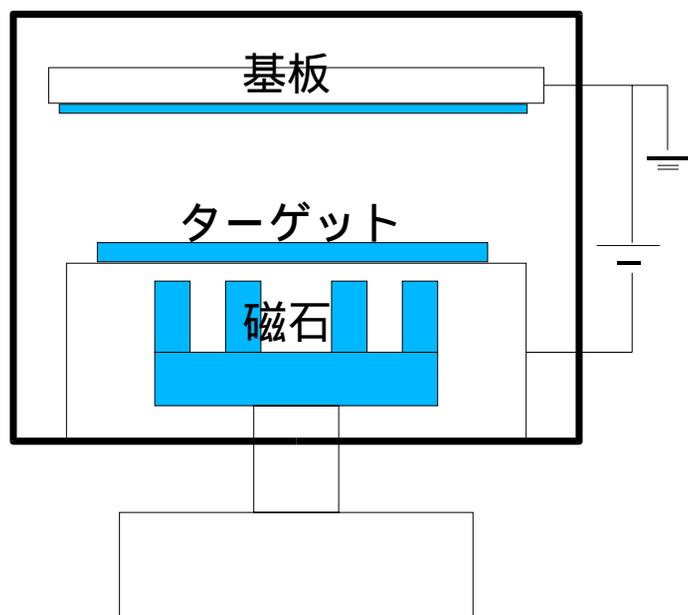
SPUTSM (表面科学系)

DSMCM

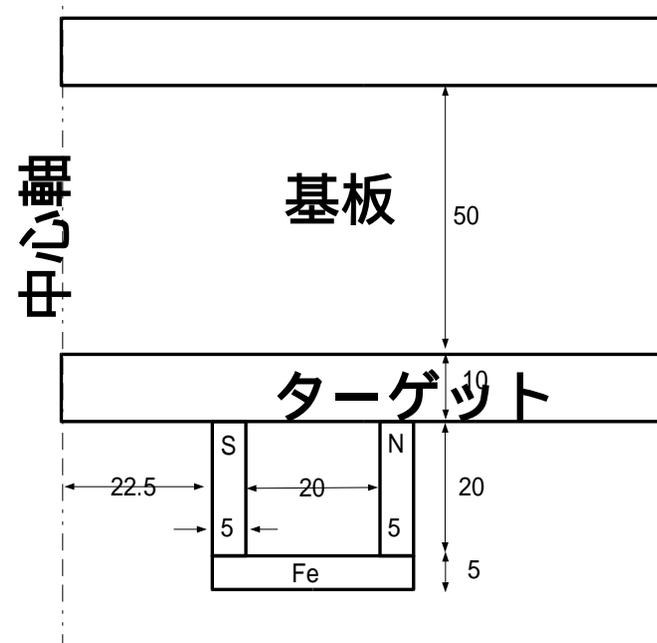
2次元マグネトロンスパッタシミュレーション概略図



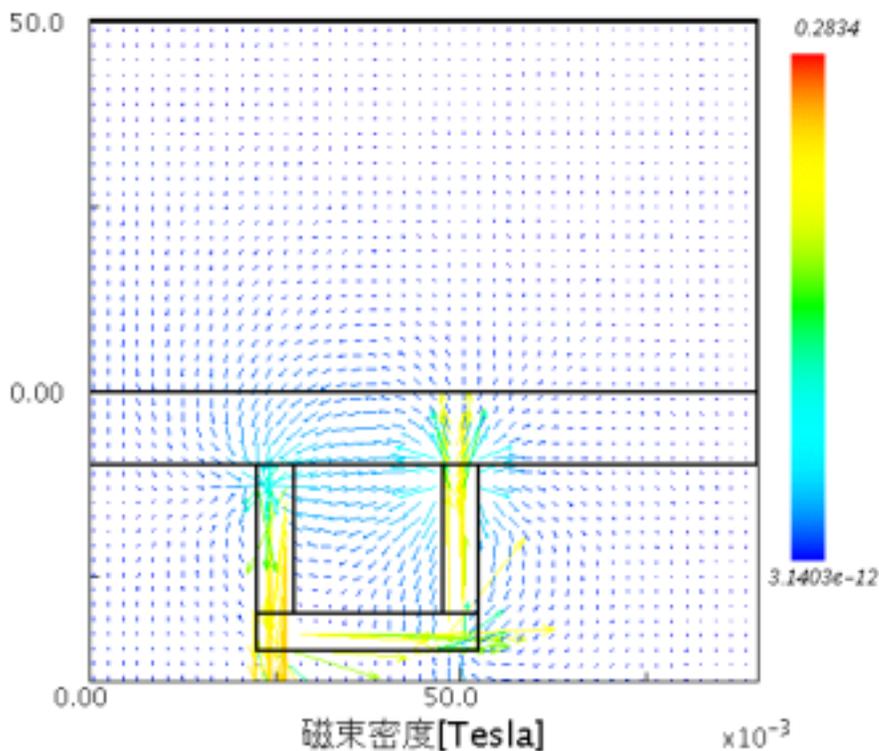
MSSM+PIC-MCCM+SPUTSM+DSMCM マグネトロンスパッタ装置



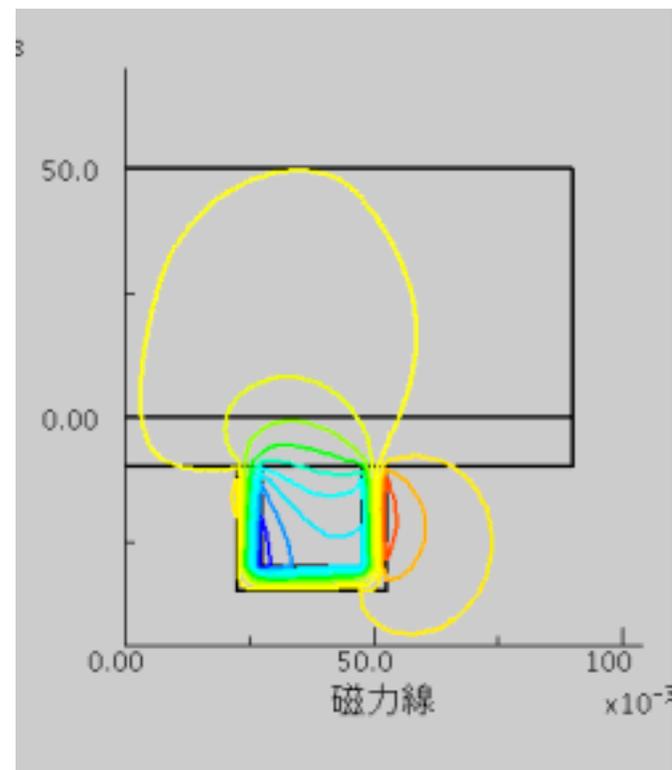
2D円柱座標系
でモデル化



Step1. MSSM による静磁場解析



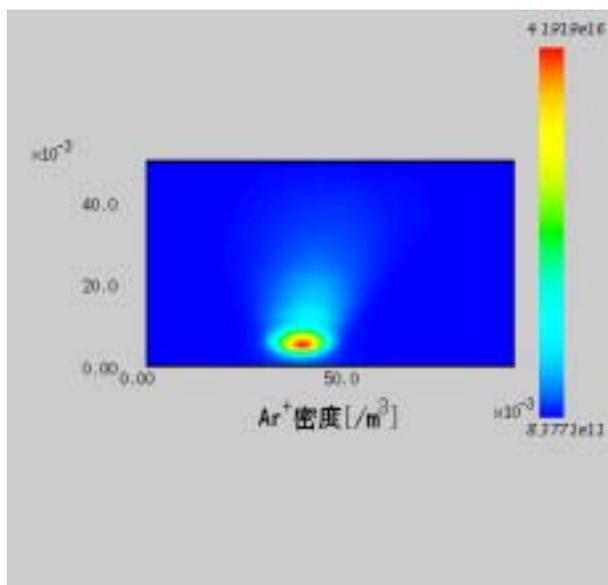
磁束密度分布



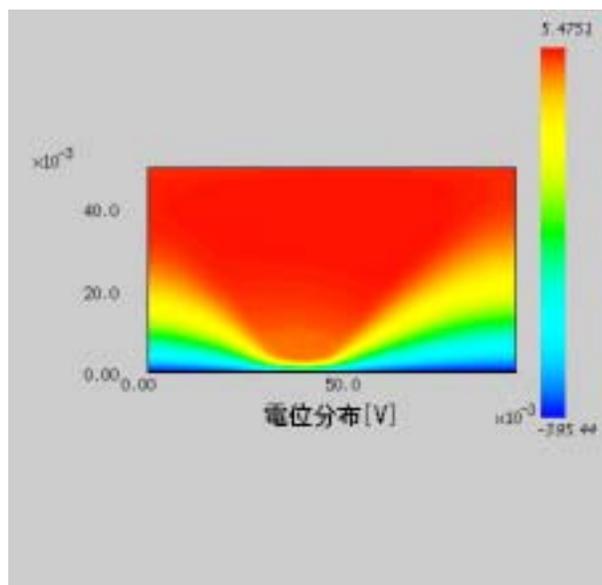
磁力線

MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM マグネトロンスパッタ装置

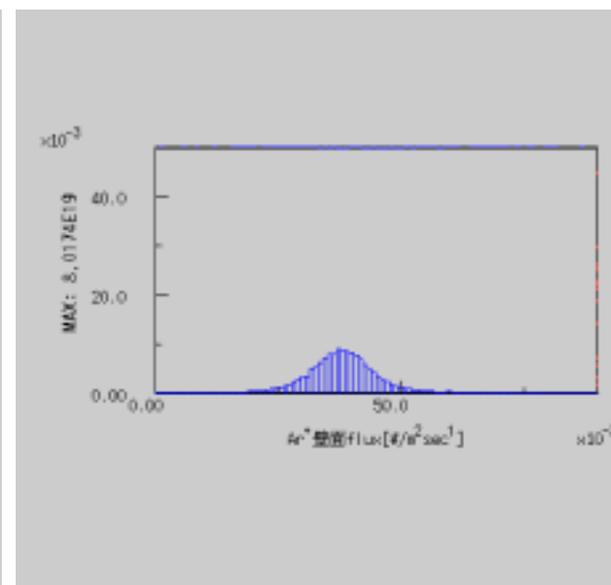
Step2. PIC-MCCM によるプラズマ解析



Ar⁺ 密度分布

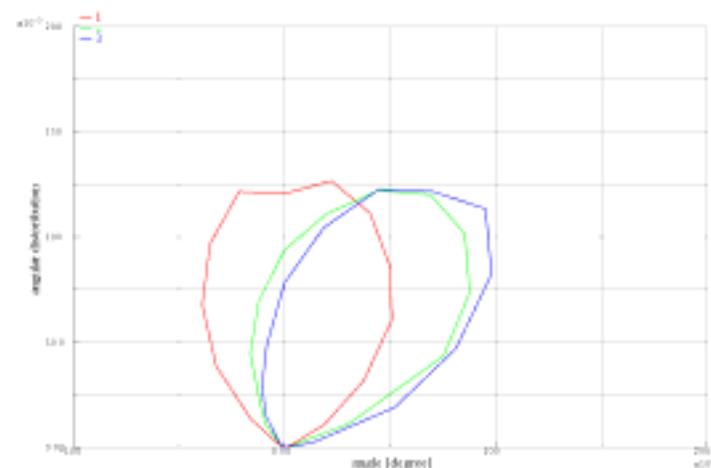
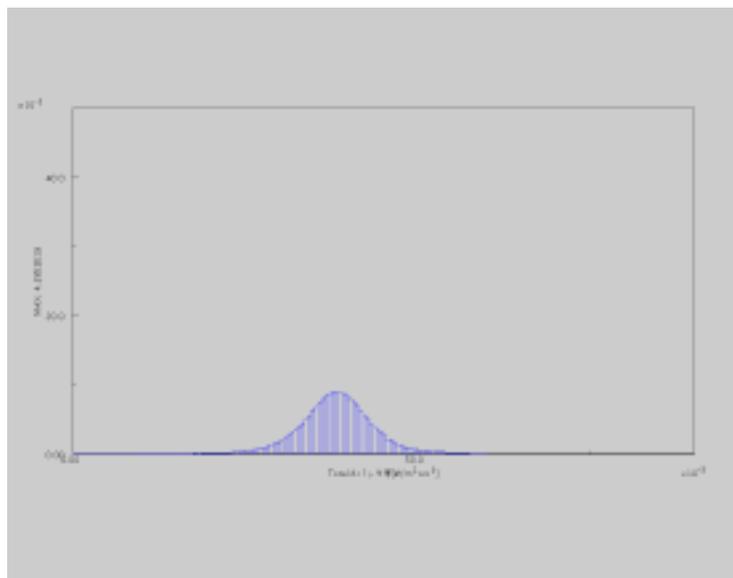


電位分布



Ar⁺ ターゲットへの
フラックス分布

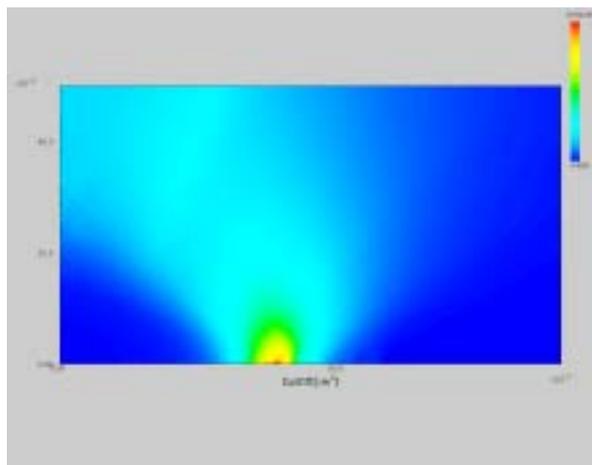
Step3. SPUTSMによるスパッタリングシミュレーション



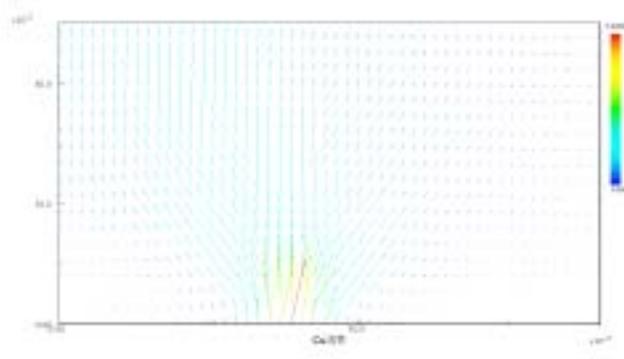
スパッタリングフラックス分布
(ターゲットの損耗分布)

スパッタリング粒子放出角度分布

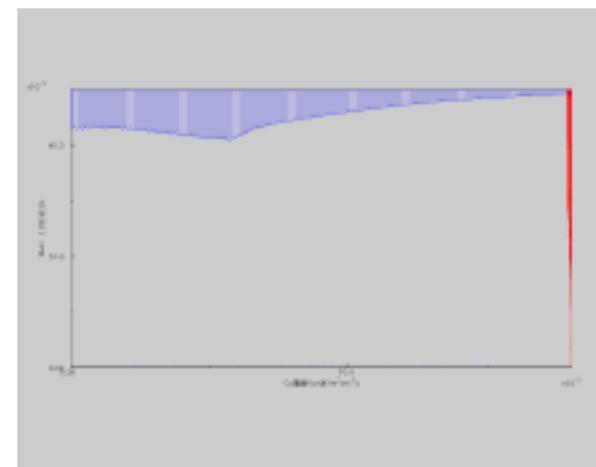
Step4. DSMCM によるスパッタ粒子の挙動解析



スパッタ粒子(Cu)
の密度分布



Cu 空間フラックス分布



Cu 基板へのフラックス分布

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イオン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

SASAMAL、SPUTSM

- 2体衝突モデルに基づき、入射イオンとターゲットを構成する原子がどのように運動していくかを追跡し、スパッタリング率やDepth Profileをシミュレーションにより求めるモジュール
 - 入力
 - 基板へのイオンのフラックスやエネルギー
 - ターゲットの組成の初期の深さ分布
 - 出力
 - スパッタリング率
 - ターゲット組成の分布の変化
 - 入射イオンのDepth Profile

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）
基礎素材研究部門

プラズマと固体表面との相互作用

成膜:ラジカル付着、イオン衝撃

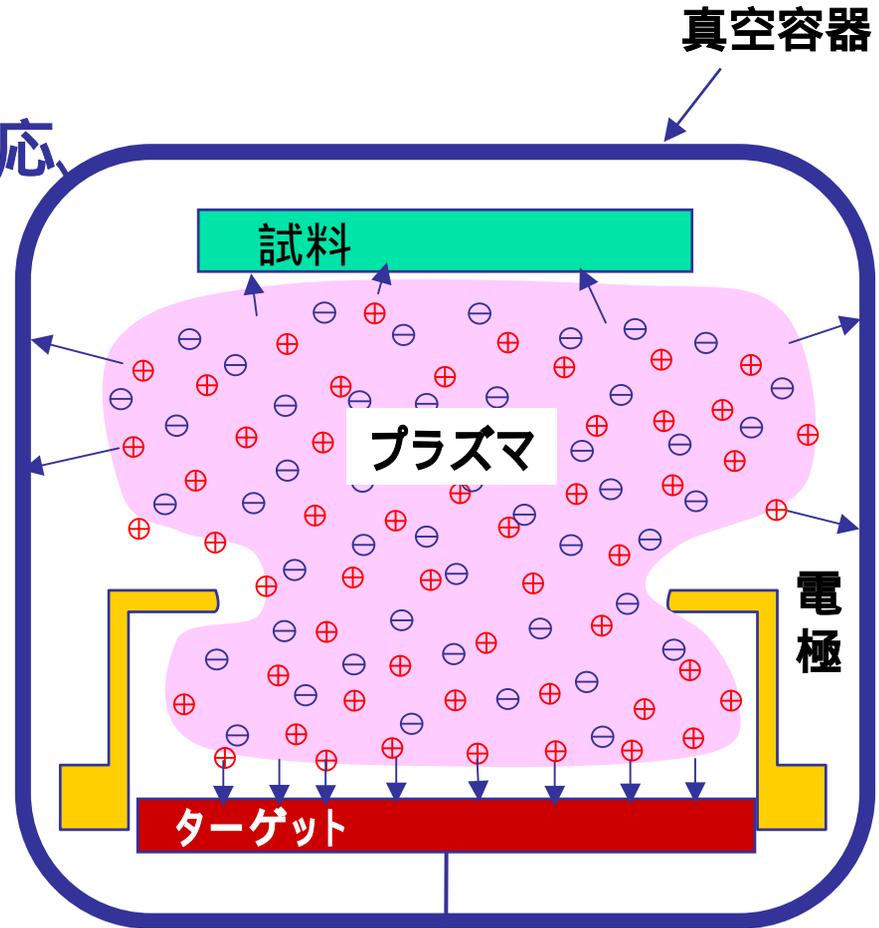
スパッタリング:イオン衝撃

エッチング:エッチングガスの化学反応、
イオン衝撃

表面改質:イオン衝撃、電子衝撃

壁からの不純物混入:
スパッタリング

PECVD装置
エッチング装置
マグネトロンスパッタ装置
イオン注入装置 等



イオン・固体相互作用シミュレーション・コードの分類

2体衝突近似法	
非結晶 モンテカルロ法	結晶
TRIM ACAT SASAMAL	MARLOWE Crystal-TRIM ACOCOT COSIPO XTOPS

動的モンテカルロ法
EVOLVE TRIDYN ACAT-DIFFUSE dynamic-SASAMAL

分子動力学法
PARASOL, MD-TOPS MODYSEM, SPUT3 MOLDYCASK, MOLDY

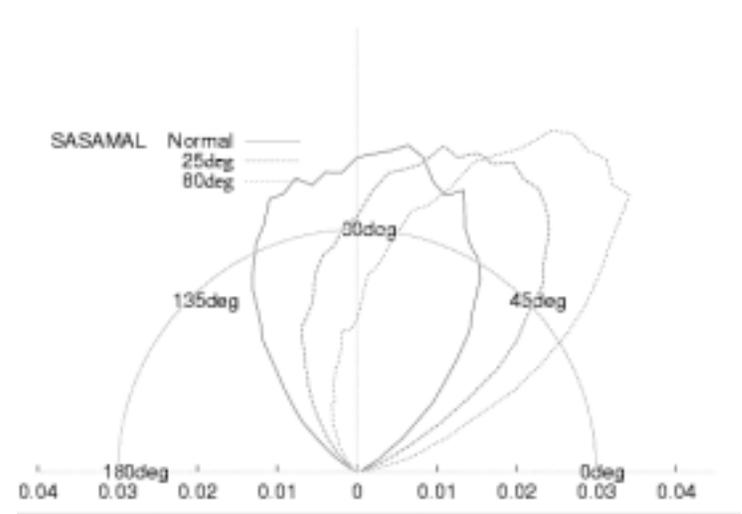
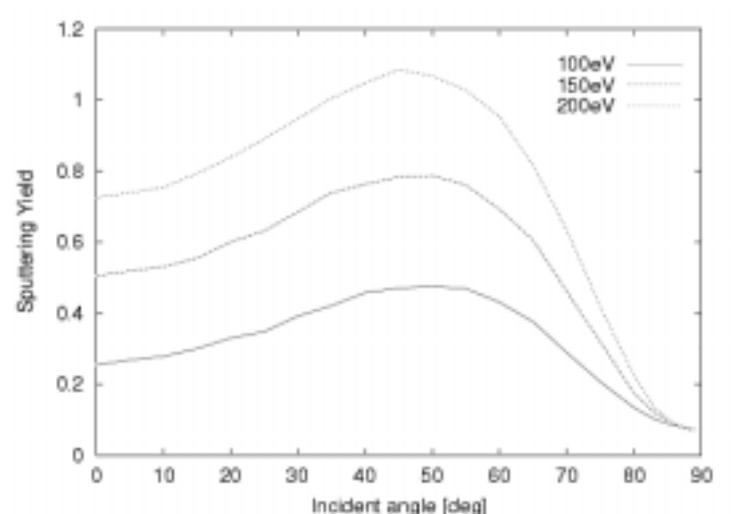
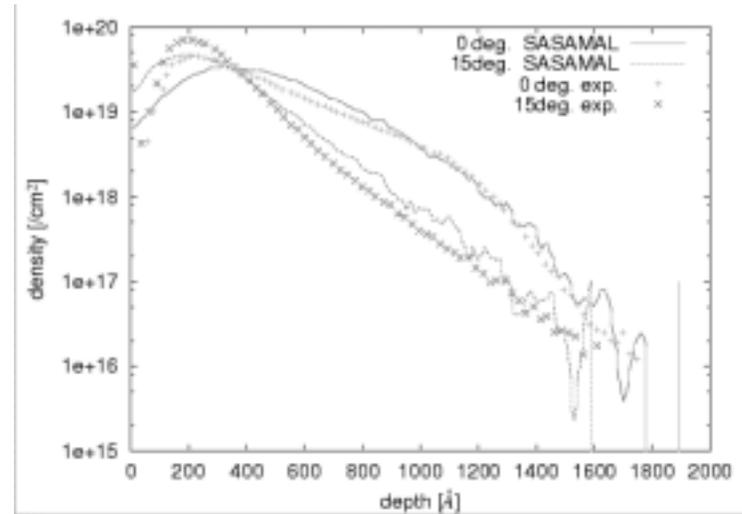
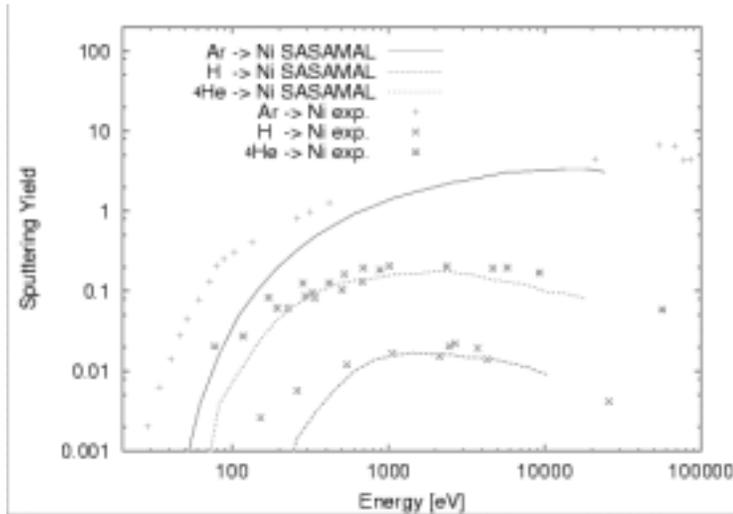
2体衝突近似法 (BCA) は、イオンと固体との相互作用を再現する適切な物理的モデルを導入することによって、計算時間を短縮している。これにより、BCA コードは、イオン注入、放射線損傷、スパッタリング、表面散乱などのシミュレーションに使われ、成功してきた。

モンテカルロ法 : 非結晶ターゲットを取扱う2体衝突近似コードでは、ターゲット原子の位置、衝突係数、あるいは、散乱角の決定に確率論的な手法を用いているので、モンテカルロ法と呼ばれている。

動的モンテカルロ法 : 線量依存性を予測する。

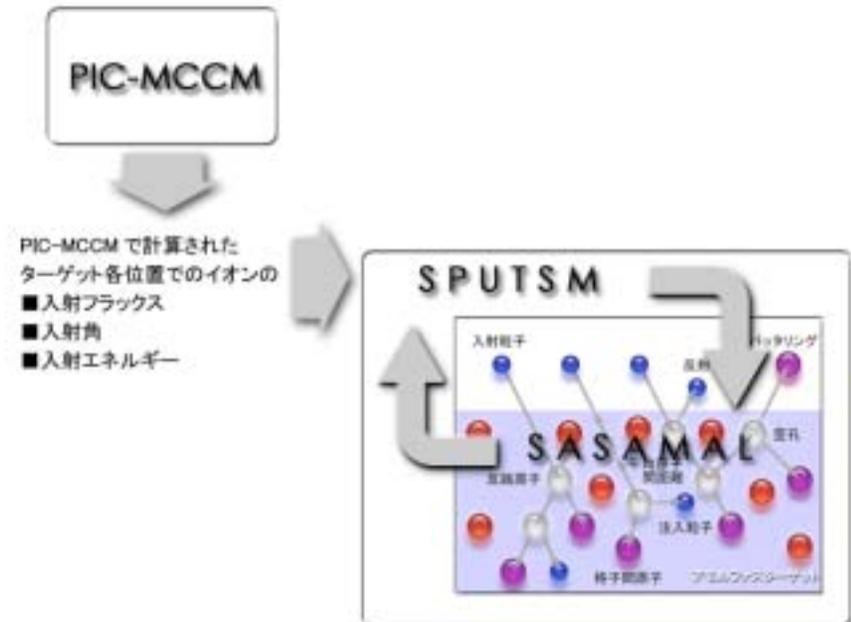
元素組成の深さ分布、損傷の深さ分布、薄膜形成
選択スパッタリング等

SASAMAL (出力例)



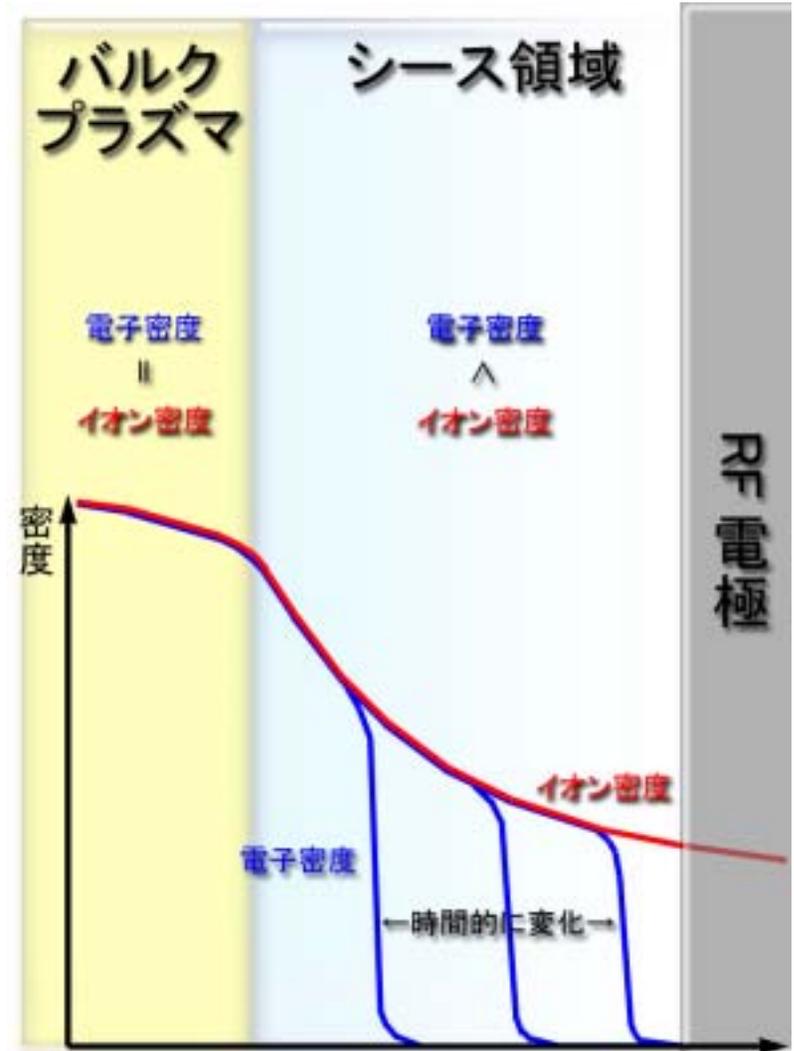
SPUTSM

- スパッタリング計算用のモジュール。
- PIC-MCCM の計算結果を参照し、内部でSASAMALを呼び出し、その計算結果を DSMCMで用いる境界条件として引き渡す。

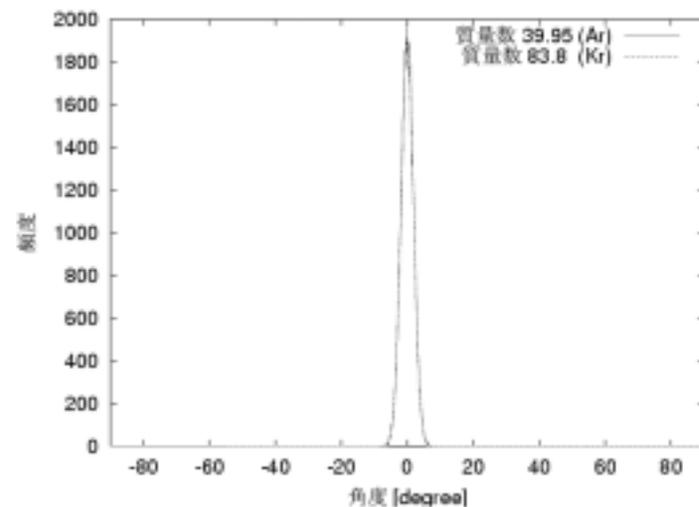
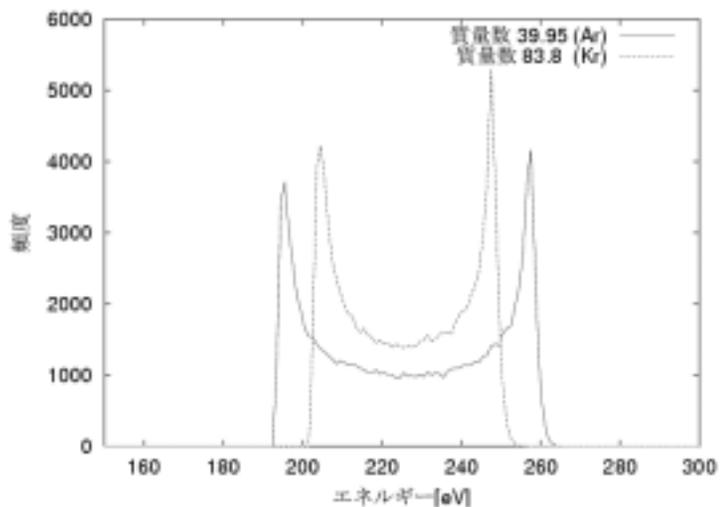
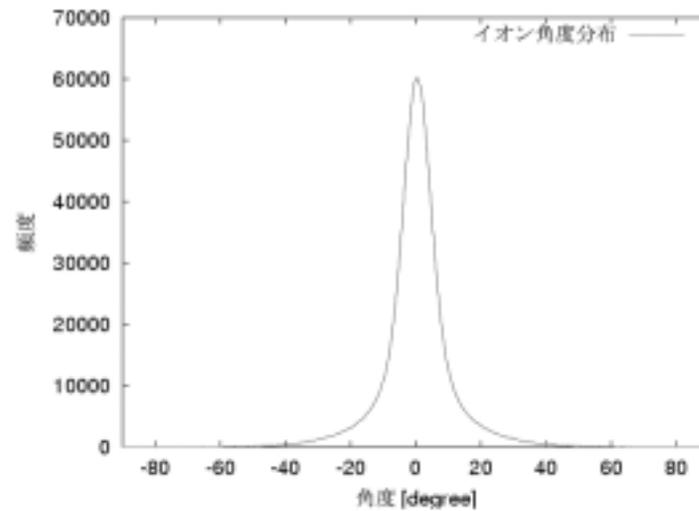
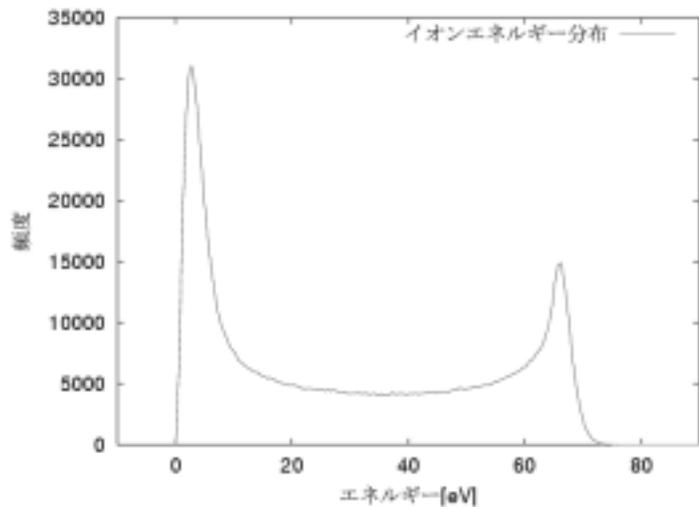


SMCSM

- 予め計算により求められた時間的に変化するシース内の電子、イオンの運動を追跡し、ターゲット上でのエネルギー分布や角度分布を求めるモジュール
 - 入力
 - シースの厚さや電界の時間変化
 - シース端でのイオン、電子フラックス等
 - 出力
 - ターゲット上での EEDF, IEDF, IADF
- Liebermannモデル(あるいはPHM)により、1次元の時間依存のシース内の電界を計算する。
- プラズマシース境界から荷電粒子(電子あるいはイオン)を入れる。
- プラズマシース境界から壁面に達するまで、時間変化する電界の中での荷電粒子の運動を追跡する。
- 壁面に到達した荷電粒子のエネルギー等をサンプリングして出力する。



SMCSM (出力例)



PEGASUS動作環境ほか

- GUI機能 / プレポスト機能
 - 付属のGUIツール(GUIM)を使用
 - 任意の断面グラフ表示、GIFデータ出力、印字出力、テキストデータ入出力、画面表示の任意拡大機能ほか
- オペレーティングシステム
 - Intel系CPU WindowsNT/2000/XP、Linux
 - EWS Tru64 UNIX、Digital UNIX v4.0D以上
- メモリー容量 512MB以上推奨
- ハードディスク容量 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

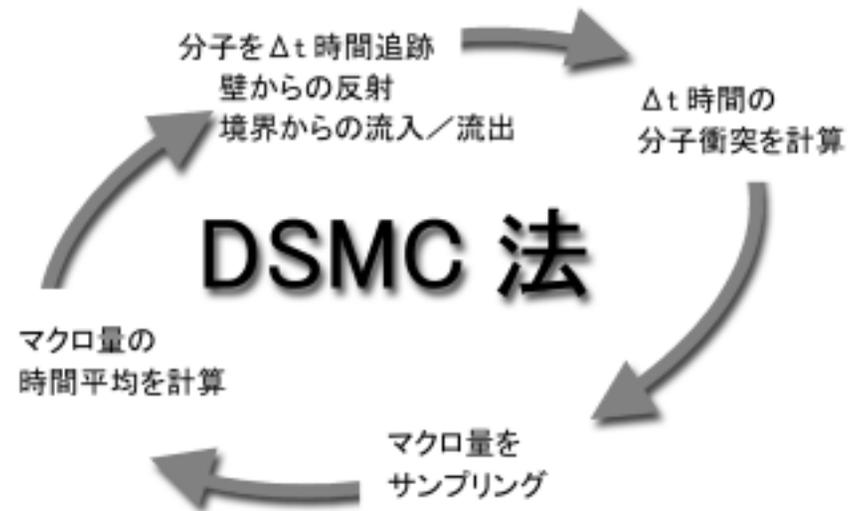
3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア

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法により数值的に解くプログラム
 - 希薄気体となる条件
 - 圧力 P [Torr]、物体の代表長さ L [mm] とすると
 - $P \cdot L < 5$ [Torr·mm]
 - 気体分子運動論の支配方程式: Boltzmann方程式など
 - DSMC法: Direct Simulation Monte Carlo

- 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



機能

- 空間分割メッシュ形状
 - 2次元3次元任意形状
- 分子間衝突(最大衝突数法)
- 分子模型(剛体球モデル)
- 反応(カスタマイズ機能)
 - 壁面上での定義
 - 解離/結合などの分子間衝突時での定義
- 入力項目
 - 粒子種毎質量、直径(剛体球モデル)、流入/流出境界条件(流入量、流入速度分布、境界反射条件など)
 - プレによる入力
 - メッシュ分割、流入/流出境界、壁温
- 出力項目
 - サンプル粒子数時刻歴、各粒子種に対する温度 / 圧力 / 密度 / 速度分布、境界壁への入射粒子束、エネルギー分布

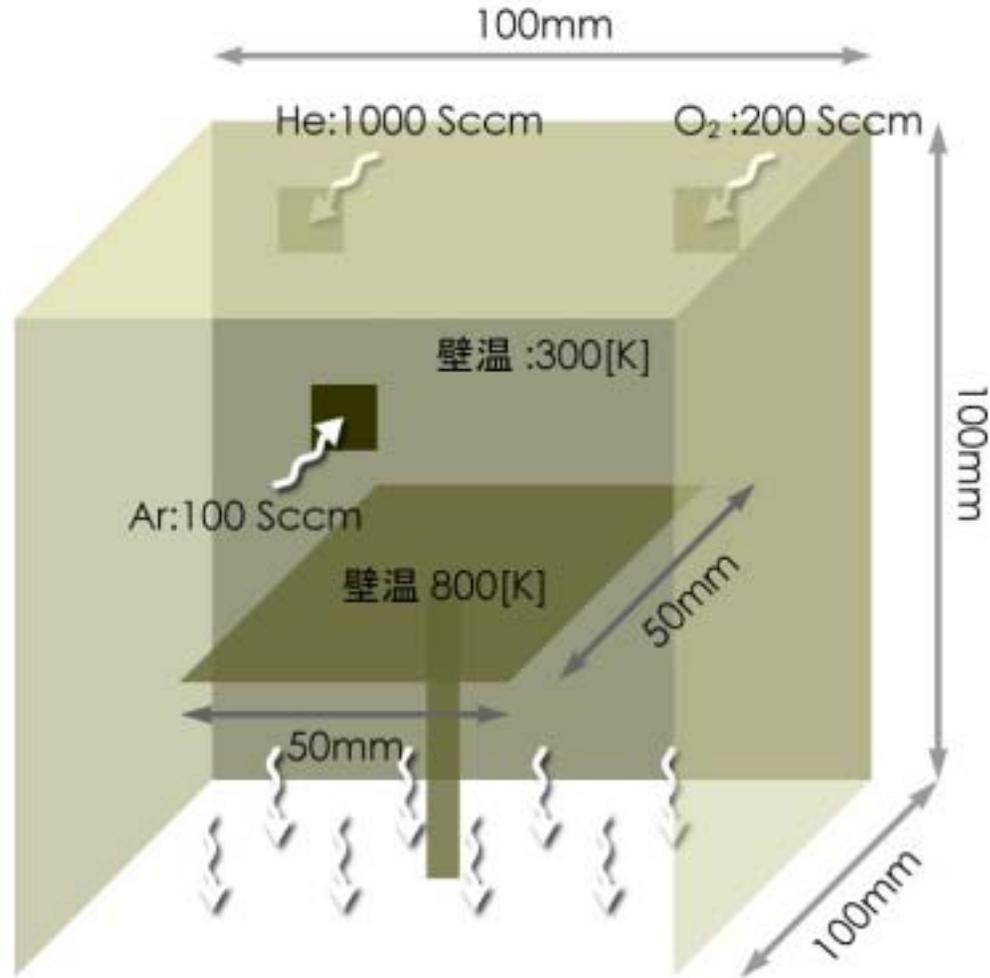
特長

- 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
- 気相、壁面反応処理機能

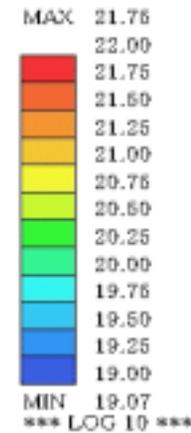
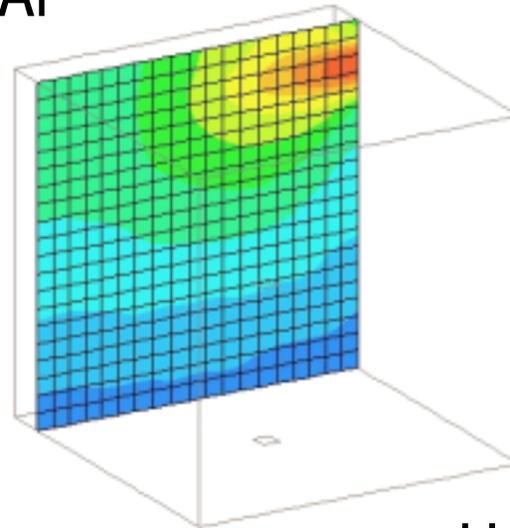
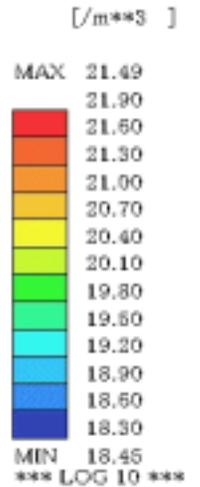
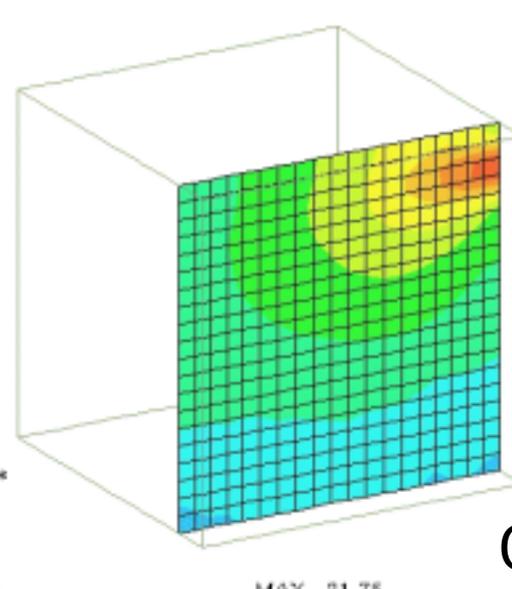
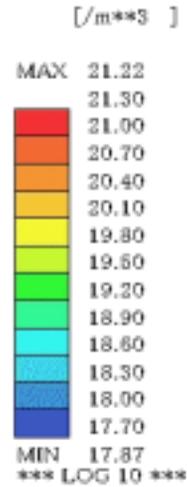
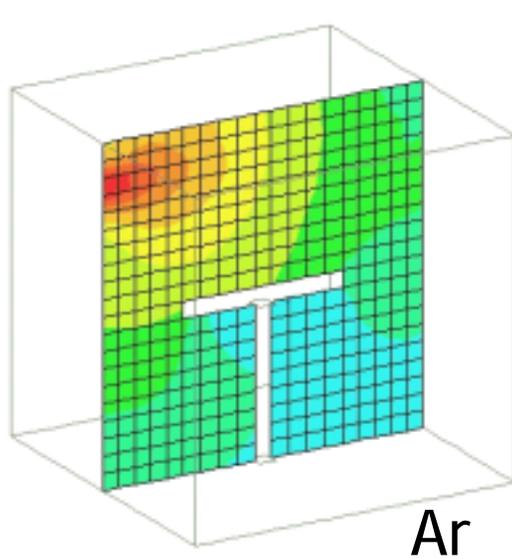
RGS3D 解析例

混合ガス希薄気体解析
真空蒸着における膜厚分布の検証例
クラウジング係数計算の検証例

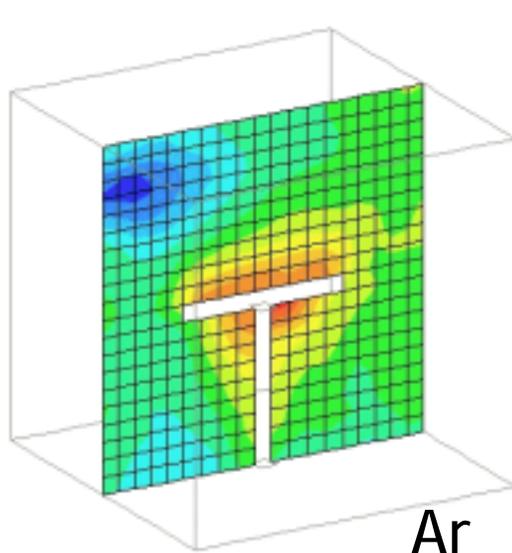
混合ガス希薄気体解析 解析モデル



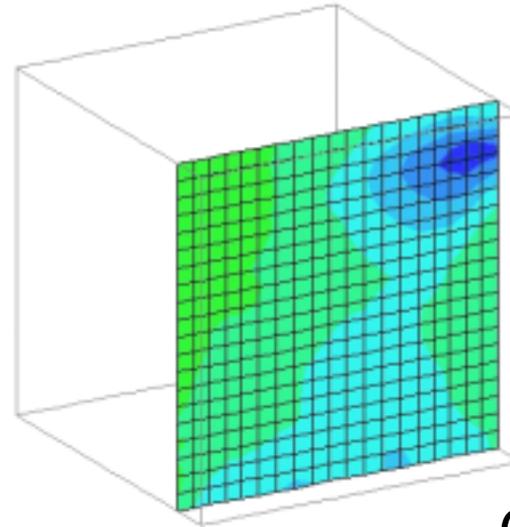
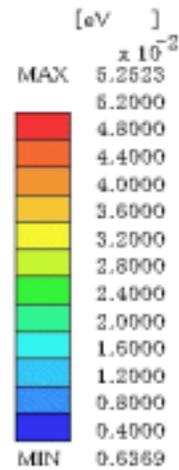
混合ガス希薄気体解析 密度分布



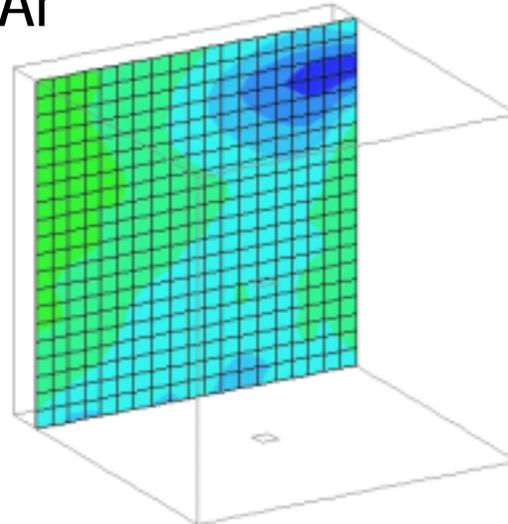
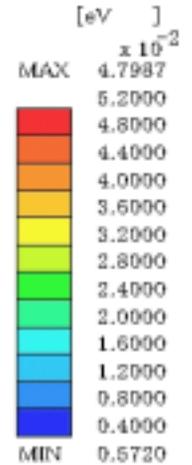
混合ガス希薄気体解析 温度分布



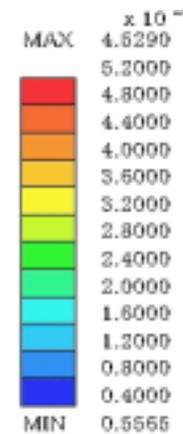
Ar



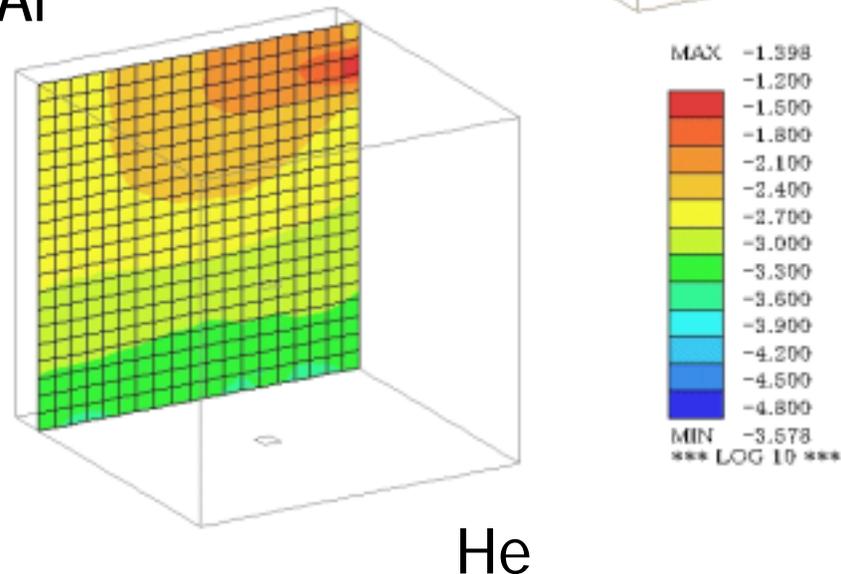
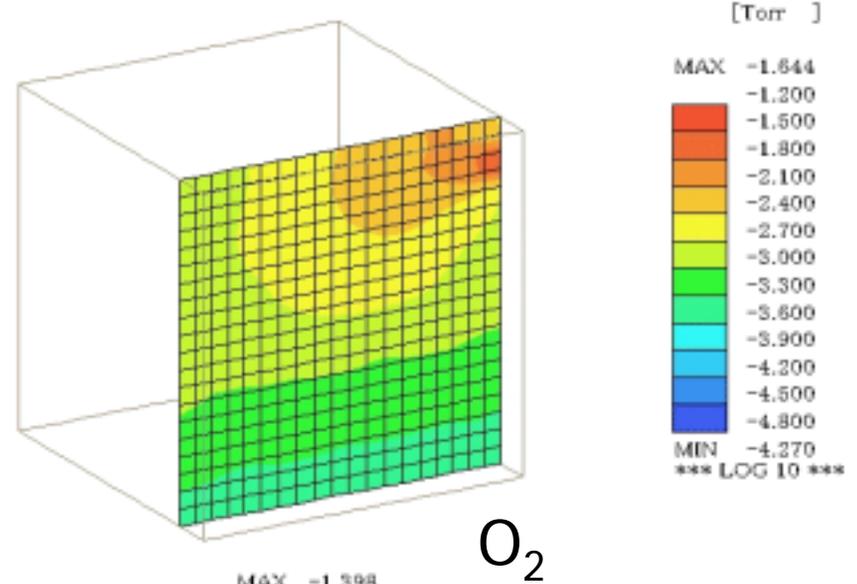
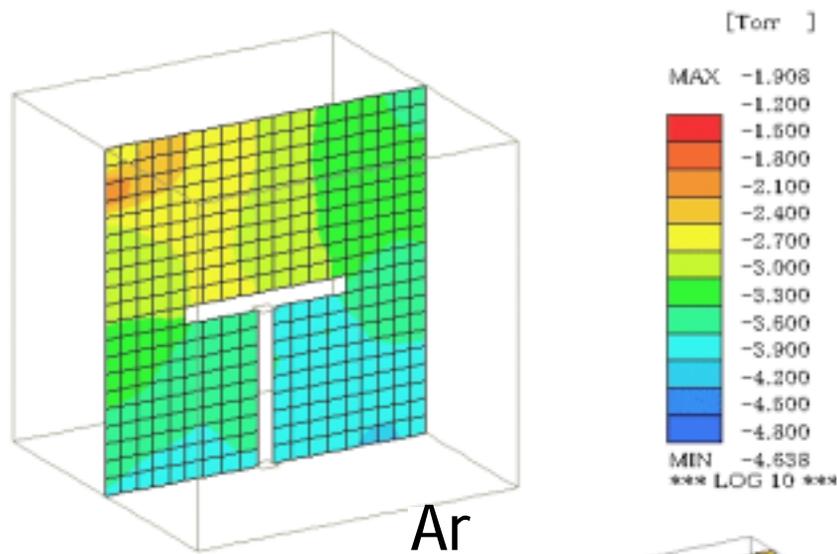
O₂



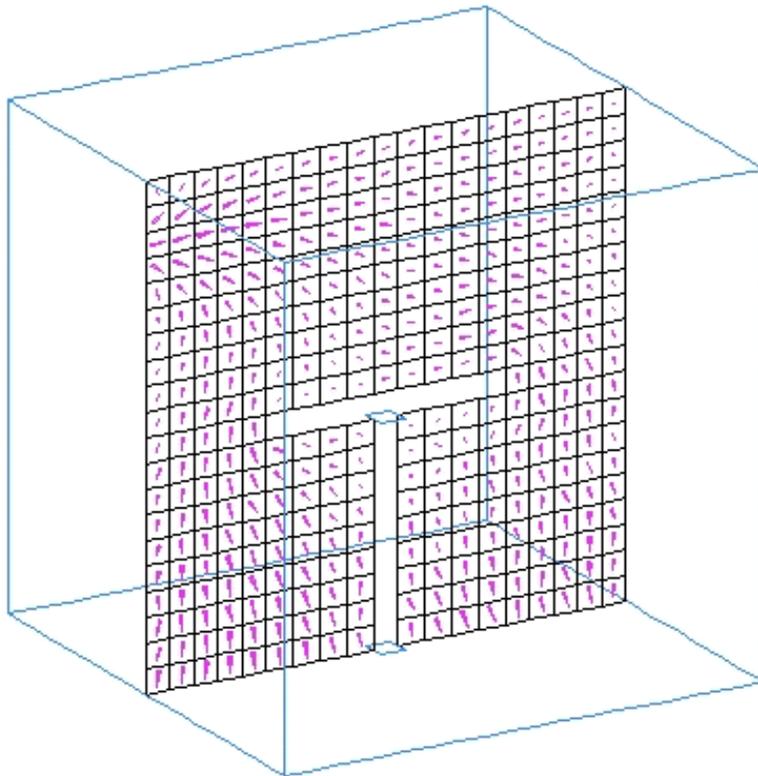
He



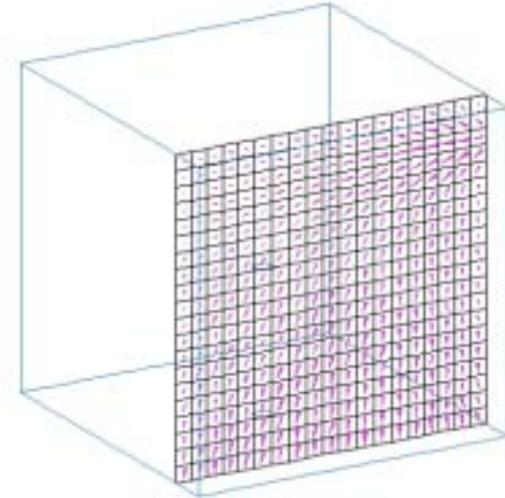
混合ガス希薄気体解析 圧力分布



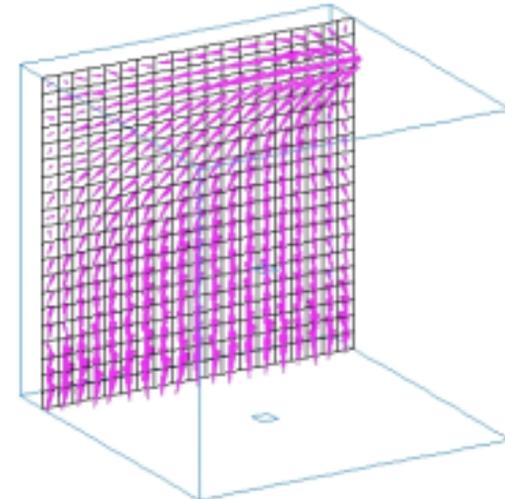
混合ガス希薄気体解析 速度分布



Ar

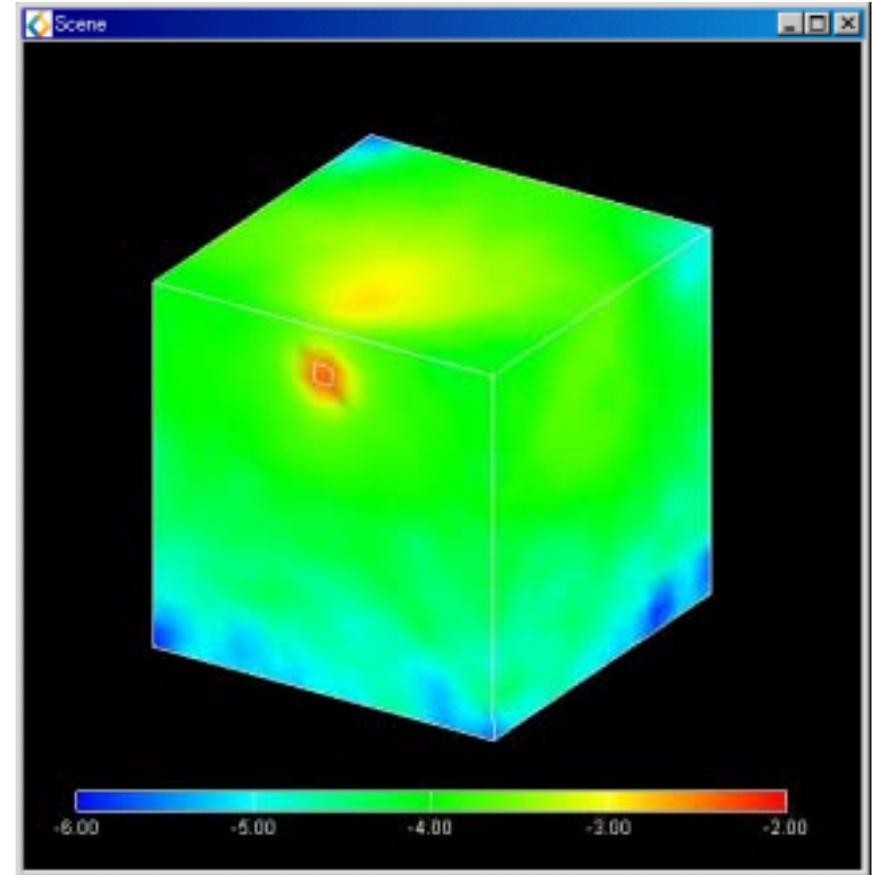
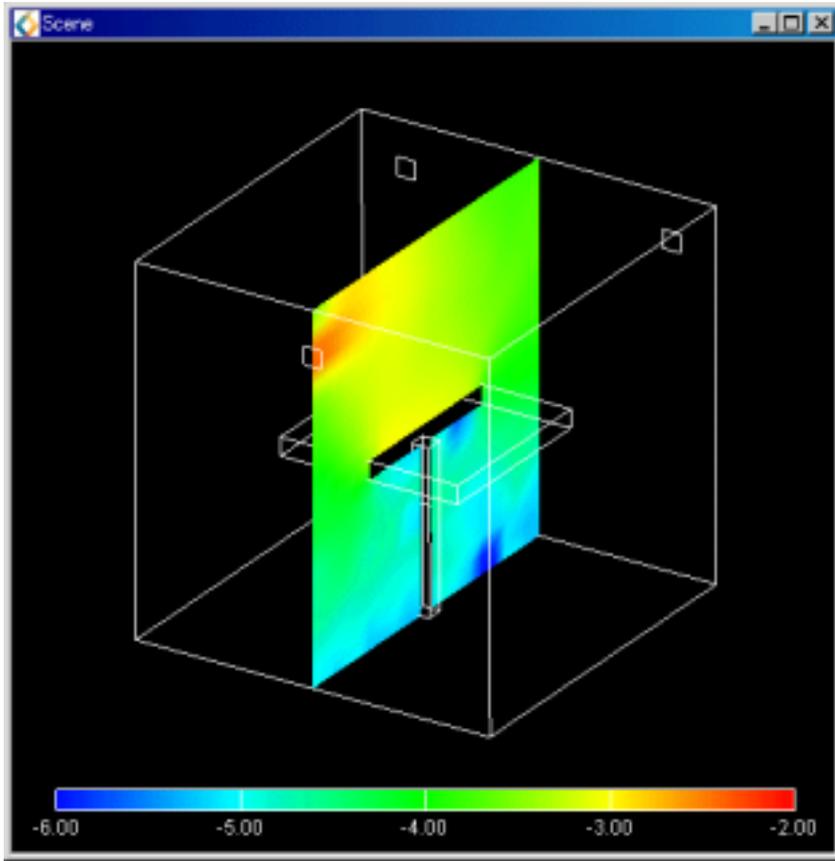


O₂



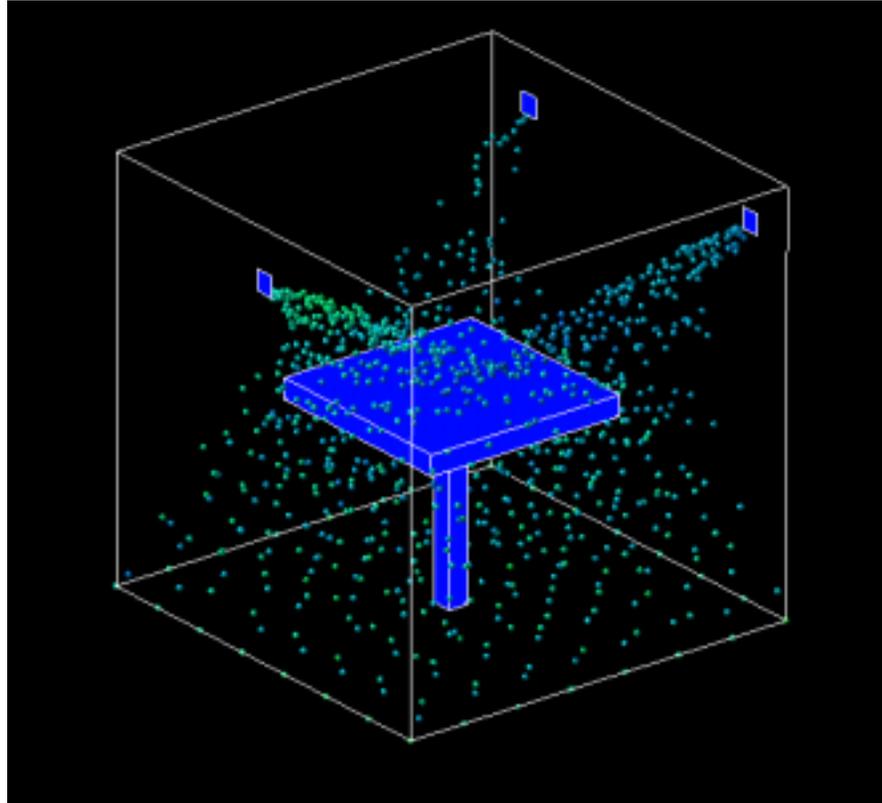
He

混合ガス希薄気体解析 圧力分布(次期バージョン)



Ar

混合ガス希薄気体解析 粒子追跡(次期バージョン)



File path: `\\Clotho\share\tmp\Vacuum2004\rgs3d\gas_particle.gfa` ファイル読込

単純 繰返し 反復 速度:

透視投影 双方向ライト ソフトウェアレンダラ モー

ノーマライズ 位置 背景色: 透明度:

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

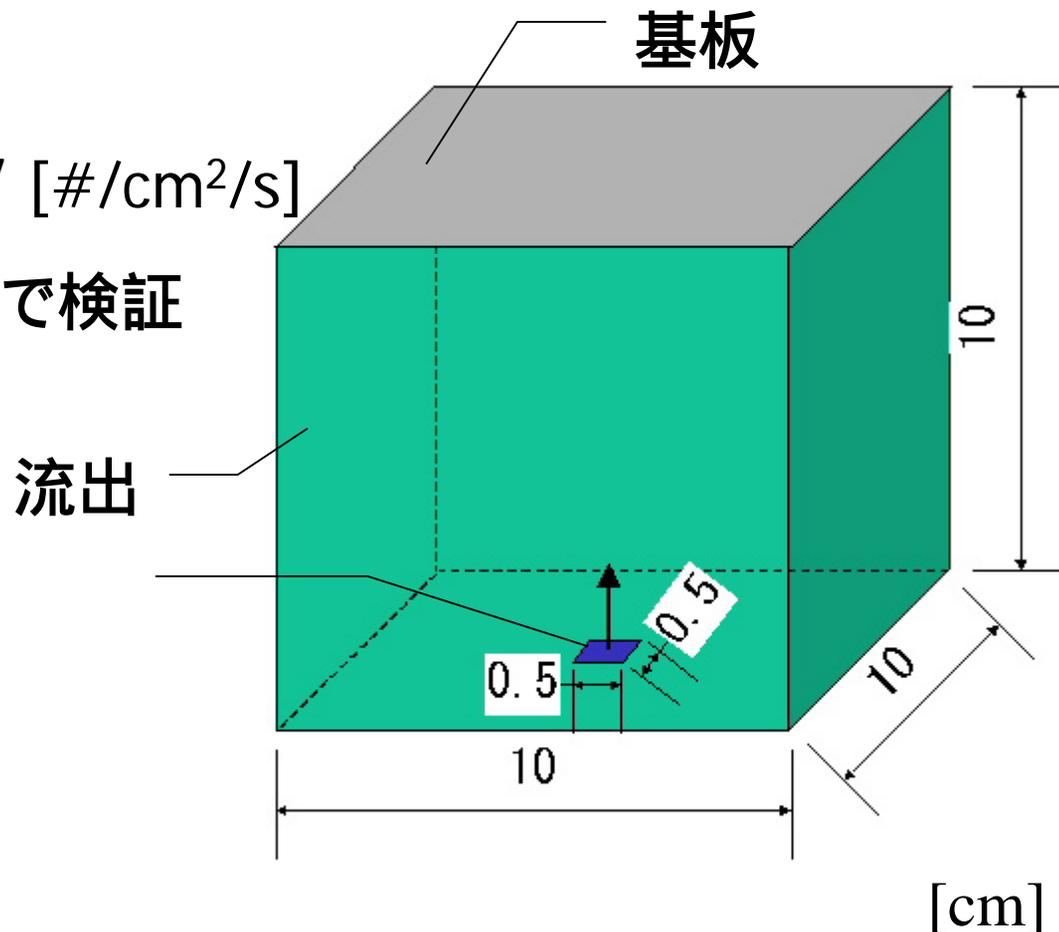
蒸発温度 : 1000 [K]

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)



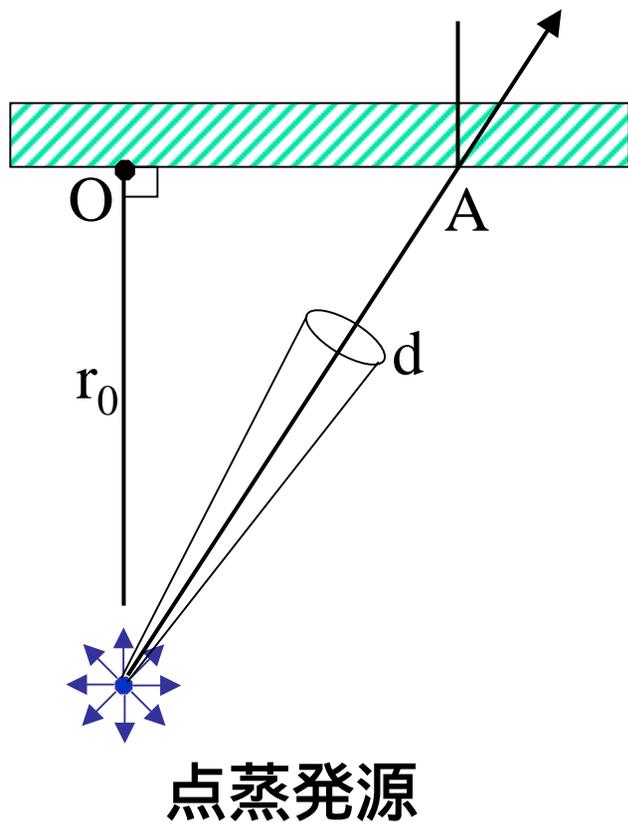
真空蒸着における膜厚分布の検証例

膜圧分布 (参考文献: “薄膜工学”、2003、丸善)

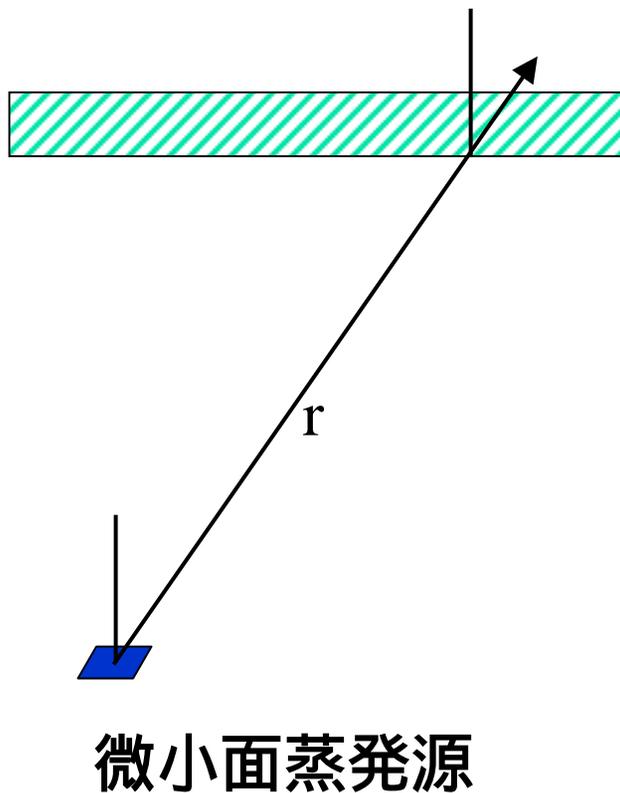
\cos^3

膜圧分布

\cos^4 (=)



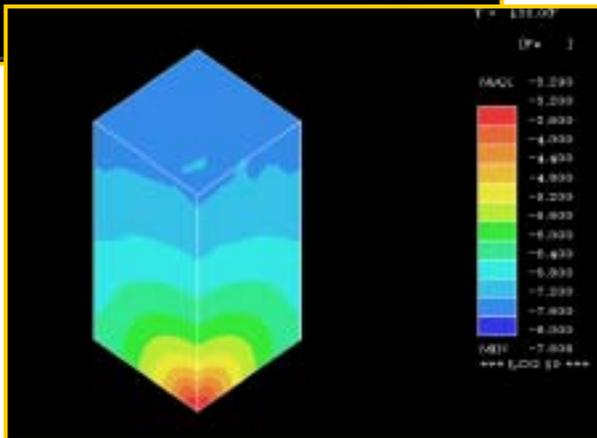
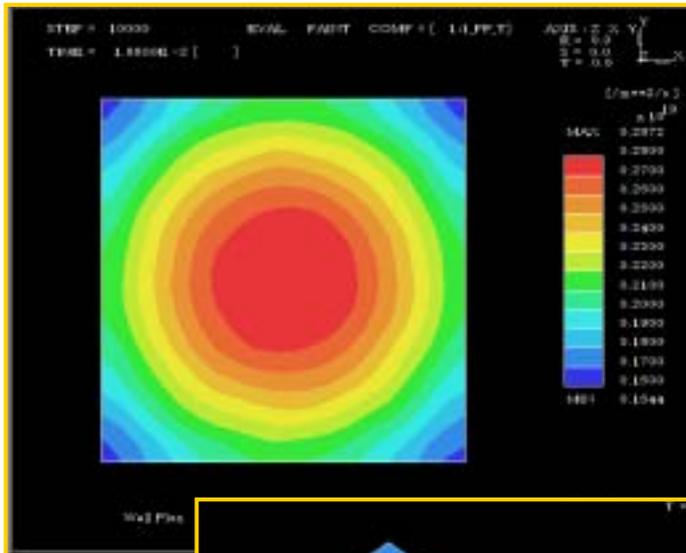
基板面



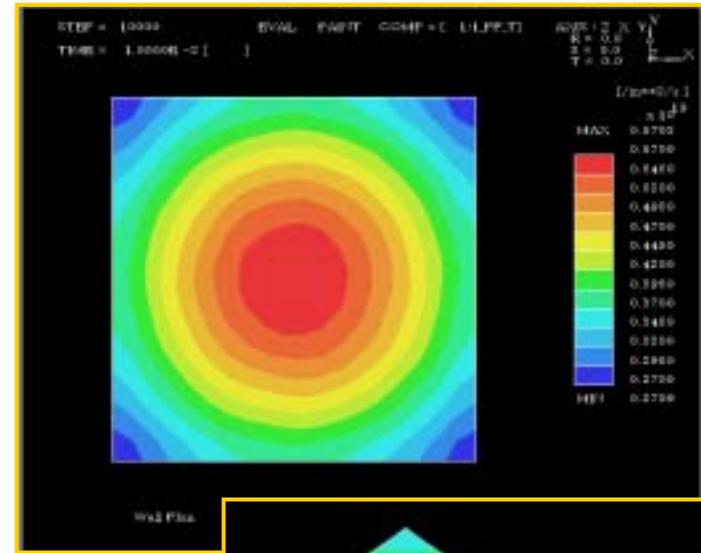
真空蒸着における膜厚分布の検証例

粒子フラックス分布、圧力分布

点蒸発源

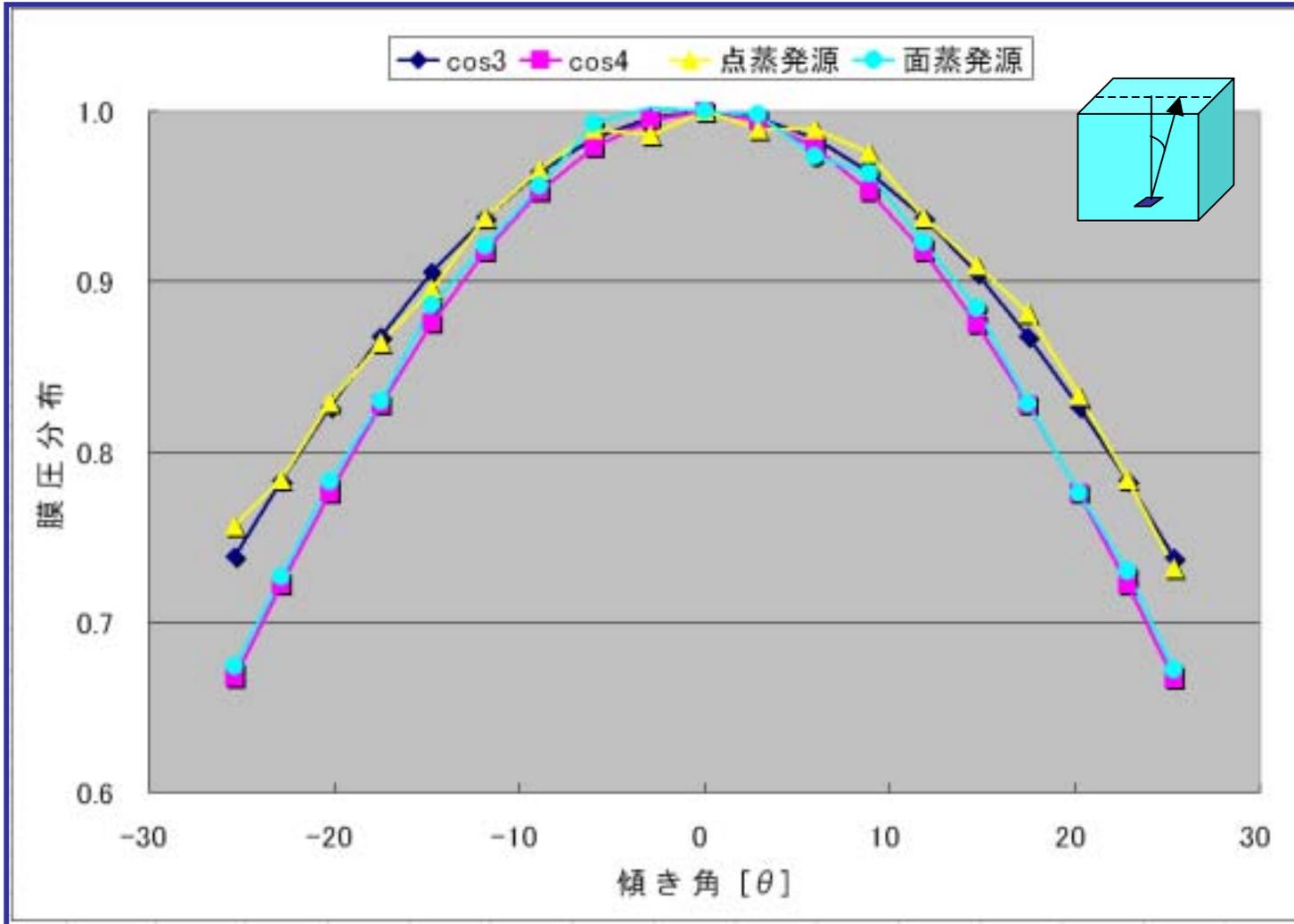


面蒸発源



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

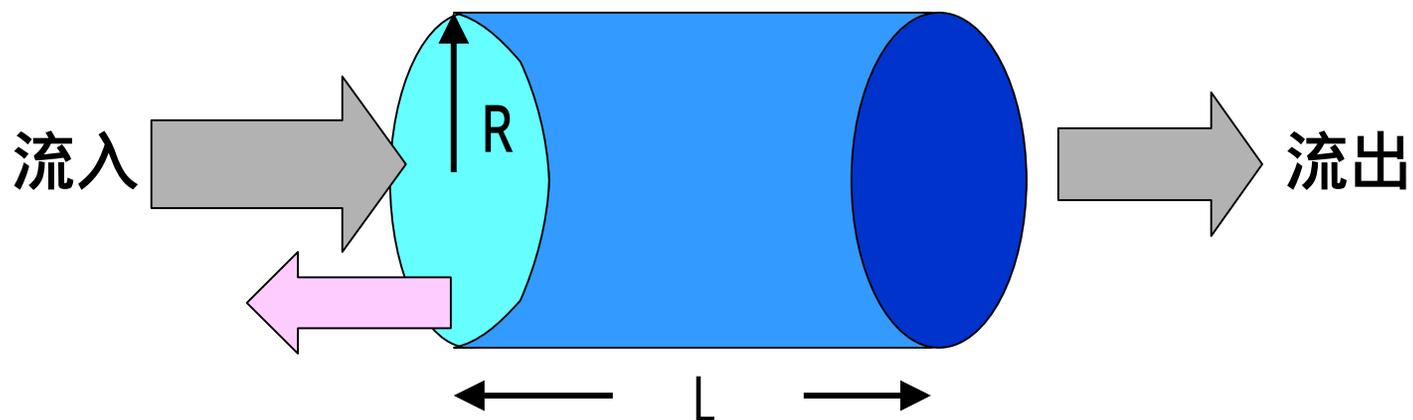


クラウジング係数計算の検証例

解析概要

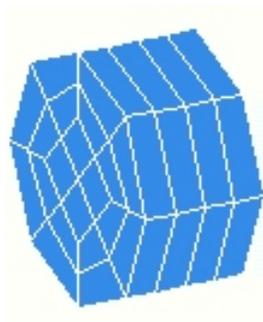
円管 (R) の径が一定で、長さ (L) を変化させたときの分子流のクラウジング係数の計算を、DSMC法、モンテカルロ法 (MC法) で行い、比較文献の分子通過確率と比較

$$\text{クラウジング係数} = \text{流出} / \text{流入}$$

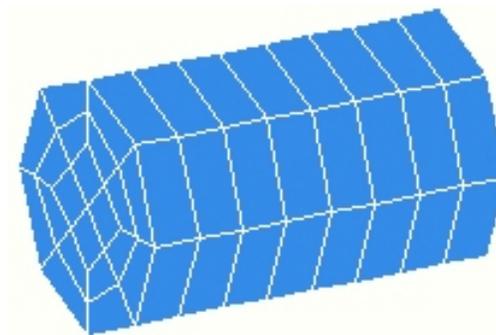


クラウジング係数計算の検証例

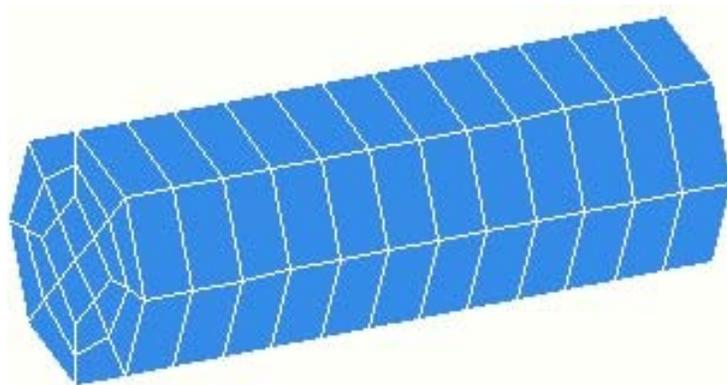
解析モデル(長さを変えて4ケース)



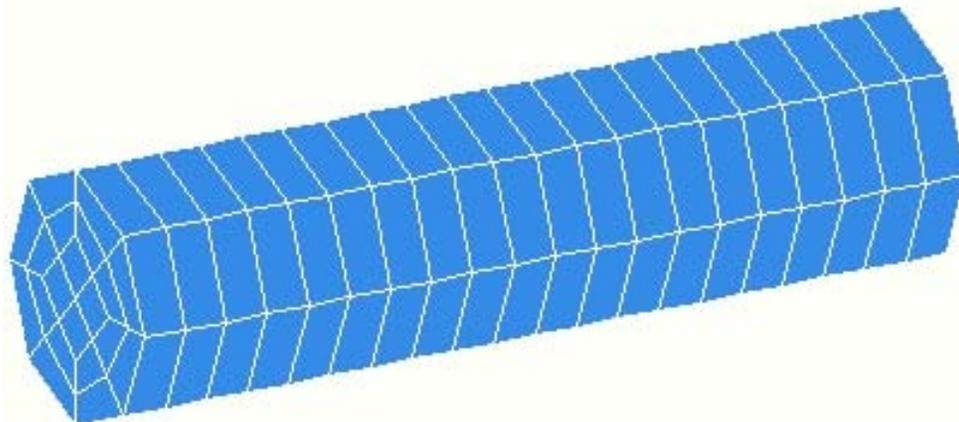
$L = 1$



$L = 3$



$L = 5$



$L = 7$

クラウジング係数計算の検証例

解析結果

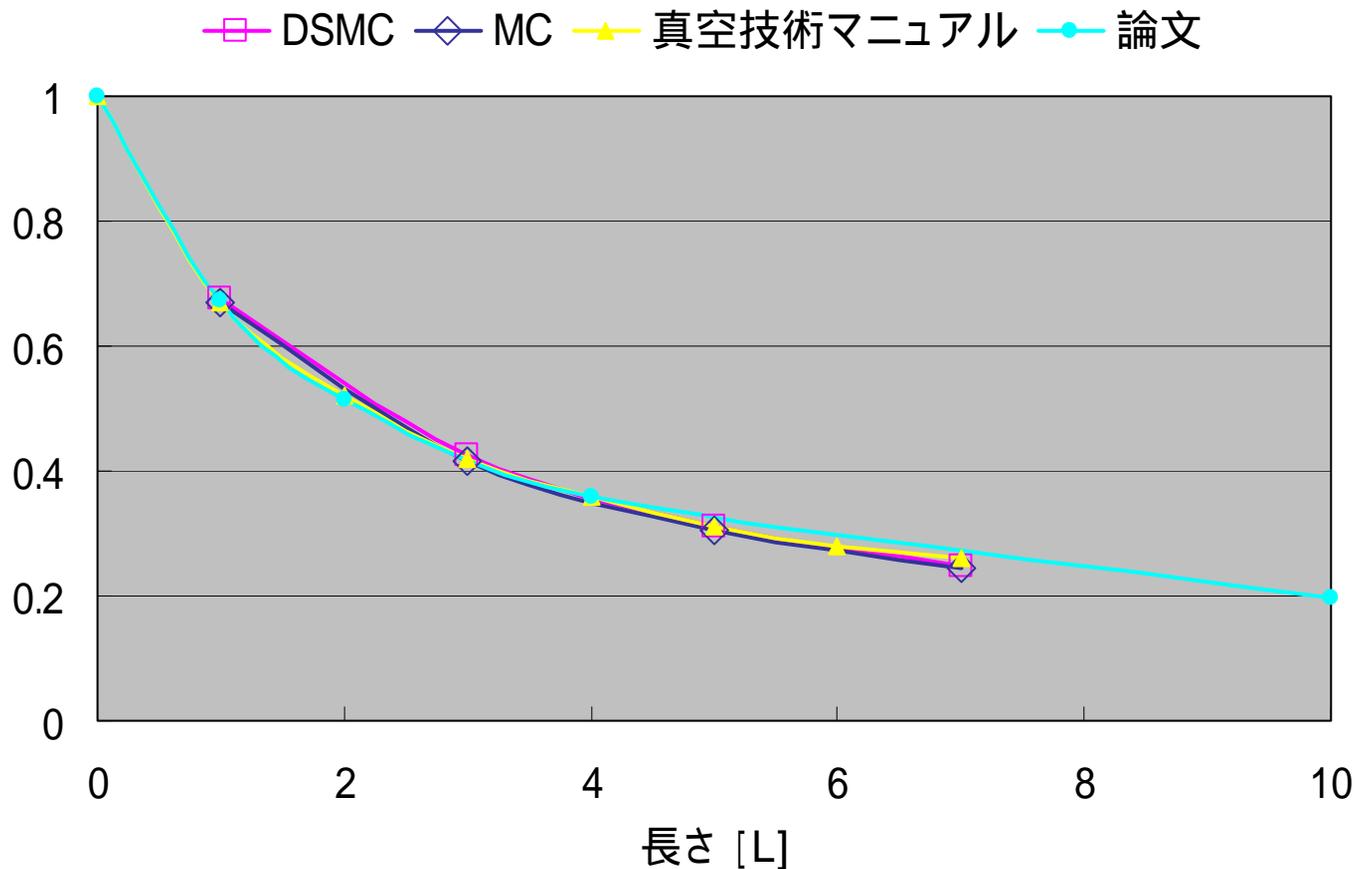
長さ(L)	DSMC法	MC法	真空技術 マニュアル	論文
1.0	0.675	0.670	0.672	0.672
2.0			0.514	0.514
3.0	0.424	0.415	0.421	
4.0			0.359	0.359
5.0	0.313	0.304	0.315	
6.0			0.281	
7.0	0.247	0.243	0.254	
10.0				0.197

■ 比較文献

- 真空技術マニュアル(産業図書) ジョンF.オハンロン著 野田保、斉藤弥八、奥谷剛訳25ページ 図2.6 円管の分子通過確率
- Gas Flow Patterns at Entrance and Exit of Cylindrical Tubes By B.B.DAYTON Table 2 Values of a and P

クラウジング係数計算の検証例

解析結果



■ 比較文献

- 真空技術マニュアル(産業図書) ジョンF.オハンロン著 野田保、斉藤弥八、奥谷剛訳 25ページ 図2.6円管の分子通過確率
- Gas Flow Patterns at Entrance and Exit of Cylindrical Tubes By B.B.DAYTON Table 2 Values of a and P

クラウジング係数計算の検証例

計算時間

長さ(L)	計算時間 [sec]		粒子個数	
	DSMC法	MC法	DSMC法	MC法
1.0	411.0	3.0	19,726	100,000
3.0	1141.0	9.0	60,268	100,000
5.0	1233.0	14.0	66,081	100,000
7.0	1373.0	23.0	71,751	100,000

計算マシン仕様

Pentium(R) 4 CPU 2.53GHz 768 MB RAM

動作環境ほか

■ プレポスト

- PEGASUSのGUIMおよび内蔵のプレポスト
- モデル形状入力、メッシュ作成、出力結果の表示など
 - 入力: 節点、要素、境界条件
 - 出力: 節点ごとの物理量、要素ごとの物理量

■ インターフェイス

- NASTRANフォーマットでの入力をサポート
- ユニバーサルファイル、ニュートラルファイルの解析結果の出力をサポート

■ 動作環境

- OS: UNIX, Linux, Windows98/NT/2000/XP
- メモリー容量 512MB以上推奨
- ディスク容量 1GB以上推奨

事業紹介

- 半導体製造技術、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支援シミュレーター『PEGASUS』の開発 / 販売、およびそれに関わる科学技術計算サービス

- 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

お問い合わせ

■ ペガサスソフトウェア株式会社

- 住所 〒104-0032
東京都中央区八丁堀4丁目2番2号共同ビル5階
- TEL (03)3553-7211
- FAX (03)3553-7212
- E-mail info@psinc.co.jp
- URL <http://www.psinc.co.jp/>

ご清聴ありがとうございました

- アンケートに御協力お願い申し上げます。
- 92ブースにて出展しております。

