

PEGASUS

<u>P</u>lasma <u>E</u>nhanced materials processing and rarefied <u>GAS</u> dynamics <u>U</u>nified <u>S</u>imulation tools





1

目次



	PEGASUSとは	3	3 🖻
	PEGASUSの目標	<i>L</i>	1
	CCP装置 プラズマシミュレーション(比較計算-1)		5 🖻
	ICP装置 プラズマシミュレーション(1)	13	3
	マグネトロンスパッタ装置 プラズマシミュレーション	21	ightarrow
	マグネトロンスパッタ装置 スパッタ粒子挙動シミュレーション	25	$\overline{\mathbf{b}}$
	真空蒸着装置 膜厚分布シミュレーション	32	2
	PEGASUSの特徴	44	1
	PEGASUSの今後の計画	45	5
•	おわりに	46	5 🖻
•	添付資料	49	



2









PEGASUSの目標



- プラズマ装置内の気体・プラズマ挙動シミュレーション
 - マグネトロンスパッタ装置内のプラズマ挙動、スパッタ粒子挙動解析
 - プラズマCVD装置内のプラズマ挙動、供給ガス・ラジカル等の気体挙動解析
 - ドライエッチング装置のプラズマ挙動、供給ガス・ラジカル等の気体挙動解析
 - 荷電粒子ビーム挙動解析
 - イオン注入による表面改質解析
- 真空装置内の希薄気体挙動シミュレーション
 (希薄気体の定義:クヌーセン数Kn>0.01、およそP[Pa]×L[mm] < 700)
 - 真空蒸着装置内の蒸発物、背景ガス挙動解析
 - プラズマ装置内の供給ガス挙動解析
 - 真空装置内の混合気体挙動解析
 - 微細領域での原子・分子挙動解析





CCP装置 プラズマシミュレーション

比較計算-1

参照論文:

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

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

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

Vol.100, No.4,1995.

(流体モデル)





解析モデル





Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.

Û

읍



比較例(1) 電子密度分布





比較例(1) 電離レート分布







Vrf:100 [V]

(3) 13.33[Pa], (5) 33.33[Pa], (6) 66.67[Pa]





Û

品



比較例(2) 電子密度分布







比較例(2) 電離レート分布



Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.



11





13.33[Pa]

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







ICP装置

プラズマシミュレーション (1)

モジュール: PHM DSMCM



13







反応式



e+F	\rightarrow F(+)+2e	$e+SF_{6} \rightarrow e+SF_{6}$ $e+SF_{6} \rightarrow SF_{5}(+)+F+2e$ $e+SF_{6} \rightarrow SF_{4}(+)+2F+2e$	すべての壁面上で F → 1/2F ₂
$\begin{vmatrix} e+F_2 \\ e+F_2 \\ e+F_2 \end{vmatrix}$	$ \rightarrow e+F_2 \rightarrow F(-)+F \rightarrow F+F+e $	$e+SF_{6} \rightarrow SF_{3}(+)+3F+2e$ $e+SF_{6} \rightarrow SF_{2}(+)+4F+2e$ $e+SF_{6} \rightarrow SF_{2}(+)+5F+2e$	F2,SF _n (n=1,5)は完全 反射
		$e+SF_6 \rightarrow SF(+)+SF+2e$ $e+SF_6 \rightarrow SF_5(-)+F$	
		$e+SF_6 \rightarrow SF_3+3F+e$ $e+SF_6 \rightarrow SF_2+4F+e$	
		$e+SF_6 \rightarrow SF_5+F(-)$ $e+SF_5 \rightarrow SF_4(+)+F+2e$	
		$e+SF_5 \rightarrow SF_5(+)+2e$ $e+SF_4 \rightarrow SF_4(+)+2e$	
		$e+SF_3 \rightarrow SF_3(+)+2e$ $e+SF_2 \rightarrow SF_2(+)+2e$	
		$e^+SF \rightarrow SF(+)+2e$	

 $\begin{array}{c} X(+)+Y(-) \longrightarrow X+Y(X,Y \in SF,F) \\ \text{Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.} \end{array}$



電子に関する物理量、空間電位そしてコイルに関する物理量



















正イオン密度分布 (F⁺,SF⁺,SF2⁺,SF3⁺,SF4⁺,SF5⁺)





17



負イオン密度分布 (F⁻,SF5⁻,SF6⁻)











中性粒子密度分布 (F,F2,SF,SF2,SF3)







40.0

SF密度[/m³]

20.0

60.0

80.0

×10⁻³

×10⁻³ 80.0

60.0

40.0

20.0

0.00 00.0









中性粒子密度分布(SF4,SF5,SF6)、全圧分布











Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.

U





モジュール: MSSM PIC-MCCM



21













Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.



23











マグネトロンスパッタ装置 スパッタ粒子挙動シミュレーション

モジュール : MSSM PIC-MCCM SPUTSM DSMCM



25



スパッタ粒子挙動シミュレーション概略図













27



Step1. MSSM による静磁場解析



Step2. PIC-MCCM によるプラズマ解析









Step3. SPUTSMによるスパッタリング解析





スパッタリング粒子放出角度分布

1.0



200 ×10⁻³







Cu 空間フラックス分布

Cu 基板へのフラックス分布





真空蒸着装置

膜厚分布シミュレーション

(1)回転基板上の膜厚分布(2)膜厚分布(理論値との比較)(3)膜厚分布(アルゴン供給ガス圧依存性に関する実験値との比較)

ソフトウェア:RGS3D



32



(1) 解析モデル







(1) 基板上での粒子フラックスの比較





静止基板

単位:[/m²/s]

Max. :0.1245×10²⁰ Min. :0.0075×10²⁰ 回転基板

Max.:0.4276×10¹⁹ Min.:0.3802×10¹⁹



34









읍







36
(2) 粒子フラックス分布、圧力分布



点蒸発源











(2) 粒子フラックス分布



Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.









(3) 装置図



Û







Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.





(3) 測定点





(3) 膜厚の比較





Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.











- モジュール構造により用途に応じたシミュレーションが可能。
- 専用のGUI(Graphical User Interface)により入力データ生成から計算中の 実行状況の確認、計算結果の表示まで、一連の操作が容易。
- プラズマシミュレーションに必要な衝突断面積データ、レート係数を内蔵。
 〔希ガス、金属原子、水素、酸素、窒素、塩素、炭化水素系分子(C2H2、CH4)
 、フッ素系分子(CF4、SF6)、シラン等、そして使用者もDBに追加可能〕
- 自社開発のためサポートを含め、迅速な対応が可能。
- 理論説明書、使用説明書そして例題集を整備。



PEGASUSの今後の計画



- プラズマ解析
 - イオン化スパッタ、イオンプレーティングシミュレーション機能
 - ECRプラズマシミュレーション機能
 - 表面波プラズマシミュレーション機能
- 表面科学系
 - 3次元蒸着膜形状シミュレーション機能
- 希薄気体解析
 - RGS3D専用GUIM3D



おわりに



- すべてのモジュールが使用可能な無償試用期間をご利用下さい。
- 1ヶ月からのレンタル使用もご利用可能です。
- 基板表面での化学反応、基板の膜質に関して量子化学計算が必要でしたら 東北大学NICHe: 宮本研究室との共同・委託研究も可能です。
- お問い合わせに関しましては下記URL、e-mailをご利用下さい。
 URL http://www.psinc.co.jp e-mail: info@psinc.co.jp















添付資料



- ユーザインターフェイス (GUIM)
- PEGASUSのモジュール(プラズマ解析)
 - CCP装置 プラズマシミュレーション(比較計算-2)
 - ICP装置 プラズマシミュレーション(2)
- PEGASUSのモジュール(表面科学系)
- 表面科学系シミュレータ概要
 - SASAMAL
 - SMCSM
- PEGASUS動作環境ほか
- 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



50

GUIMの目的



- 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
 (プリプロセッサー)
- 計算結果を簡単な操作で確認 、検討

(ポストプロセッサー)

•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、
 モニタリングセルの指定





GUIMのサンプル画面





PEGASUSのモジュール(プラズマ解析)









CCP装置

プラズマシミュレーション

比較計算-2

参照論文:

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



54

解析モデル













56



比較例(2) 電位分布、電子温度分布





57





Ar(4S)の密度分布





比較例(2) Ar(4s)密度分布



Ar(4S)の密度分布(拡大図)



59



比較例(2) Ar(4s)密度の電極端上z軸方向分布







ICP装置

プラズマシミュレーション (2)

参考文献: M. Shiozawa and K. Nanbu, "Coupling of plasma and flow in materials processing", Thin Solid Films, Vol.457,pp.48-54,2004

モジュール: PHM DSMCM



61

解析モデル





反応式



<電子衝突断面積> e⁻+Cl : 弾性、非弾性(励起、電離)等3種 e⁻+Cl2:弾性、非弾性(励起、電離、解離、解離性付着)等6種 <反応レート定数> Cl⁻+Cl2⁺ → 3Cl Cl⁻+Cl⁺ → Cl2 Cl⁺+Cl2⁺ → 3Cl Cl⁻+Cl⁺ → Cl2



63

コイルパワー吸収分布、誘導電界強度分布、 電子エネルギー分布関数



Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.

64

PEGASUS Software

電子に関する物理量、電位分布









Cl⁻、Cl⁺密度分布、 Cl⁻、Cl⁺生成率分布



Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.



Cl₂+密度、生成率分布、Cl₂、Cl分布





Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.





PEGASUSのモジュール(表面科学系)





Û

읍



表面科学系シミュレータ概要



69



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



70

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)








SMCSM







SMCSM(出力例)



Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.



Û

읍



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、
 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



76

Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.







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





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



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

