

# 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

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



目次



PEGASUSとは		3
PEGASUS構成モジュール		4
ユーザインターフェイス(GUIM)		5
PHM 計算例 (CCP装置検証計算2例、ICP計算)		13
PIC-MCCM 計算例		38
(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		55
3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア概要		65
RGS3D 真空蒸着における解析例		68
(回転基板上の膜厚分布、膜厚分布(理論値との比較、	実験との比	較))

#### **PEGASUS**とは

 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、

プラズマプロセス,真空技術における

(FLCVD表画、 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



PECVD

蒸着

表面改質

航空宇宙

ドライ エッチング



#### 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
  - 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)

(DSMCM)

- 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)



## 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

JIM	
闎〈	履歴
:Wasaaki\PIC-MCCM 計算条件の設定	
ガス種反応式の選択	計算形状の設定
各種計算制御パラメータの設定	E BHテーブルの設定
計算の実行計算	算の進行状況の確認
ポスト処理 ポスト処理を行う	リストファイル
	7



# ガス種、反応式の選択







#### 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







## 制御パラメータの設定

	<b>慢</b> 欠	100	00000			
最大超粒子数 gtd 出力間隔		1000000				
out 出力間	隔	1				
粒子種	初期密度		初期超粒子数	_		
e(-)	1.0e15		10000	_		
N(+)	o		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	-		
磁場データコ	7ァイル名		bfield.ext		選択	
中性ガスモジ	リュール選択		なし	-		
中性粒子と	の反復		10			
🗌 ሀスタート	計算を行う					
PIC_dump_i	nterval		10000			
	寛を行う					
⊟ dtをfix	する		1.0e-10			
smooth ty	pe2		4			
□ 角度分	fi start	70.0	end 110.0	div.	40	<b>—</b>

PHM NMEM DSMCM PSM PEM EMCSM ECSDB EMM						
最大ステッ	グ装女	10000		-		
サンプリング	間隔	10	10			
gtd 出力間	那高	1000	1000			
out 出力間	那高	10000	10000			
最大粒子数(Major)		300000	300000			
最大粒子数	最大粒子数(Minor)		800000			
restart 出力間隔		10000				
初期普	8度の単位 [#/n	13] 💌 初期温	度の単位 [eV]	<b>.</b>		
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	F		
H_2(*)	1.0e18	0.03	10000	- -		
	1.2.22	l				



## ポスト処理











# CCP装置

# 高ガス圧(10[Pa]以上)

# PHM

# NMEM



# 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)



解析モデル







検証例(1) 電子密度分布





検証例(1) 電離レート分布



検証例(1) 結果比較



#### Vpp: 200 [V]

# (3) 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





検証例(2) 電子密度分布





検証例(2) 電離レート分布







#### 13.33[Pa]

# (3)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

解析モデル





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







### 結果比較(2)





#### 結果比較(3)





Ar(4S)の密度分布

### 結果比較(4)





#### Ar(4S)の密度分布(拡大図)

結果比較(5)





#### Ar(4s)の電極端上z軸方向分布





Arの流束ベクトル[#/m<sup>2</sup>/s]

Ar(4s)の流束ベクトル[#/m<sup>2</sup>/s]





高密度プラズマ

# PHM

# DSMCM







#### <u>反応式</u>



e+F e+F <sub>2</sub>	$\rightarrow$ F(+)+2e $\rightarrow$ e+F <sub>2</sub>	$\begin{array}{rcl} \mathrm{e}+\mathrm{SF}_{6} \rightarrow & \mathrm{e}+\mathrm{SF}_{6} \\ \mathrm{e}+\mathrm{SF}_{6} \rightarrow & \mathrm{SF}_{5}(+)+\mathrm{F}+2\mathrm{e} \\ \mathrm{e}+\mathrm{SF}_{6} \rightarrow & \mathrm{SF}_{4}(+)+2\mathrm{F}+2\mathrm{e} \\ \mathrm{e}+\mathrm{SF}_{6} \rightarrow & \mathrm{SF}_{3}(+)+3\mathrm{F}+2\mathrm{e} \end{array}$	すべての壁面上で F $\rightarrow$ 1/2F <sub>2</sub> F2,SF <sub>n</sub> (n=1,5)は完全
$e+F_2$ $e+F_2$	$\rightarrow$ F+F+e	$e+SF_6 \rightarrow SF_2(+)+4F+2e$ $e+SF_6 \rightarrow SF(+)+5F+2e$	反射
		$e+SF_6 \rightarrow SF_5(-)+F$	
		$e+SF_6 \rightarrow SF_3+3F+e$	
		$e+SF_6 \rightarrow SF_2+4F+e$	
		$e+SF_6 \rightarrow SF_5+F(-)$	
		$e+SF_5 \rightarrow SF_4(+)+F+2e$	
		$e+SF_5 \rightarrow SF_5(+)+2e$	
		$e+SF_4 \rightarrow SF_4(+)+2e$	
		$e+SF_3 \rightarrow SF_3(+)+2e$	
		$e+SF_2 \rightarrow SF_2(+)+2e$	
		$e+SF \rightarrow SF(+)+2e$	

 $\underset{\text{Copyright 2002-2005 PEGASUS Software Inc., All rights reserved.}}{X(+)+Y(-)} \xrightarrow{X+Y} (X Y \in SF, F)$ 



#### 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





負イオン密度分布









## 中性粒子密度分布














#### 中性粒子密度分布

×10<sup>-3</sup> 80.0

60.0

40.0

20.0

0.00.00

80.0

60.0

40.0

20.0

0.00.00





# CCP装置

## 低ガス圧(10[Pa]以下)

# PIC-MCCM

# DSMCM

### 解析モデル







#### Step1. DSMCM によるArバッファガスの流れ場の計算













電子密度分布

イオン密度分布







#### PIC-MCCM の出力物理量の一例



電子温度空間分布



イオンエネルギー分布



基板へのイオンフラックス









サンプル粒子数の時間変化

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

電離率空間分布







Ar⁴s密度分布



Ar4s生成率分布





基板へのフラックス









密度の時間変化



# マグネトロンスパッタ装置

# MSSM

# PIC-MCCM





















# 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



解析モデル















#### Step3. SPUTSMによるスパッタリングシミュレーション







スパッタリング粒子放出角度分布







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
  - シースを通っ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

#### 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



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







# 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



# RGS3D 真空蒸着における 解析例

(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(実験との比較)

(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:**[/m<sup>2</sup>/s]

Max. :0.1245×10<sup>20</sup> Min. :0.0075×10<sup>20</sup> 回転基板

Max.:0.4276×10<sup>19</sup> Min.:0.3802×10<sup>19</sup>

(2) 解析モデル








### (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









(3) 解析モデル













# (3) 膜厚の比較



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





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