

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

PEGASUSの全体構想

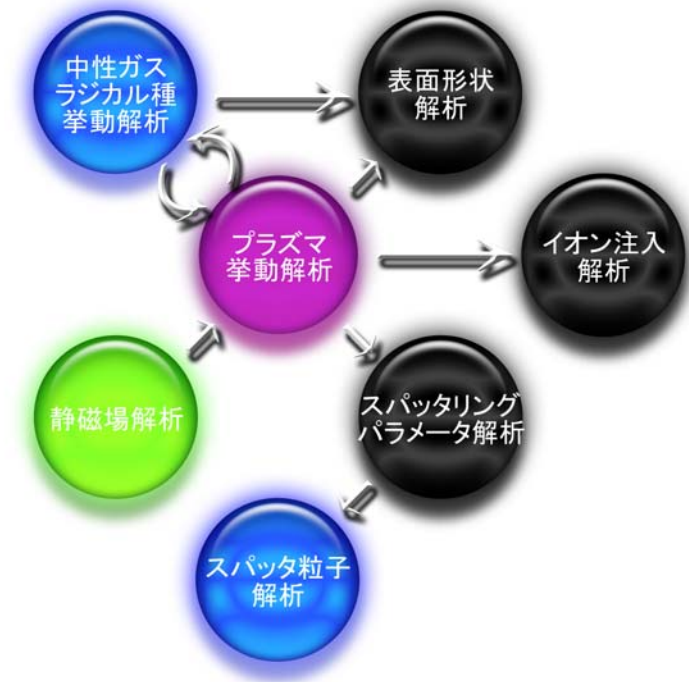
- プラズマプロセス, 真空技術における

- 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

PEGASUSの応用範囲

- プラズマ挙動／中性粒子挙動を個別および組み合わせた解析が可能
 - 真空装置、CVD装置、エッチング装置、マグネトロンスパッタ装置内の挙動解析
 - イオンプレーティングなど表面改質解析
 - ドライエッチング／デポジションなど表面形状解析



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)
- イオン注入シミュレーションモジュール (IPSM) <現在開発中>
- シース内モンテカルロ・シミュレーション・モジュール (SMCSM)
- 表面形状シミュレーション・モジュール (SPSM) <現在開発中>

■ 3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア (RGS3D)

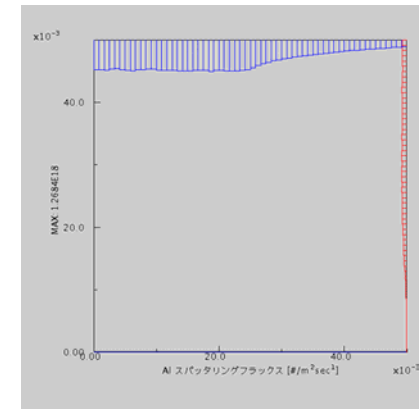
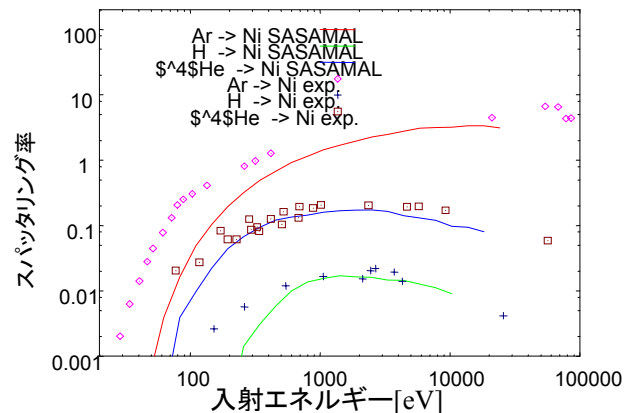
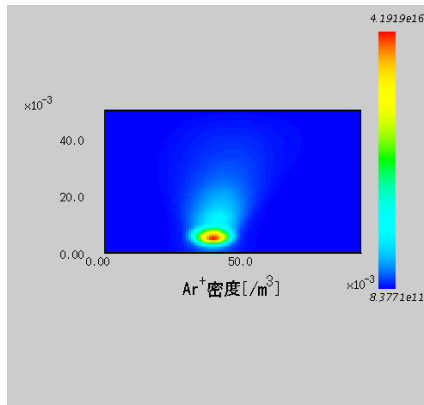


気相／表面科学系シミュレータ とその組み合わせ例

- 気相シミュレータ
 - 装置内部の原料ガス・ラジカル等の中性粒子や電子、イオンの密度、フラックス、静磁界、静電界等を計算
- 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、エッチング・デポジションによる形状変化等）を模擬
- 各モジュールはそれぞれ単体で計算を行うことができます。さらに、気相／表面科学系シミュレータの各モジュールを適切に組み合わせることにより、例として次のようなシミュレーションを行うことが可能になります。
 - エッチングシミュレーション
 - PECVDシミュレーション
 - イオン注入シミュレーション（表面改質）
 - スパッタリングシミュレーション

スパッタリングシミュレーションの構成例

- MSSM, PIC-MCCM, SPUTSM, DSMCMを組み合わせた例

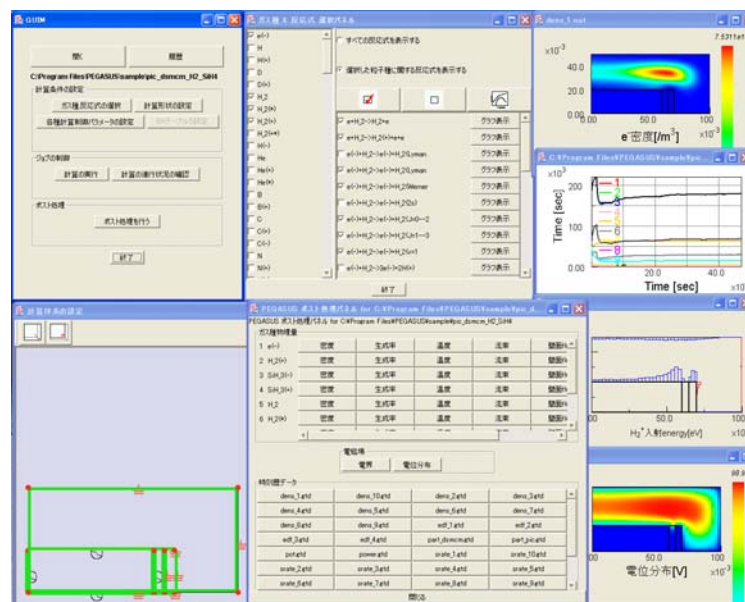


ユーザーインターフェイス GUIM

ユーザーインターフェイス GUIM

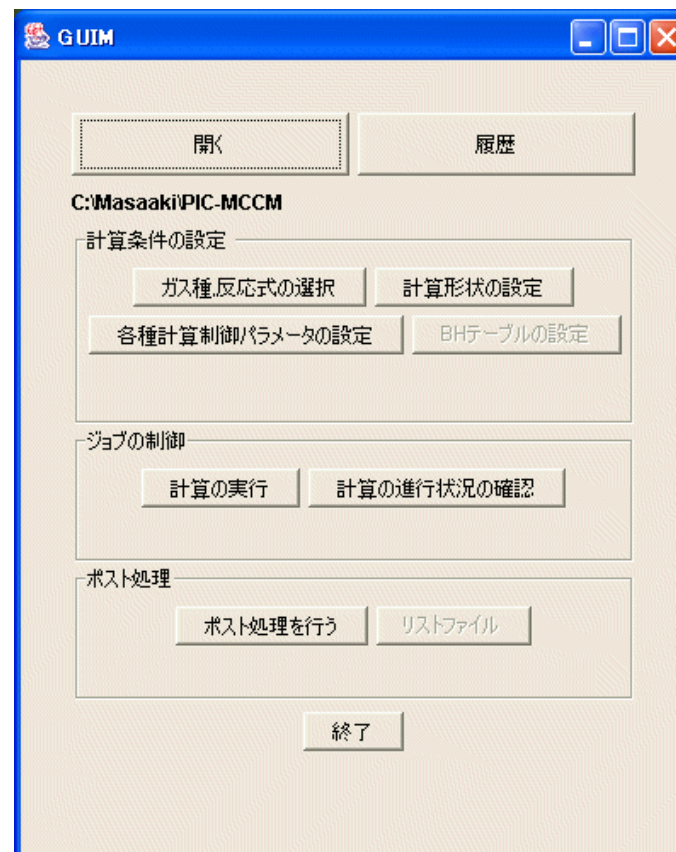


- PEGASUS専用のグラフィカルユーザーインターフェイス(標準装備)
- ガス種、反応式、装置形状などの計算条件を直感的な操作で指定できる(プリプロセッサー)
- 計算結果を簡単な操作で確認、検討できる(ポストプロセッサー)

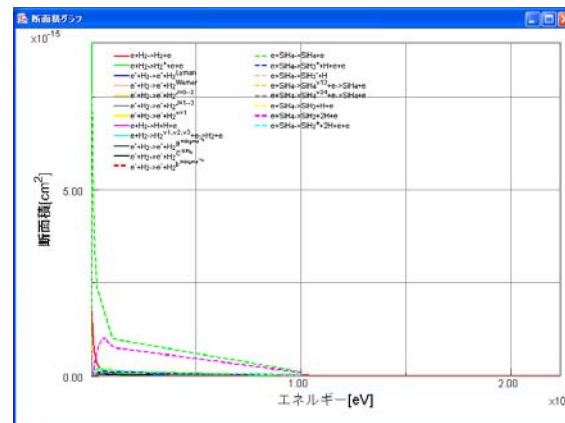
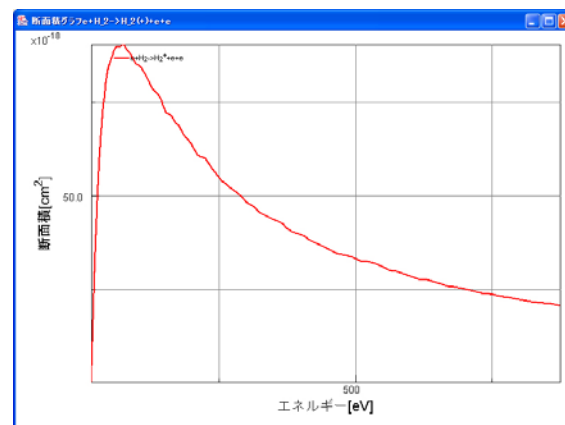


PEGASUS/GUIM(メインパネル)

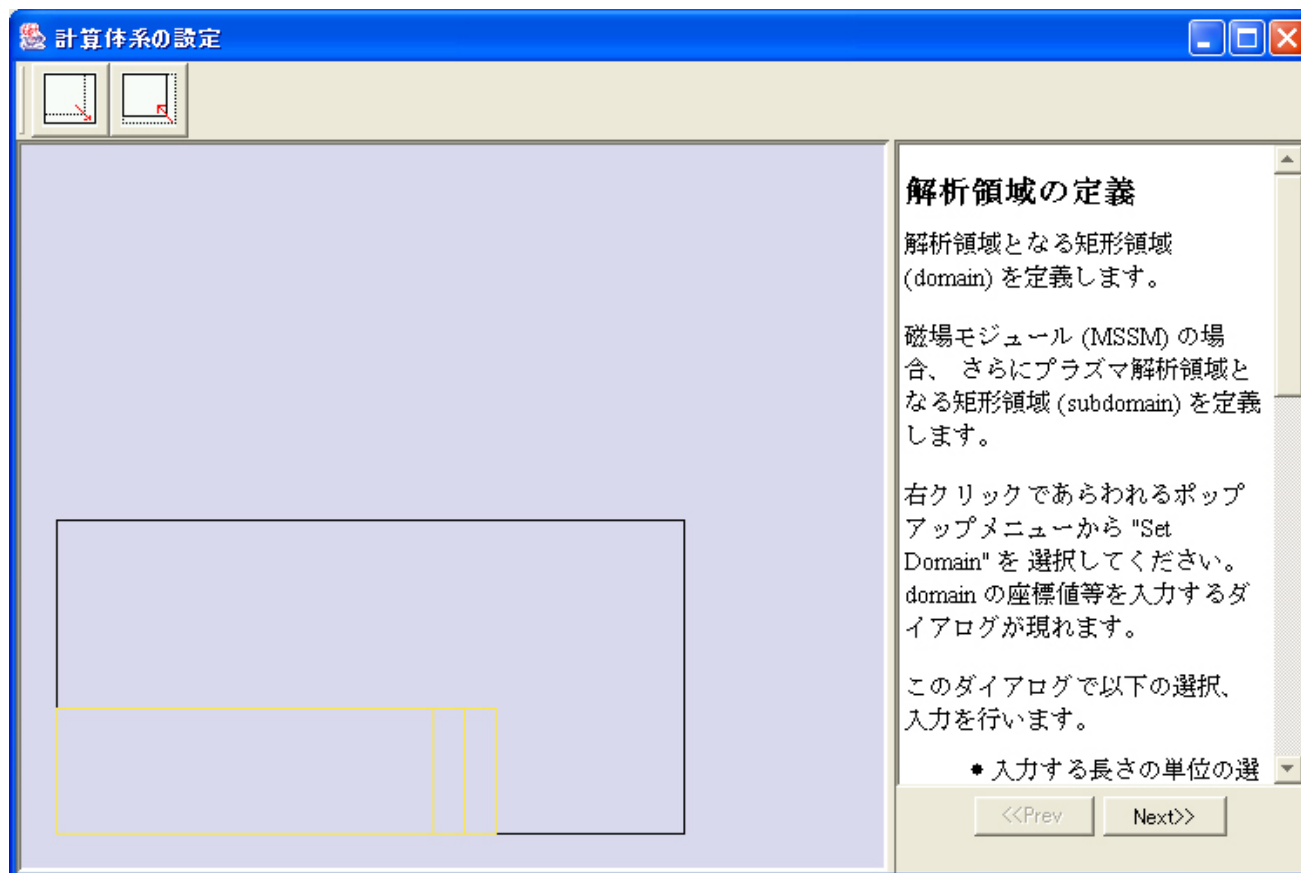
- 計算条件の設定
 - 入力データ作成
- ジョブの制御
 - モジュールの実行
 - 停止
 - ログファイル出力
- ポスト処理
 - 時刻歴データ
 - 空間分布表示



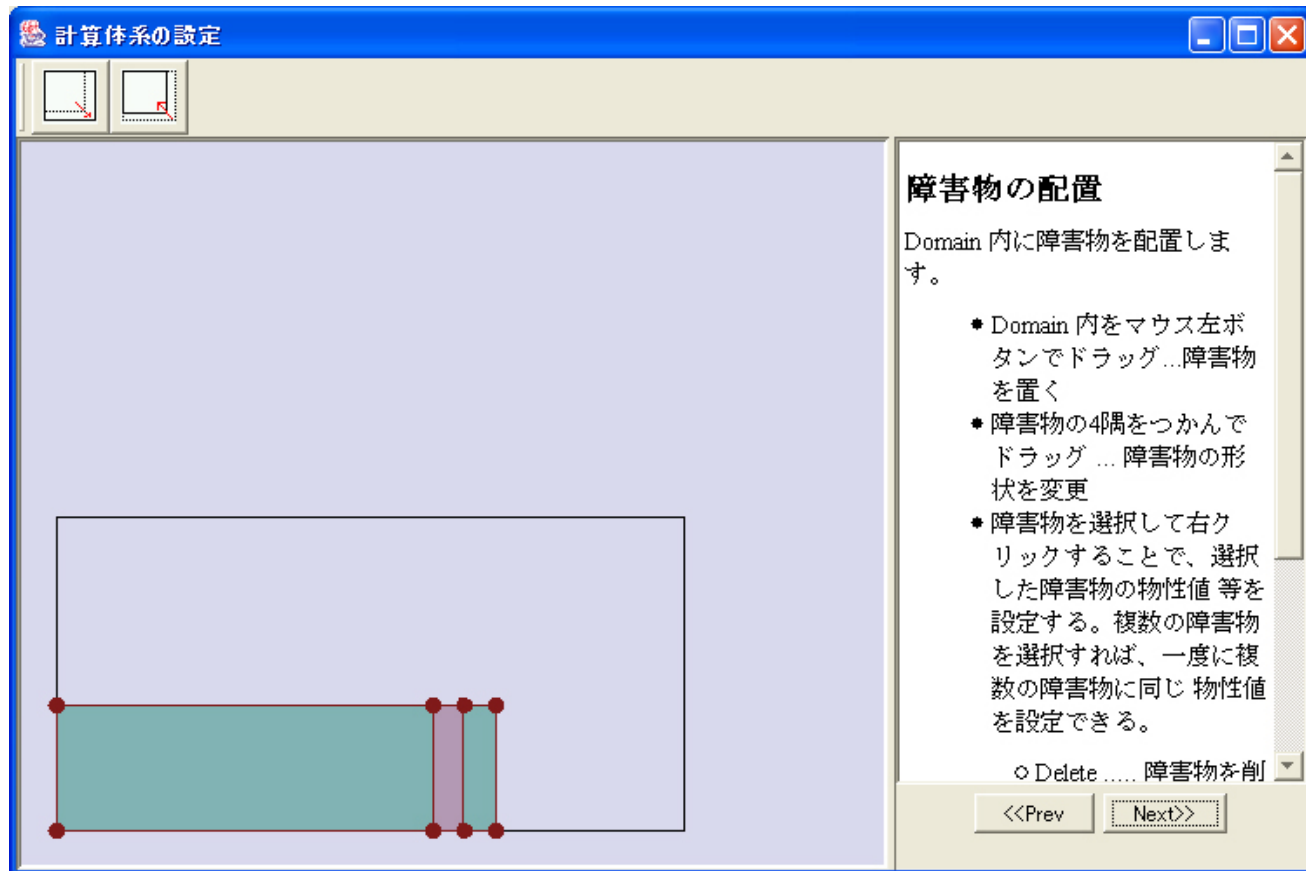
ガス種、反応式の選択



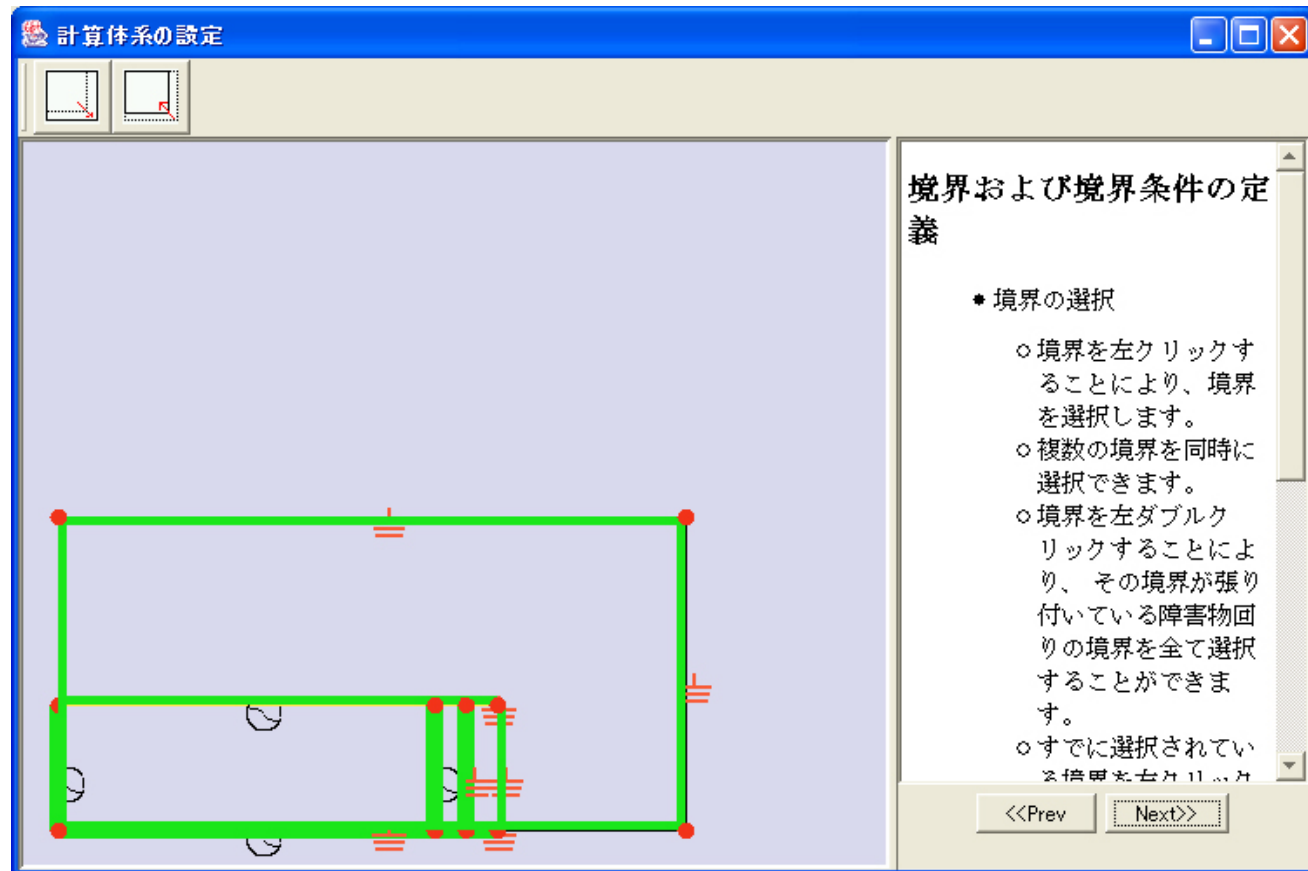
計算領域の設定



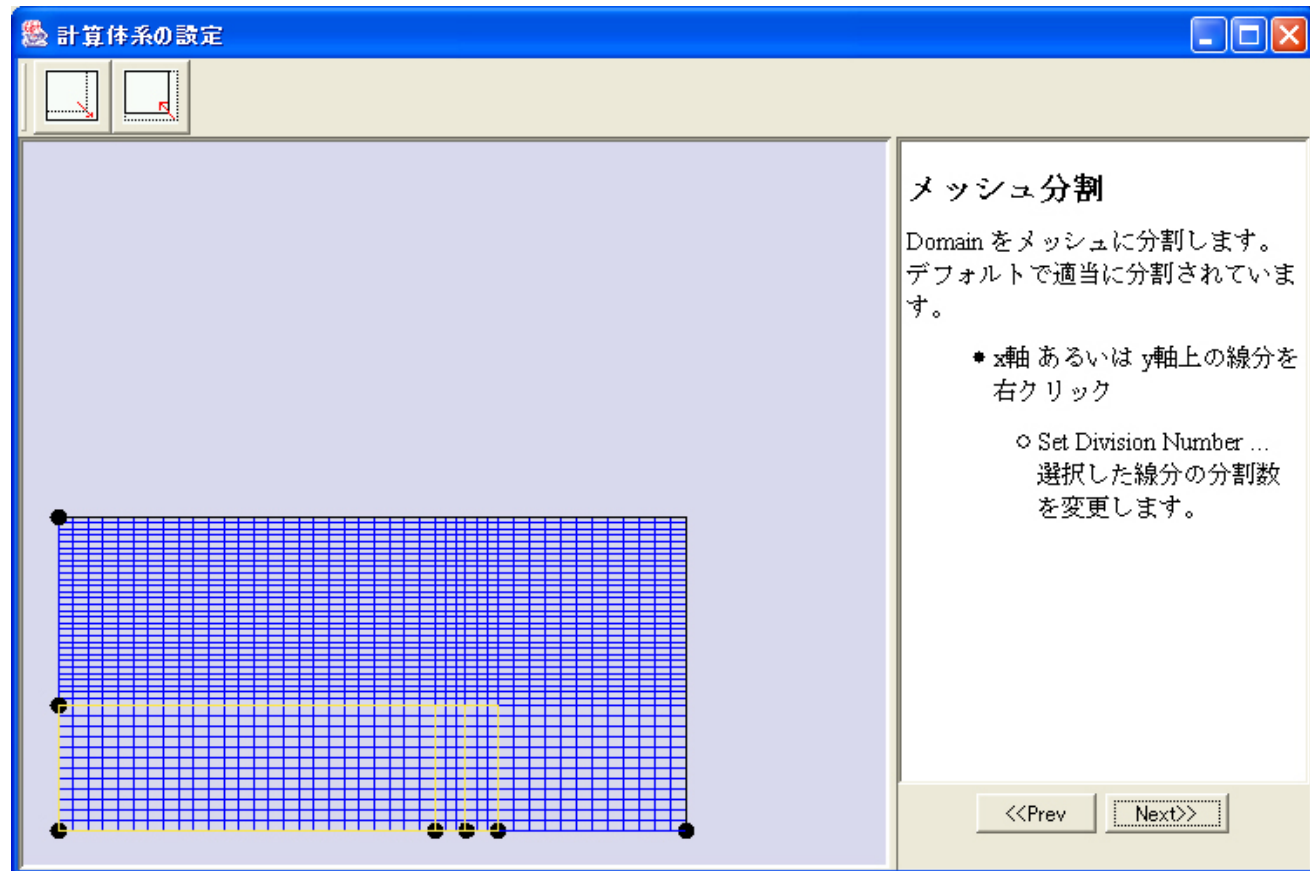
電極や誘電体などの配置



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

☐ PIC-MCCM
 ☐ NMEM
 ☐ DSMCM
 ☐ PEM
 ☐ ECSDB
 ☐ EMM

最大ステップ数
 最大超粒子数
 etd 出力間隔
 out 出力間隔

粒子種	初期密度	初期超粒子数
e(-)	1.0e15	10000
N(+)	0	0
N2(+)	1.0e15	10000
N	0.0	0
N2	3.2e20	0

外部磁場の指定

磁場データファイル名

中性ガスモジュール選択

中性粒子との反復

☐ リスタート計算を行う

PIC_dump_interval

☐ EMM計算を行う

☐ dt を fix する

smooth type2

☐ 角度分布 start end div

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

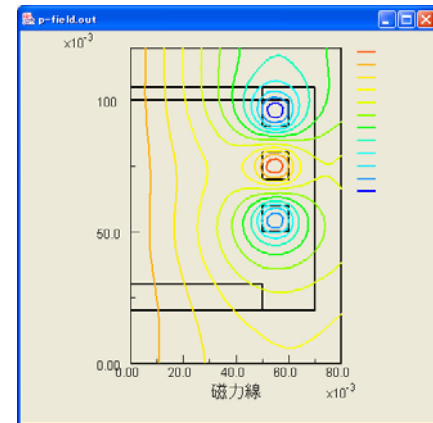
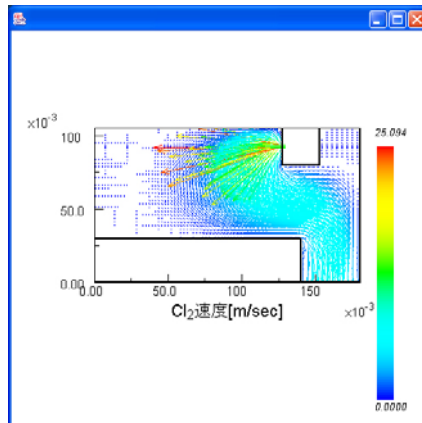
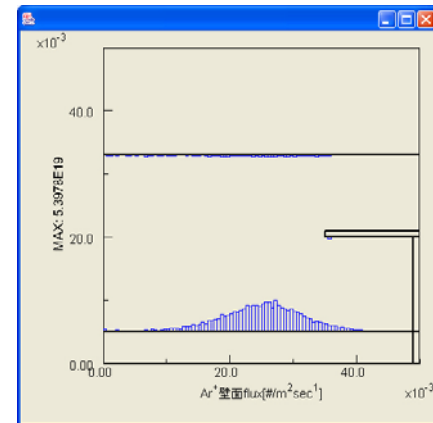
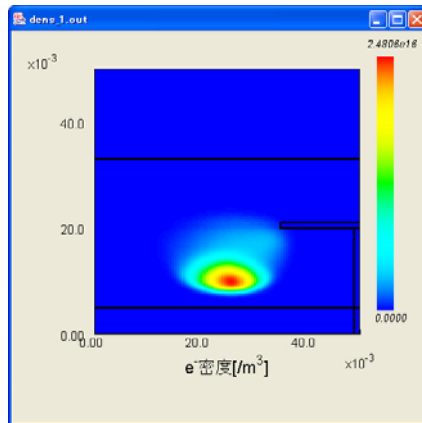
☐ PHM
 ☐ NMEM
 ☐ DSMCM
 ☐ PSM
 ☐ PEM
 ☐ EMCSM
 ☐ ECSDB
 ☐ EMM

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

初期密度の単位
 初期温度の単位

粒子種	初期密度	初期温度	初期超粒子数	マイナー?
H2	8.0e21	0.03	50000	☐
H2(*)	1.0e18	0.03	10000	☒

ポスト処理

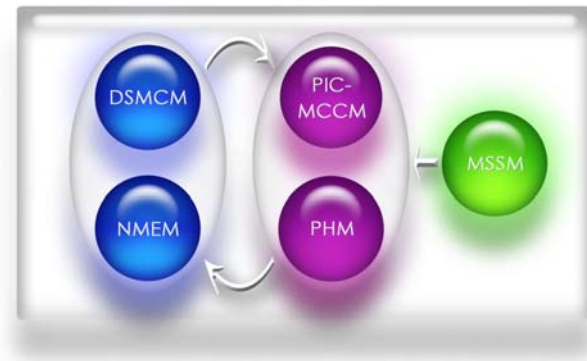


2次元気相シミュレータ概要

2次元気相シミュレータ

- 装置内の状態
 - 静磁場
 - MSSM
 - バッファガスの流れ場
 - DSMCM
 - NMEM
 - プラズマの密度分布等
 - PIC-MCCM
 - PHM
 - ラジカル種の密度分布等
 - DSMCM
 - NMEM

を計算するモジュール

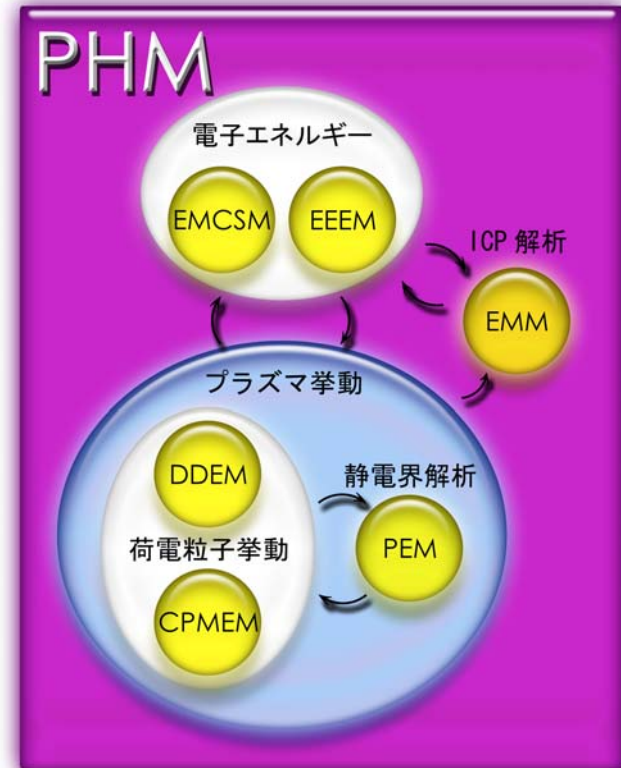


2次元気相シミュレータの構成モジュール

- 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。荷電粒子の密度は『流体近似』としたモデルを用いています。
- 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
 - 電子エネルギー方程式解法モジュール
 - ポアソン方程式モジュール
 - ドリフト・拡散モジュール
 - 運動量保存則解法モジュール
 - 誘導電界モジュール(ICPの場合)
- 2次元直交座標および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NMCM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。

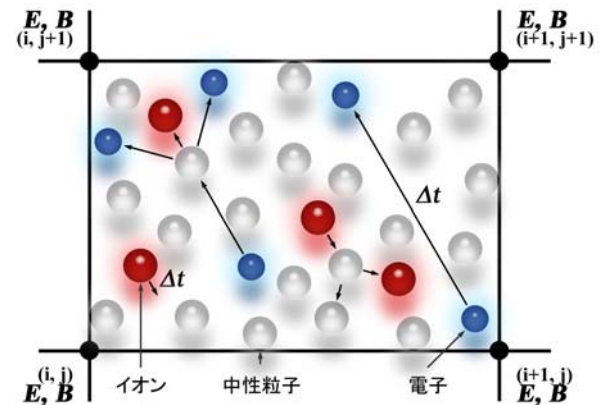
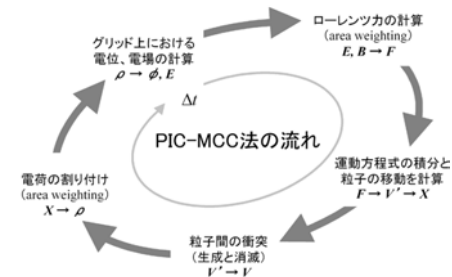


PHMの適用分野

- 以下の装置のプラズマシミュレーション
 - 容量結合型プラズマ(CCP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - 誘導結合型(ICP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置

PIC-MCCM

- PIC-MCCMは、ガス圧またはプラズマ密度の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、衝突過程を一つ一つ忠実に追跡しますので、
 - 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
 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。



PIC-MCCMの適用分野

- 以下の装置のプラズマシミュレーション
 - 容量結合型プラズマ(CCP)装置
 - 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
 - 誘導結合型(ICP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - 荷電粒子(電子もしくはイオンのみ)の挙動シミュレーション

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て、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。有限体積法によるSIMPLE法を圧縮性流体用に変形した手法を用いています。
- 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。

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

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

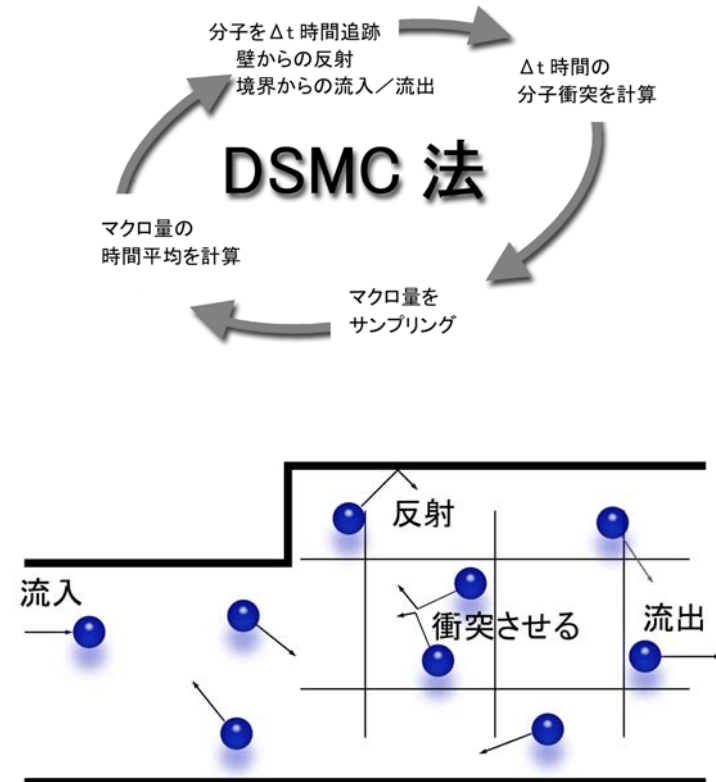
$$P_\alpha = R_\alpha \rho_\alpha T_\alpha$$

NMEMの適用分野

- 以下の装置の流れシミュレーション
 - 容量結合型プラズマ(CCP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - 誘導結合型(ICP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - 各種真空装置

DSMCM

- DSMCMは、多数のサンプル粒子を解析空間に配置し、それらの衝突を物理モデルに従って確率的に引き起こし、その運動を追跡する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。
- 気体を連続体と見なせる指標 Kn (クヌーセン数) が大きな流れ場 (中間流、自由分子流) の解析を得意としています。
- DSMC法は原理的に低圧から高圧の気体の流れ場を解析できますが、計算量の問題から、低圧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。

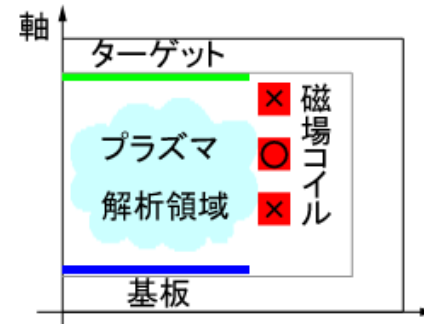
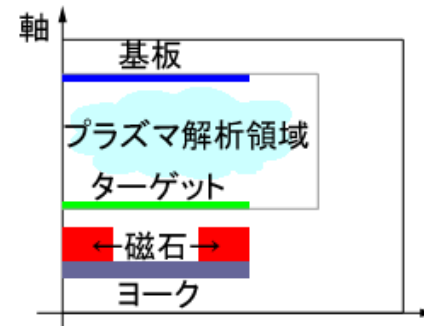


DSMCMの適用分野

- 以下の装置の流れシミュレーション
(希薄気体条件: ガス圧力[Torr] × 装置の代表長さ[mm] < 5 [Torr・mm])
 - 容量結合型プラズマ(CCP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - マグネトロンスパッタ装置
 - 誘導結合型(ICP)装置
 - PECVD装置
 - エッチング装置
 - 各種真空装置
- ナノスケール表面への粒子輸送シミュレーション

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、有限会社ミューテ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



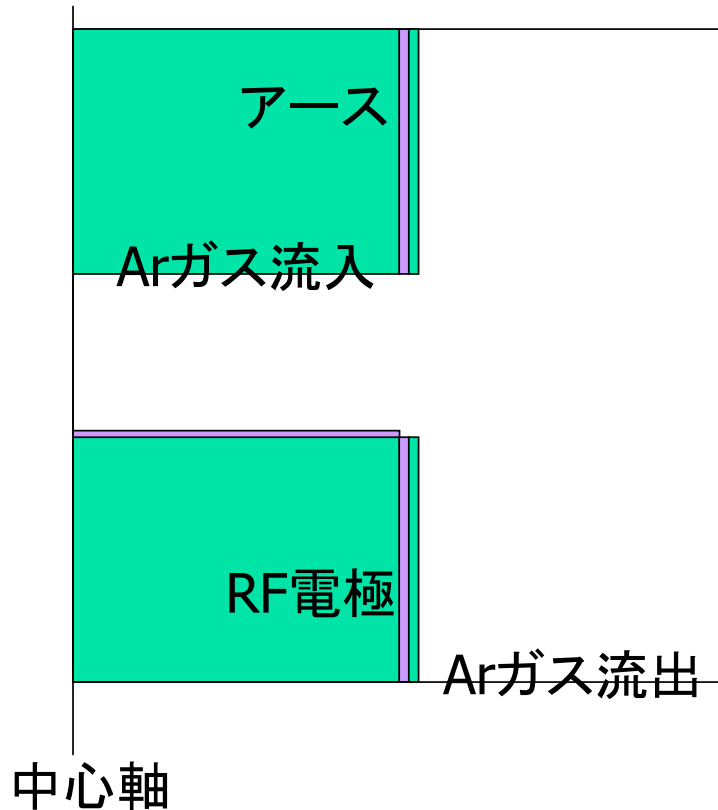
2次元気相シミュレータ概要

各モジュール単体／組み合わせ
計算例

2次元気相シミュレータ 単体／組み合わせ計算例 1

GECRC型の装置
PIC-MCCM
DSMCM

PIC-MCCM+DSMCM GEC-RC型の装置

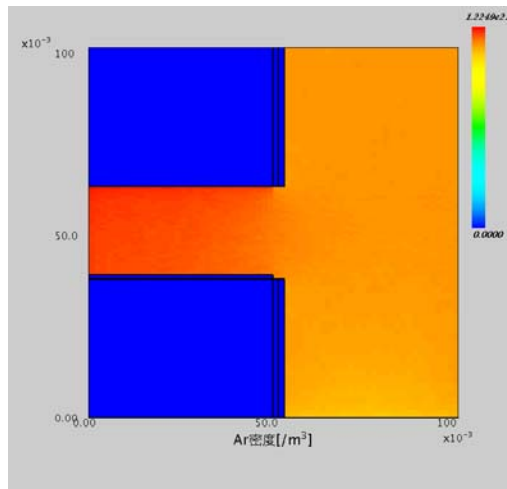


- 印加電圧 $V_{rf}=100[V]$
- ガス圧 およそ $40[mTorr]$
(DSMCMで計算)
- 反応式
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar$ (弾性散乱)
 - $e^- + Ar \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^*$ (励起)
 - $e^- + Ar \rightarrow e^- + Ar^{4s}$ (励起)
 - $e^- + Ar^{4s} \rightarrow 2e^- + Ar^+$ (電離)
 - $Ar^+ + Ar \rightarrow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

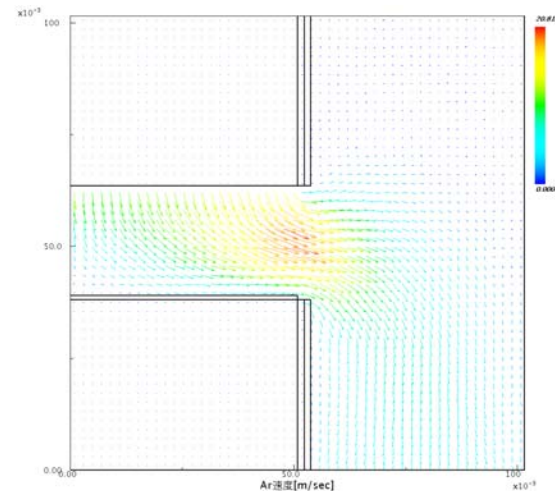
PIC-MCCM+DSMCM GEC-RC型の装置

Step1. DSMCM によるArバッファガスの流れ場の計算

計算時間 : Alpha 21264 500MHz の計算機で3時間



Ar密度分布



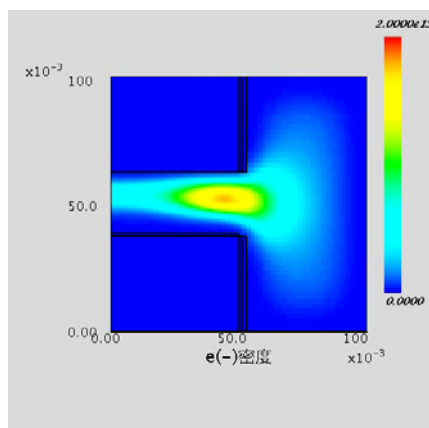
Ar速度分布

PIC-MCCM+DSMCM GEC-RC型の装置

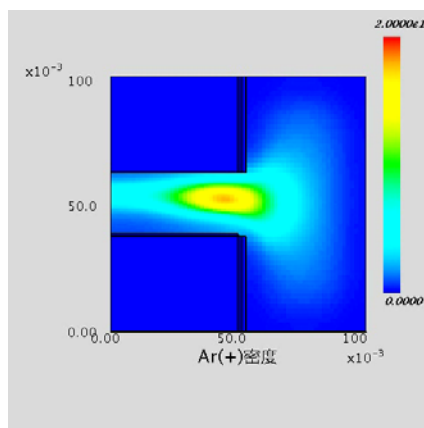


Step2. PIC-MCCM+DSMCM による プラズマ、励起種の計算

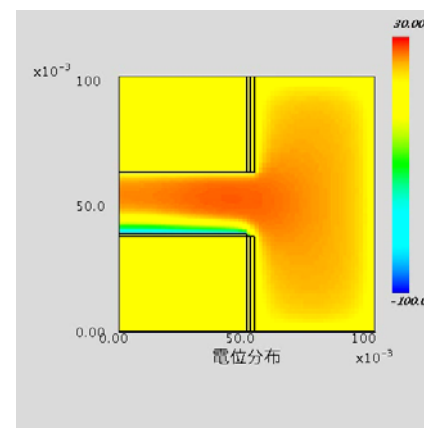
計算時間：Alpha 21264 500MHz の計算機で12時間



電子密度分布



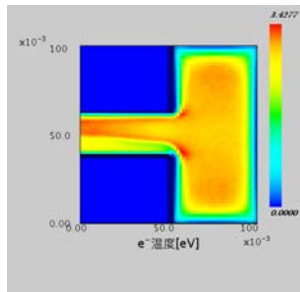
イオン密度分布



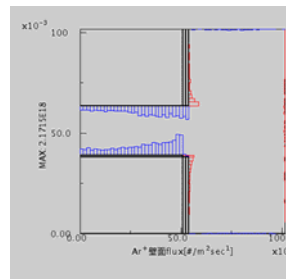
電位分布

PIC-MCCM+DSMCM GEC-RC型の装置

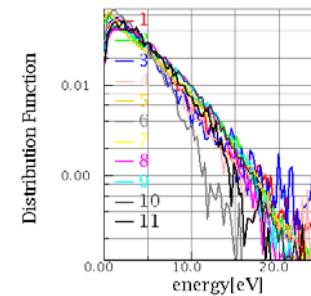
PIC-MCCM 単体で計算できる物理量の一例



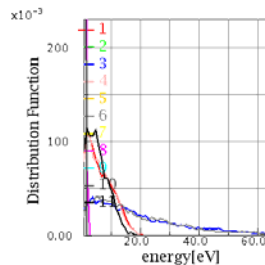
電子温度空間分布



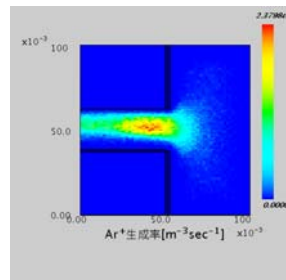
基板へのイオンフラックス



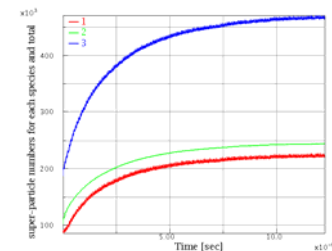
電子エネルギー分布



イオンエネルギー分布



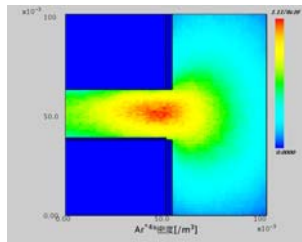
電離率空間分布



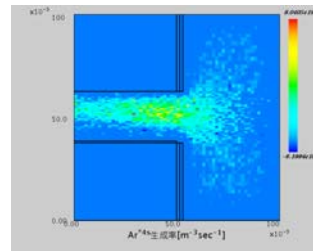
サンプル粒子数の時間変化

PIC-MCCM+DSMCM GEC-RC型の装置

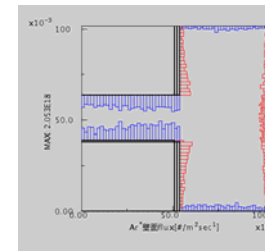
PIC-MCCMとDSMCMを組み合わせたときに計算できる物理量の一例



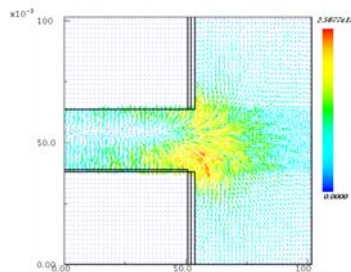
Ar^{4s}密度分布



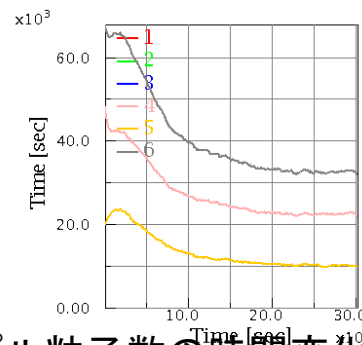
Ar^{4s}生成率分布



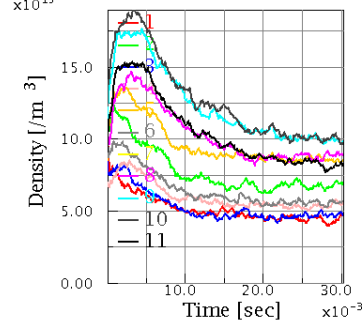
基板へのフラックス



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

2次元気相シミュレータ 単体／組み合わせ計算例 2

マグネトロンスパッタ装置

MSSM

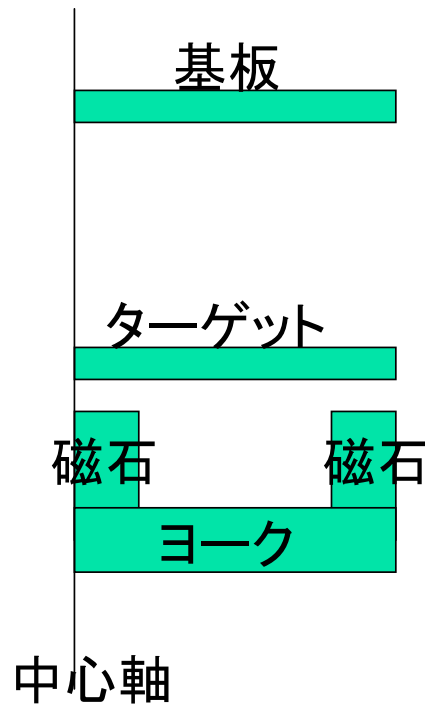
PIC-MCCM

SPUTSM(表面科学系)

DSMCM

MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM

マグネトロンスパッタ装置



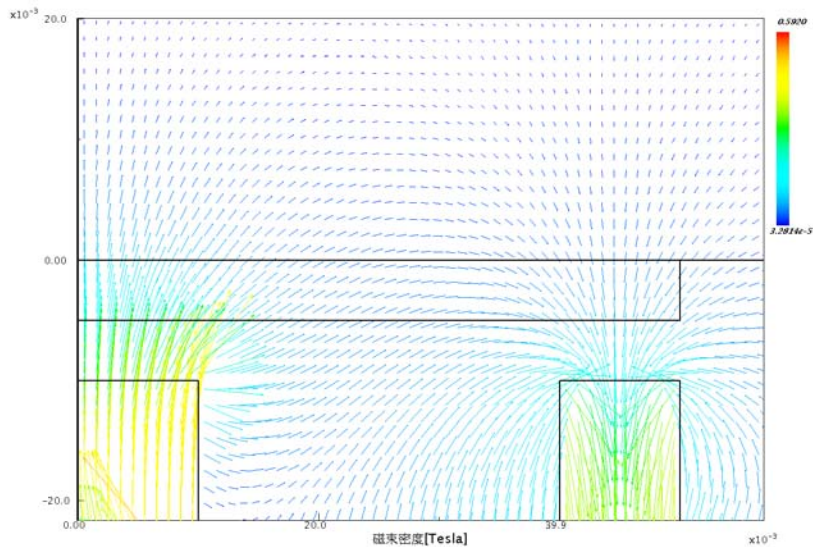
- バッファガス Ar 5mTorr
- 印加電圧 $-400[V]$

MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM

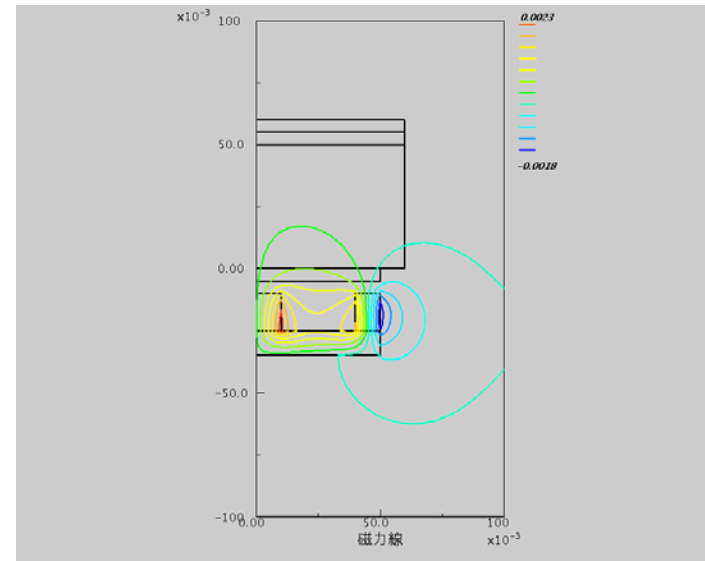
マグネトロンスパッタ装置

Step1. MSSM による静磁場解析

計算時間 : PenIII 850MHz の計算機で 10秒



磁束密度分布



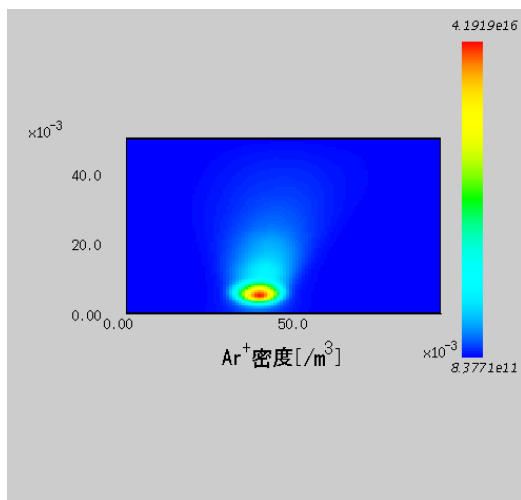
磁力線

MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM マグネトロンスパッタ装置

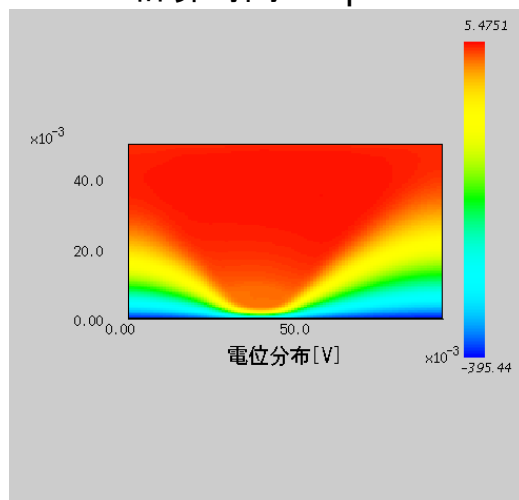


Step2. PIC-MCCM によるプラズマ解析

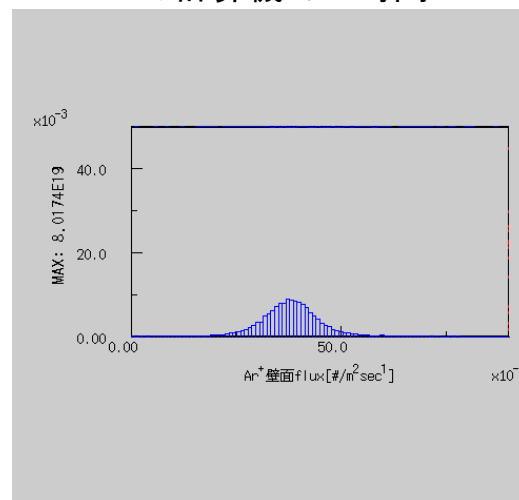
計算時間：Alpha 21264 500MHz の計算機で18時間



Ar⁺密度分布



電位分布



Ar⁺ ターゲットへの
フラックス分布

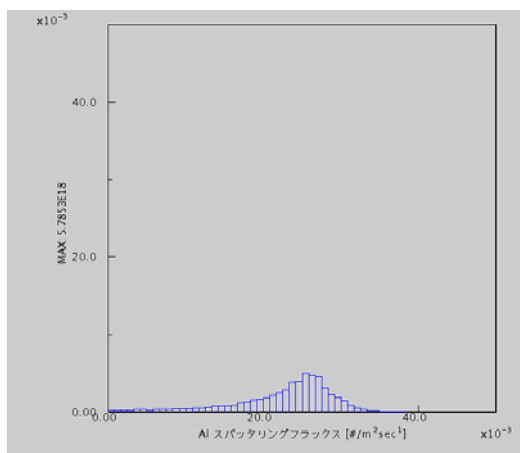
MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM

マグネトロンスパッタ装置

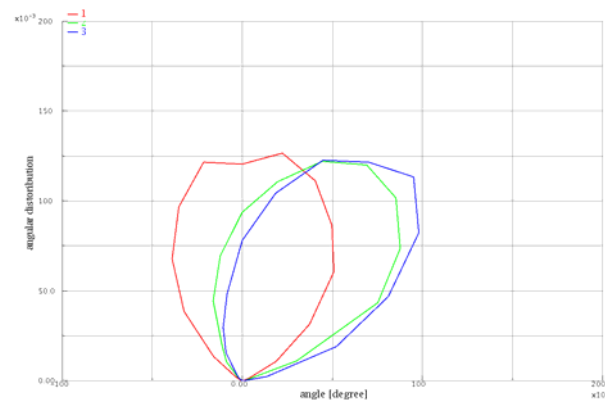


Step3. SPUTSMによるスパッタリングシミュレーション

計算時間：PentiumIII 850MHz の計算機で20分



スパッタリングフラックス分布
(ターゲットの損耗分布)

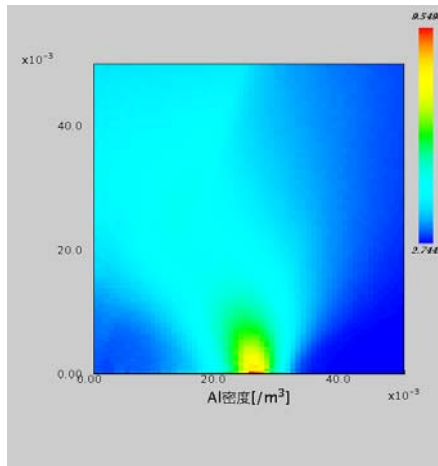


スパッタリング粒子放出角度分布

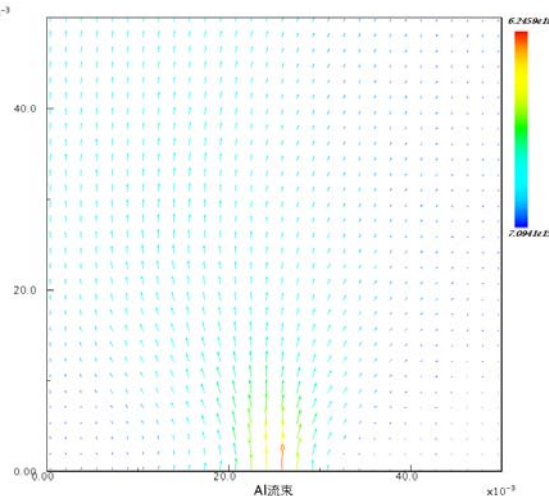
MSSM+PIC+SPUTSM+DSMCM マグネトロンスパッタ装置

Step4. DSMCM によるスパッタ粒子の挙動解析

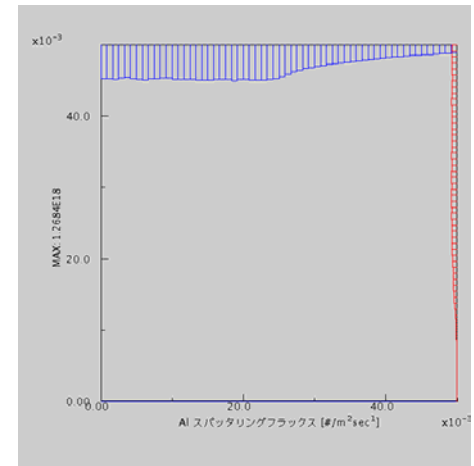
計算時間：Alpha 21264 500MHz の計算機で10分



スパッタ粒子(Al)の
密度分布



Al 空間フラックス分布



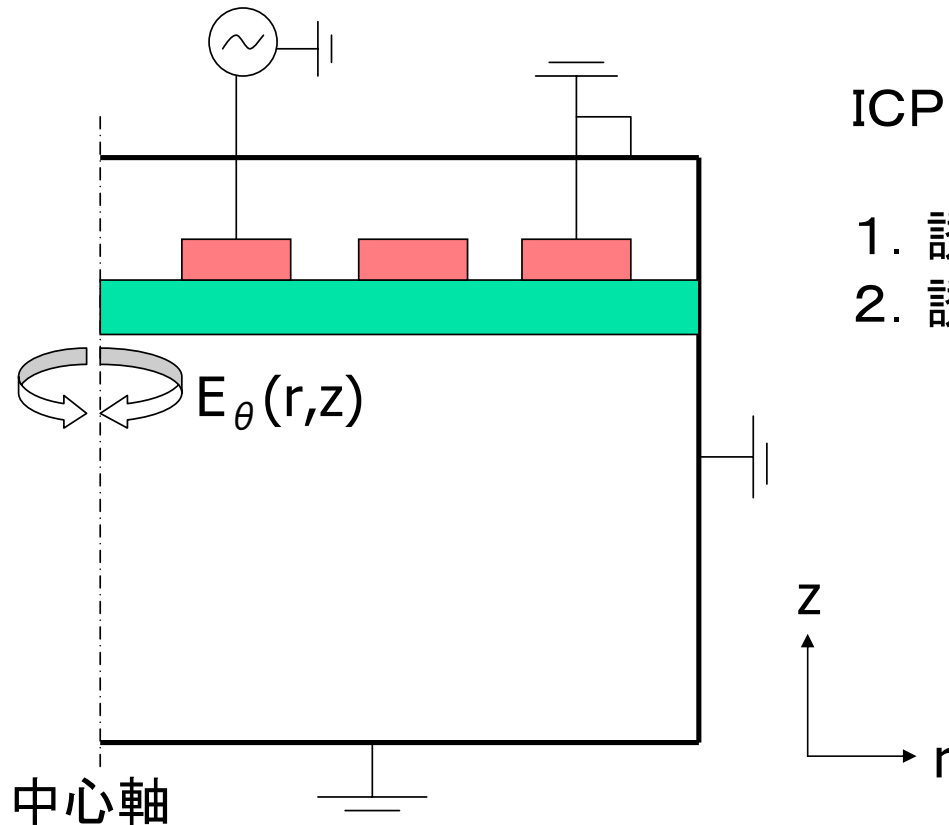
Al 基板へのフラックス分布

2次元気相シミュレータ 単体／組み合わせ計算例 3

ICP型装置
PHM
DSMCM

PHM+NMEM

ICP型装置



ICP固有の入力条件:

1. 誘導コイルパワー(W)
2. 誘導コイル周波数

PHM ICP型装置

- 入コイル入力パワー: 500 [W]
- 周コイル周波数 : 13.56 [MHz]
- ガス圧 : O₂ / 10 [mTorr]
 - STEP-1) DSMCMによりO₂密度分布を計算

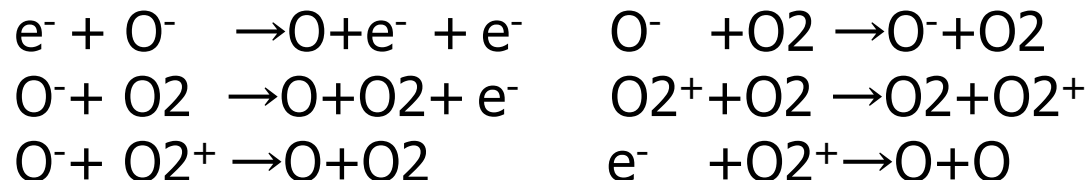
反応式：

<電子衝突断面積>

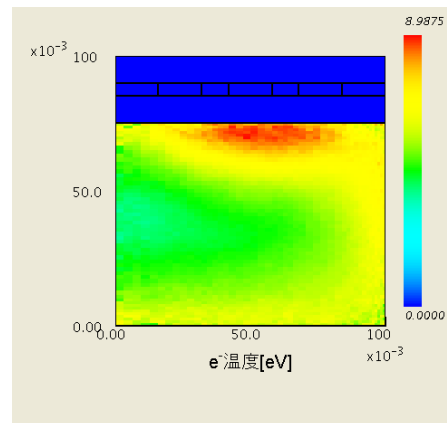
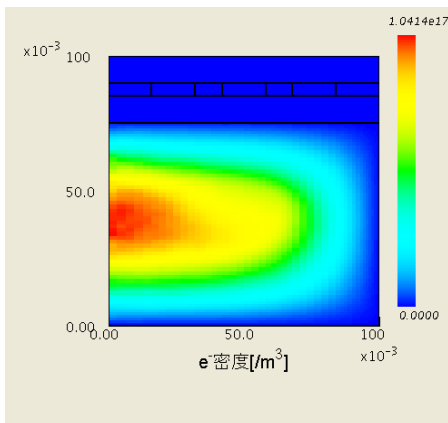
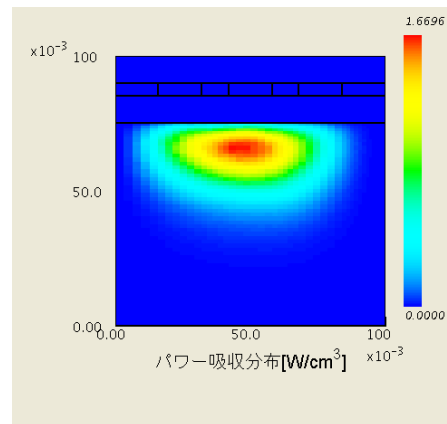
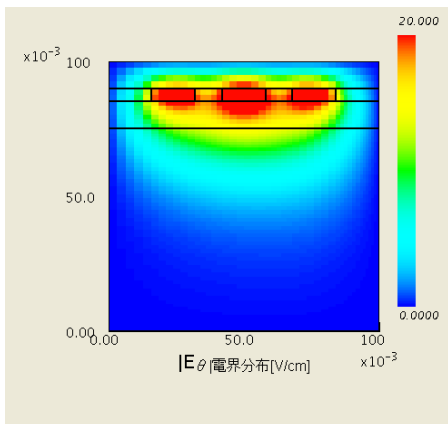


($e^{-} + O_2$ に関して他に励起、弾性衝突13種)

<反応レート定数>

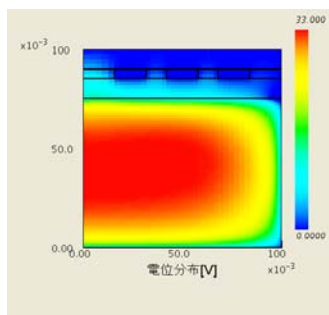


PHM ICP型装置

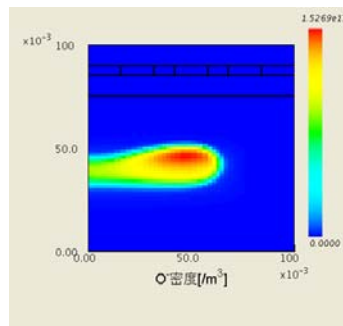


PHM ICP型装置

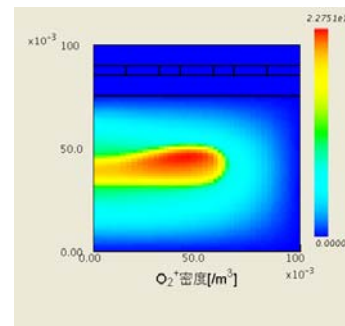
- PHM 単体で計算できる物理量の一例



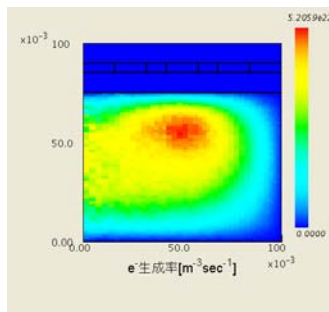
電位分布



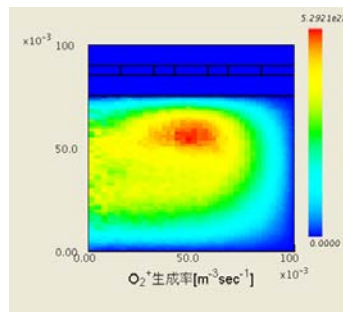
$O(-)$ 密度分布



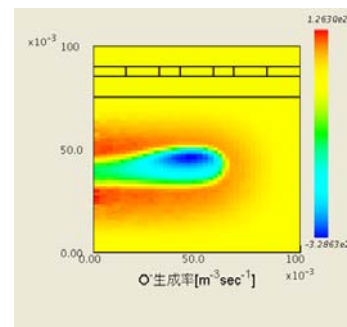
$O_2(+)$ 密度分布



電子生成率分布



$O_2(+)$ 生成率分布



$O(-)$ 生成率分布

表面科学系シミュレータ概要

表面科学系シミュレータ

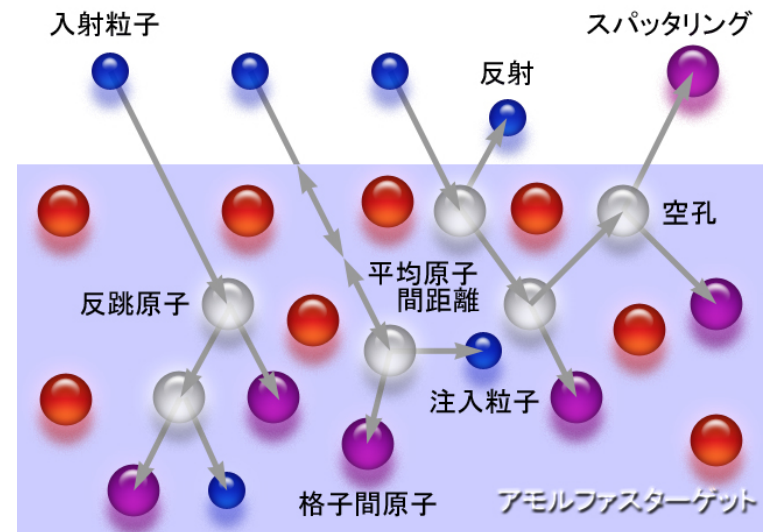
- 材料表面で生じる現象
 - サブミクロンスケールでの形状変化
 - SPSM(表面形状シミュレーションモジュール)
 - ラジカルやイオンのフラックス、および表面反応モデルを与えて、2D/3Dの形状変化を計算する。
 - スパッタリング現象、イオン注入
 - SASAMAL, SPUTSM, IPSM
 - スパッタリング率やDepth Profile を求め
 - イオン注入
 - シースを通して表面に達する荷電粒子
 - SMCSM(シース内モンテカルロシミュレーションモジュール)
 - シース内の荷電粒子の運動を追跡してイオンエネルギー分布関数等を求める。



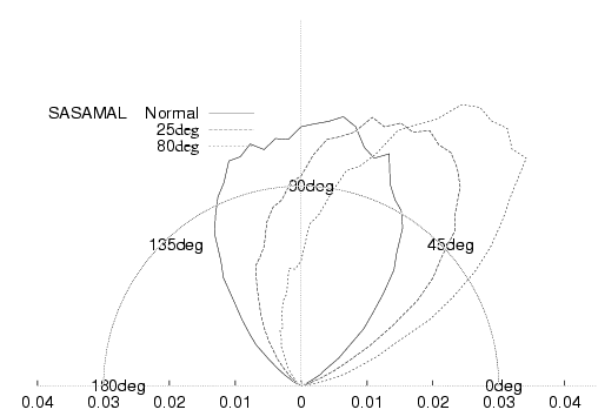
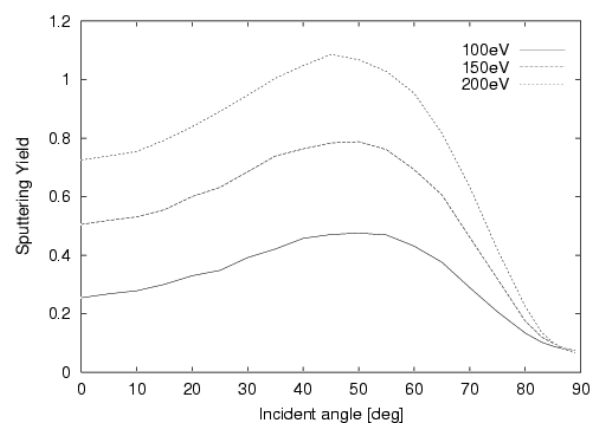
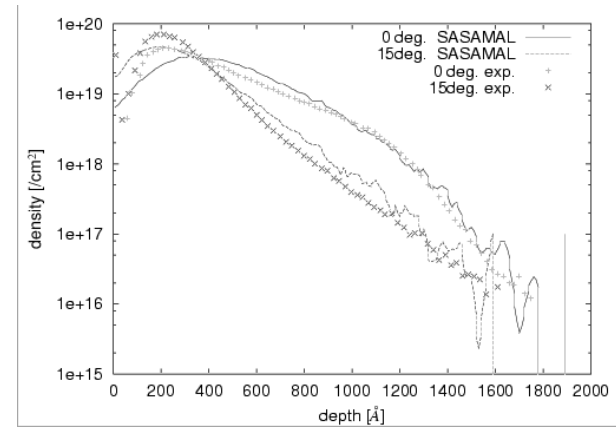
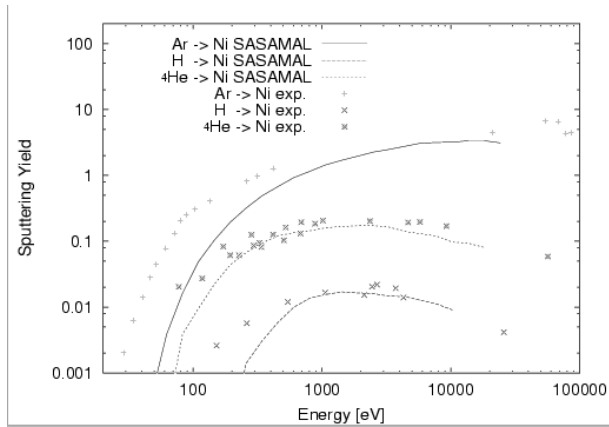
についてシミュレーションを行うモジュール群

SASAMAL、SPUTSM、IPSM

- 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変化
 - 入射イオンのDepth Profile

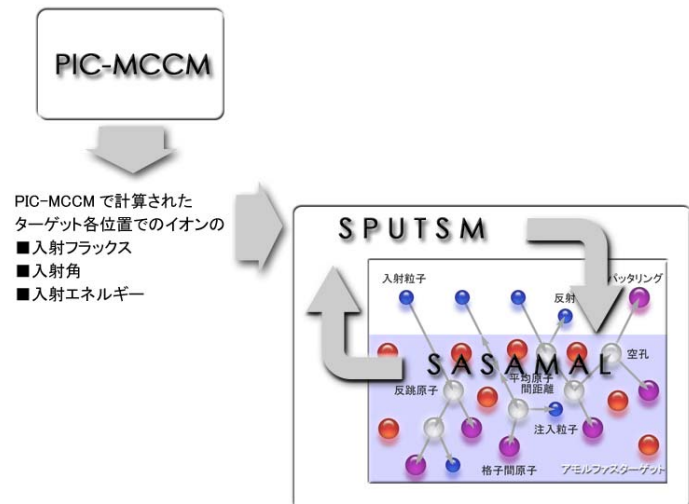


SASAMAL(出力例)



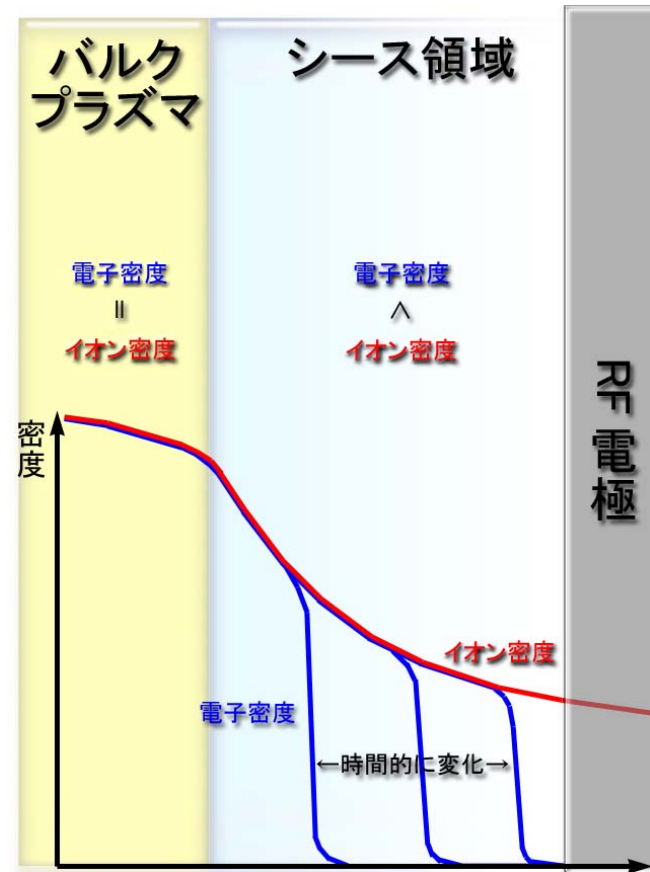
SPUTSM

- 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。

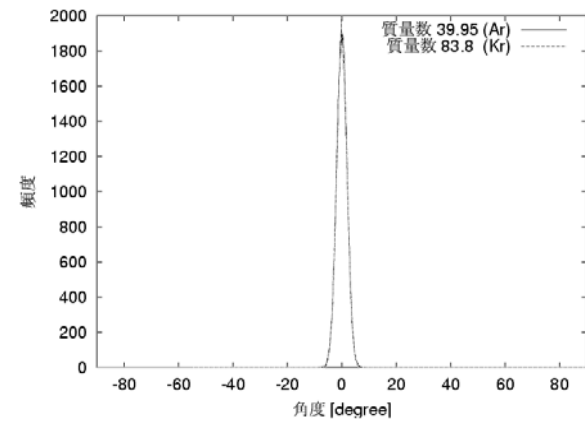
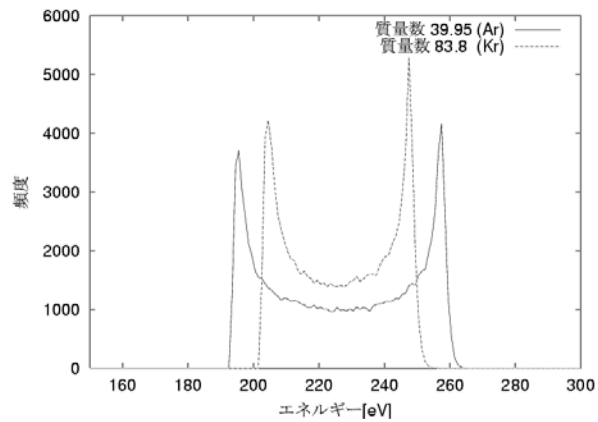
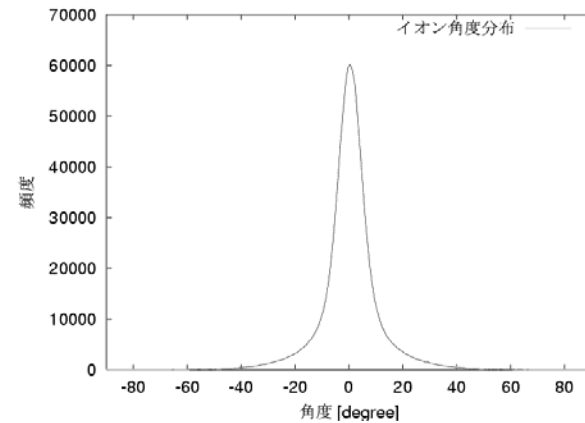
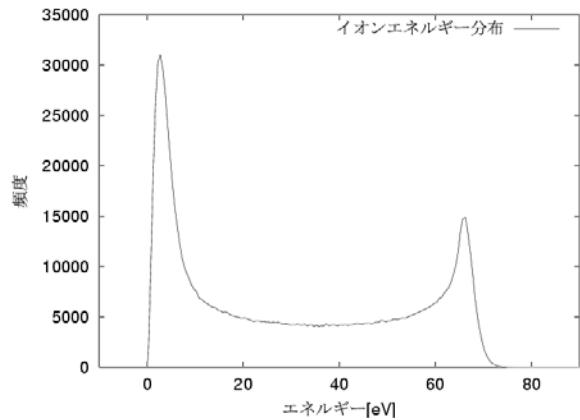


SMCSM

- 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

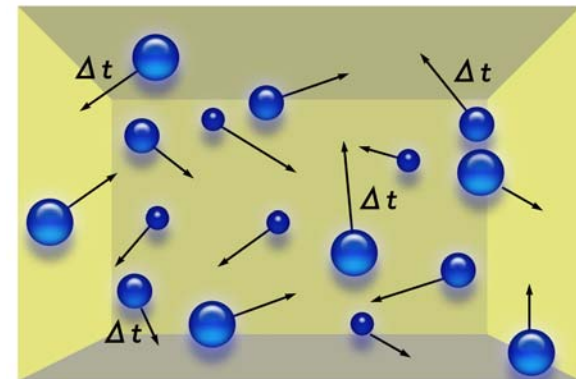
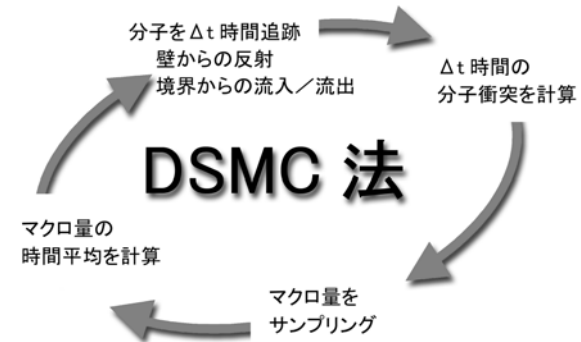
- GUI機能／プレポスト機能
 - 付属のGUIツール(GUIM)を使用
 - 任意の断面グラフ表示、GIFデータ出力、印字出力、テキストデータ入出力、画面表示の任意拡大機能ほか
- オペレーティングシステム
 - Intel系CPU WindowsNT/2000/XP、Linux
 - EWS Tru64 UNIX、Digital UNIX v4.0D以上
- メモリー容量 512MB以上推奨
- ハードディスク容量 20GB以上推奨
- ※主に作業領域、プログラムは200MB
- その他 Java実行環境

3次元希薄気体挙動解析ソフトウェア RGS3D

RGS3Dの概要

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 $\cdot$ 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



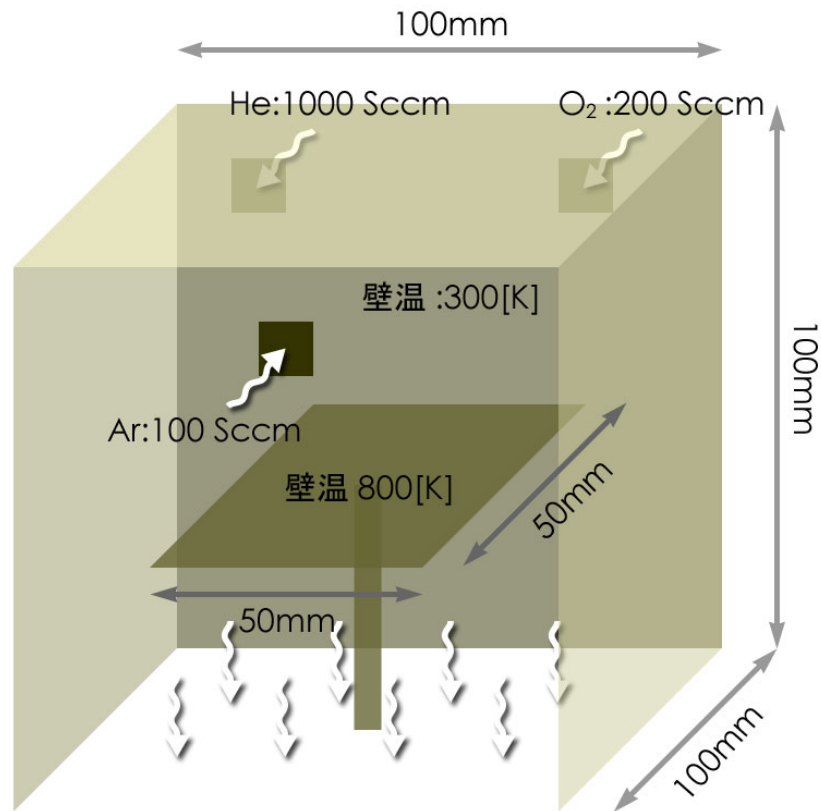
機能

- 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

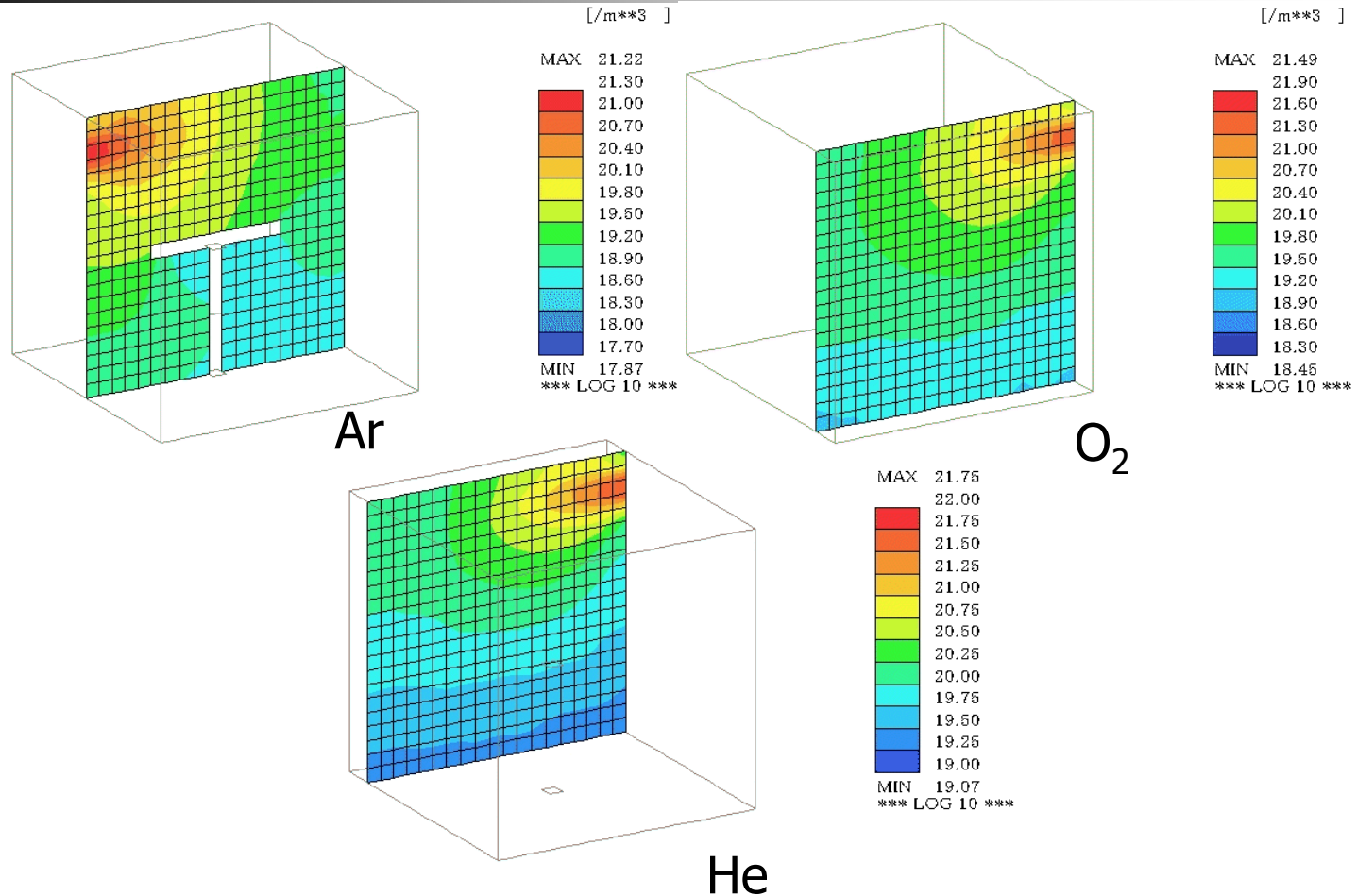
特長

- 重み付法により、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

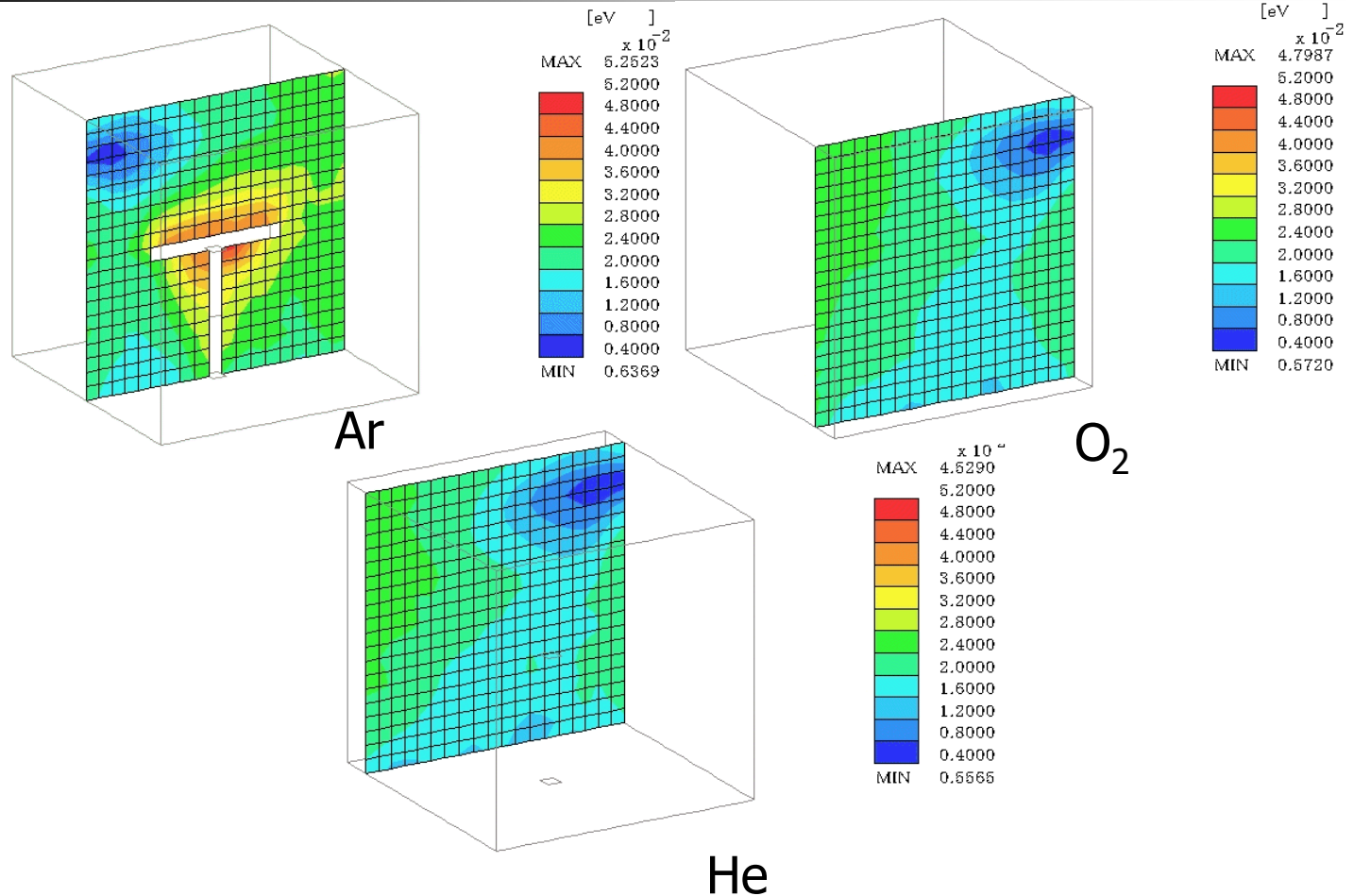
解析モデル



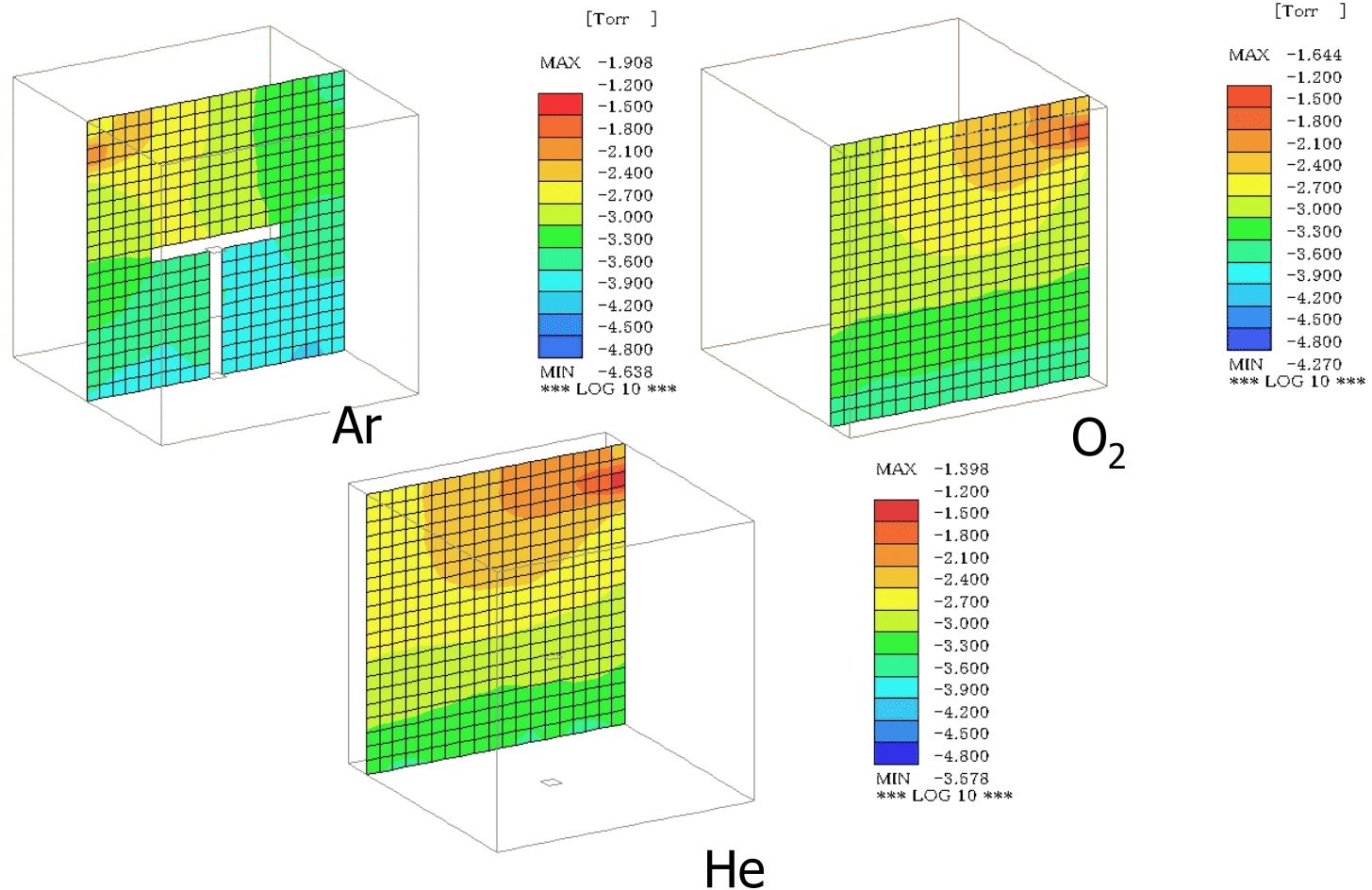
密度分布



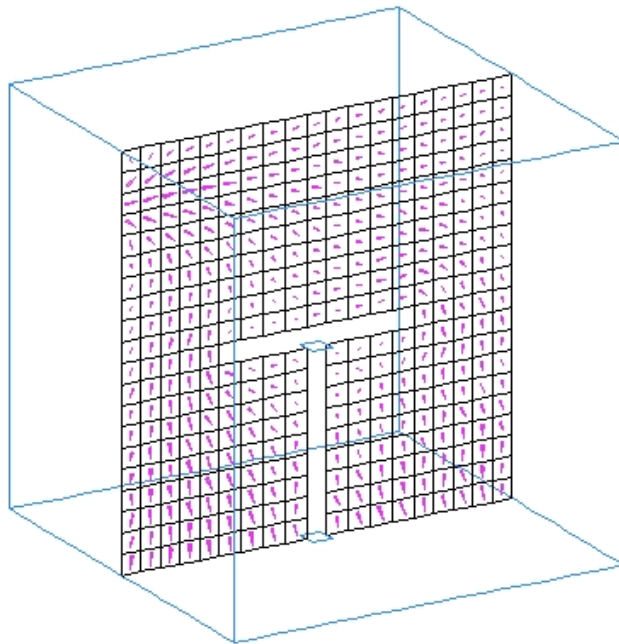
温度分布



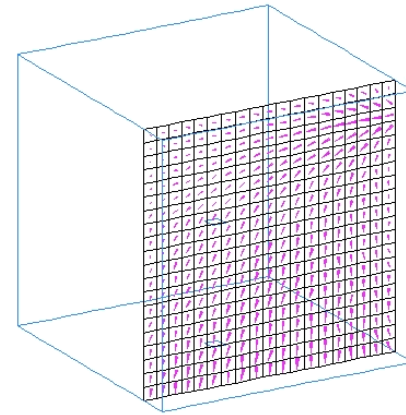
压力分布



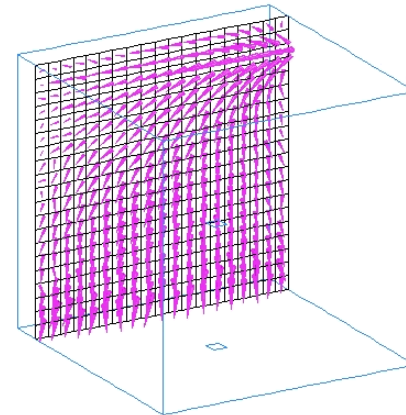
速度分布



Ar



O₂



He

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
- インターフェイス
 - ユニバーサルファイル、NASTRANフォーマットでの入出力が可能
 - 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
- 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

お問い合わせ

- ペガサスソフトウェア株式会社

- 営業本部

- 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/>