

2016/3/20

第63回応用物理学会春季学術講演会

20p-W621-6

プラズマプロセスにおける シミュレーション

ペガサスソフトウェア(株)

松永 史彦

PEGASUS とは

希薄気体の流れやプラズマ内で起きる現象を数値シミュレーションによって模擬するソフトウェア群.

プリ・ポスト処理

GUIM

荷電粒子流れ解析

PIC-MCCM (粒子) 2D/3D

PHM (流体・ハイブリッド) 2D
(3D開発中)

中性粒子流れ解析

DSMCM (粒子) 2D/3D

NMEM (流体) 2D (3D開発中)
RGS3D (粒子)

両極性拡散モデル

ADM3D (流体)

静磁場解析

MSSM2D/3D

表面解析

SMCSM SASAMAL SPUTSM

表面形状解析

FPSM2D/3D

電子輸送パラメータ

TTBEQ

データベース

原子/分子 衝突断面積
反応レート係数

・静磁場解析のものを除いてすべて自社開発.

プラズマプロセス技術

- ・プラズマCVD(化学蒸着)による薄膜の堆積
- ・ドライエッチングによる薄膜の加工
- ・スパッタリング粒子による薄膜の堆積(物理蒸着PVD)
- ・ガス圧数 Torr 以下の容器内に原料となるガスを投入し, 適当な方法で電力を供給して放電を起こしプラズマを生成する. そこで生成されるラジカル種やイオンを利用して薄膜の堆積や加工をおこなう.
- ・成膜速度, 均質性, 選択性を良くしたい. そのためには基板やターゲット表面における粒子フラックスや粒子のエネルギー分布を定量的に把握する必要がある.

 数値シミュレーション

プラズマ中で起こっている現象

- ・粒子(電子/イオン/分子・原子)の輸送
- ・エネルギーの輸送
- ・各種衝突(反応)
 - 電子－電子 電子－イオン 電子－分子
 - イオン－分子 分子－分子
 - 衝突による粒子の生成/消滅とエネルギー交換
- ・電場による荷電粒子の加速
- ・固体表面における反応
- ・現象の時間スケールが広範囲にわたる:
 - 電子の輸送 ns
 - イオンの輸送 μ s
 - 分子の輸送 ms
- ・電極近傍にシースと呼ばれる(リアクターサイズに比べて)うすい領域が生成される.

非平衡・低温プラズマ

- ・プラズマプロセスで利用されるプラズマ(電子)密度:

$$n_e = 10^{15} \sim 10^{18} \text{ [}/\text{m}^3\text{]} \text{程度.}$$

ガスの圧力を100mTorr(13.3Pa), 温度を室温と仮定すると
ガスの密度は $n_g = 3.2 \times 10^{21} \text{ [}/\text{m}^3\text{]}$, $n_e = 10^{16} \text{ [}/\text{m}^3\text{]}$ とすると

$$\text{電離度} \equiv n_e/n_g = 3 \times 10^{-6} \text{ (弱電離プラズマ)}$$

- ・弱電離プラズマなので荷電粒子はほとんど中性粒子と弾性衝突してエネルギーを交換する.
- ・1回の弾性衝突において, 衝突粒子が失う運動エネルギーは, 衝突相手の粒子との質量比程度:

$$m_e/m_g < 10^{-3} \quad m_i/m_g \sim 1$$

電子は電場から獲得したエネルギーをほとんど損失しないので, ガスの温度より高い温度となる. イオンは中性粒子とのエネルギー交換率が大きいののでガスと同程度の温度になる: $T_e (1\text{-}10 \text{ eV}) \gg T_i \sim T_g (0.03\text{eV})$

プラズマ数値シミュレーションの方法

- 粒子モデル(PIC-MCC, DSMC)
- **流体モデル**
- ハイブリッドモデル(流体モデル＋粒子モデル)
- クヌッセン(Knudsen)数 $Kn = \lambda/L$
 - λ : 平均自由行程(mean free path)
 - L : 系の代表長さ(電極間距離など)

$Kn \ll 1$ ($Kn < 0.2$ 程度) であれば流体モデルが適用できる.
- ガス分子半径: 2 Å, ガス温度: 400 K と仮定して圧力を P [Pa] とすると
 - 電子に関して $\lambda = 4.4 \times 10^{-2}/P$ [m]
 - イオンに関して $\lambda = 7.78 \times 10^{-3}/P$ [m]
 - 電子に関して $Kn=0.044/PL < 0.2 \Rightarrow L=0.1\text{m}$ とすると
 - $P > 2.2$ Pa
- 圧力が数Pa以上であれば流体モデルが適用できる.

流体モデルで用いる物理量

- 物理量は空間に分布する連続量と考える。
(位置ベクトル $\mathbf{r}$ と時間 t の連続関数)

数密度 n_α [$/\text{m}^3$]

速度 $\mathbf{v}_\alpha$ [m/s]

内部エネルギー $\varepsilon_\alpha = C_{v\alpha} T_\alpha$ [J]

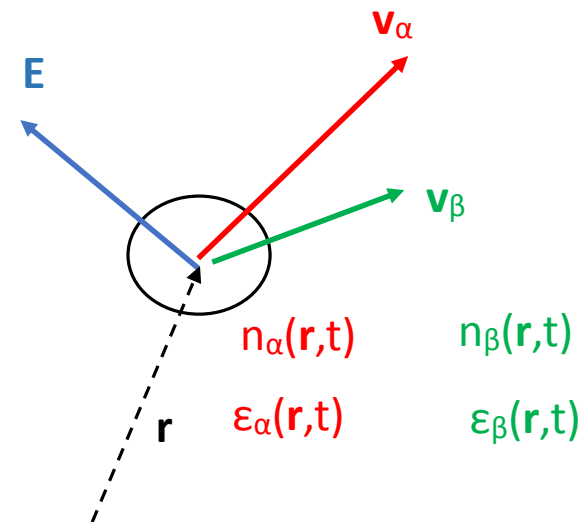
圧力 p_α [Pa]

フラックス $\Gamma_\alpha = n_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ [$/\text{m}^2/\text{s}$]

電場 $\mathbf{E}$ [V/m]

磁場(磁束密度) $\mathbf{B}$ [Tesla]

α は粒子種を区別する指標



流体モデルで解く方程式

- 以下を仮定する:
 - 理想気体の状態方程式が成り立つ.
 - 荷電粒子に関しては粘性応力を無視する.
 - イオンの温度は一樣とし, エネルギー方程式は解かない.
 - 中性粒子は多成分の混合ガス(1流体)と考える.
 - ガスの流れは層流. (低レイノルズ数)

- 荷電粒子に関して

電子/イオンに関する連続の式 $\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_\alpha = \sum_l R_{\alpha l}$

電子/イオンに関する運動方程式(ドリフトー拡散近似)

$$\Gamma_\alpha = \pm n_\alpha \mu_\alpha E - D_\alpha \nabla n_\alpha$$

μ : 移動度
 D : 拡散係数

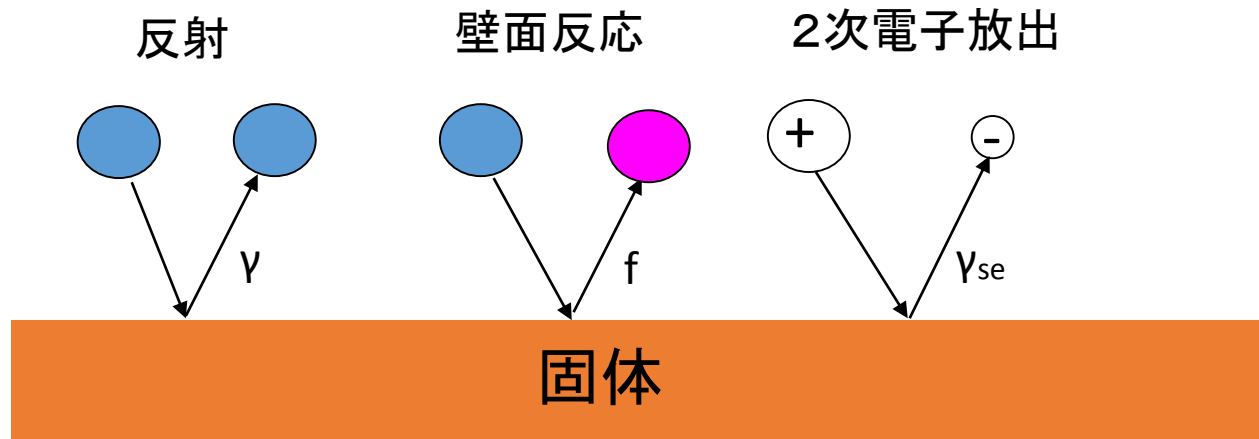
電子のエネルギー輸送方程式

流体モデルで解く方程式(続き)

- ・ 静電ポテンシャル(電位) ϕ に関するポアソン方程式
電場は $E = -\nabla\phi$ より求める.
- ・ 中性粒子に関して
粒子種毎の連続の式(移流-拡散方程式)
混合気体としての運動方程式(ナビエ・ストークス方程式)
混合気体としてのエネルギー輸送方程式
- ・ 電子/イオン運動の時間スケールとガス流れの時間
スケールはオーダーが異なるので, 分離しておこなう.

固体表面における反応

- 粒子が壁面に到達したとき次のことが起こる
 - a) 確率 γ で反射する
 - b) 確率 f で他の種類の粒子が放出される(壁面反応)
 - c) 確率 γ_{se} で2次電子が放出される



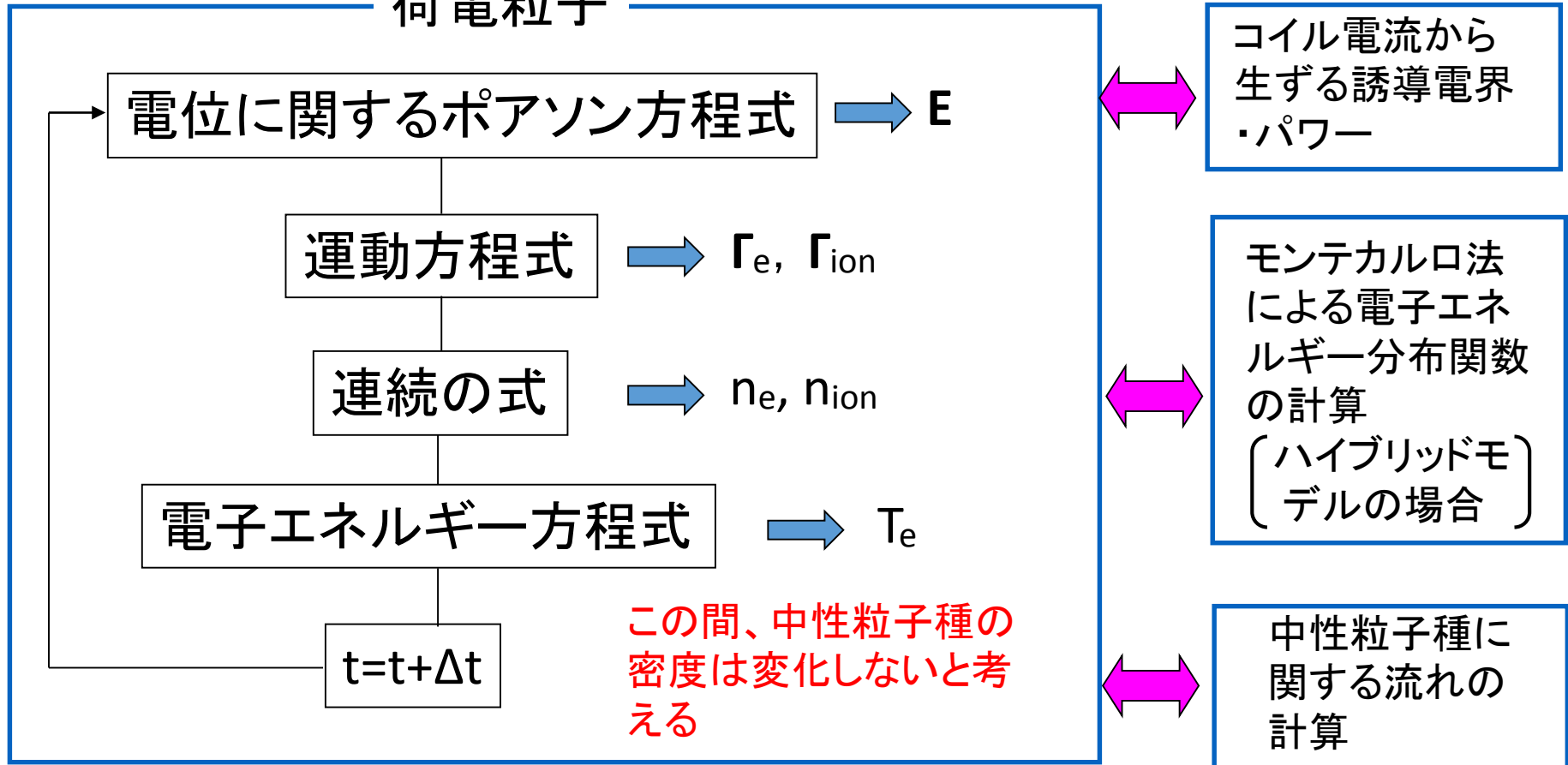
- γ, f, γ_{se} はインプットデータ. 正確に与えることは難しい.

電極に与える電圧振幅と自己バイアス電圧

- 駆動電極においては境界条件として電圧の振幅 V_{rf} と周波数を与える必要があるが、実際には電圧振幅ではなくパワーが条件として与えられる 場合が多い。
その場合は 計算の反復過程においてプラズマが消費するパワーが与えられた値になるように V_{rf} の値を調整する。
- 駆動電極の面積と接地されている面積が異なる場合は 駆動電極側に自己バイアスとよばれる直流成分 V_{dc} が生じる。これに対してはその境界における電子電流とイオン電流の1サイクルにわたる総和がゼロとなるように計算を進めながら変化させる。

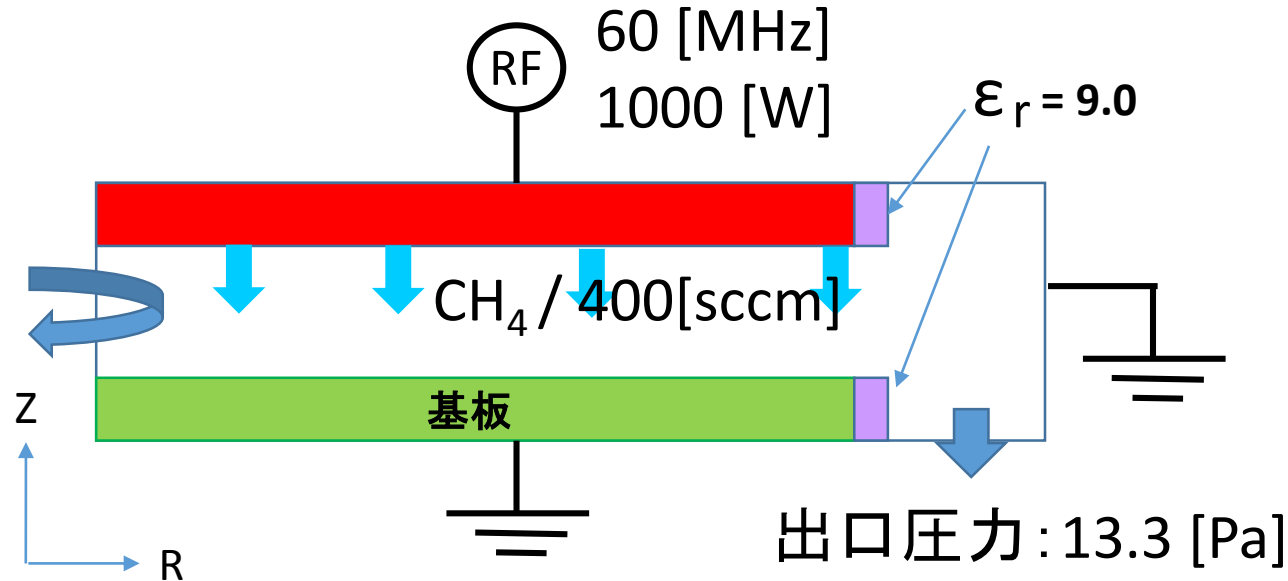
計算のフローチャート

荷電粒子



数サイクル毎に1回やり取りする

解析例1 メタン CCP装置



単位: [mm]
軸対称モデル: R(300), Z(80)
基板—電極間距離: 40
基板半径: 240

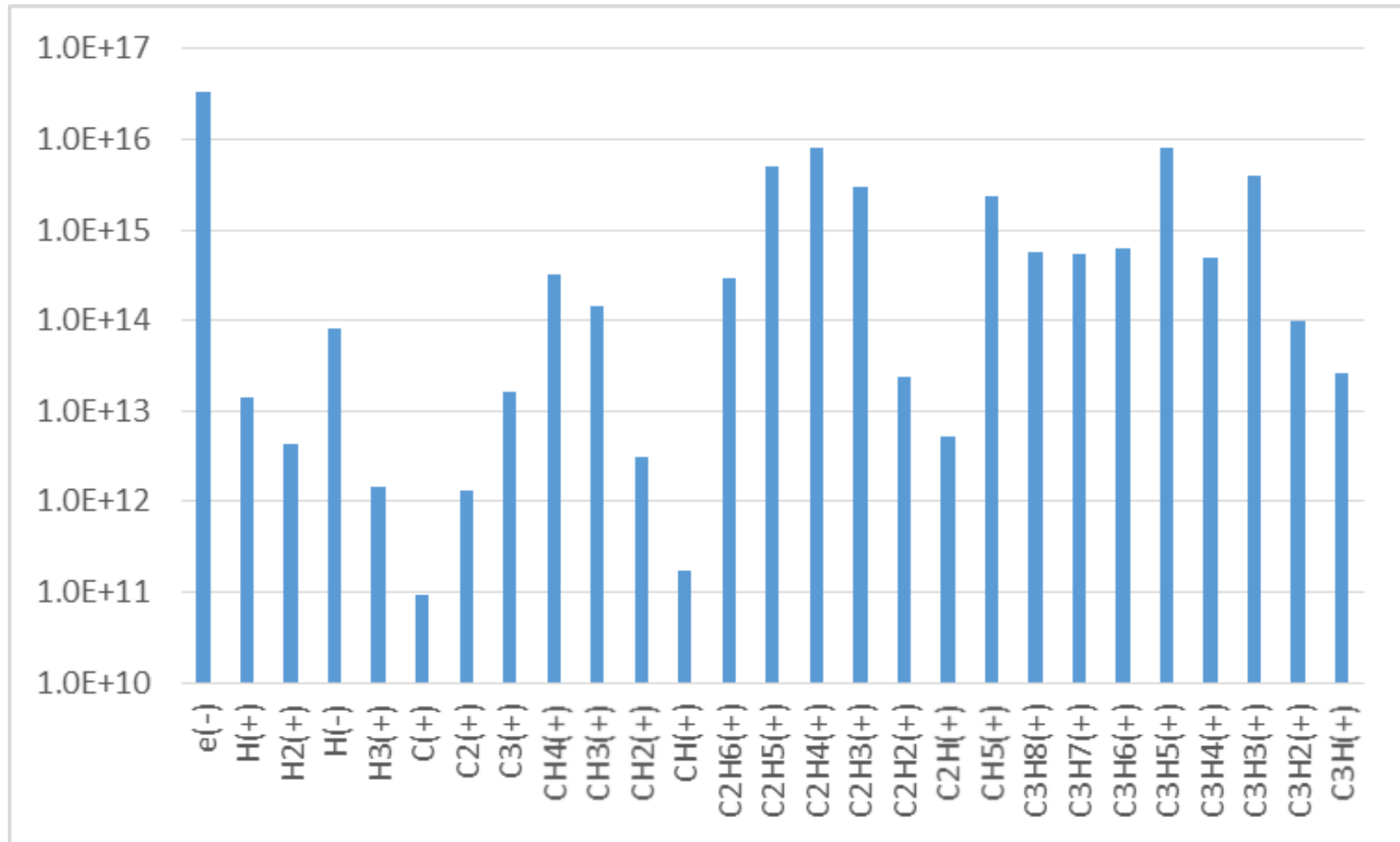
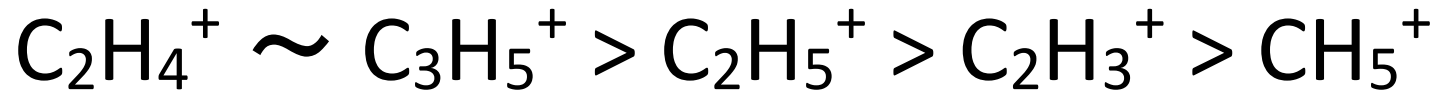
原子・分子データベース:
・中性粒子種: 24
・イオン種: 26
・気相反応数: 715

定常状態において $V_{dc} = -84$ [V] $V_{rf} = 181$ [V]

PEGASUS
Software

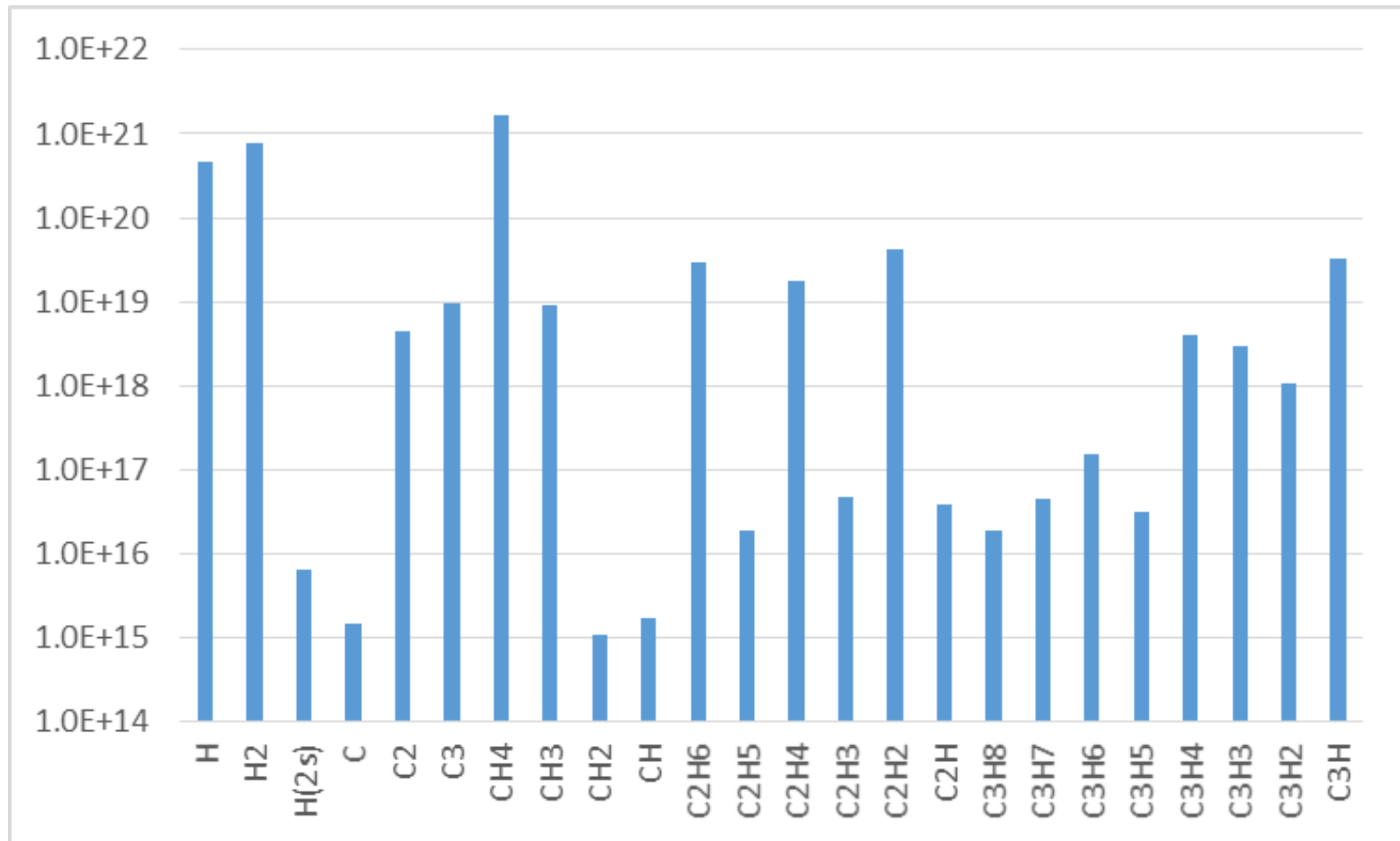


荷電粒子の密度(空間平均値) [/m³]

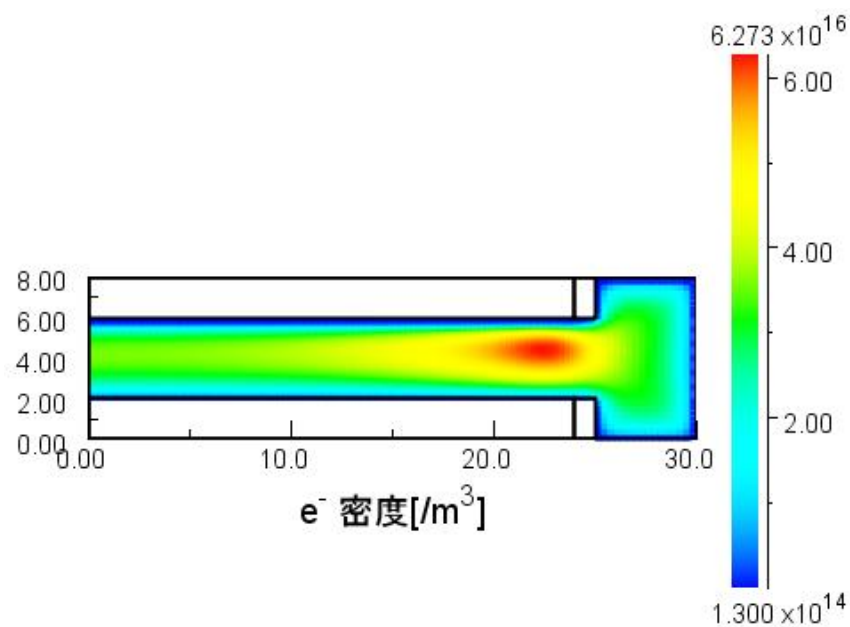
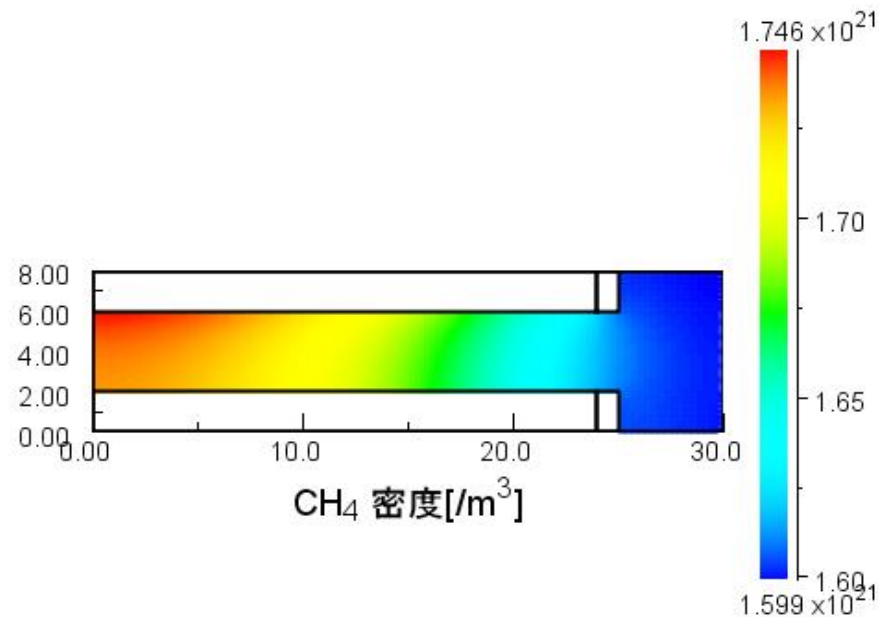
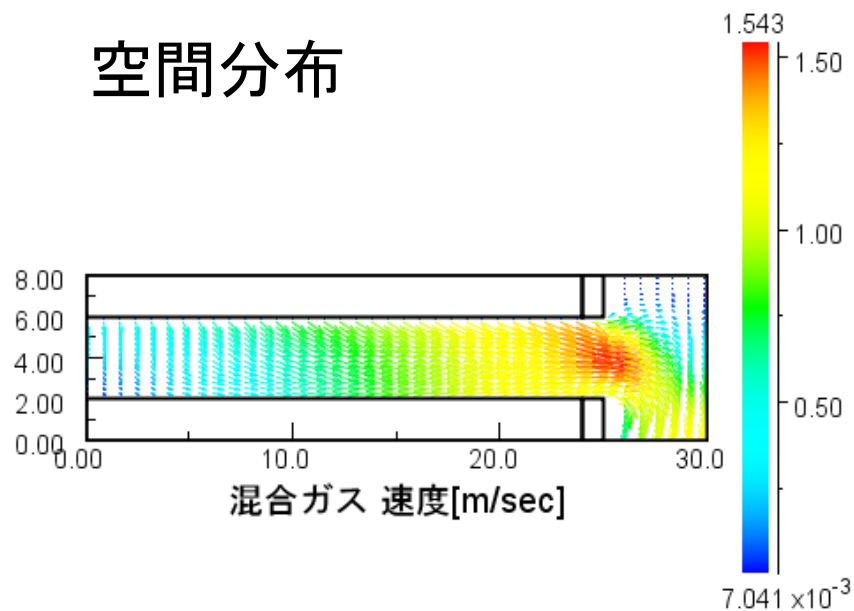


中性粒子の密度(空間平均値) [/m³]

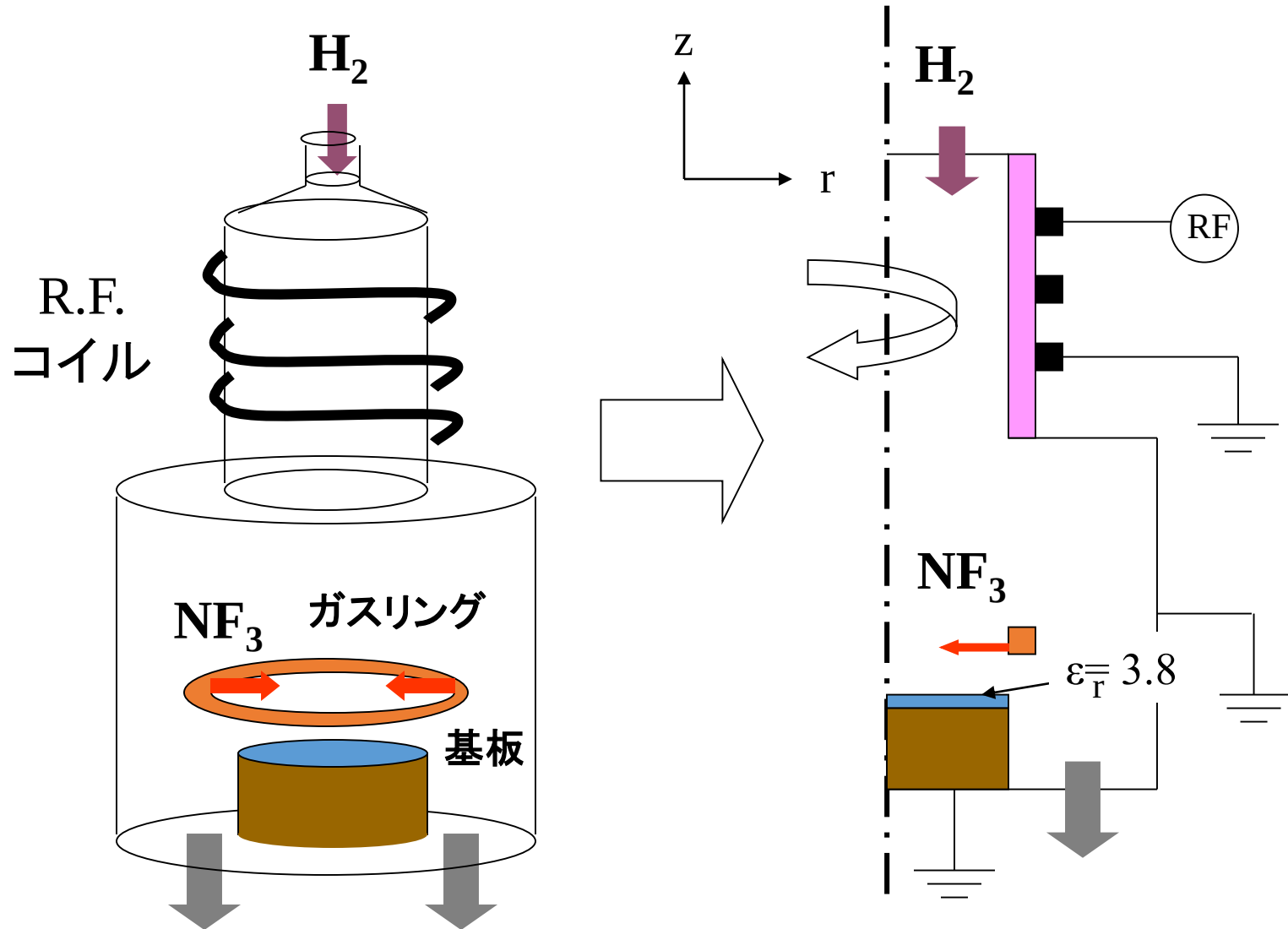
$\text{CH}_4 > \text{H}_2 > \text{H} > \text{C}_2\text{H}_2 > \text{C}_3\text{H} > \text{C}_2\text{H}_6 > \text{C}_2\text{H}_4 > \text{CH}_3 \sim \text{C}_3$

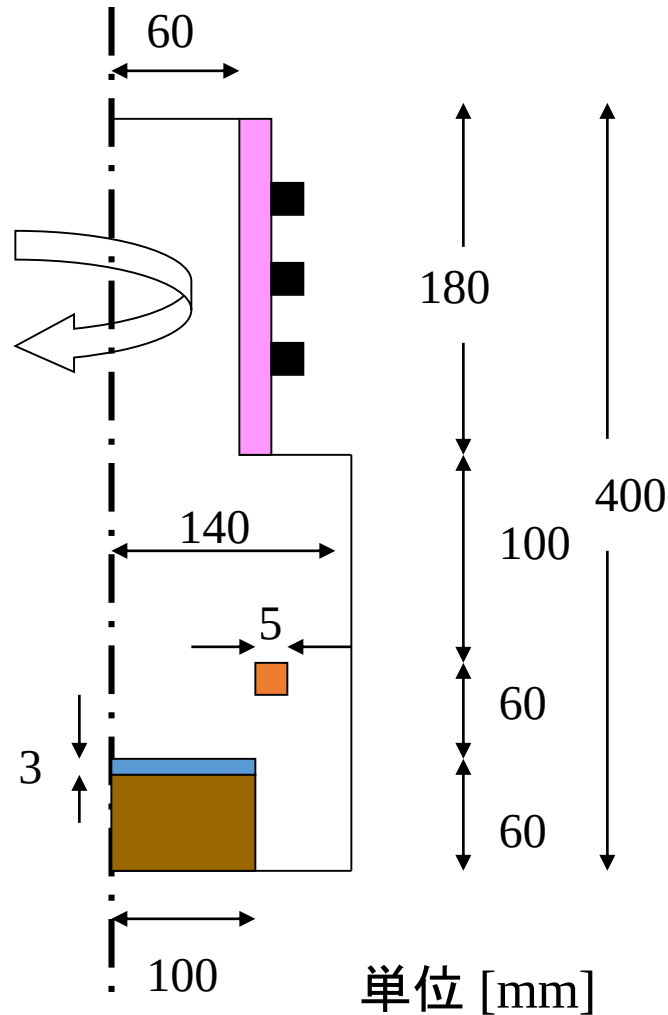


空間分布



解析例2 H_2/NF_3 ICP装置





運転条件

ICPコイル パワー: 200 [W]
周波数: 13.56 [MHz]

総流量: 300 [sccm]

$H_2:NF_3 = 2:1$

荷電粒子種: 13

中性粒子種: 13

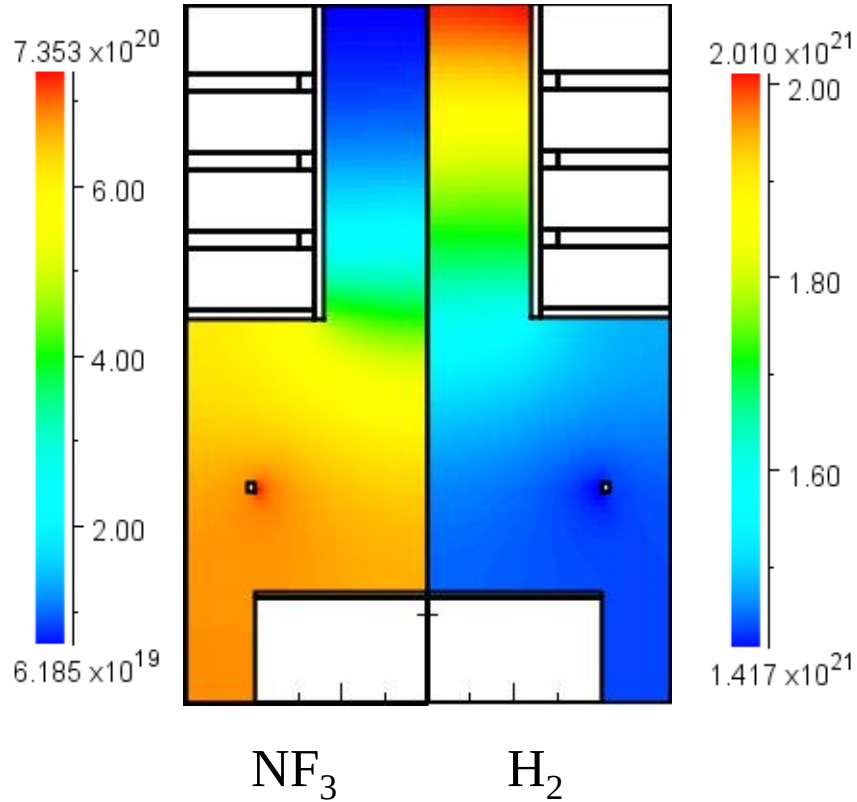
出口圧力: 10 [Pa]

気相反応数: 86

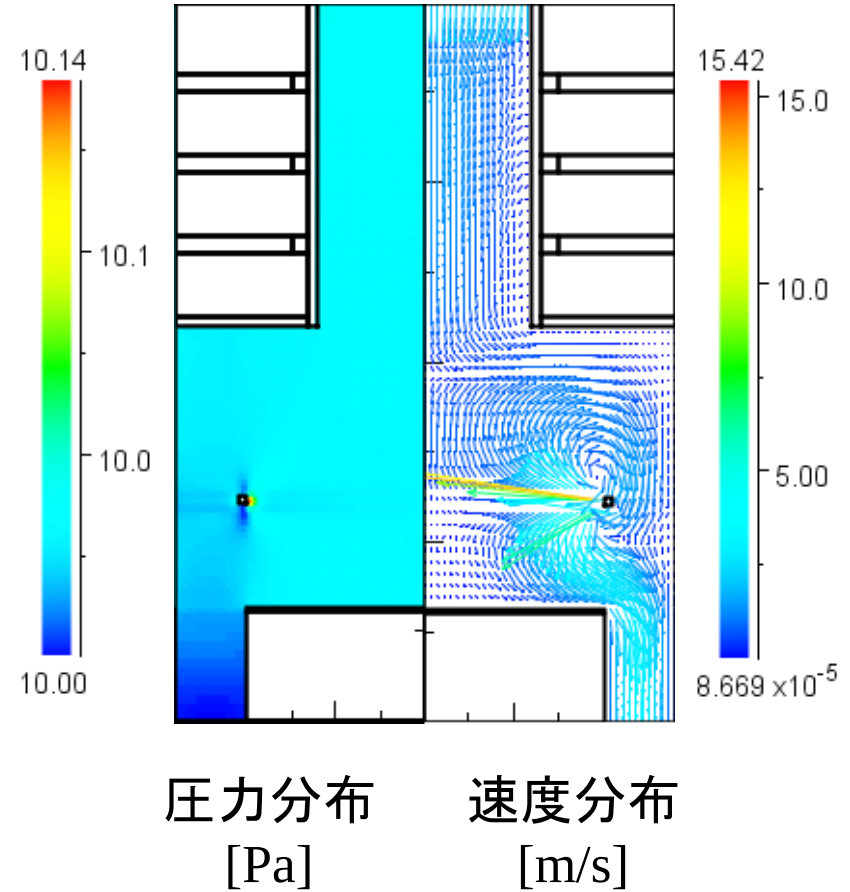
壁温および基板温度: 313 [K]

ガス温度: 313 [K]

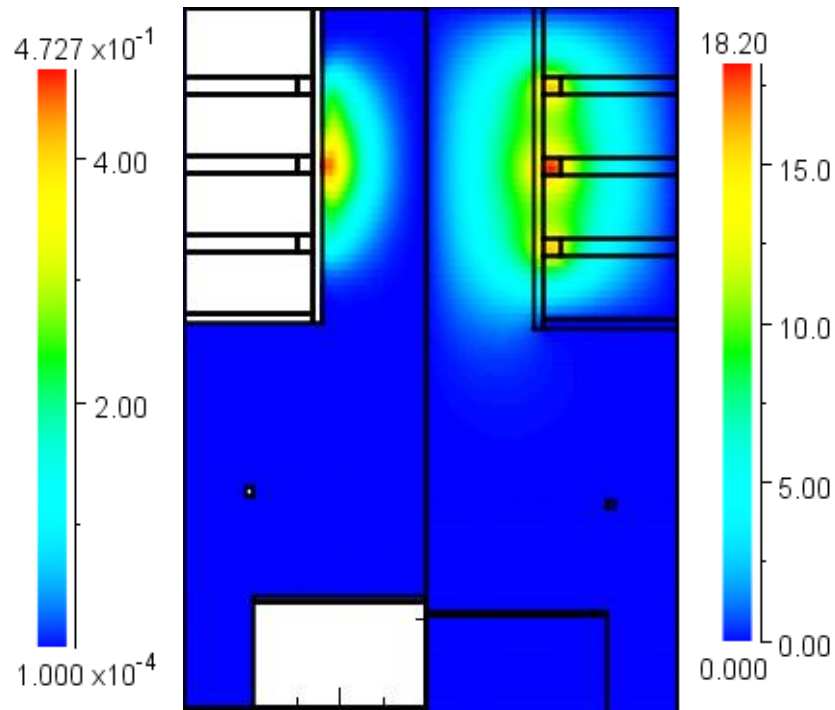
中性粒子 密度分布 [m^3]



混合氦体

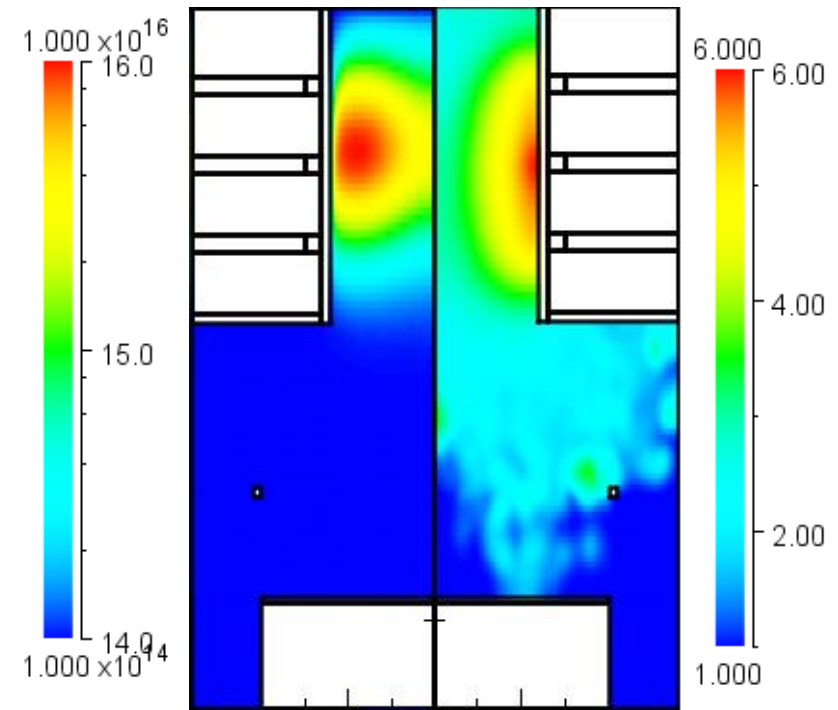


R.F.コイルによる 物理量



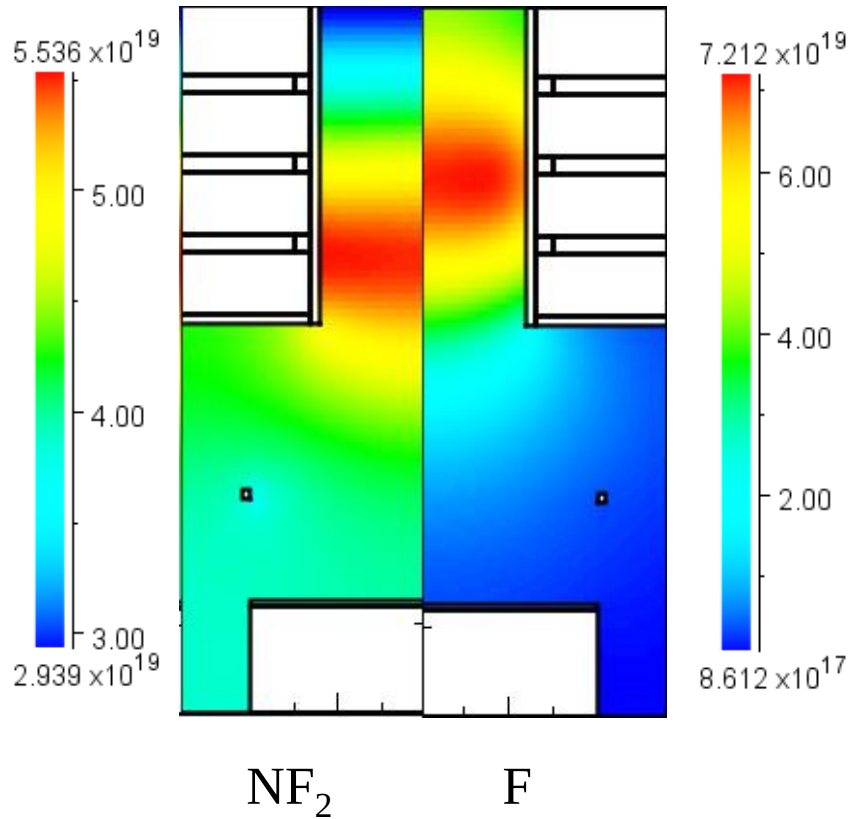
パワー吸収 誘導電界
[W/cm³] [V/cm]

電子の物理量



電子密度 電子温度
[/m³] [eV]

中性粒子 密度分布 [$/\text{m}^3$]



中性粒子 密度分布 [$/\text{m}^3$]

