

平成9年 12月 25日

プロジェクト提案書(草案)

『プラズマ CVD ガス挙動解析』

提案書作成者

Advanced Algorithm & Systems

提案書承認者

Advanced Algorithm & Systems

代表取締役社長 柿沼 良輔

1. はじめに

本提案書は、株式会社原子力事業部 殿より表題案件に関してご提示された課題に対する弊社の現時点での回答をまとめたものである。

また、本提案書は正式（最終的）なものではなく、あくまでも以後の議論に資するための草案として位置づけられるものである。

尚、課題のうち具体的なアルゴリズムに関しては現在の段階では未知数が多いため書き添えていない。これに関しては貴社との協議のあと正式な提案書で改めて書き加えたい。

2. 解析方針

2. 1 系の記述方程式に関する指針

系を記述する方程式としてどのようなものを選ぶかは重要な問題である。いかに複雑な流れ場であろうとも、それが古典粒子として近似できるならば気体運動論（ボルツマン輸送方程式）として記述することが可能であることは明白である。

しかし、数値解析では現象をより厳密に解析するという命題に加えてつねに計算機リソースという経済的制約が伴う。従って、実用上問題ない程度に現象を簡略化し、より計算負荷の小さい数学モデル（基本方程式）を選択することが技術者・研究者のセンスとして問われることになる。

現在、CVD 装置内の気流解析は Navier-Stokes equation に基づいて行なわれている。この場合、注目する領域が気体分子の平均自由行程に比較して十分大きいこと、つまり連続体近似が成立する範囲の気圧（希薄度）での装置運用の場合に関してのみ正当性が保証される計算に頼っている。クヌーセン数が 0.01 以上の CVD 装置の解析に関しては分子流としての解析方法を選ばなければならない。

従って、すべてに先立ちわれわれは、

(A) ボルツマン輸送方程式による系の記述

(B) 連続体（巨視的）方程式による系の記述

のどちらの数学モデルを採用すべきかの判断を行う必要がある。

(A) は古典論の範囲内ではもっとも基本的であり、連続体近似が成立しない場合でも有効である。しかし、ボルツマン方程式を直接解くには現在の計算機の能力と計算技術は未熟な段階にあり、実用を目指す解析コードが基礎を置く系の記述モデルとしては好ましくない。

幸い西森らの報告によれば、ダイヤモンド薄膜生成に使用されるプラズマ CVD のガス圧は 1Torr 以上とある。貴社の想定 CVD のガス圧がこの程度であれば (B) の連続体近似が物理的に保証されることになる。またこれを基礎とする計算手法は多くの研究者により発展されており、実用を目指す開発期間の短い解析コードには適していると考ええる。

以後、連続体近似を前提とした解析方針に関して述べる。

2. 2 対象のモデル化

ここで重要なことは、複雑なプラズマ CVD 装置内の気体の流れ場をいかに抽象するかであろう。この抽象化がすなわち物理現象の数学モデル（基礎方程式）化を意味する。

本解析で対象とするプラズマ CVD は、

- ◆弱電離気体
- ◆多成分
- ◆反応性
- ◆外場（電場、磁場、重力場）の存在

の性質をもつ基本的に圧縮性を伴った流体と考えられる。

さらに、解析モデルとその数値解法は

- ◆プラズマ（電離したイオンと電子の集団・気体）
- ◆中性の気体（多成分の反応性混合気体）

のどちらに重点を置くかにより異なる。

本件の場合中性ガスの挙動に解析の主眼があるものと判断し解析モデルの構成を試みた。

系は 3 つのそれぞれ異なる応答特性をもつ流体と近似する。その内訳は

- (A) 中性ガス
- (B) 陽／陰イオンガス
- (C) 電子ガス

(A)、(B) では、質量はほぼ等しいが外場（電場、磁場）への応答が異なる。

(B)、(C) では、外場（電場、磁場）への応答は同じであるが質量が極端に異なる。

である。

これら 3 つの特性の違う流体が複雑に相互作用を及ぼしながら全体の流れ場を形成するわけであるが、これは一種の混相流体とみなすことができる。

以上から、解析モデルとしては 3 流体モデルを基本に据え、計算コストを鑑み本質を見失わない程度に簡略化をはかるのが適当と考える。

3. 解析モデル

それぞれの相（中性ガス、イオンガス、電子ガス）に関して、

- (1) 質量保存式
- (2) 運動量保存式
- (3) エネルギー保存式

が成立する。また、各相には相間輸送として、

- (1) 質量の交換（生成・消滅項）
- (2) 運動量の交換（相間摩擦＝運動量緩和）
- (3) エネルギー緩和

なる相互作用が働く。

以上に関する基礎方程式系はボルツマン方程式の右辺衝突項を緩和時間で近似したBGK (Bhatnager, Gross, Krook) 方程式の運動量空間における0次、1次および2次のモーメントととることで導出できる（実際、半導体デバイスシミュレーションの緩和時間近似モデルで行なわれている）。

さらに、上記方程式に加えて

- ◆状態方程式
- ◆電磁場方程式

が系が完結するために必要である。

また、中性ガスに関してはそれ自体単体ではないため（多成分混合状態）、さらにモデル化が必要である。これについては、反応も含め燃焼シミュレーションで採用されているモデル化の方法が援用可能である。すなわち、

- (1) 混合ガス全体としての流体方程式
- (2) 各構成化学種ごとの質量分率に関する移流拡散方程式
- (3) 反応方程式（質量分率の生成・消滅項）

として記述される。

さらに、実際の問題を解析する上では、

- ◆拡散係数、緩和時間（衝突周波数）等に代表される輸送係数のモデル化の調査・検討
- ◆乱流モデル化の必要性の検討
- ◆各種反応モデル（電離モデルも含む）の調査と選択

が必要である。

但し、以上のことはあくまでも3流体モデルに関する一例であり、他の方法も考えられる。

さらには、3流体モデルを採用すること自体に関しても実際の解析にあたっては事前に文献調査・ヒアリングを行い、その妥当性を確認すると同時に他のモデルの可能性を探ることも必要であると感ずる。

4. 数値解法

数値流体力学で用いる解析手法には粒子シミュレーションによる方法と差分化に代表される偏微分方程式の離散化（代数方程式への近似）を用いる方法に大別される。

本件ではこれまでの議論から後者の方法を用いるのが適当と考えられる。

具体的な方法の選択には圧縮性がどの程度顕著であるかに大きく左右される。プラズマ CVD の運転条件に関する知見を弊社は現時点で得てはいないので貴社との議論ののちに改めて御提示したい。但し、電子、イオンのプラズマの部分は基本的に圧縮性が大きいと考えられるので数値流速に基づく TVD 有限体積法が適していると考えている。

中性の混合ガスに関しては反応の激しさとそれに伴う発熱・吸熱量がどの程度のものかを鑑み適当な数値解法（対流型、保存型等）を選択することになる。

現在、圧縮性流体の数値解法は TVD 法が主流である。従って、BFC+有限体積法+TVD の組み合わせが有望と考えている。

今ひとつの方法としては、著者が研究している CIP 法（圧縮・非圧縮の統一解法）をもとにした反応性高速流解析の手法あるいは乱流燃焼シミュレーション手法にプラズマ（電磁相互作用）の系を組み込む方法も一案として考えられる。

5. 参考文献

- [1] Lawrence A. Berardinis , “ MODELS OF SUCCESS ” , Machine Design,11,1996,54-58
- [2] 西森年彦、坂本仁志、高桑雄二、「ダイヤモンドの気相成長」、日本物理学会誌、8,1997 591-598
- [3] 数値流体力学編集委員会編、「燃焼・希薄流・混相流・電磁流体の解析」、東京大学出版会
- [4] 日本機械学会編、「原子・分子の流れ」、共立出版
- [5] 日本原子力学会編、「気液二相流の数値解析」、朝倉書店
- [6] 日本物理学会編、「計算物理学」、培風館
- [7] 田中寛、山本良一編、「計算物理学と計算化学」、海文堂出版
- [8] 田中基彦、西川恭二、「高温プラズマの物理学」、丸善
- [9] 塚越誠一、「数値流体力学」、培風館
- [11] 渡部勝博、飯塚幹夫、「高精度 TVD スキームを用いたデバイスシミュレーションの試み」、信学技報、9,1995、49-54
- [12] Christopher M. Snowden、 “Introduction to Semiconductor Device Modeling”
- [13] Kenneth K. Kuo、 “Principles of Combustion”、Wiley