



4.2 プラズマの大規模シミュレーション Large-scale Numerical Simulations of Plasmas

浜口 智志

京都大学エネルギー科学研究科

〒611-0031 京都府宇治市五ヶ庄

Satoshi HAMAGUCHI

Graduate School of Energy Science, Kyoto University

Gokasho, Uji, Kyoto 611-0031, Japan

The recent trend of large scales simulations of fusion plasma and processing plasmas is briefly summarized. Many advanced simulation techniques have been developed for fusion plasmas and some of these techniques are now applied to analyses of processing plasmas.

Keywords : Fusion plasmas, Tokamaks, Plasma processing, Numerical simulation, TCAD,

1. はじめに

高温電離気体としてのプラズマを扱う研究分野は、制御熱核融合炉開発から、地球・宇宙科学、材料プロセス工学など、多岐にわたっている。特に核融合科学の分野においては、プラズマの平衡や安定性、非線形時間発展などが計算機シミュレーションによって調べられてきた長い歴史があり、核融合科学は、現在、最も大規模シミュレーションを活用する研究分野のひとつとなっている [1]。また、最近では、半導体超微細加工などに代表される材料プロセスにおいてプラズマの果たす役割が極めて大きくなり、プロセスプラズマの分野においても、計算機シミュレーションによる研究方法が幅広く採用されている [2]。プロセスプラズマでは熱平衡から大きく外れた条件下で起こる複雑な化学反応を主として利用するため、核融合や宇宙科学で問題になるプラズマの場合比べて、プラズマ中やプラズマに接する物質表面上での化学反応のモデル化と数値シミュレーションが大きな課題となる。さらに産業用プラズマのシミュレーションは、製品や製造プロセスの開発ツール、すなわち、いわゆる TCAD (Technical Computer Aided Design) の一部として用いられることに対するニーズが高い。この意味で、産業応用の観点からは、計算コストの高い大規模シミュレーションが必ずしも求められているわけではない。しかしながら、将来のデスクトップコンピュータの性能向上や、グリッドコンピューティングなど廉価で大規模な計算環境の整備などを見越して、現段階で化学反応を含む産業用プラズマの大規模シミュレーション技術を確立しておくことは極めて意義深い。こうした観点から、以下では、核融合プラズマとプロセスプラズマ応用技の数値シミュレーションについて概観する。

2. 核融合プラズマ

核融合プラズマの数値シミュレーションの歴史は長く、その計算技術は多岐にわたっている。ここでは、磁気閉じ込め核融合実験に用いられる高温プラズマ物性を議論するための数値シミュレーションに内容を限定して、その概略を述べる。大型磁気閉じ込め核融合実験装置のプラズマは、典型的には、数テスラの磁場で磁化され、数 keV の温度、 10^{14}cm^{-3} 程度の密度をもつ。トカマクやステラレータなどのトラス型の閉じ込め装置では、大型のものでは、プラズマ大きさが、大半は数 m、小半径も 1m を超える。このようなプラズマを安定に閉じ込めるためには、プラズマの形状や密度・温度分布の注意深い制御が必要である。プラズマの平衡および安定性は、計算機シミュレーションにより古くから研究され、現在、プラズマ閉じ込め装置の設計において、プラズマ平衡・線形安定性の計算機シミュレーションは必要不可欠なものである。プラズマの平衡・線形安定性の計算の基礎となる方程式は、通常、(一流体近似の) 磁気流体力学 (MHD) 方程式が用いられる。

最近の磁気閉じ込め核融合研究における大きな課題のひとつは、熱や粒子の輸送制御である。核融合プラズマ中では、プラズマを構成する電子やイオンのクーロン衝突による拡散(新古典論的拡散)では説明できないほど大きな輸送(異常輸送)が引き起こされ、このためプラズマの閉じ込め性能の向上が難しく、熱核融合反応を効率的に起こすことに対する大きな障害となっている。異常輸送の原因はプラズマの乱流にあり、従って、磁気核融合閉じ込め実験では、プラズマ乱流の制御が大きな課題となっている。トラス型プラズマにおいては、ある放電条件の下に、プラズマの一部で乱流が大きく抑制される領域が発生し、閉じ込め性能を向上させることが可能となる。この乱流抑制の機構の解明と乱流輸送による輸送係数の評価にも計算機シミュレーションが幅広く使われている。このようなプラズマは通常 MHD 的には安定であり、プラズマ中の乱流はドリフト波の不安定性に起因することが多い。従って、シミュレーションの基礎となる方程式として、イオンと電子をそれぞれ独立の流体として扱う二流体方程式を選ぶことが多い。最近の計算機性能の向上により、基礎方程式として更に精密な方程式であるヴラゾフ方程式(非衝突領域における運動論方程式)を採用したジャイロ運動論シミュレーションも行われるようになってきている。

3. プロセスプラズマと TCAD

半導体微細加工や各種材料の表面改質にはしばしばプラズマが用いられる。これら材料プロセスに用いられるプラズマは、通常、電離度が低く、プラズマ温度も低い。典型的な例で、電子温度は 10eV 程度、イオン温度は 1eV 以下となる。中性ガスの圧力は、数 mTorr から大気圧をはるかに超える高圧まで様々であり、また、ガスの温度も、常温からかなり的高温まで様々である。このようにプラズマの物理パラメータの観点からは、プロセスプラズマと核融合プラズマは極めて異質なプラズマであるが、そのダイナミクスの大半は、共通の方程式で記述できる。そのため、核融合プラズマの解析用に開発されてきた様々な数値解析の手法が、プロセスプラズマの解析にも応用できる。ただし、数値解析上也考慮しなければならない両者の間の大きな違いは、プロセスプラズマでは、その非熱平衡性を利用して、通常の熱平衡状態では起こりえない特殊な化学反応を利用するという点である。このことから、プラズマプロセスシミュレーションで

は、プラズマ内およびプラズマと接する固体表面上でおこる化学反応をできるだけ高い精度でモデル化することが重要となる。電離や再結合等のバランスによるプラズマの維持や、活性種の生成などもふくむ非平衡化学反応を考慮に入れたプラズマ・中性ガス系のシミュレーションは、核融合の炉芯プラズマシミュレーションではほとんど取り扱われておらず、プロセスプラズマの解析特有の問題である。

コンピュータチップ等の半導体製品の作成には、プラズマプロセス以外にも多くの微細加工過程が用いられている。プラズマを用いる代表的加工過程としては、プラズマエッチング（反応性イオンエッチング）やプラズマCVD（化学蒸着）などがあり、それ以外の加工過程としては、リソグラフィ、イオン注入、アニーリング、洗浄、平坦化等のプロセスがある。半導体を製造する企業は、こうした各種プロセスの一連の工程を最適化して、低コストで効率よく事業を行う必要がある。このため、製品の設計から製造プロセスの開発全般において、数値シミュレーションを利用することにより、できるだけ試行錯誤を少なくする努力が払われている。このような、コンピュータ上に製造工程と製品の物理モデルを再現して、製品および製造工程の数値シミュレーションを利用する設計方法は、TCAD（Technical Computer Aided Design）といわれる。半導体製造業界で広く利用されているTCADとしては、現段階では、製造された集積回路上の個々のトランジスタの性能を評価するシミュレーション（デバイスシミュレーション）は広く用いられているが [3]、プロセスシミュレーションに関しては、ほんの一部の製造工程がモデル化されるにとどまっている。特にエッチングや堆積などのプラズマプロセスのシミュレーションは、その化学反応の複雑さにより、TCADとしてはほとんど用いられていない。今後、プラズマ化学のデータベースを充実化することにより、実用的なプラズマプロセスシミュレーション技術の開発が望まれる。

TCADにおけるプロセスシミュレーション全般はもとより、プラズマプロセスシミュレーションに限っても、その計算手法は多岐にわたる。ここでは、プラズマプロセスシミュレーションのうち、プラズマ表面相互作用の解析法として、最近注目を集めている分子動力学シミュレーションについて、簡単に紹介する [4]-[7]。

プラズマに暴露された物質表面では、プラズマから供給される各種のラジカルが表面に吸着して表面の状態が暴露前の状態から変化しているところに、プラズマからエネルギーの高いイオン照射を受ける。この際、物質表面のごく薄い（厚さ数 nm の）層で、物質の運動エネルギーが高くなり（いわば実質的な高温状態となり）、基盤そのものの温度は低温のまま、表面では、各種の化学反応が高い反応率で進行する。この状態を数値シミュレーションするために、表面のごく近傍の原子の運動をニュートンの運動方程式を解くことによって追跡するのが分子動力学シミュレーションである。原子間のポテンシャルは、原子間の共有結合をモデル化する多体相互作用ポテンシャルと、イオン結合やファンデルワールス力などをモデル化するための二体相互作用の組み合わせを採用する。このような古典的原子間ポテンシャルでは、実際の複雑な原子間相互作用をすべてモデル化できるわけではないが、可能な範囲で、量子力学計算から得られる実際の原子間ポテンシャルに近い形となるように、ポテンシャル関数（力場関数）のパラメータを調整

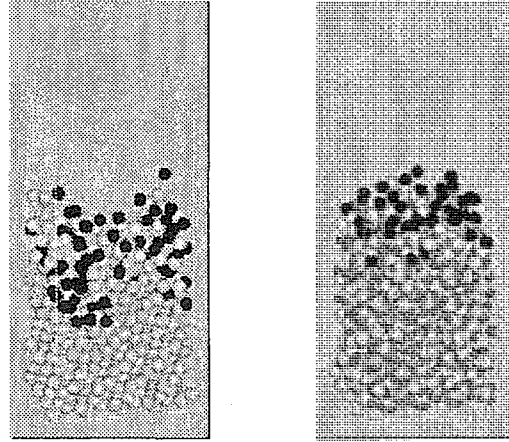


図 1.: 50eV の Cl 原子が垂直入射する表面の典型的な構造 (MD シミュレーション結果)。 (a) は Si 表面、(b) は SiO₂ 表面を表す。大きな黒い球が Cl 原子、白い球が Si 原子、小さな灰色の球が O 原子を表す。

する。図 1 に MD シミュレーション結果の例を与える [6]。それぞれ約 2nm 四方の表面を数 nm の深さで切り出した基板表面を表しており、計算では、平衡方向に周期境界条件を課している。表面に 50eV の Cl 原子を垂直入射し、1 ピコ秒弱のあいだ全エネルギー一定で MD 計算を行い、その後、基板原子を室温まで下げるというイオン入射プロセスを数百回繰り返した後の基板表面の様子である。このような計算から、エッチングレート、表面脱離物などの評価を行うことができる。

4. まとめ

以上簡単に、最近の核融合プラズマとプロセスプラズマ研究における大規模シミュレーションの動向についてまとめた。いずれの分野も、そのシミュレーション技術は現在急速に発展しており、今後更なる展開が期待される。特に産業応用の観点からは、今後の計算機性能と通信技術の更なる向上により、数値シミュレーションによる材料やプロセス開発の効率化が急速に進むものと思われる。

参考文献

- [1] T. Tajima, *Computational Plasma Physics: With Applications to Fusion and Astrophysics*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Redwood City, 1989.
- [2] S. Hamaguchi, IBM J. Res. Develop. 43, 199 (1999).
- [3] G. F. Carey, et al., *Circuit, Device and Process Simulation*, John Wiley & Sons, Chichester, 1996.
- [4] 浜口智志、応用物理第 70 巻 1099 (2001).
- [5] 浜口智志、プラズマ核融合学会誌 第 77 巻 1221 (2001).
- [6] H. Ohta and S. Hamaguchi, J. Vac. Sci. Technol. A19, 2373(2001).
- [7] H. Yamada and S. Hamaguchi, in *Proceedings of the 16th International Symposium on Plasma Chemistry (ISPC)* (ed. by R. d'Agostino, P. Favia, F. Fracassi, F. Palumbo) 209 (2003).