

<CVD特化型シミュレータご説明>

AEOLUS によるCVD 計算のカスタマイズコンセプト

内容

1. AEOLUS 一流体特性対応特化型 数値流体解析ソルバー
2. CVD シミュレーションへの対応
3. タイムスケジュール

Advanced Algorithm & Systems

内容：マイクロ波プラズマ CVD 装置内における**薄膜生成**のシミュレーション
特に、反応性ガスに対する、中性ガス・プラズマ・電場分布を調べる。

1. AEOLUS 一流体特性対応特化型 数値流体解析ソルバー

解法：CIP+GCUP 法

*CIP 法：物理量の数値拡散を抑える

⇒**反応性ガスの組成分布を精度良く導出できる**

*GCUP¹法：圧力のポアソン方程式を状態方程式と整合的に解く

⇒物理量が急激に変化する状況でも安定して解ける

機能：高精度 Runge-Kutta 法を使用した多成分ガスの反応・拡散計算

考慮ガス成分：窒素・酸素などの空気を構成する分子の解離反応

2次元計算

—物理現象に応じた、スキームの組み込み可能—

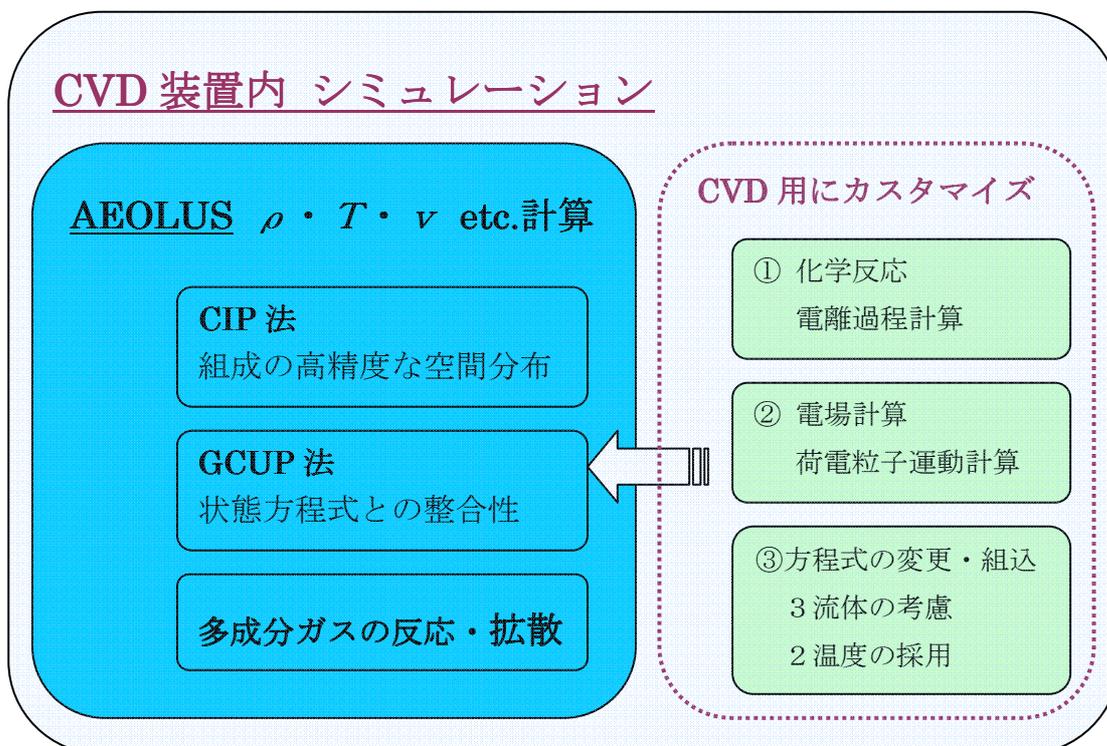
実績例：宇宙往還機大気圏の突入計算・ガス燃焼解析計算

*AEOLUS の得意領域：B,C,D。本件は、C,D に対応すると考えられる

	単相・単純	多相・複雑
低速流	A <ul style="list-style-type: none">・非圧縮性乱流・熱対流・物質拡散	C <ul style="list-style-type: none">・気液 2 相流・燃焼解析・MHD、磁性流体、ERF などの機能性流体现象・粉体流（極性流体モデル）
高速流	B <ul style="list-style-type: none">・圧縮性乱流・高速飛翔体・高速鉄道	D <ul style="list-style-type: none">・レーザー加工・溶接・爆縮（レーザー核融合）・ジェット・エンジン・爆発・爆轟・プラズマ

¹ CUP 法の改良版。CUP 法により、圧縮・非圧縮を統一的に解くことが可能。

2. CVD シミュレーションへの対応



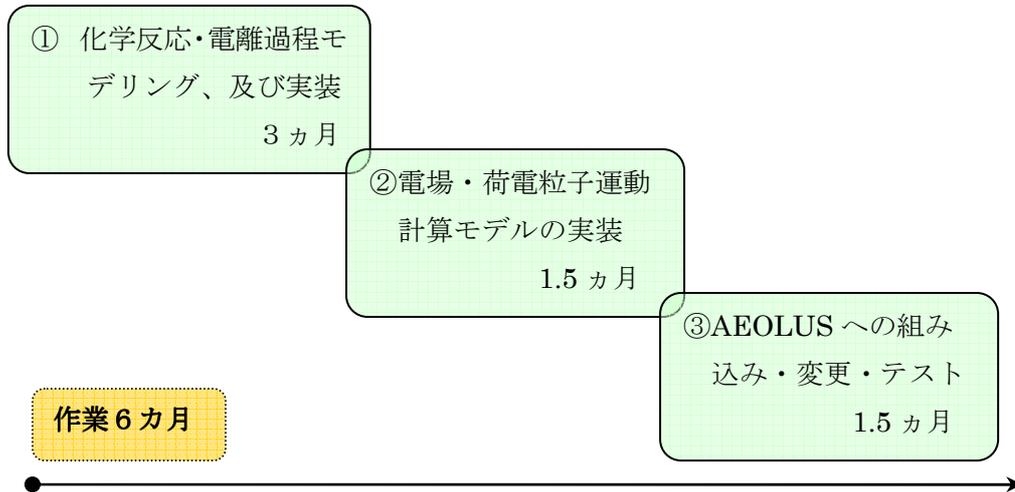
AEOLUS に対し、次のカスタマイズ必要

- ① 化学反応・電離過程の計算の組み入れ
⇒ 陰解法によって硬い方程式系を解く
- ② 静電場中の荷電粒子の運動計算の組み入れ
⇒ Poisson 方程式から電場を求め、荷電粒子のドリフト計算
- ③ モデル
 - 2-1. 連続体近似 (AEOLUS の採用)
 - 2-2. —3 流体を考慮：中性ガス・イオン・電子—
電場の影響を受ける粒子と 2 温度の考慮を行うため。
尚、ガス組成は、 $\text{H}_2(90\%), \text{CH}_4, \text{O}_2, \text{N}_2$

—2 温度の採用：電子温度・イオン温度—
装置内では弱電離プラズマ（電離度 1% 以下）で、イオン・電子は、熱的に非平衡だと考えられるため。
- ④ 座標系：2次元軸対称（対応済み）

3. タイムスケジュール

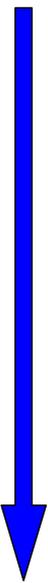
CVD 計算実現までのカスタマイズと期間の概算



—このなかでも重要なカスタマイズ内容—

1. 電場を考慮した時の方程式の調査
2. 素過程データ・モデルの調査
 - * 化学反応・電離過程の計算
レート方程式の対象：
 1. 反応粒子の選定：中性ガス・イオン・電子・励起状態
 2. 化学反応・電離過程の双方に適用するかどうかの考察反応の種類、電離の種類・段階の選定
断面積・反応熱データの収集
 - * 吸着計算
吸着係数・モデルの選定
 - * 輸送計算
ドリフト項：移動度の選定
拡散項： 拡散係数の選定

プラズマCVD法による薄膜生成過程シミュレーション見積

	項目	得られる計算結果	工数	弊社見積	市販品 参考価格	開発年度
	Step 1	AEOLUSによるCVD装置内の流れ解析 中性ガス、イオン、電子の3流体モデル	3流体各々の質量、温度分布、速度ベクトル グロスの蒸着量(基板へのFLUX)	1人月 (+コード販売)	250万円 450万円	n年度
	Step 2	電場・荷電粒子運動計算モデル組み込み ポアソン方程式とドリフト拡散モデル	Step 1+プラズマ分布 より正確な蒸着量	2人月	200万円 450万円	n+1年度
	Step 3	化学反応・電離過程モデル組み込み 反応及びガス組成を考慮した計算	Step 2+中性ガス、イオン成分の濃度分布 より正確な蒸着量	4人月	300万円	カスタマイズ n+2年度
	Step 4	成膜過程のシミュレーション 粒子法を用いた基板表面の形状計算	微視的な膜形成過程	2人月	200万円	開発中 n+3年度

精度向上を目指す