

<RIE 特化型シミュレータご説明>

AEOLUS によるドライエッチング計算のカスタマイズコンセプト

内容

1. CIP 法多成分系解析のメリット・デメリットについて
—ドライエッチングシミュレーションへの対応—
2. CIP 法の特徴について -弊社その他の実績-

Advanced Algorithm & Systems

1. CIP 法多成分系解析のメリット・デメリットについて

ここでは、低圧装置内(例:半導体装置内)における反応性流体の解析を対象とする。低圧装置内流れに対し、クヌーセン数が重要な量となってくる。この量は、連続体近似成立の判断材料である。ここでは先ず、クヌーセン数を意識せず、ナビエ・ストークス方程式を CIP 法で解くとする (CIP 法の一般的な説明については、2. を参照)。

<メリット>

数値拡散の抑制が、最大のメリットだと考えられる。

このケースは、電離・化学反応があり、その成分の空間分布が重要である。

一方、反応過程は、温度・密度・成分の情報を必要とし、特に温度に敏感である。

もし、温度・密度・成分の空間分布をうまく導出できなければ、その計算の信頼度は下がる。即ち、数値拡散が顕著になると、空間的にぼやけた物理量を計算に取り込むこととなる。この時、反応を含む場の時間積分の結果には、注意を要する。

結局、この過程を捉えるには、数値拡散の抑制が第一の要点であり、CIP 法が有利である。

<デメリット>

低圧力の場合、クヌーセン数が大きくなる恐れがある。この時、系を連続体と見なせなくなるため、ナビエ・ストークス方程式を使用できない。従って、CIP 法で流体の方程式を解いても数値解がでるのみである。つまり、実際の物理状況と合致しない恐れがある。

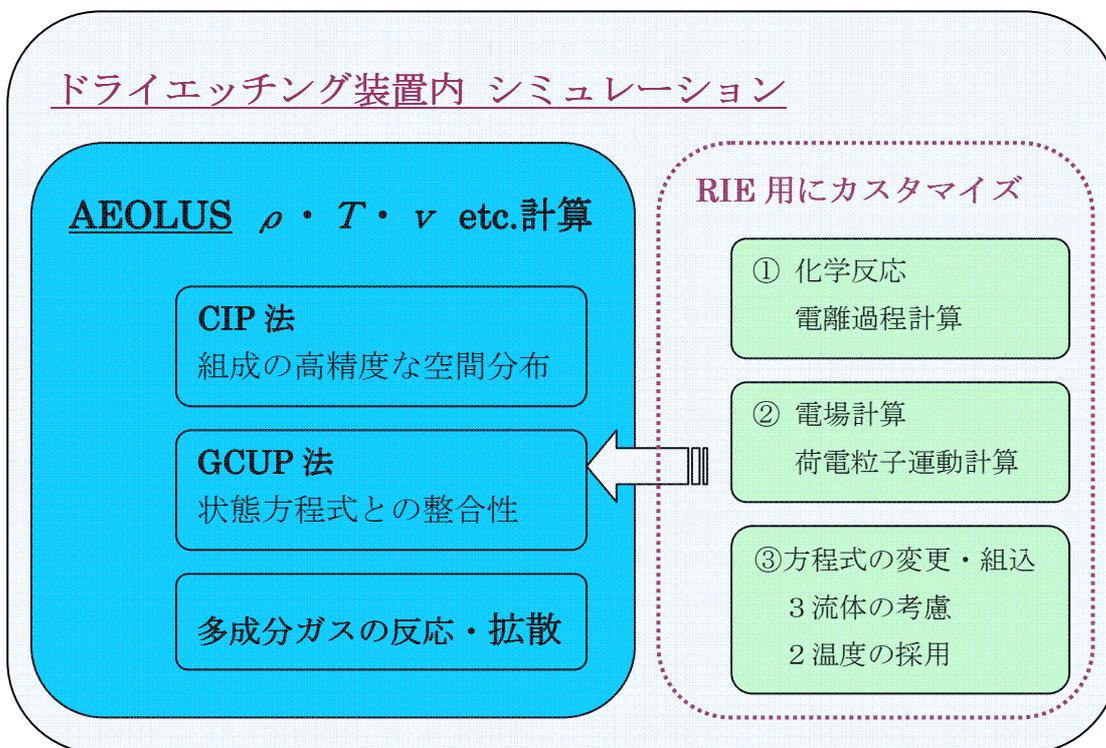
この時は、CIP 法の問題よりも、モデル設定と物理現象の整合性の問題である。

—解析方法—

“希薄”と“連続”の中間領域の挙動を調べる際、希薄用の解法と、連続体用の解法 (CIP 法としておく) による計算結果で、現象を挟みうちにするのが一つの手と考えられる。

半導体装置内の解析に対し、CIP 法コード：AEOLUS（弊社開発）をベースにすると、下のようなイメージになります。

(例) ドライエッチング (RIE) シミュレーションへの対応



- 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
 1. 連続体近似
 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。

— 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

2. CIP 法の特徴について -弊社のその他の実績-

—CIP 法の特徴—

CIP 法は、物理量とその空間微分を 3 次補間式で近似し、移流操作を行う。更に、圧力の修正方程式を用い、物理量の補正を行う分離解法である。これにより、実現される特長と欠点を述べる。

<一般的特長>

- ・ 数値拡散が少ない ⇒ 物理量の界面をシャープに捉える。
- ・ メッシュ数が少なくてよい ⇒ 計算コスト抑える。
- ・ 圧縮・非圧縮の統一解法である。⇒ 固・液・気の相変化を伴う系を同一アルゴリズムで解くことが可能。
- ・ 物理量の伝播の方程式を解く方法なので、電磁場解析などに応用可能。

<欠点と対応>

燃焼に代表される、変動の激しい場の解析を行う時、従来の方法では計算が破綻する。或いは、計算コストがかかる。これに対し、弊社は CIP-GCUP 法 (AEOLUS) を開発した。本法は、状態方程式を満たすように流体場を解く。これにより、解は自然に熱力学的関係を満たし、数値安定性を確保できるようになった。

<実績例>

CIP-GCUP 法を採用し、ガス燃焼や宇宙往還機大気圏再突入の問題に対し、現象に応じて解析した実績がある。

また、表の B, C, D に対し、CIP 法が展開を図れる分野だと認識している。

	単相・単純	→	多相・複雑
低速流 ↓	A ・ 非圧縮性乱流 ・ 熱対流 ・ 物質拡散		C ・ 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 ・ 圧縮性乱流 ・ 高速飛翔体 ・ 高速鉄道		D ・ 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