

# 衝突断面積・反応速度定数・輸送係数等 の推算方法に関する調査分科会 (仮名称)

－ プロセスプラズマシミュレーション技術の向上を目指して －

Feb. 4 2011

# 背景

## プロセスプラズマで使用されるガスの種類

フロロカーボンガス  
ハイドロカーボンガス  
ハロゲンガス  
モノシラン・ジシラン  
H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> 等のキャリアガス  
等, 様々なガスが利用されている。

プロセスプラズマのシミュレーションを行う上で, 必要となる衝突断面積・反応速度定数や輸送係数, 等のいわゆるデータベースは, その多くが不足している。

反応モデルの構築を請け負う企業は, 海外には存在している。一方で, 国内ではそのような対応は難しく, データセットを構築・活用する体制が整っているとは言えない。

## 背景(続き)

その一方で、個別の大学・研究機関においては、実測や推算も行われていないわけではない。しかし、誰がどの分野の専門家であり、どのような手法が利用されているかについては、産業界の研究者やモノづくりに携わる人々には十分認知されていない。これは、日本国内においてデータベースを活用するための仕組みが出来ていない、或いは十分ではないためだと考えられる。

データベースの構築には、本来実測が必要であるが、一般には多大な費用と時間を要する。しかし、推算方法が見つまっている場合、実測を待つことなく、検討をスタートする可能性を提供することが出来る。従って、どのような推算方法が知られており、また、どの分野にどのような専門家がいるかを整理することはデータベースを有効活用する仕組みを構築・サポートする上で重要と考えられる。

# 本分科会の目的

そこで、本分科会では、プロセスプラズマシミュレーションを行う上で必要となる衝突断面積・反応速度定数・輸送係数等の推算方法を整理し、既知のデータベースを補完するツールの作成を目指す。同時に、この分野の専門家に関する人的データベースについても整理する。

作成されたツールの有用性は、既知のデータベースと比較し、その適用範囲を検証する。また、これまで実測値の見つからなかった反応過程に対し、作成したツールを用いて計算・補完を実行し、新しいデータベースセットの構築を試みる。構築されたデータセットは、シミュレーションによって既存の実験・論文等と比較・検証する。

得られた成果は、原子・分子データ応用フォーラムを介して報告する。

# 期待される効果

本活動により作成される推算ツール・報告書を利用する結果、従来は考慮できなかった反応過程を含めたプロセスプラズマのデータセットを構築できるようになり、データセットの構築を行う仕組み作りの一環になると期待される。

また、シミュレーション技術者のより幅広い関心を得ることにより、従来得られていなかった断面積データに対する測定の必要性が再認識され、実験や測定に必要となるグラントを獲得するための活動にも役立つと期待される。

# 本分科会の活動内容

過去に提唱されている衝突断面積・反応速度定数・輸送係数等の推算方法を調査し、どのような手法でどのようなデータが構築可能かを整理する。

その後、適当と思われる手法を反応過程ごとに選択し、GUI (Graphical User Interface)を備えた計算ツールの作成を目指す。

本分科会の活動は一般には非公開とし、Google等の利用可能なディスカッションボードを利用して、関係者の間で共有される。ただし、年に1度以上、原子・分子データ応用フォーラムにおいて進捗報告を行う。また、作成したツールを公開する場合、原子・分子データ応用フォーラムの承認を得ることとする。

# 調査する反応過程・輸送係数

電子衝突, イオン衝突, 中性粒子衝突による  
電離・励起・解離・再結合・付着・離脱・イオン-分子反応, 等  
の過程

また, 可能であれば,

拡散係数, 移動度, エネルギー輸送係数, 等

参考: 電離気体の原子・分子過程 (東京電機大学出版社)

# 推算の例 (Springer Series on Atoms+Plasma)

## 2.1.3 $e+H^*(2s) \rightarrow e+H^*(2p)$

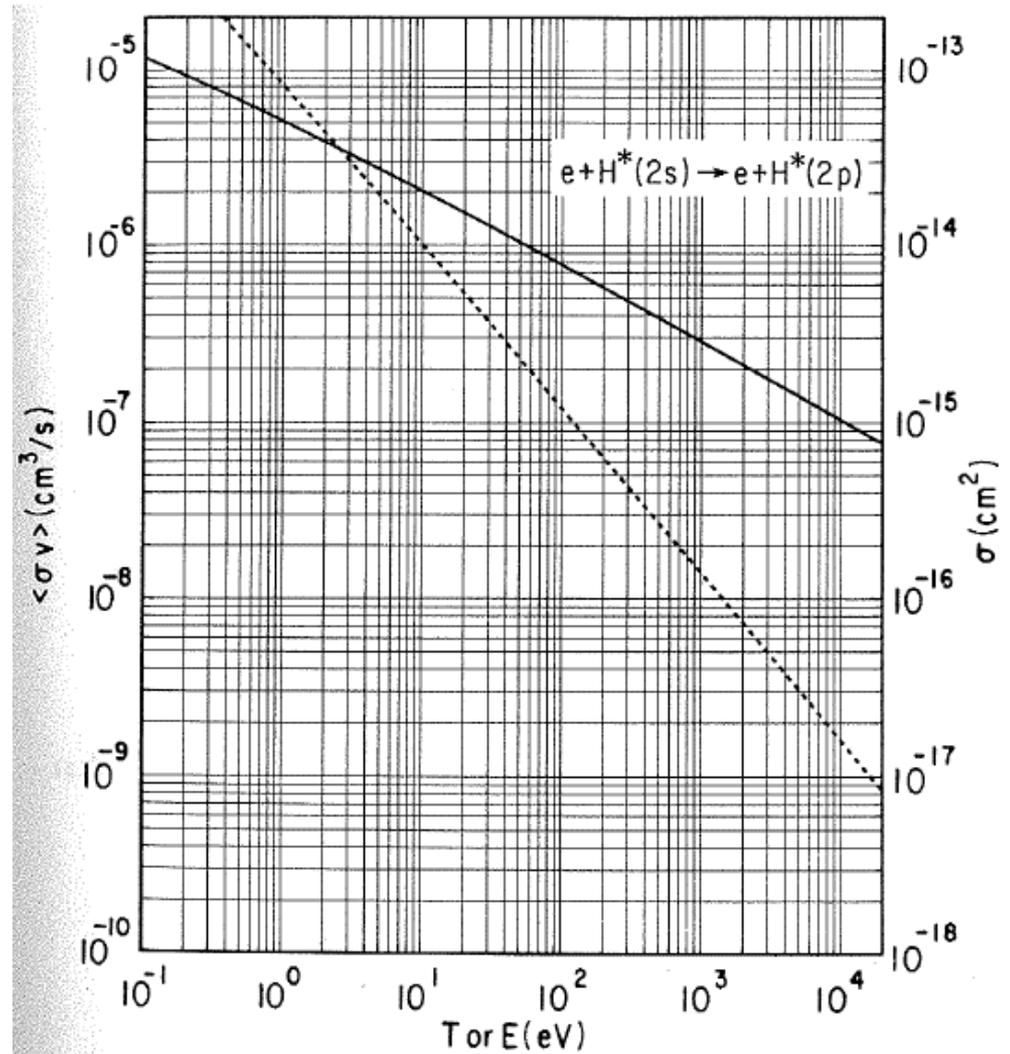
$$E_{th} = 1.934 \times 10^{-5} \text{ eV}, \quad \Delta E_e^{(-)} = E_{th}.$$

Cross Section:

$$\sigma_{(2s+2p)} = \frac{8.617 \times 10^{-15}}{E} \ln(1.14 \times 10^4 E) [\text{cm}^2].$$

Reference: Chibisov (1969)

cross section の値を推算する  
式や理論・コメント等を整理



Comment: The analytic formula for  $\sigma(2s + 2p)$  is obtained by perturbation theory and is valid for  $E \gg E_{th}$ .

# 本分科会の活動期間・内容

目標：3年間

この間、年3～4回程度、分科会で報告・進捗確認を行う。また、年1回以上、原子・分子データフォーラムの会議又はセミナーにて進捗報告を行う。

活動の大半は、電子メール・データのやりとりになると予想されるため、ディスカッションボードを準備予定。

引き続き活動を継続する価値があると認められる場合、3年後にメンバーで協議する。

# 本分科会のメンバー(1/28現在)

氏名

所属

(敬称略・順不同)

田辺 正孝

AOCプランニング

池田 圭

(株)アテナシス

田中 正明

ペガサスソフトウェア(株)

小方 誠司

(株)アルバック

田沼 肇

首都大学東京

その他, 原子・分子データ応用フォーラムを中心に公募

# 要検討項目

本分科会を通じて作成したツールは公開することを前提とする。ただし、著作権は放棄せず、第三者への再配布は許可しない、といった方針を確認する。

また、実際の使用方法等を原子・分子データ応用フォーラムのセミナー(有料)で紹介する等、NPO に還元することも検討する。

以上は現在の案であり、著作権を含め、今後の検討課題とする。

# 将来の展望

本分科会の活動は、当面、気相の反応をターゲットにしている。しかし、実際のプロセスプラズマの目的は、成膜やエッチングを含む表面処理が大半であり、その表面反応モデルの構築には、推算で対応できる範囲は極めて限られていると予想される。

表面反応モデルの構築に対するニーズ・シーズのマッチングには、実験・実測を行って頂ける研究機関が必要であり、その人的データベースや手法についても将来的に整理して行くことが望まれる。