

スーパーコンピュータによる スパッタ成膜シミュレーション高速化 —金属の膜厚分布予測への適用—

研究・開発機関 : 芝浦メカトロニクス株式会社
 利用施設 : FOCUSスパコン
 計算規模 : Fシステム(最大:36ノード)で1ケース3時間程度
 利用ソフトウェア : 独自開発の解析ソフト (Fortran、Intel MPI)

Before

- スパッタ成膜シミュレーションは社内ワークステーションで1ケース1週間程度かかっていました。
- 計算に非常に時間がかかるため、十分な有効活用には至っていませんでした。

After

- スーパーコンピュータを利用することにより1ケース3時間程度と計算時間が大幅に短縮しました。
- スパッタ成膜シミュレーションの有効活用により、効率的な開発が可能になりました。

背景と目的

半導体などの電子部品の導電膜生成、光学部品の反射率制御、装飾品の金属光沢付与など、産業界には金属の薄膜を固体表面に成膜したいという要求が数多くあり、その実現手法の一つに「スパッタ成膜(図1)」があります。この成膜のメカニズムを示します。まず真空容器内に被成膜物と膜と同種の金属でできた板(ターゲット)を置き、容器内が1Pa(パスカル)程度の圧力になるようにアルゴン(Ar)ガスを供給します(a)。次にターゲットに数100Vの電圧をかけるとプラズマが発生します。この中でAr原子の一部がAr⁺イオンに変わり、電場に引かれてターゲットに衝突します(b)。そして、Ar⁺イオンの衝突によりターゲットの金属原子がはじき出されます。この金属原子は容器内のAr原子と衝突しながら移動し、被成膜物に付着して膜になります(c)。

この手法は容易に高純度の膜を生成できる利点がありますが、ターゲットから離れた場所や陰になる場所では膜厚が薄くなるという欠点があります。このため、ターゲットの位置やArガスの圧力を変更したり、被成膜物を回転させたりすることで膜厚を均一にする調整を行います。従来はこれらを試行錯誤で行っていました。

近年、シミュレーションによる膜厚分布の予測が可能になりましたが、計算時間が長く十分には活用されていませんでした。そこで、スーパーコンピュータ(FOCUSスパコン)によりシミュレーションの高速化を実施し、積極的な利用を図ることにしました。

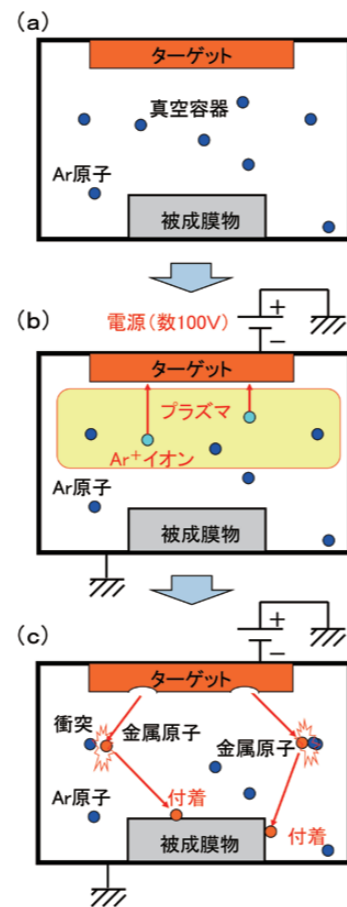


図1 スパッタ成膜のメカニズム

■ 利用成果

スパッタ成膜シミュレーションソフトはFortranおよびMPI(複数の計算機を使用して並列計算を行う技術)を用いて社内で独自開発しました。解析は図1(c)の部分を対象とし、ターゲットからはじき出された1個の金属原子が真空容器内を周囲のAr原子と衝突しながらジグザクに移動し、被成膜物の表面に付着するまでをモンテカルロ法と呼ばれる乱数を用いたシミュレーション手法により計算します。この計算を非常に多くの金属原子に対して行い、付着した金属原子の単位面積あたりの個数から膜厚分布を求めます。この計算では各金属原子の運動は独立していると仮定しており、1つの解析を複数のコアを同時に使用して計算を行う並列計算に適しています。FOCUSスパコンにて1440コアまでの解析を試みましたが、計算速度はコア数にほぼ比例して速くなりました。

シミュレーションの一例を示します。対象装置は、当社製高速枚葉式スパッタ装置BM-700(図2)です。この装置は斜めのターゲットと回転するホルダ(被成膜物を保持する回転テーブル)により、立体物・複雑形状への成膜が可能になっています。今回は、ターゲットをアルミニウム(Al)とし、ホルダに被成膜物として複数の四角柱を並べ、ホルダが回転していない状態での各四角柱側面への膜厚分布を計算しました(図3)。その結果、計算値は実験値と非常に良く一致していることがわかりました(図4)。実際の運用ではホルダは回転していますので、ホルダの角度を細かく変更した解析を複数回行い、合算して回転時の膜厚分布を求めます。

従来、このスパッタ成膜シミュレーションは社内ワークステーションで1ケース1週間程度かかっていましたが、スーパーコンピュータを使用することで1ケース3時間程度と大幅な時間短縮が実現しました。これによりシミュレーションの業務への適用が可能になりました。今後は、より高度かつ高精度な解析ソフトを開発し、適用範囲を広げていく予定です。



図2 BM-700装置外観

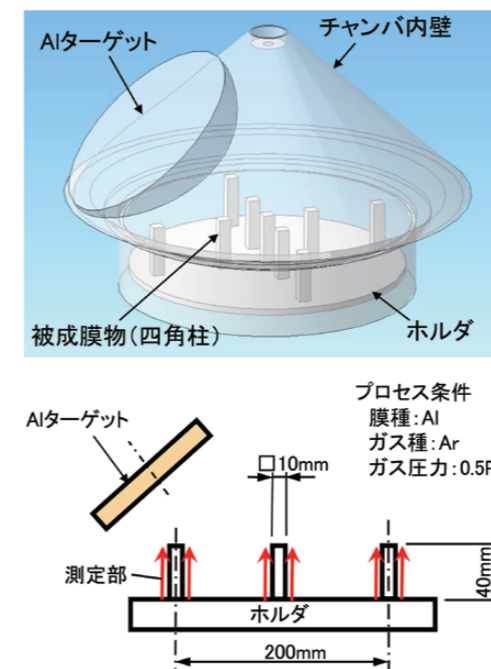


図3 装置内部と被成膜物の構造

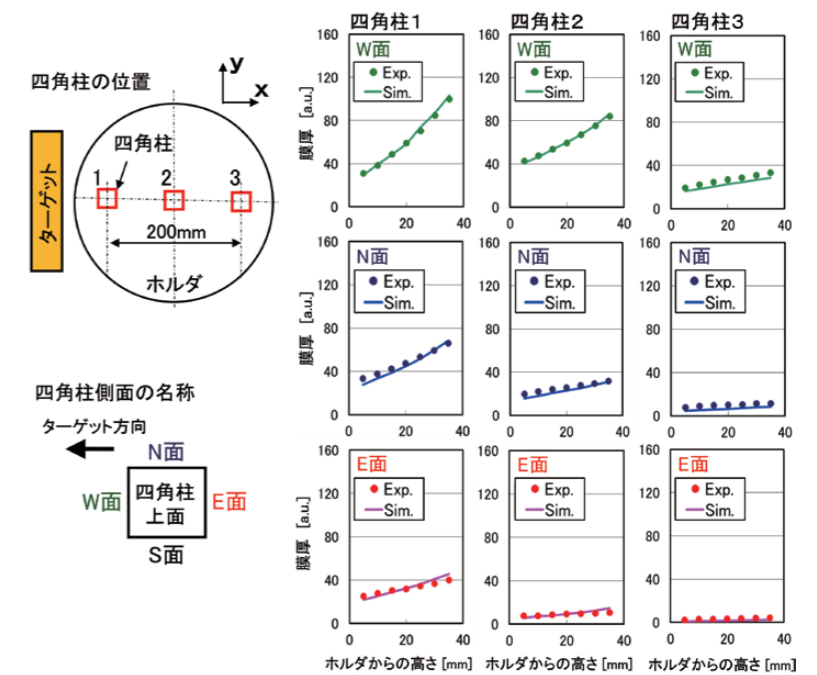


図4 実験結果と解析結果の比較