

## 【基盤研究(S)】

理工系（総合理工）



### 研究課題名 多階層シミュレーションによる新規多様材料プラズマプロセスの量子論的理解

大阪大学・大学院工学研究科・教授 はまぐち さとし  
浜口 智志

研究課題番号： 15H05736 研究者番号： 60301826

研究分野： プラズマエレクトロニクス

キーワード： 数値シミュレーション プラズマ物質相互作用 プラズマプロセス

#### 【研究の背景・目的】

近年、プラズマを用いた表面改質は、半導体デバイス製造プロセスから、バイオ材料プロセスまで、産業界で幅広く活用されている。これらの最先端の応用プロセスでは、低い入射エネルギーや紫外光の影響下での非熱平衡化学反応が、様々な新規基板材料に対して利用され、これまでのプラズマ表面相互作用の学術体系では、理解不能な様々な現象が確認されている。こうしたデリケートな非熱平衡表面化学反応を理解するためには、量子論的解析が必要不可欠である。本研究では、量子シミュレーションを最大限に活用した、多階層シミュレーションを用いて、低エネルギーイオン照射による原子層プラズマプロセスの物理機構を理解するための学術基盤を確立することを目的とする。これにより、ラジカルや活性酸素（ROS）による化学反応が主体となる最先端半導体プロセスやプラズマバイオプロセスの新しい学術体系の創生が可能となると期待される。

#### 【研究の方法】

本研究では、プラズマ照射下の半導体デバイス新規材料・バイオ材料等表面に対し、量子コードにより、その表面反応を解析し、表面反応の物理機構を明らかにする。また、これらのデータに基づいて、古典的MDシミュレーションの原子間ポテンシャルを新規に開発し、更に、古典MDコードを、プラズマコードと量子コードと連成する多階層シミュレーションシステムを構築する。一方、シミュレーション結果は、プラズマ実験・ビーム実験・バイオ実験の結果と比較し、シミュレーションの精度を向上させる。（図1）

#### 【期待される成果と意義】

本研究では、量子論的シミュレーションコード・第一原理MDコード・気相プラズマコードを連成する多階層シミュレーションシステムを開発して、新規材料に対する新規プロセスを解析する。特に、新規半導体材料やバイオ材料に関するプラズマ照射効果を明らかにする。本研究により、低エネルギー領域におけるプラズマ表面相互作用の新しい学術が創成されると同時に、新規材料 RIE 解析用の多階層シミュレーションシステムが、世界ではじめて構築され、その意義は、極めて大きい

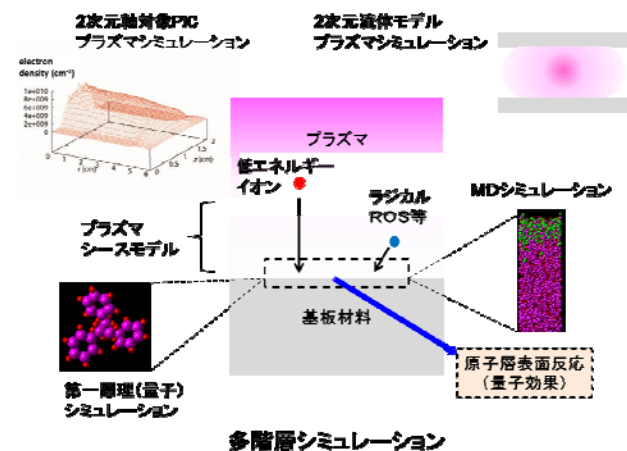


図1 本研究で構築する多階層シミュレーションシステム概念図。流体モデル以外、図中のシミュレーションコードは、全て、代表者のグループが開発した。本研究で、これらのコードを、低エネルギー表面反応プロセス用に発展させ、連成（多階層）シミュレーションを可能とする。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- K. Mizotani, *et al.*, “Molecular dynamics simulation of silicon oxidation enhanced by energetic hydrogen ion irradiation,” *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**(15) (2015) 152002 (5pp)
- H. Li, *et al.* “Suboxide/subnitride formation on Ta masks during magnetic material etching by reactive plasmas,” *J. Vac. Sci. Tech. A* **33**(04) (2015) 040602 (5pp) ..
- K. Karahashi and S. Hamaguchi, “Ion beam experiments for the study on plasma-surface interactions,” *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**(22) (2014) 224008-1~224008-15.

#### 【研究期間と研究経費】

平成 27 年度～31 年度 116,900 千円

#### 【ホームページ等】

<http://www.camt.eng.osaka-u.ac.jp/hamaguchi/>  
[hamaguch@ppl.eng.osaka-u.ac.jp](mailto:hamaguch@ppl.eng.osaka-u.ac.jp)