

審査の結果の要旨

氏名 崎山 幸紀

本論文は、半導体製造プロセスのような化学反応を伴う希薄気体流れについて、電子運動から輸送現象までを合理的にモデル化するための多重スケール解析モデルを確立することを目的としている。

近年の高度情報化社会を支える半導体産業において、エッチングやCVD (Chemical Vapor Deposition) 等の半導体製造プロセスが非常に重要な役割を果たしている。このような極限的な技術開発を効率的に行なうためには、従来までの実験的手法に加えて詳細な数値解析モデルの構築が必須である。特に近年、生産速度の向上とコスト低減のためにプロセスの反応装置内が低圧化される傾向にあり、典型的なCVDプロセスにおいては、もはや連続流体の仮定は成立しない。このような条件下においては、DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) 法やPIC/MC (Particle In Cell / Monte Carlo) 法などによる解析が必要である。これら粒子法では衝突断面積や散乱角といった分子レベルのモデル化が必要となってくるが、そのような汎用的なモデルは未だ確立されていない。

以上のような背景を踏まえ、本論文では分子の電子状態から反応容器内の流れのスケールまでを体系的にモデル化する多重スケール解析を提案する。この方法では、電子運動を解析することにより分子間相互作用を求め、そこから分子間衝突に関する各種モデルを構築する。さらに、それらのモデルをDSMC解析に導入することによって、最終的な反応装置内の熱流動構造に関する知見を得ることが可能となる。このような従来までの方法とは全く異なるアプローチによって、経験的要素を極力排除した汎用的な解析モデルを構築することが本論文の内容であり全6章から構成される。

第1章は「序論」であり、研究の工学的な背景、目的、そして従来までの研究について述べられている。

第2章は「分子間相互作用モデルの構築」である。ここでは非経験的分子軌道法を用いて SiH_4/H_2 系に共通な分子間ポテンシャルを構築する手法について述べられている。まず $\text{SiH}_4\text{-H}_2$ の分子軌道計算結果を用いて Si-H 及び H-H 間のモデルを構築する。さらに、この結果を利用して $\text{SiH}_4\text{-SiH}_4$ の分子軌道計算結果から残りの Si-Si 間のモデルを構築する。このような手順を踏むことによって、 SiH_4/H_2 系に共通なパラメータを有するモデルを構築することができる。ただし、この際に斥力と引力に分解することによって最小二乗解を求めるための数学的取り扱いが容易となり、正確なパラメータの決定が可能となる。さらに導出されたポテンシャルの妥当性を検証するため、粘性係数の実験値と分子動力学計算との比較が行ない、両者が実験誤差範囲内で一致することが確認されている。

第3章は「分子間衝突モデルの構築」である。前章で得られたポテンシャル関数を用いて古典的軌道計算の解析を行ない、 $\text{SiH}_4\text{-SiH}_4$ 及び $\text{SiH}_4\text{-H}_2$ 間の衝突断面積、散乱角分布のモデル化を行なっている。全衝突断面積は並進エネルギーのみの関数として記述することができ、また散乱角モデルは単原子古典衝突理論から一定の分散を有して分布することが明らかとなった。これらのモデルは数%程度の誤差で古典軌道計算の結果を再現することができ、また $\text{SiH}_4\text{-SiH}_4$ 及び $\text{SiH}_4\text{-H}_2$ に共通である。さらに、得られた結果を DSMC 計算モデルへと拡張したところ、熱平衡状態の維持及び並進エネルギーの緩和を再現し得ることが確かめられた。

第4章は「DSMC 計算における各種モデルの拡張」である。ここでは、統計的な重みに着目して DSMC 計算における化学反応計算モデルの検証と拡張を行ない、さらに多重時間刻み法の提案について述べている。また、境界条件に対する簡単な考察も行なっている。

第5章は「Jet-CVD プロセスの多重スケール解析」である。ここでは本研究で構築された各種衝突モデルによる実スケールの Jet-CVD プロセスの数値解析について述べられている。また本研究と従来までの単純な衝突モデルが成膜にどの程度の差異を生じ得るかについて論じられており、本研究で構築したモデルの有効性が述べられている。

そして、第6章が「結論」である。

分子間ポテンシャルや古典的軌道計算といった個々のスケールについては、これまでも数多くの研究例がある。しかし、これらの異なるスケールを結びつけてマクロスケールの現象までを取り扱った研究は他に類を見ない。本研究は、電子運動から輸送現象までを合理的にモデル化する、という多重スケール解析の具体的な手法を提案したという点で非常に優れた論文である。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。