Physics-Informed Neural Network による RF 電界下における電子速度分布関数の計算

Calculation of electron velocity distribution function in RF electric fields

using Physics-Informed Neural Network

室蘭工大 〇川口 悟, 髙橋一弘, 佐藤 孝紀

Muroran I. T. °S. Kawaguchi, K. Takahashi, and K. Satoh E-mail: skawaguchi@mmm.muroran-it.ac.jp

1. 背景

半導体デバイス製造におけるエッチングなどにおい て, RF 電圧によって駆動されるプラズマが広く用いら れている。プラズマの性質を明らかにする上で、電子速 度分布関数(EVDF)は最も基礎的かつ重要な情報の一つ である。EVDF はボルツマン方程式を解くことによって 得ることができ,数値計算に基づく RF プラズマ中の EVDFの計算が行われている[1, 2]。RF プラズマの性質 について議論する上で,周期的な定常状態における EVDF が重要となるが、従来の数値計算法でそれを求め るには、多数のRF サイクルを解く必要がある。

本研究では Physics-Informed Neural Network (PINN)[3] を活用して, RF 電界下におけるボルツマン方程式の周 期的な定常解を,多数の RF サイクルを解くことなく, 直接求める方法を提案する。ここでは、出力に周期性を 予め持たせた人工ニューラルネットワーク(ANN)を用 いて EVDF を表現し、ANN の出力がボルツマン方程式 を満たすように学習を行う。

2. 計算方法

電界*E*(*t*) = (0,0,*E*(*t*))が与えられた自由空間におけ る EVDF $f(v_x, v_z, t)$ は、ボルツマン方程式より得られる (1)式にしたがうと考えられる。

$$\left[\frac{qE(t)}{m}\frac{\partial}{\partial v_z} + \frac{\partial}{\partial t} + R_i(t) - J_c\right]f(v_x, v_z, t) = 0 \quad (1)$$

qは電子の電荷, mは電子の質量, $R_i(t)$ は電離衝突周波 数, $J_c f(v_x, v_z, t)$ は衝突項を表す。また, $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$ とする。(1)式を $\hat{L}f(v_x, v_z, t) = 0$ と表記する。

(1)式を満たす EVDF を ANN によって表現する。Fig. 1 は本研究で用いた ANN の概略図を示す。Wang et al. [4] が提案した順伝搬型ニューラルネットワークを基に,学 習に依らず ANN の出力が周期的になるように, Periodic Layer [5]を追加する。ANN の出力値の周期につ いては, E(t)と同じ周期とする。

損失関数を(2)式のように定義する。ANN への入力値 (v_{xi}, v_{zi}, t_i) を一様かつランダムにサンプリングし,各入 力値に対する ANN の出力 $f(v_{x,i}, v_{z,i}, t_i; \boldsymbol{\theta})$ を計算する。 その後、 $|\hat{L}f(v_{x,i}, v_{z,i}, t_i; \theta)|$ を計算し、それらの平均値が 小さくなるように ANN 内のパラメータ θを更新する。

$$\mathcal{L}_r = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} \left| \hat{L}f(v_{x,i}, v_{z,i}, t_i; \boldsymbol{\theta}) \right|$$
(2)

He ガス中の EVDF を提案方法および Monte Carlo simulation (MCS)によって計算し、EVDF より平均エネ ルギーなどの電子輸送係数を求める。気体分子数密度を N=3.535×10²² m⁻³とし, 換算電界を E₀/N = 100 Td とする。 電界の周波数については、10,50,200 MHz とする。

3. 計算結果および考察

Fig. 2 は He ガス中の電子の平均エネルギーおよび電

離衝突周波数の計算結果を示す。提案方法および MCS による計算値が一致しており,提案方法によって周期的 な定常状態の EVDF を正確に計算できることが示唆さ れる。電界周波数が高くなるに従い、電子が電界の時間 変化に対して追従できなくなり, 平均エネルギーが減少 する。これによって電離衝突周波数が低下する。

以上より、出力に周期性をもたせた ANN に(1)式を学 習させることにより,周期的に変化する電界下における 周期的な定常状態の EVDF を直接計算することができ ることが示された。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP22K14245 の助成および東京 エレクトロンテクノロジーソリューションズの支援を 受けて行われた。

参考文献

- [1] K. Maeda and T. Makabe, Jpn. J. Appl. Phys. 33, 4173 (1994)
- Z. Lj. Petrović et al., Appl. Surf. Sci. 192, 1 (2002). [2]
- [3] M. Raissi *et al.*, J. Compt. Phys. **378**, 686 (2019).
 [4] S. Wang, *et al.*, SIAM J. Sci. Compt. **43**, A3055 (2021).
 [5] S. Dong and N. Ni, J. Compt. Phys. **435**, 110242 (2021).



Fig. 2. Time behavior of mean energy and ionization collision frequency in He at various frequencies.