

Title	事例2 : イオンビームプロセス・シミュレーションの 可視化
Author(s)	出口, 弘; 渋谷, 陽二
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1992, 86, p. 86-92
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65981
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

事例2

イオンビームプロセス・シミュレーションの可視化

大阪大学大型計算機センター研究開発部 出ロ 弘 deguchi@harmony.center.osaka-u.ac.jp 大阪大学工学部機械工学科 渋谷 陽二 sibutani@mech.osaka-u.ac.jp

1. イオンビームプロセスの分子動力学シミュレーションと可視化

電場により高速に加速されたイオンを材料表面に照射することによって、材料 の表面を改質したり薄膜を形成したりする手法はイオンビームプロセスと言われ ています。これは、高度に知的機能を持つ、いわゆるインテリジェント材料の創 製に必要な技術の一つと考えられています。この照射過程を力学的な側面からみ ると、熱力学的非平衡状態において、材料をとりまく外部から物質の流出入が激 しく行なわれる開放系力学挙動として捉えられます。この開放系では、従来の閉 鎖系で予測できない現象やメカニズムの見い出される可能性があります。



図1 イオンビームプロセスのモデル

図1に示したように、アルミニウム単結晶の(110)面に加速されたアルゴンイオ ンを照射するモデルを考え、表面原子構造の変化やそれに伴う内部応力の発生と いった材料強度的な観点に着目した分子動力学シミュレーションを行ないました。 またこのシミュレーションは、不活性ガスイオンによるスパッタリングを利用し たX線光電子分光法(XPS)による表面解析過程のシミュレーションにも対応 しています。

今回、照射過程のシミュレーション結果である時系列データを IRIS Explorer を用いた3次元アニメーションとして可視化しました。



図2 アルゴンイオン照射後(1000[eV])

図2は 1000[eV] に加速されたアルゴンイオンを照射した後の様子を示していま す。表面原子を叩き出すスパッタリング現象が見られます。Disordered の領域や 注入イオンの侵入位置、ターゲット材の構造変化が可視化されています。スパッ タリングによる格子間原子や空孔の形成は照射域の体積膨張を引き起こし、この ことが層内の圧縮内部応力を発生させることになります。



図3 アルゴンイオン照射後(2[eV])

図3は2[eV] に加速したアルゴンイオンを照射した後の様子を示しています。ア ルゴンイオンは内部に入らず表面にトラップされ吸着の現象がみられます。吸着 されたアルゴンイオンは一定の位置に留まらず、表面上を動き回る migration 挙 動を示すことが今回のアニメーションにより明らかになりました。また、アルゴ ンイオンの代わりに金属イオンを用いると、薄膜の形成過程のアニメーションが 可能となり、応用範囲の広がることが期待できます。

## 2. 入力モジュールの説明

シミュレーション結果はターゲット材料(バルク)であるアルミニウム金属原 子と照射アルゴンイオンの位置を表す座標値の時系列データです。ある時刻のデ ータはファイルに以下のようなフォーマットでアスキーコードの文字列として表 現されています。このようなファイルがシミュレーションのステップ数(400個) だけあります。例えば、n0、n1、... n399。

860 840			総粒子数	バルク粒子数	1	
3.501438e-13			シミュレーション時刻		2	
7.264169e-01	8.582170e-01	0.000000e+00	バルク粒子の	x、y、z座標	3	
3.569183e+00	8.510909e-01	0.000000e+00	84	〇個		
・・・バルク粒子座標省略・・・						
1.242493e+00	1.761305e+01	3.163920e+01	イオン粒子の	)X、Y、Z座標	4	
1.738245e+01	4.229254e+00	3.163920e+01	2	〇個		
・・・イオン粒子座標省略・・・						

イオン粒子数は①のデータを読み込んだ後に(総粒子数-バルク粒子数)で計算 できます。particles モジュールを使って粒子を球で表示するために1次元非定 型格子データとして扱います。また、バルク粒子とイオン粒子を色分けするため に、出力を2系列(バルクとイオン)にします。図4はある時刻のデータファイ ルを読み込み、Explorer 型データをバルクとイオンの2系列出力する rdia モジ ュールを DataScribe で作成したところです。



図4 入力モジュール rdia

2.1 入力テンプレート

まず Template メニューで、Direction を Input、Type を Ascii として入力 テンプレートを作ります。名前を inputfile としています。

①の粒子数を読み込むために、パレットから入力テンプレートに Integer を2 つドラッグします(それぞれ名前を totalnum、bulknum としています)。次に、 イオン粒子数 ionnnum を計算するために Template メニューから Constants を 選び、定数テンプレートを作り、その中にパレットから Set をドラッグします( 名前はデフォルト Set1 のままにしています)。Set Set1 の右丸をクリックして 開き、その中にパレットから Integer をドラッグし(名前を ionnum としていま す)、その値として右に式 totalnum - bulknum を入力します。

②の時刻を読み込むために、パレットから入力テンプレートに Double をドラッグします(名前を time としています)。

③のバルク粒子の座標値を読み込むために、パレットから入力テンプレートに Vector をドラッグします(名前を bulk としています)。Vector bulk の右丸 をクリックして開き、インデックスを1 – bulknumとし、パレットから Vector を ドラッグして要素の型を Vector とします。さらにその Vector を開き、インデ ックスを1-3とし、パレットから Double をドラッグし要素の型を Double と します。これで Vector bulk は Double 型の3次元ベクトルの bulknum 個の配 列となります。

④のイオン粒子の座標値を読み込むために、パレットから入力テンプレートに Vector をドラッグします(名前を ion としています)。Vector ion の右丸を クリックして開き、インデックスを1 – <u>ionnum</u>とします。以下 Vector Bulk と同 様にして、Vector ion を Double 型の3次元ベクトルの ionnum 個の配列としま す。

2.2 出力テンプレート

まず Template メニューで、Direction を Output、Type を Explorer として 出力テンプレートを2つ作ります。それぞれ名前を out\_bulk、out\_ion としてい ます。

1 次元非定型格子データを出力するために、出力テンプレート out\_bulk および out\_ion にパレットから 1D Curv をドラッグします (それぞれ名前を bulk、 ion としています)。1D Curv bulk および ion の右丸をクリックして開き、そ れぞれの nDataVar1 の右に1、nCoordVar1 の右に3を入力して、要素の次元を 1、格子点の座標の次元を3とします。

2.3 接続と保存

まず、③のバルク粒子のデータ(座標)を out\_bulk に出力するために、入力 テンプレート inputfile の bulknum と出力テンプレート out\_bulk の dims1 を 接続し、入力テンプレートの bulk と出力テンプレート out\_bulk の coord1 を 接続します。次に、④のイオン粒子のデータ(座標)を out\_ion に出力するため に、定数テンプレートの ionnum と出力テンプレート out\_ion の dims1 を接続 し、入力テンプレートの ion と出力テンプレート out\_ion の coord1 を接続 し、入力テンプレートの ion と出力テンプレート out\_ion の coord1 を接続 ます。これらの接続操作の時はマウスの右ボタンを使うことに注意して下さい。 接続が完了したら、File メニューから Save As を選び、ファイルブラウザー を呼び出し、このモジュールを rdia として保存します。

## 3. マップの説明

図5は図2、3の可視化画像およびアニメーションを作成するためのマップで す。まず、DataScribe で作成したファイル入力モジュールの rdia を呼び出しま す。次に、画像表示を得るための Render、粒子を表示するための particles、粒 子に色を付けるための GenerateColormap の各モジュールをテンプレートからマ ップエディタにドラッグします。あとは図5のようにそれぞれのモジュールの入 出力ポートを接続します。GenerateColormap モジュールの接続は、その出力ポー トパッドから Colormap-Lattice を選び、particles モジュールの入力ポートパ ッドの Colormap-Lattice と接続します。これらの接続操作の時はマウスの右ボ タンを使うことに注意して下さい。



図5 可視化マップ anion.map

ファイル入力モジュール rdia の inputfile にシミュレーションデータのファ イル名を入力します。particles モジュールにおいて、粒子を球で表示するため に spheres ボタンを選択し、粒子の大きさ(半径)をのスライダーで調節します。 バルクとイオン粒子の色付けをそれぞれの GenerateColormap モジュールで行な います。

## 4. アニメーションの作成

この事例のように可視化画像の生成に時間がかかってしまいリアルタイムアニ メーション(VTRで流し取りができます)ができない場合には、コマ取りによ ってアニメーションを作らなければなりません。コマ取りアニメーションを作成 するときは、アニメーションを構成する各フレームに対応するファイルを用意し ます。ファイル名は(ベース+番号)という形にします。例えば、n0、n1、... n399。

## 4.1 準備

まず準備として、ビデオテープにタイムコードを記録します。コマ取りシステムのVTRにおいて以下のように操作します。なお、アニメーションシステムの 使い方の詳細は「IRIS-4Dのビデオシステムについて」を参照して下さい。

- ・REGEN/PRESET を「PRESET」にする
- ・RECRUN/FREERUN を「RECRUN」にする
- ・CONTROL の REMOTE/LOCAL を「LOCAL」にする
- ・SEARCH/MENU を「MENU」にする
- ・ダイヤルメニュー5008「TIME CODE PRESET」を選ぶ サーチダイヤルをJOGモードにして回し、
  - 「STOP(DATA)」を押す
- 「RESET」を押し00:00:00:00にし、
  「SEARCH (SET)」を押す
- ・SEARCH/MENU を「SEARCH」にもどす
- 「REC」を押しながら「PLAY」を押す
- ・所望の時間を過ぎた時点で「STOP」を押す
- ・REGEN/PRESET を「REGENE」にもどす
- ・RECRUN/FREERUN を「FREERUN」にもどす
- ・CONTROL の REMOTE/LOCAL を「REMOTE」にもどす
- 4.2 コマ取り
  - コマ取り用シェルコマンド an im を起動します

% /usr/video/local/anim

- ② 録画を開始するタイムコードを入力します
  - ・ O K ならば「y」を入力します
  - デフォルトは00:01:00:00(1分0秒0フレーム)です ・変更するときは「n | を入力し、
    - h(時)、m(分)、s(秒)、f(フレーム)をそれぞれ入力します
- 動画の速度を設定します
  - ・ファイル1つあたり何フレーム録画するかを入力します
    1のとき動きが最も速くなり、大きくするほど動きが遅くなります
    ☆最大99フレーム(約3秒)です
- ④ ファイル名を入力します
  - ・ファイル名のベースを入力します
  - ・最初のファイルの番号を入力します
  - ・最後のファイルの番号を入力します
  - ☆使用ファイルを、 n 1 、 n 2 … n 9 9 とすると

n、1、99 とそれぞれ入力します

- ⑤ 設定を確認します
  - ・ O K ならば「y」を入力します。
  - ・変更するならば「n」を入力します
  - ・中止ならば「q」を入力します
- ⑥ EXPLORER のデータ入力モジュールのファイルを設定します
  ・表示されているファイル名を EXPLORER のファイル入力モジュールで 入力します

⑦ 画像生成の完了を確認し、そのフレームを録画します

- 「Render」のウィンドウの右上の四角をクリックし、 ウィンドウを画面全体に広げ、画像生成の完了を待って、
   「y」を入力します
- ・このとき「y」以外をを入力するとコマ取りを中止できます
  ・録画を開始すると、「SCUED」「EDIT」「DONE」と 表示され、終了後、次のファイル名とタイムコードが表示されます

8 6 ~

参考文献

- 1. 山田 公: イオンビームによる材料創製, 金属, pp.42-47, 1991-1.
- 三宅 庄司 : 最近のイオンビーム発生および利用技術の動向, 高温学会誌, Vol. 18, No. 3, pp.107-118, 1992-5.
- 渋谷 陽二, E. Darque-Cretti, 北川 浩: イオン・インプランテーション における開放系力学挙動の検討, 第15回NCPシンポジウム論文集, pp. 188-193, 1992-1.
- 4. 渋谷 陽二,北川 浩:イオン注入による表面改質層の残留応力評価,複合 ・接合構造の創成技術と力学的評価シンポジウム,1992-9.
- 5. 出口 弘 : 汎用可視化ツール Explorer の使い方, 大阪大学大型計算機セン ターニュース, Vol. 22, No. 2, 1992-8.
- 6. 小林 一男 : IRIS-4D のビデオシステムについて、大阪大学大型計算機セン ターニュース, Vol. 22, No. 2, 1992-8.