

## サロゲートモデルを利用した 半導体用材料ガス供給システムのシミュレーション

### Simulation of material gas supply system for semiconductors using surrogate model

相葉 恵介\*

AIBA Keisuke

#### 1. はじめに

当社では、固体材料を使用した半導体用材料ガスの供給システム開発に取り組んでいる。このシステムは、常温・常圧で固体材料を容器に充填し、容器周囲に設けられたヒータで加温し、固体材料を気化させて、半導体用材料ガスとして供給するシステム（以下、「本システム」という）である。

本システムにおいて、半導体用材料ガスの安定供給のためには、容器内の気相圧力を所定の圧力に維持することが必要であり、気相圧力を維持するためには、ヒータによる容器への加熱量を適切に制御することが重要である。例えば、ヒータ配置（ヒータ数）を変えることで加温を制御できるが、ヒータ配置の組合せは、すべてを実験で検討できるような組合せ数ではなく、費用や時間にも限界があり現実的ではない。

そこで、ヒータ設計にあたって、複数のヒータ配置を想定し、配置の違いに応じた容器内の気相圧力の挙動を 1D シミュレーション（流体の圧力や温度等の挙動を連立微分方程式等のシンプルな数理モデルで表現するシミュレーション）<sup>2)</sup>によって把握し、当該シミュレーションをヒータ配置の検討に活用した（以下、「本取り組み」という）。なお、1D シミュレーションには、Modelica 言語（OpenModelica Ver. 1.18.1）<sup>3)</sup>を利用した。

#### 2. 1D シミュレーションの課題と解決手段

##### 2.1 1D シミュレーションの課題

図 1 に、気相圧力の経時変化を示す。図 1 の「実験結果」は本システムでの供給実験において、容器を一定条件で加温した際の気相圧力、「飽和蒸気圧」は固体材料に関する飽和蒸気圧の近似式から求められる気相圧力、また「サロゲートモデル」は後述するサロゲートモデルから求められる気相圧力である。

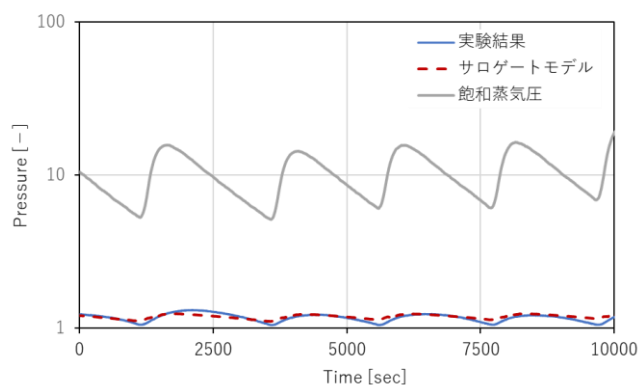


図 1 気相圧力推算の検討結果

なお、「実験結果」では、容器内の気相圧力を保つためにヒータ ON-OFF 制御によってヒータ温度を変動させる影響を受け、波打った挙動を示している。また、図 1 では、気相圧力を正規化し、視認性を考慮し対数表示とした。当初は、容器内の気相圧力が飽和蒸気圧となると想定していたが、図 1 に示す通り、「実験結果」と「飽和蒸気圧」とは大きく相違した。

##### 2.2 解決手段

上述の課題に対し、本取り組みでは、飽和蒸気圧ではなく、サロゲートモデルによって気相圧力を推算し、「実験結果」に見合う 1D シミュレーションを実施することとした。

一般に、サロゲートモデルとは既存のデータをもとに、既知の説明変数と目的変数との間にある法則性を発見し、その法則性を利用して未知の目的変数を予測するモデルである<sup>4)</sup>。当該法則性は、近似関数を用いる応答曲面法や機械学習により見出すことができる。

本取り組みでは、2 ケースの実験結果から 2 つの説明変数（容器内の気相温度 2 点）と 1 つの目的関数（容器内の気相圧力 1 点）の組合せ約 10 万点をサンプル点とし、2 次多項式近似による応答曲面を生

\* 技術開発ユニット 開発企画統括部 開発業務部 シミュレーションサポート課

成した。なお、応答曲面の生成には、汎用の設計探査ツール Simcenter HEEDS Ver. 2021.2<sup>5)</sup>を利用した。

サロゲートモデルの生成にあたって重要な点は、実験結果に含まれるノイズや外れ値を排除する前処理を行うことである。前処理により、サロゲートモデルの精度が向上し、出力される気相圧力の精度は決定係数 (R2) 0.8 以上となった。図 1 に示すように、「サロゲートモデル」と「実験結果」とは概ね一致している。

### 3. 1D シミュレーションの数理モデル

本取り組みの 1D シミュレーションでは、固体材料が充填された容器をヒータで覆い、ヒータによって容器内温度を上昇させ、気化したガスを容器の 1 箇所から供給することを想定する。また、容器の形状は中空円柱とし、容器内は固体材料が一様に存在する領域 (固相)、および固体材料から気化した気体が一様に存在する領域 (気相) で構成されると仮定した。

#### 3.1 質量収支に関する数理モデル

容器内の質量関係の略図を図 2 (a) に示す。気相の質量  $m_g$  と固相の質量  $m_s$  の総和を容器内の質量とし、それぞれの質量の経時変化を、式 (1)、式 (2) で表す。

$$\frac{dm_g}{dt} = -(F_{sup} - F_{vp}) \quad (1)$$

$$\frac{dm_s}{dt} = -F_{vp} \quad (2)$$

ここで、 $F_{sup}$  は供給量、 $F_{vp}$  は気化量を示す。また、気相の質量  $m_g$ 、および固相の質量  $m_s$  を、固相の体積  $V_s$  で式 (3)、式 (4) のように表す。

$$m_g = \rho_g(V_T - V_s) \quad (3)$$

$$m_s = \rho_s V_s \quad (4)$$

ここで、 $V_T$  は容器内容積であり一定である。また、 $\rho_g$  は気相の密度、 $\rho_s$  は固相の密度を示す。

#### 3.2 エネルギー収支に関する数理モデル

容器内エネルギー関係の略図を図 2 (b) に示す。容器内の微小時間における全エネルギーの経時変化を、式 (5) のように表す。

$$\frac{dH_T}{dt} = Q_{zg} + Q_{rg} + Q_{zs} + Q_{rs} - (Q_{g,out} + Q_{s,out}) \quad (5)$$

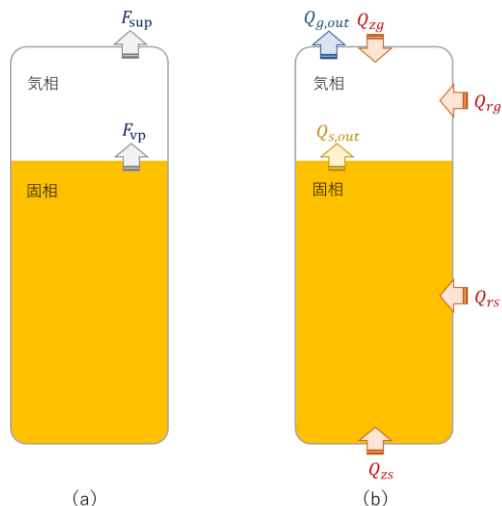


図 2 (a) 質量関係の略図 (b) エネルギー関係の略図

ここで、 $H_T$  は全エネルギー (気相のエンタルピーと固相のエンタルピーの総和) とする。また、 $Q_{zg}$  は気相が容器上部から得るエネルギー、 $Q_{rg}$  は気相が容器側部から得るエネルギー、 $Q_{zs}$  は固相が容器底部から得るエネルギー、 $Q_{rs}$  は固相が容器側部から得るエネルギー、 $Q_{g,out}$  は供給により気相が失うエネルギー、 $Q_{s,out}$  は気化により固相が失うエネルギーを示す。式 (5) の各エネルギー (伝熱量)  $Q_{zg}$ 、 $Q_{rg}$ 、 $Q_{zs}$ 、 $Q_{rs}$  は、総括伝熱係数、伝熱面積、および温度差 (気相温度と容器温度、固相温度と容器温度) で定義する。

式 (1) ~ (5) で示した数理モデルを解いて気相温度を算出し、サロゲートモデルに気相温度を入力することで、気相圧力を算出する。

### 4. 1D シミュレーションの計算例

前述したように、ヒータ配置の組合せは数多く存在するが、設計あるいは製作可能なヒータ配置を想定し、1D シミュレーションを実施することで、ヒータ配置の検討に対する限られた実験費用や実験時間を有効に活用することができる。

図 3 に、ヒータ配置のタイプ例を示す。図 3 の矢印は各々のヒータによる加熱を表しており、数字が大きいほど温度が高いヒータである。また、図 3 の L1、L2、L3 は、各タイプで容器の側面に取り付けるヒータ幅を示す。

図 4 に、各タイプのヒータ配置による気相圧力のシミュレーション結果を示す。当該シミュレーション結果から、想定したヒータ配置では、気相圧力に大きな差が無いことが分かり、タイプ 1 のヒータ配

置を選定し、実際の供給実験を行うに至った。タイプ1は、他のタイプと比べて、製作工数がかからず安価に製作可能である。

ヒータ配置タイプ1で供給実験を行い、1Dシミュレーション結果との比較を行った。なお、当該供給実験では、開始から終了まで安定供給できたことを確認している。図5に気相圧力の経時変化を示す。「実験結果」はヒータ配置タイプ1による実験結果、「シミュレーション結果」は前述のヒータ配置タイプ1でのシミュレーション結果、「平均値」は実験結果での一度のヒータ ON-OFF 制御における気相圧力の平均を示す。実験結果については、図1と同様、容器内の気相圧力を保つために、ヒータ ON-OFF 制

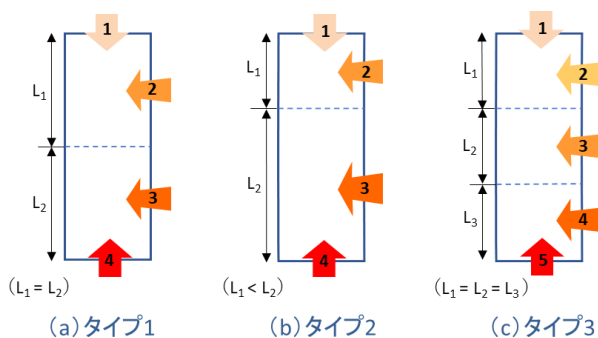


図3 ヒータ配置タイプ例

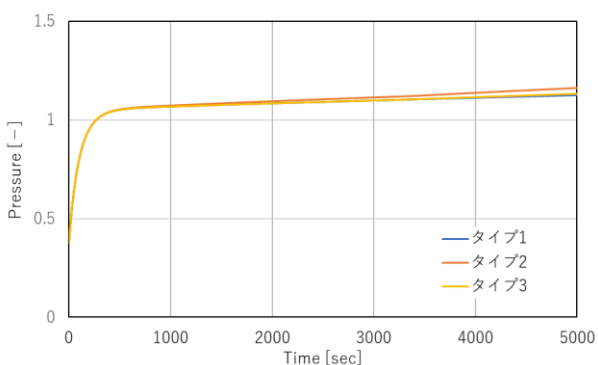


図4 各タイプのシミュレーション結果

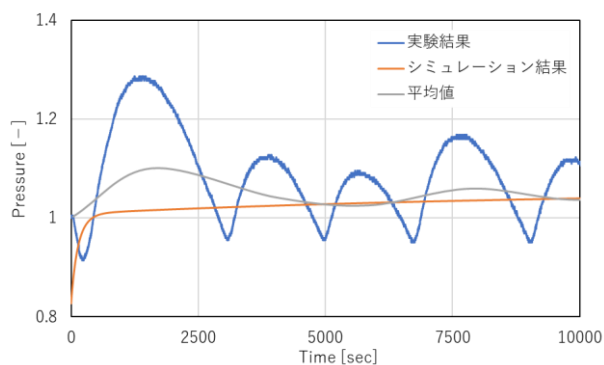


図5 タイプ1の実験結果とシミュレーション結果

御によってヒータ温度を変動させる影響を受け、波打った挙動を示している。一方で、シミュレーション結果で示す気相圧力は、各箇所でのヒータで加温した際の容器温度を一定として、サロゲートモデルで算出したものであり、気相圧力の推算値はなだらかな挙動となっている。実験結果とシミュレーション結果との比較において、シミュレーション結果は、一度のヒータ ON-OFF 制御における気相圧力の平均に対し、供給開始後約 3000 秒までの挙動を除いて約 3% 内の誤差に収まった。これより、シミュレーション結果は気相圧力挙動の傾向を概ね捉えていると言える。

## 5. おわりに

本取り組みでは、固体材料を使用した半導体用材料ガス供給システムにおいて、容器をヒータで加温しガスを供給する際の気相圧力の大まかな挙動を把握するために、1Dシミュレーションを実施し、ヒータ配置の検討を目指した。

1Dシミュレーションでの気相圧力の算出において、実験結果と飽和蒸気圧とが大きく相違してしまう課題があったが、実験結果から生成したサロゲートモデルによって気相圧力を推算し、当該サロゲートモデルを1Dシミュレーションの数理モデルに組み込むことで、実験結果に見合う1Dシミュレーションを実施できた。また、ヒータ配置の検討にあたっては、複数のヒータ配置タイプ全てについて実験することなく、1Dシミュレーションを活用し、ヒータ配置を決定した。

このように、当社では、シミュレーションを活用することで、効率的なシステム開発を行っている。

## 参考文献

- 1) 亀岡崇史, 鈴木克昌, 向庸佑, 渡部僚馬. 大陽日酸株式会社. 固体材料供給装置, 及び固体材料供給方法. 特開 2022-136704. 2022-09-21.
- 2) 大富浩一, 羽藤武宏. 1DCAE によるものづくりの革新, 東芝レビュー. 2012, Vol.67, No.7, p. 7-10.
- 3) Modelica Association. <https://www.modelica.org/> (参照 2022-12-23).
- 4) 和田義孝. 特集, ものづくりに役立つデータサイエンス: 深層学習によるサロゲートモデル構築, 成形加工. 2020, 第32巻, 第3号, p. 83-87.
- 5) SIEMENS. <https://www.plm.automation.siemens.com/global/ja/products/simcenter/simcenter-heeds.html> (参照 2022-12-23).