数 値 解 析 27－4
（1988. 12. 2）

半導体製造用縦型拡散炉内における ガス流のシミュレーション
― ILUBCG法の適用例として

堀端康善　　青柳謙一*　　松本一秀**
（株）東芝　システム・ソフトウェア技術研究所
*府中工場　　**重電技術研究所

VLSI時代に入り，ウェーハの大口径化，省スペース化，省エネルギー化への要請が一層高まるに従い，従来の横型炉に代わって，炉を垂直にした縦型炉が脚光を浴びてきた。

本論文は，縦型炉設計支援のための炉内ガス流れシミュレーション・プログラムについて，ILUBCG法の適用例として報告する。

基礎方程式はNavier－Stokes方程式，エネルギー方程式，質量保存式，状態方程式である。これを座標変換してから完全に陰的な差分法で解く。そして，疎行列を係数とする連立1次方程式の解法にILUBCG法を使う。

最後に，簡単な条件でのシミュレーション例を紹介する。

NUMERICAL SIMULATION OF GAS FLOW IN A VERTICAL FURNACE FOR SEMICONDUCTOR FABRICATION PROCESSES
— APPLICATION OF THE ILUBCG METHOD

Yasuyoshi HORIBATA, Ken-ichi AOYAGI and Kazuhide MATSUMOTO
Systems & Software Engineering Laboratory, Toshiba Corporation
70, Yanagi-cho, Saiwai-ku, Kawasaki 210, Japan

Semiconductor fabrication processes consist of a large number of heat treatments of wafers in furnaces. Today horizontal furnaces are commonly used for the heat treatments. The VLSI technology, however, is demanding larger wafers, smaller scale of the fabrication apparatus, and less consuming power. Vertical furnaces can satisfy these requirements more easily than horizontal furnaces.

Gas flow plays an important role in heat treatments in furnaces. This paper simulates the gas flow in order to help design verical furnaces. The Navier-Stokes equations, internal energy equation, continuity equation, and equation of state are utilyzed. Generalized coordinate transformation is employed in order to transform the governing equations from the physical domain to the computational domain. A fully-implicit finite difference scheme solves the transformed equations on a uniformly spaced computational grid. The sparce systems of linear equations are solved by the incomplete LU biconjugate gradient (ILUBCG) method.

1. はじめに

半導体製造技術は炉の中での熱処理の繰り返しから成り立っている。ウェーハは何回も熱処理を繰り返し，炉への出し入れを重ねて次第に製品に作りあげられてゆく。デバイスが複雑化し，工程が長くなるに従って炉中での熱処理の回数が増加する。

現在最も一般的に使用されてる炉は横型炉と呼ばれ，水平に置かれた管状炉である。しかしながら，VLSI時代に入り，ウェーハの大口径化，省スペース化，省エネルギー化への要請が一層高まるに従い，横型に代わって，炉を垂直にした縦型炉が脚光を浴びるようになってきた。縦型は横型に比し大口径化への対応が容易であり，40%の省スペース，50%の省エネルギーという特長を有している。一方，問題点としては均熱制御性，ガス流の均一化等があると考えられる。

それらの問題点を克服し縦型炉を真に有用なものにするためには，縦型炉内のガス流の数値シミュレーションが不可欠である。本研究はガスの流れと温度分布のシミュレーション・プログラムの開発を目的とする。

本論文は，ILUBCG法の適用例としてのシミュレーション・プログラムの基本部分について報告する。

シミュレーション領域内でのガスの温度変動が大きいのでガスは圧縮性として扱わねばならない。基礎方程式はNavier−Stokesの方程式，ガスの内部エネルギーについての方程式，ガスの質量保存式，状態方程式からなる。次にシミュレーション領域の形状への適応性を高め，また所定の箇所でのシミュレーション精度を上げられるように一般座標系を導入する。圧力変化の密度変化に及ぼす影響を無視する。座標変換された方程式を完全に陰的な差分法で解く。そして，疎行列を係数とする連立1次方程式の解法にILUBCG法を採用し，計算時間の短縮をはかる。

最後に，簡単な条件の下でシミュレーションを行ってプログラムを検証する。

2. 基礎方程式

直角座標（x，y，z）のz軸を鉛直上向きにとる。

a）Navier−Stokesの方程式

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{1i}}{\partial x_i} \qquad (1)$$

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{2i}}{\partial x_i} \qquad (2)$$

$$\rho \frac{dw}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \sigma_{3i}}{\partial x_i} - \rho g \qquad (3)$$

ここでd／dtは全微分をあらわし，

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \qquad (4)$$

である。σ_{1i}，σ_{2i}，σ_{3i}は粘性ストレステンソルで

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \qquad (5)$$

となる。μは粘性係数。

b） 内部エネルギー

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + h \tag{6}$$

ここでq_iは熱流束密度をあらわし，

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{7}$$

となる。κは熱伝導度である。hは単位体積当りの発熱量。

εはガスの単位質量当りの内部エネルギーであり，温度Tとの間に

$$\varepsilon = c_v T \tag{8}$$

なる関係がある。c_vはガスの定積比熱。

c） ガス質量の保存式

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \tag{9}$$

d） 状態方程式

$$p = \rho R T \tag{10}$$

Rはガスの気体定数。

3. 式の変形[1)]

炉内での圧力の変化が小さいと仮定すると，2の基礎方程式から次式が得られる。

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{11}$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{\gamma} \left(-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + h \right) \tag{12}$$

γは定圧比熱と定積比熱の比

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}$$

4. 座標変換[2)]

一般化変換によって基礎方程式を物理空間（x，y，z）から計算空間（ξ，η，ζ）に変換する。

変換後の基礎方程式は次のようになる。但し，Jは変換のヤコビアン。

Navier－Stokesの方程式

$$\frac{\rho}{J} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\rho U}{J} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\rho V}{J} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\rho W}{J} \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{1}{J} \left(\xi_x \frac{\partial p}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial p}{\partial \eta} + \zeta_x \frac{\partial p}{\partial \zeta} \right)$$

$$- \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_x \sigma_{11} + \xi_y \sigma_{12} + \xi_z \sigma_{13}}{J} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_x \sigma_{11} + \eta_y \sigma_{12} + \eta_z \sigma_{13}}{J} \right)$$

$$- \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{\zeta_x \sigma_{11} + \zeta_y \sigma_{12} + \zeta_z \sigma_{13}}{J} \right) = 0 \tag{13}$$

$$\frac{\rho}{J}\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\rho U}{J}\frac{\partial v}{\partial \xi}+\frac{\rho V}{J}\frac{\partial v}{\partial \eta}+\frac{\rho W}{J}\frac{\partial v}{\partial \zeta}+\frac{1}{J}\left(\xi_y\frac{\partial p}{\partial \xi}+\eta_y\frac{\partial p}{\partial \eta}\right.$$

$$\left.+\zeta_y\frac{\partial p}{\partial \zeta}\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{\xi_x\sigma_{21}+\xi_y\sigma_{22}+\xi_z\sigma_{23}}{J}\right)-\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{\eta_x\sigma_{21}+\eta_y\sigma_{22}+\eta_z\sigma_{23}}{J}\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{\zeta_x\sigma_{21}+\zeta_y\sigma_{22}+\zeta_z\sigma_{23}}{J}\right)=0 \tag{14}$$

$$\frac{\rho}{J}\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\rho U}{J}\frac{\partial w}{\partial \xi}+\frac{\rho V}{J}\frac{\partial w}{\partial \eta}+\frac{\rho W}{J}\frac{\partial w}{\partial \zeta}+\frac{1}{J}\left(\xi_z\frac{\partial p}{\partial \xi}+\eta_z\frac{\partial p}{\partial \eta}\right.$$

$$\left.+\zeta_z\frac{\partial p}{\partial \zeta}\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{\xi_x\sigma_{31}+\xi_y\sigma_{32}+\xi_z\sigma_{33}}{J}\right)-\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{\eta_x\sigma_{31}+\eta_y\sigma_{32}+\eta_z\sigma_{33}}{J}\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{\zeta_x\sigma_{31}+\zeta_y\sigma_{32}+\zeta_z\sigma_{33}}{J}\right)-\frac{\rho}{J}g=0 \tag{15}$$

内部エネルギー

$$\frac{\rho}{J}\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\frac{\rho U}{J}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi}+\frac{\rho V}{J}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta}+\frac{\rho W}{J}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \zeta}$$

$$+\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{\xi_x q_x+\xi_y q_y+\xi_z q_z}{J}\right)+\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{\eta_x q_x+\eta_y q_y+\eta_z q_z}{J}\right)\right.$$

$$\left.+\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{\zeta_x q_x+\zeta_y q_y+\zeta_z q_z}{J}\right)-\frac{1}{J}\left(\sigma_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+h\right)\right]=0 \tag{16}$$

質量保存式

$$\frac{1}{J}\frac{d\rho}{dt}=-\rho\left[\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{U}{J}\right)+\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{V}{J}\right)+\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{W}{J}\right)\right] \tag{17}$$

ここでU，V，Wは次式で定義される速度成分であり，それぞれ $\xi=\mathrm{const}$，$\eta=\mathrm{const}$，$\zeta=\mathrm{const}$ 面の法線方向にある。

$$\begin{aligned} U&=\xi_x u+\xi_y v+\xi_z w\\ V&=\eta_x u+\eta_y v+\eta_z w\\ W&=\zeta_x u+\zeta_y v+\zeta_z w \end{aligned} \tag{18}$$

また，式(11)は

$$\frac{1}{J}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dt}\right)=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{U}{J}\right)+\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{V}{J}\right)+\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{W}{J}\right) \tag{19}$$

となる。

5. 数値解法

基礎方程式系を差分法で解く。

スタッガード格子を使用する。圧力，内部エネルギー等を共通の格子点で定義し，u，vについてはξ方向に$\frac{1}{2}\triangle\xi$だけ，wについてはζ方向に$\frac{1}{2}\triangle\zeta$だけずらす。

以下の記述を簡単にするため次のように差分演算子を定義する。

$$\delta_{n\alpha}\phi(\alpha)=\frac{1}{n\triangle\alpha}\left[\phi(\alpha+n\triangle\alpha/2)-\phi(\alpha-n\triangle\alpha/2)\right] \tag{20}$$

Navier−Stokes 方程式を次のように差分化する。

$$\frac{u^{n+1}-u}{J\triangle t}=-\frac{1}{J\rho}(\xi_x\delta_\xi p+\eta_x\delta_\eta p+\zeta_x\delta_\zeta p)^{n+1}+M_u \tag{21}$$

$$\frac{v^{n+1}-v}{J\triangle t}=-\frac{1}{J\rho}(\xi_y\delta_\xi p+\eta_y\delta_\eta p+\zeta_y\delta_\zeta p)^{n+1}+M_v \tag{22}$$

$$\frac{w^{n+1}-w}{J\triangle t}=-\frac{1}{J\rho}(\xi_z\delta_\xi p+\eta_z\delta_\eta p+\zeta_z\delta_\zeta p)^{n+1}+M_w \tag{23}$$

M_u, M_v, M_w はそれぞれ式(13), (14), (15)において右辺の圧力項を除く項全体をあらわす。

式(21), (22), (23)から

$$\frac{1}{\triangle t}\left\{\left[\delta_\xi\left(\frac{U}{J}\right)+\delta_\eta\left(\frac{V}{J}\right)+\delta_\zeta\left(\frac{w}{J}\right)\right]^{n+1}-\left[\delta_\xi\left(\frac{U}{J}\right)+\delta_\eta\left(\frac{V}{J}\right)+\delta_\zeta\left(\frac{w}{J}\right)\right]\right\}=-\delta_\xi\left\{\frac{1}{J\rho}\left[n^2{}_\xi\delta_\xi p^{n+1}+(n_\xi\cdot n_\eta)\delta_\eta p^{n+1}+(n_\xi\cdot n_\zeta)\delta_\zeta p^{n+1}\right]\right\}$$
$$-\delta_\eta\left\{\frac{1}{J\rho}\left[(n_\eta\cdot n_\xi)\delta_\xi p^{n+1}+n^2{}_\eta\delta_\eta p^{n+1}+(n_\eta\cdot n_\zeta)\delta_\zeta p^{n+1}\right]\right\}$$
$$-\delta_\zeta\left\{\frac{1}{J\rho}\left[(n_\zeta\cdot n_\xi)\delta_\xi p^{n+1}+n_\zeta\cdot n_\eta)\delta_\eta p^{n+1}+n^2{}_\zeta\delta_\zeta p^{n+1}\right]\right\}$$
$$+\delta_\xi(\xi_x M_u+\xi_y M_v+\xi_z M_w)+\delta_\eta(\eta_x M_u+\eta_y M_v+\eta_z M_w)$$
$$+\delta_\zeta(\zeta_x M_u+\zeta_y M_v+\zeta_z M_w) \tag{24}$$

ここで n_ξ, n_η, n_ζ はそれぞれ $\xi=$ const, $\eta=$ const, $\zeta=$ const 面上の法線ベクトルであり,

$$n_\xi=(\xi_x,\ \xi_y,\ \xi_z)$$
$$n_\eta=(\eta_x,\ \eta_y,\ \eta_z) \tag{25}$$
$$n_\zeta=(\zeta_x,\ \zeta_y,\ \zeta_z)$$

一方，式(11), (12)から

$$\left[\delta_\xi\left(\frac{U}{J}\right)+\delta_\eta\left(\frac{V}{J}\right)+\delta_\zeta\left(\frac{W}{J}\right)\right]^{n+1}=\frac{1}{J\gamma\rho\varepsilon}\left(-\frac{\partial q_i}{\partial x_j}+\sigma_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+h\right) \tag{26}$$

を得る[1]。

式(26)から式(24)の左辺が求まるから，共役残差法[3]を使って式(24)から p^{n+1} を求める。

u^{n+1} を求めるには，式(13)を次のように差分化する。

$$\frac{\rho}{J}\frac{u^{n+1}-u}{\triangle t}+\frac{\rho U}{J}\frac{\partial u^{n+1}}{\partial\xi}+\frac{\rho V}{J}\frac{\partial u^{n+1}}{\partial\eta}+\frac{\rho W}{J}\frac{\partial u^{n+1}}{\partial\zeta}$$
$$+\frac{1}{J}\left(\xi_x\frac{\partial p^{n+1}}{\partial\xi}+\eta_x\frac{\partial p^{n+1}}{\partial\eta}+\zeta_x\frac{\partial p^{n+1}}{\partial\zeta}\right)$$
$$-\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{\xi_x\sigma_{11}^{n+1}+\eta_y\sigma_{12}^{n+1}+\eta_z\sigma_{13}^{n+1}}{J}\right)-\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\frac{\eta_x\sigma_{11}^{n+1}+\eta_y\sigma_{12}^{n+1}+\eta_z\sigma_{13}^{n+1}}{J}\right)$$
$$-\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{\zeta_x\sigma_{11}^{n+1}+\zeta_y\sigma_{12}^{n+1}+\zeta_z\sigma_{13}^{n+1}}{J}\right)=0 \tag{27}$$

対流項の差分に2次精度風上差分を使い，他の空間微係数には中心差分を使う。σ_{11}^{n+1}, σ_{12}^{n+1}, σ_{13}^{n+1} では u のみ時刻レベル n+1の値を使い，v とwは時刻レベル n での値を使う。円筒の軸回わり方向

の周期条件も陰的に組み込む。この連立方程式の係数は，１行当り非ゼロ要素が１５個の非対称行列である。これを前処理つき双対共役勾配法（ＩＬＵＢＣＧ法）[3] で解いて u^{n+1} を求める。ＩＬＵＢＣＧ法のサブルーチンは，１行当りの非ゼロ要素の個数を引数にし，非ゼロ要素の位置の規則性を直接利用しないようにしてコーディングする。

同様にして v^{n+1}，w^{n+1} をそれぞれ式(14)，(15)から求める。

式(16)を次のように差分化する。

$$\frac{\rho}{J}\frac{\varepsilon^{n+1}-\varepsilon}{\triangle t}+\frac{\rho u}{J}\frac{\partial\varepsilon^{n+1}}{\partial\xi}+\frac{\rho V}{J}\frac{\partial\varepsilon^{n+1}}{\partial\eta}+\frac{\rho W}{J}\frac{\partial\varepsilon^{n+1}}{\partial\zeta}+\frac{1}{\gamma}$$

$$[\frac{\partial}{\partial\xi}(\frac{\xi_x q_x^{n+1}+\xi_y q_y^{n+1}+\xi_z q_z^{n+1}}{J})+\frac{\partial}{\partial\eta}(\frac{\eta_x q_x^{n+1}+\eta_y q_y^{n+1}+\eta_z q_z^{n+1}}{J})$$

$$+\frac{\partial}{\partial\zeta}(\frac{\zeta_x q_x^{n+1}+\zeta_y q_y^{n+1}+\zeta_z q_z^{n+1}}{J})-\frac{1}{J}(\sigma_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+h)]=0 \qquad (28)$$

ｕ，ｖ，ｗの場合と同様に対流項については２次精度風上差分を，他の空間微係数には中心差分を使い，前処理つき双対共役勾配法で ε^{n+1} を求める。

6. 均熱管内のシミュレーション

拡散炉では均熱管の側壁をヒータで加熱し，均熱管の中にプロセスチューブが入っている。

簡単のため，プロセスチューブを入れない状態で均熱管を加熱したときの管内ガスをシミュレーションする。

図１のように円筒形の均熱管の側壁を熱し，上面と下面に断熱材を置く。

6.1　境界条件

均熱管側壁の温度を指定する。管の上面と下面に放熱型の境界条件を使う。即ち，

$$-\kappa\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_B = h\,(T_\infty - T_B) \qquad (29)$$

ここでｎ＝境界面に垂直な座標，ｈ＝熱通過率，T_∞＝外壁温度，添字Ｂは境界上での値をあらわす。

6.2　シミュレーション例

ｈ＝１１１.1 cm，ａ＝１５ cm の均熱管でシミュレーションする。均熱管の側壁温度を１００５℃，上方と下方にある断熱材の熱通過率をそれぞれ h_{top} = 0.3 w／m² C°，h_{bot} = 0.5 w／m² C°とする。

上方と下方の外側温度 T_{top}，T_{bot} として次の２通りの場合についてシミュレーションする。

シミュレーション①：T_{top}＝９５０C°，T_{bot}＝８００C°

シミュレーション②：T_{top}＝９９０C°，T_{bot}＝９５０C°

いずれの場合も定常状態に達するまでシミュレーションを続ける。得られた定常状態は軸対称になった。

使用計算機はＣＲＡＹ Ｘ-ＭＰ／２１６。計算時間はいずれの場合も約９０分。ＩＬＵＢＣＧ法の打ち切り精度を 10^{-6}，あるいは 10^{-8} にした。収束するまでの反復回数は１０回以内。

使用した格子，軸を含む鉛直断面及び水平断面における速度分布，鉛直断面における温度分布を，シミュレーション①については図１，２，３に，シミュレーション②については図４，５，６に示す。温度は１０００C° を基準にし，それからの変動値を等温線上に書き込んである。

側壁のヒータで熱せられたガスは側壁に沿って上昇し，上面にぶつかってから中央へ集まり，炉芯を下降する。下降流の最大速度は①では２２ cm／sec，②では８ cm／sec。①では下降速度が

大きいため下面にぶち当って跳ね上がってから再び下面に着地している。いずれの場合も下面近傍に渦輪ができている。下降流が等温線を下方へ押し下げるため，いずれの場合も下面近傍では等温線が密集する傾向がある。①ではこの傾向が特に著しい。

7. おわりに

ガスの流れ場内での温度差が大きくても，また温度や速度が空間的に急激に変動する箇所があって精確にシミュレーションできるプログラムが完成した。計算時間を短縮さすため，完全陰差分法を使って時間刻み幅の制限を緩め，さらに連立方程式の解法に並列演算向きのＩＬＵＢＣＧ法を用いた。均熱管内のガス流れをシミュレーションし，プログラムの検証も行った。

参考文献

1） 堀端：円筒内熱対流の数値シミュレーション，第２回数値流体力学シンポジウム講演論文集（１９８８）

2） D. A. Anderson, J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher：Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, McGraw-Hill（１９８４）

3） 村田，小国，唐木：スーパーコンピュータ，丸善（１９８５）

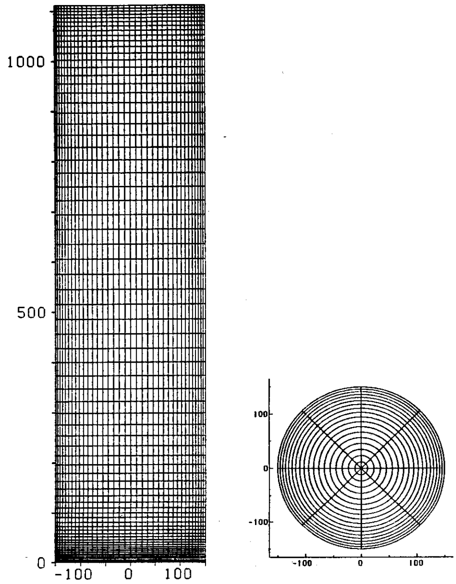

図１．使用した格子（①）

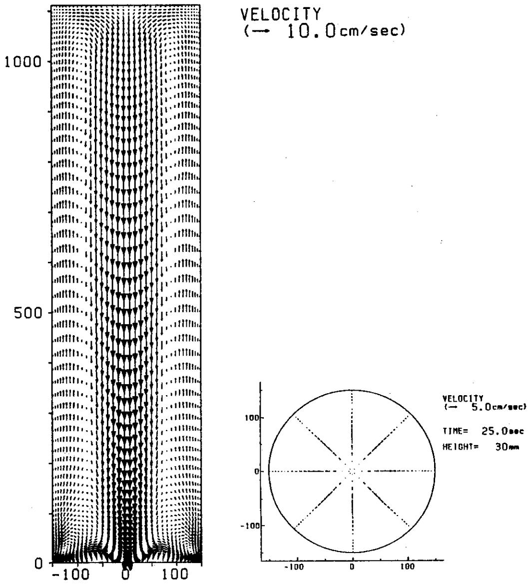

図２．均熱管内速度分布（①）

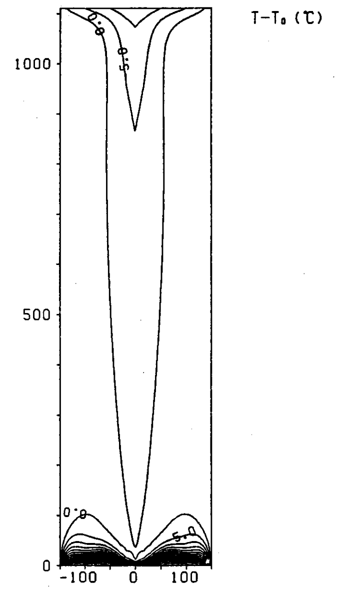

図３．均熱管内温度分布（①）

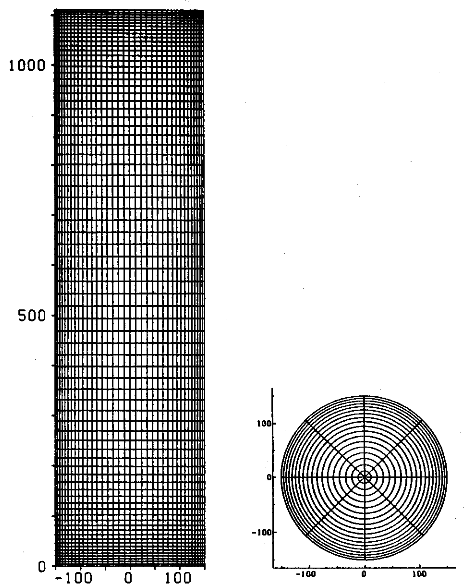

図４．使用した格子（②）

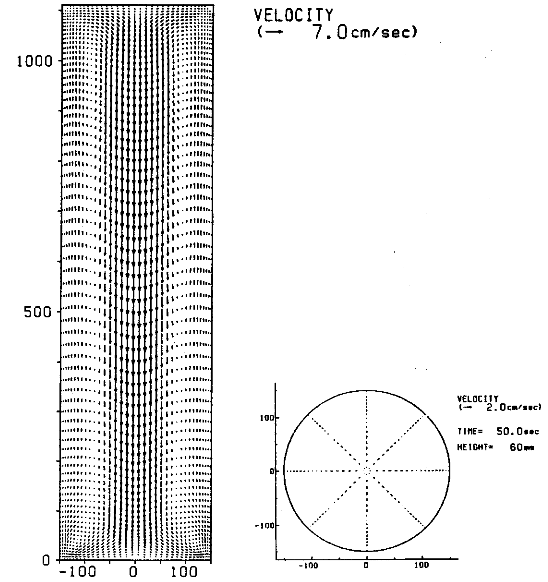

図５．均熱管内速度分布（②）

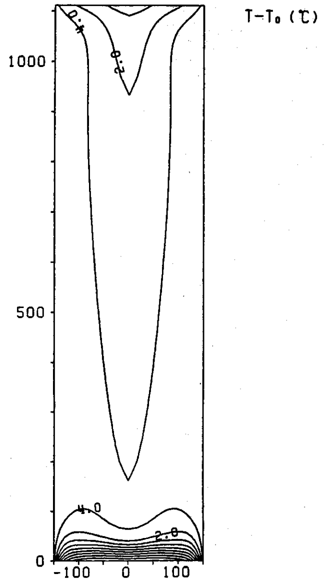

図６．均熱管内温度分布（②）