

# モンテカルロ・ダイレクトシミュレーションによる 円筒容器内希薄気体の流動解析

Monte Carlo Direct Simulation for Rarefied Gas Flow in a cylindrical vessel

小林 敏雄\*・松本 裕昭\*

Toshio KOBAYASHI and Hiroaki MATSUMOTO

## 1. はじめに

近年 LSI, 超 LSI の基盤となるシリコンウエハの開発製造が盛んに行われており, 製品の性能や製造効率に及ぼす流れの影響の調査が必要となってきた。シリコンウエハの製造法には, 常圧下で行われる CVD 法 (Chemical Vapor Deposition), 高真空圧下で行われる MBE 法 (Molecular Beam Epitaxy) などがあり, それぞれの手法について数値シミュレーションが行われ始めている<sup>1)2)3)</sup>。また CVD 法でも低圧, 減圧下で行われる減圧 CVD 法があり, 低圧下における流れの解析, すなわち流れを分子運動論の立場から解析することも必要と思われる。本研究は, 減圧 CVD 法を分子運動論的な取り扱いにより解析する方法の確立を目標とした基礎研究である。

減圧 CVD 法は, 反応炉 (円管) 内にディスクが同心円状に流れに垂直に直列に並べられており, 炉壁は, 流入ガスの絶対温度の 2~3 倍に熱せられている。ディスクの枚数は, 約 120 枚ほどで, 注入されるガスは, 蒸着ガスと輸送ガスの混合気流である。したがって炉内は相当に複雑な流れ場となっていることが予想される。今回は, 基礎段階として, 圧力が,  $P \approx 10^{-3}$  [torr] に保たれている炉内に, 5 [inch] のディスクが 4 枚並べられている場合を想定している。この流れ場を軸対称流 (2 次元) にモデル化し, モンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法<sup>4)</sup>を用いて数値予測を行うためのプログラムのコードを作成し, 炉内の温度, 密度, 速度分布を試算した。

## 2. 計算手法

計算手法のフローチャートを図 1 に示す。モンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法は, 計算対象流れ場に,  $10^3 \sim 10^4$  個の模擬分子 (以下分子と略す) を配置し, 各分子について微小時間刻み  $\Delta t_m$  後の位置を計算しながら他の分子との衝突, 固定壁との干渉による速度の変

化をある確率法則に従って統計的に決定していくという手法である<sup>4)5)</sup>。

## 3. 円筒座標系への拡張

### 3.1 速度, 位置座標の修正

管軸 (流れ) 方向に  $x$  軸, 管径方向に  $r$  軸をとり, 位置座標が,  $r_0 = (x_0, r_0)$  で, 速度が  $V_0 = (u_{x0}, u_{r0}, u_{\theta 0})$  であるような分子について考える。軸対称性から位置に関する  $\theta$  座標は無視できる。すなわち, ある分子が  $\theta$  方向に移動して, 計算領域 (断面内) から出ていったとしてもそれと全く同じ情報を持った分子が計算断面に流入

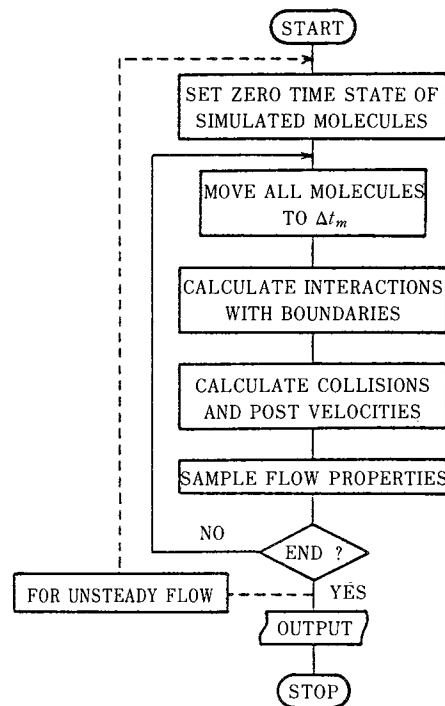


図1 フローチャート

\*東京大学生産技術研究所 第2部

研究速報

してくると考える訳である。一方速度については、分子間の衝突や固定壁との干渉は、常に三次元的であるから、 $\theta$  方向の情報は、無視することができない。

この  $r_0$ ,  $V_0$  の情報を持った分子が微小時間刻み  $\Delta t_m$  後に別の場所に移動して、 $r_1=(x_1, r_1)$ ,  $V_1=(u_{x1}, u_{r1}, u_{\theta 1})$  になったとする。図 2 により移動後の座標  $r_1=(x_1, r_1)$  および管軸方向速度  $u_{x1}$  は次式により与えられる。ただし図 2 中  $x$  軸は紙面に対して垂直にとっている。

$$x_1 = x_0 + u_{x0} \cdot \Delta t_m \quad (1)$$

$$r_1 = \{(r_0 + u_{r0} \cdot \Delta t_m)^2 + (u_{\theta 0} \cdot \Delta t_m)^2\}^{1/2} \quad (2)$$

$$u_{x1} = u_{x0} \quad (3)$$

また実際の分子は  $\theta$  方向の速度成分により回転移動するので速度の  $r$ ,  $\theta$  座標に対しては、その影響を考慮する必要がある。速度ベクトルは保存されるから、図 2 より

$$u_{r1} = u_{r1} \cdot \cos \Theta - u_{\theta 1} \cdot \sin \Theta \quad (4)$$

$$u_{\theta 0} = u_{r1} \cdot \sin \Theta + u_{\theta 1} \cdot \cos \Theta \quad (5)$$

であるから

$$u_{r1} = u_{r0} \cdot \cos \Theta + u_{\theta 0} \cdot \sin \Theta \quad (6)$$

$$u_{\theta 1} = -u_{r0} \cdot \sin \Theta + u_{\theta 0} \cdot \cos \Theta \quad (7)$$

が成り立つ。

また、

$$\cos \Theta = (r_0 + u_{r0} \cdot \Delta t_m) / r_1 \quad (8)$$

$$\sin \Theta = u_{\theta 0} \cdot \Delta t_m / r_1 \quad (9)$$

であるから式 (6) (7) に式 (8) (9) を代入して

$$u_{r1} = [u_{r0} \cdot (r_0 + u_{r0} \cdot \Delta t_m) + u_{\theta 0} \cdot (u_{\theta 0} \cdot \Delta t_m)] / r_1 \quad (10)$$

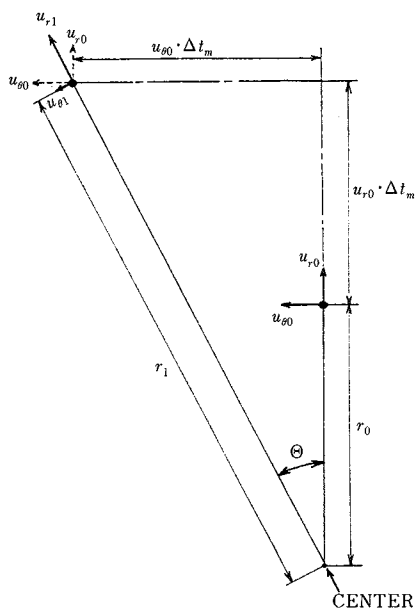


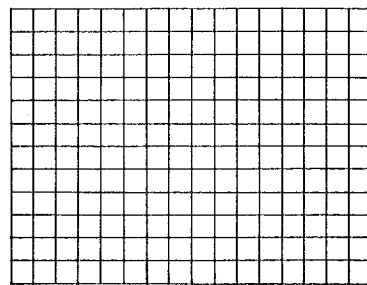
図 2 移動による分子の速度変化

$$u_{\theta 1} = [-u_{r0} \cdot (u_{\theta 0} \cdot \Delta t_m) + u_{\theta 0} \cdot (r_0 + u_{r0} \cdot \Delta t_m)] / r_1 = u_{\theta 0} \cdot r_0 / r_1 \quad (11)$$

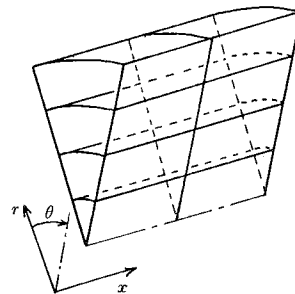
となる。以上のようにして式 (1) (2) (3) および (10) (11) を用いて分子移動による各情報の入れ替えを行う。

### 3.2 重み係数の導入

計算は、計算対象領域をセルと呼ばれる微小空間に分割して行われる<sup>4)5)</sup>。二次元座標系では図 3 (a) に示すようにセルの厚み (紙面に対して垂直方向) を 1 とすることにより、セルの体積を計算断面上の面積と等しくとることができる。一方軸対称流れを扱う場合、図 3 (b) に示すように  $\theta$  方向の厚さが中心軸からの距離により異なるため図の  $xr$  平面のセルの面積を等しくとると中心軸から離れるにつれてセルの体積が増大する。仮に流れ場の密度が一樣とすると、1セルあたりの分子数は中心軸付近では管壁付近に比べて相対的に少なくなる。そのため一樣な密度にもかかわらず中心軸付近では相対的にサンプル数が少なく、管壁付近では分子間衝突の計算を多数行うなどの不釣り合いが生じる。そこでこの不釣り合いを解消するために重み係数  $W$  を導入する。これは、各セルに重み係数  $W_n$  ( $n=1 \sim$ セル総数) を割り当て、そのセルに含まれる分子を  $W_n$  の重さとしみなすというものである。すなわち、 $W_n$  のセルと  $W_m$  のセルを考えると  $W_n$  のセルの分子は  $W_m$  のセルの分子の  $W_n/W_m$  倍



(a) 直交座標系



(b) 円筒座標系

図 3 セル分割

研 究 速 報

の重さになる。これはまた  $W_n$  のセルの分子 1 個は  $W_m$  のセルでは  $W_n/W_m$  個の分子に相当すると考えることもできる。よって次の条件を満たす必要がある。

$$N_m = \sum_{i=1}^{N_i} (n_i V_i / W_i)$$

$$W_i = n_i V_i / N_i$$

ただし、 $N_m$ ,  $N_c$ ,  $N_i$  はそれぞれ流れ場全体の総分子数、セル総数、 $i$  番目のセルに含まれる分子数を示し、 $n_i$ ,  $V_i$ ,  $W_i$  はそれぞれ  $i$  番目のセルにおける分子の数密度、体積および重み係数を示す。

3.3 分子のセル間移動に伴う処理

上述したように、重み係数  $W_n$  のセルの分子 1 個は、 $W_m$  のセルでは、 $W_n/W_m$  個に相当する。したがってセル  $n$  からセル  $m$  へ 1 個の分子が移動した場合、セル  $m$  へは  $W_n/W_m$  個の分子が流入したとしなければならない。そこで以下のような処理を行う。

- (i)  $W_n/W_m > 1$  なら  $W_n/W_m - 1$  個の分子を複製
- (ii)  $W_n/W_m < 1$  なら  $1 - W_n/W_m$  の確率でその分子を消去
- (iii)  $W_n/W_m = 1$  なら複製、消去の処理は行わない

一般に、 $W_n/W_m$  は整数値にはならないので実際の計算には棄却法<sup>6)</sup>を用いる。すなわち、 $(W_n/W_m - 1)$  または  $(1 - W_n/W_m)$  の小数部と一様乱数を比較して乱数のほうが大きければ  $(W_n/W_m - 1)$ ,  $(1 - W_n/W_m)$  の小数部を切り捨て、逆の場合はそれぞれ的小数部を切り上げるという操作を行う。

4. シミュレーション

4.1 計算対象流れ場

計算対象とした流れ場は図 4 に示すように円管内に無限小厚さのディスクが 4 枚同心円上に等間隔に直列配置されたものである。軸対称性から計算領域を図 5 のようにとる。図中の寸法比は、 $R_2/R_1 = 2$ ,  $L/R_1 = 1$  である。セルの一辺の大きさは、分子の平均自由行程より小さく

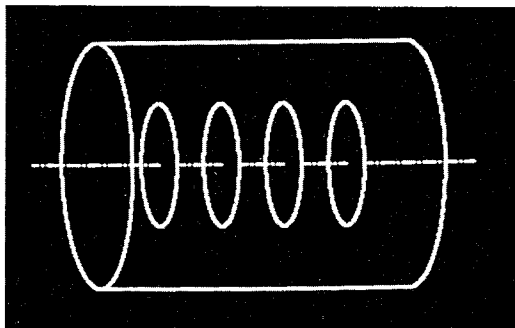


図 4 計算対象流れ場

取ることが望ましいとされており<sup>4)</sup>、本シミュレーションでは、平均自由行程の半分としている。

4.2 境界条件

モンテカルロ・ダイレクトシミュレーションでは、出入口でのガスの状態(温度、密度)、流れの平均速度分布を与えなければならないが、これらの諸量は特に速度について規定しにくい。また実現象においても実験が困難であることから、本研究では最も単純な条件として入口からは一様流速  $C_0$  の分子が常に流入し、出口は完全真空状態につながれているものとする。すなわち、出口側から計算領域内に流入する分子は全く無いとする。分子と固定壁の反射条件としては最も単純なモデルである拡散反射の条件を用い、分子は剛体球モデルを用いている。

無次元化は、一様流の分子の平均自由行程  $\lambda_0$ , 温度  $T_0$ , 質量  $m$ , 最大確率熱速度  $C_{\infty} = 1/\beta_{\infty} = \sqrt{2RT_{\infty}}$  ( $R$  はガス定数), 数密度  $n_0$  を用いて行う。

4.3 計算条件

初期条件として各セルに 30 個の分子を乱数を用いて空間に一様に配置する。また各分子には乱数を用いて、Maxwell の熱平衡分布から初期熱速度の 3 方向成分を与え<sup>45)</sup> さらに軸(流れ)方向成分には一様流速  $U_0$  を加える。本計算では、無次元速度として  $U_0 = 1.0$  を与えている。壁面、ディスクの温度は、常に同一に保たれているとし無次元温度として  $T_w = 1.0$ ,  $T_w = 2.0$  の 2 ケースについて計算を行った。

今回の計算では、乱数の初期値を 20 回変えて同様の計算を行い、各計算結果の平均をとり密度、温度、速度の巨視的物理量を求めている。

5. 結果および考察

本計算における希薄度を示す指数、クヌッセン数  $K_n$  はディスクの径を代表長さにとって  $K_n = \lambda/D = 0.1$  である。

図 5, 図 6 に  $T_w = 1.0$ ,  $T_w = 2.0$  とした場合の速度ベクトル図を示す。図よりディスク間の流れは、いずれの場合も 1 枚目と 2 枚目の間に主流からの巻き込み渦が存在するが、その他の場所では主流の影響をほとんど受け

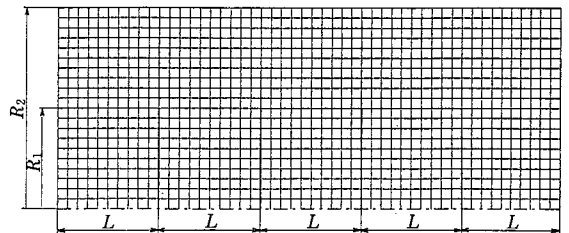


図 5 計算領域

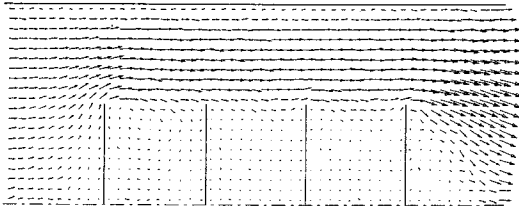


図 6 速度ベクトル図 ( $T_w=1.0$ )

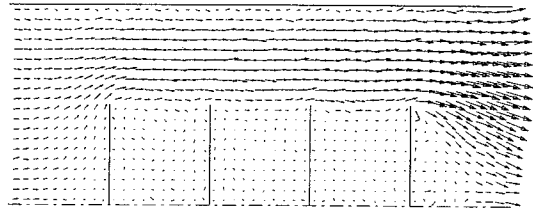


図 7 速度ベクトル図 ( $T_w=2.0$ )

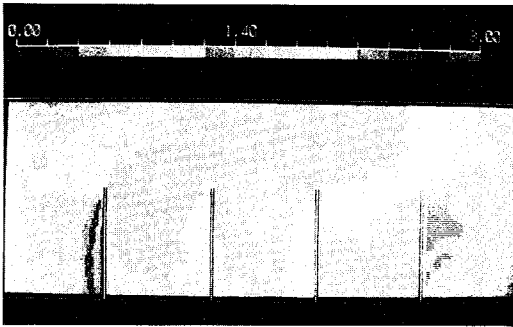


図 8 密度分布図 ( $T_w=1.0$ )

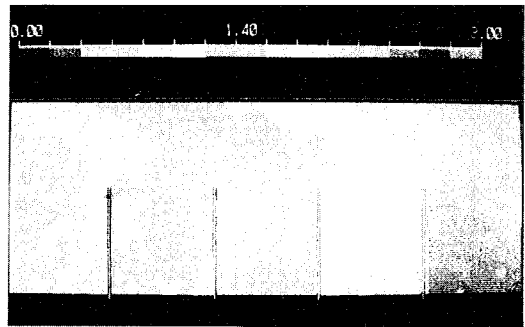


図 9 密度分布図 ( $T_w=2.0$ )

ていないことが計算されている。また管壁近くの速度ベクトルが変動しているが、これは、(i)ディスクから発生する衝撃波の影響、(ii)サンプル数不足による誤差の影響などが考えられる。また4枚目のディスク付近で出口条件の影響が出ており、流速が上昇している。実際の減圧CVD法と比較するためには、さらに多くのディスクを配置する必要があると思われる。図8、図9に密度分布を示す。 $T_w=1.0$ の場合各ディスクからは、下流側にはほぼ直線的に密度変化の境界線が出ているのに対し、 $T_w=2.0$ では、このような境界線は出ていない。また、最高密度領域が、 $T_w=1.0$ では1枚目のディスクの上流側のごく小さい領域であるのに対し、 $T_w=2.0$ では最高密度領域は大きく広がって、入口付近に近くなっている。

6. ま と め

モンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法により減圧CVD法のシミュレーションを試み、2次元軸対称流れ場の解析のための基礎プログラムのコードを作成した。

現行のシミュレーションでは分子と壁との反射の扱いを拡散反射として行っているが、現実には分子は壁面に蒸着、壁面からの蒸発が生じていると考えられ、これらをプログラムに組み込むことが必要であろう。さらに多

くのディスクが存在する場合を解析するためには、周期条件を組み込むことも必要であり、今後の課題である。

またモンテカルロ・ダイレクトシミュレーションでは分子間の衝突を統計的に扱うために、分子間の1回1回の衝突について角運動量が保存されず、はく離、渦の発生などが生じる流れ場の非定常性を正しく評価できないという報告<sup>7)</sup>もありモンテカルロ・ダイレクトシミュレーションの有効性についてのより深い考察が必要であろう。

本計算は、東京大学大型計算機センター M 280-H, M 682-Hシステムにより行われた。

(1986年9月24日受理)

参 考 文 献

- 1) Kusumoto, A., et al, Jpn. J. Appl. phys. Vol.24, No.5 (1985), 620
- 2) 太田, 平山, 機論 85-0370 A
- 3) 南部, 機誌 Vol. 89, No.809 (1986.4), 445
- 4) Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics, Oxford univ. press (1976)
- 5) 小林, 松本, 生産研究 Vol. 38, (1986.1), 65
- 6) たとえば津田, モンテカルロ法とシミュレーション, 培風館 (1977)
- 7) Meiburg, E., DFVLR · FG 85-13