有限要素法による真空排気シミュレータ*

伊藤 明子**・中沢 優**・上田 新次郎**

(昭和62年1月13日 受理)

Simulator for Vacuum System by FEM

Akiko ITOH, Masaru NAKAZAWA and Sinjiroo UEDA

(Mechanical Engineering Research Laboratory,
Hitachi, Ltd., Tsuchiurashi Ibaraki)

(Received January 13, 1987)

1. はじめに

真空装置は、半導体製造装置をはじめとして、加速器、核融合装置、表面観察装置など適用分野の拡大と共に、高真空化、複雑化が進んでいる。このような真空システムの計画、研究開発、設計、メンテナンスの各段階においては、装置コンポーネントの形状、寸法やポンプの個数、位置、容量などを合理的に決めるツールとして真空排気シミュレータが必要である。これまでに報告されている真空システムの圧力分布計算法には、(1)装置内の放出ガス量とポンプの排気速度、配管のコンダクタンスから概略を求める方法¹⁾、(2)真空システムを電気回路網に置換して求める方法²⁾、(3)モンテカルロ法を用いて分子の運動を追跡して求める方法³⁾などがある。(1)、(2)の方法では一次元の圧力分布しか予測できず、過渡状態や容器内の二次元、三次元の圧力分布は求められない。(3)の方法はミクロな現象を知るにはよいが、複雑な装置全体のシミュレーションには時間と手間がかかりすぎる。

そこで、気体分子は密度勾配に比例して分布するとし求めた密度分布から、圧力分布を解くことを試みた。数値解法には有限要素法を採用し、一～三次元の任意形状について非定常問題も取扱えるものとした。

2. 支配方程式

高真空から超高真空の分子流領域について支配方程式を考える。密度が不均一な真空空間での分子の挙動を、単位面積を単位時間に N 個の分子が密度勾配 dn/dx に比例して移動する現象として表わす。これを式で示すと、

$$N = -C_x \frac{\partial n}{\partial x} \quad (2.1)$$

ここで、 C_x は比例定数である。今、容器内の任意の位置 (x, y, z) 、任意の時刻 t における分子密度を $n(x, y, z, t)$ で表わし、Fig. 1 のように任意空間にとった辺長 dx, dy, dz の微小直方体への分子の出入りを考える。式(2.1)より、時間 dt の間に A 面へ流入する分子数 $(dN_x)_{in}$ は、

Fig. 1 Flux of molecules to and from infinitesimal cubic.

* 昭和61年11月14日 第27回真空に関する連合講演会で講演 (14Aa-2)

** (株)日立製作所機械研究所 (茨城県土浦市)

$$(dN_x)_{in} = - \left(C_x \frac{\partial n}{\partial x} \right) dy dz dt \quad (2.2)$$

B面から流出する分子数 $(dN_x)_{out}$ は、

$$(dN_x)_{out} = - \left[\left(C_x \frac{\partial n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(C_x \frac{\partial n}{\partial x} \right) dx \right] dy dz dt \quad (2.3)$$

したがって、増加分子数 dN_x は、流入分子数から流出分子数を差し引いて、

$$dN_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(C_x \frac{\partial n}{\partial x} \right) dx dy dz dt \quad (2.4)$$

となる。同様に y 方向、 z 方向についても dN_y , dN_z が求まる。また、単位時間、単位体積について $q(x, y, z, t)$ 個の分子が発生する場合には、

$$dN_b = q dx dy dz dt \quad (2.5)$$

として増加分子数を表わすことができる。以上より、時間 dt の間の直方体内の増加分子数は、

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} dx dy dz dt &= dN_x + dN_y + dN_z + dN_b \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(C_x \frac{\partial n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(C_y \frac{\partial n}{\partial y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(C_z \frac{\partial n}{\partial z} \right) + q \right] dx dy dz dt \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。ここで、気体の状態方程式 $n = P/kT$ (P : 圧力, k : ボルツマン定数, T : 温度) を用いて上式を書き直す。温度は一定とし、 C_x/kT を D_x などと置き直せば、圧力を未知量とした支配方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial P}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial P}{\partial z} \right) + q - \frac{1}{kT} \frac{\partial P}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

境界条件は、放出される分子数 q_1 を一定とする場合、

$$q = q_1 \quad (2.8)$$

境界部の圧力 P_s に比例して変化する場合には、比例定数 C_n を入力データとして与えて、

$$q = C_n P_s \quad (2.9)$$

となる。今回の検討では、放出ガス一定の条件を用いている。また、排気部の扱いは、排気速度 S を入力データとして与え、排気口部圧力 P_p から、

$$q = S P_p \quad (2.10)$$

となる。

3. 有限要素法プログラム

式(2.7)に対する有限要素法の離散化およびプログラム技術はすでに確立されているので、これを応用した汎用プログラムを作成した。以下に概要を述べる。

Out gassing rate: 8.0×10^{-9} Torr $\cdot$ l/sec

Pumping speed: 2.0 l/sec $\cdot$ cm²

d : 1, 3, 6, 8, 10 cm

l : 250, 500 cm

(a) Analysis conditions.

(b) Axisymmetric finite element model of pipe.
($d = 6$ cm, $l = 500$ cm)

Fig. 2 Analysis models.

- (1) 有限要素法: 一次および二次の変位関数を用いた一次要素, 二次要素, 軸対称要素および三次要素。
- (2) 解析可能な形状: 上記要素の単独および組合せて表現される形状。
- (3) 解析可能な現象: 線形および非線形, 定常および非定常の組合せの合計 4 種類。
- (4) 要素および節点数に対する制限: 実用上なし。

4. 計算結果と検討

4.1 単一パイプによる検討

以上の手法およびプログラムを実用化するためには、式(2.7)の D_x , D_y , D_z をどのように与えるかが問題となる。そこで、まずコンダクタンス法によって解析的に求められるモデルを用いて、係数 D の値とその特性について検討した。

Fig. 2 に検討に用いた単一パイプモデルの形状と計算条件および有限要素モデルを示す。寸法の影響を調べるためパイプ径を 5 種類、長さを 2 種類変えた組合せ 10 ケースについて、軸対称三次元形状として線形定常解析を行った。まず、各パイプについてコンダクタンス法を用いて温度 293 K での窒素の圧力分布を解析的に求め、プロットした。次に係数 D ($D_x = D_y = D_z$) を種々変えながら有限要素法による本解析を行い、上記解析解と分布が一致する D を求めて、これらを各パイプの D とした。Fig. 3 にこのような検討をした最終結果を示す。図より

Fig. 3 Pressure distribution along Z axis in the single pipe model.

Fig. 4 Effect of pressure on coefficient D .

わかるように D の値は唯一とならず、パイプの直径によって変化している。また、同じ直径のパイプでは、長さが 500 mm の場合と 250 mm の場合とで同一な D が得られた。次に、各パイプでは圧力にかなりの差があるため、圧力の D に及ぼす影響を調べた。ここでは、各パイプについて、放出ガス量を増減させ、圧力レベルを変えて、 D の変化を調べた。この結果を Fig. 4 に示す。これより、 $10^{-10} \sim 10^{-7}$ Torr の圧力範囲では D の値は

Fig. 5 Relation between diameter and diffusion coefficient $\bar{D}$.

圧力に影響されないことがわかる。

以上の検討から、 D に影響するパラメータはパイプ径のみであることがわかった。そこで、パイプ径に対して D をプロットしたのが Fig. 5 である。図よりわかるように、パイプ径と D は比例関係にあり、そのうえ D は拡散係数の経験式⁴⁾

$$\bar{D} = \frac{1}{3} \bar{v} \lambda \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{d}{\lambda} \right) \right\} \quad (4.1)$$

$\bar{v}$: 平均速度 λ : 平均自由行程

に一致するものとなった。つまり、本計算でパイプの圧力分布を計算する場合、 D として拡散係数 $\bar{D}$ を用いればよい事がわかる。なお、Fig. 6 に、パイプ径 $d=6$ cm の場合について、広範囲な圧力に対して $\bar{D}$ を計算した結果を示す。高真空域では $\bar{D}$ は一定値となり、先に検討した結果 (Fig. 4) が妥当であることがわかる。

4.2 異径パイプによる検討

これまでの検討で、単一パイプに対する係数 D の値を確定することができた。ここでは、これまでの検討をより一般化するために、直径の異なる 2 本のパイプを連結した形状を取り上げ、先に求めた D をそれぞれのパイプに用いて線形定常解析を行い、コンダクタンス法で求めた解析解と比較した。Fig. 7 に用いたモデルの形状

Fig. 6 Effect of pressure on diffusion coefficient $\bar{D}$.

Fig. 7 Two-pipe models.

Fig. 8 Pressure distribution along Z axis in the two-pipe model.

および計算条件を示す。Fig. 8 には、軸方向の分布を解析解と共に示した。図からわかるように、径が異なる場合には、それぞれのパイプごとに式(4.1)で求められる $\bar{D}$ を与えればよい事がわかる。

Fig. 9 Pressure distribution along Y axis in the two-pipe model ($d_1 = 3$ cm, $d_2 = 8$ cm).

Fig. 10 Pressure distribution along Y axis in the two-pipe model ($d_1 = 6$ cm, $d_2 = 8$ cm).

以上の検討から、円形パイプから成る装置においては、径の異なるパイプごとに、式(4.1)の $\bar{D}$ を求め、係数 D として与えてやれば、本計算手法で圧力分布が求められる事が確認できたと思われる。

なお、本報告の方法では、パイプ内の圧力分布を詳細に求めることができる。Fig. 9 および Fig. 10 はそれぞれ小径パイプの直径を 6 cm および 3 cm とした場合、パイプ断面での径方向圧力分布を示したものである。この図より、異径部付近で径方向に圧力勾配が表われること、異径部から各パイプの半径距離だけ離れた断面では勾配がなくなることなどがわかる。

4.3 一般形状への応用の検討

以上の検討から円形パイプの場合、係数 D として式(4.1)で表わされる拡散係数 $\bar{D}$ を与えればよい事がわかった。ここで式(4.1)を書き直して

$$\bar{D} = \frac{1}{3} \bar{v} \lambda' \quad (4.2)$$

$$\lambda' = \lambda \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{d}{\lambda} \right) \right\} \quad (4.3)$$

とすると、本検討で用いた直径 d のパイプでは、 $d/\lambda \ll 1$ より、 $\lambda' \simeq d$ と与えればよい事がわかる。他の形状へ適用する場合、円形パイプと同様、形状の影響を考慮に入れた分子の平均自由行程 λ' を用いた拡散係数 $\bar{D}$ を係数 D として与えればよいと推測できる。

5. 結 言

真空排気システムの最適設計を目的として分子流領域

の真空排気シミュレータの開発を行った。

(1) 有限要素法を用い、密度勾配に比例して変化する気体分子の様子から圧力分布を解く方法を検討した。

(2) 上記検討を基に、一次元、二次元、三次元形状を線形定常問題から非線形非定常問題まで扱えるプログラムを作成した。

(3) 係数 D について解析解と比較検討した結果、直径 d のパイプでは、管の中の拡散係数 $\bar{D}$ の経験式 $\bar{D} = 1/3 \cdot v\lambda \{1 - \exp(-d/\lambda)\}$ とよく一致することがわかった。

(4) 異型パイプの圧力分布を解析解と比較し、各径ご

とに係数 D を与えればよいこと、また、径方向の圧力分布が計算できる事を確認した。

今後はさらに種々の形状について検討を進め、適用範囲を広げてゆきたい。

〔文 献〕

- 1) 熊谷寛夫，他：真空の物理と応用（裳華房，1970）p. 95.
- 2) N. Yosimura: J. Vac. Sci. Technol. A3(6) Nov/Dec (1985) 2177.
- 3) 中山光康，他：真空 **28** (1985) 475.
- 4) 林 主税，他：真空技術（共立出版，1985）p. 17.