長い円管導管を通過した分子流気体分子の フローパターン

美馬 宏司*・山内 尚彦*,***・森脇 聡博*,****・小川 倉一**

(受付1991年8月5日, 掲載決定1991年10月5日)

On a Flow Pattern of the Molecules through a Long Cylindrical Tube in Molecular Flow

Hiroshi MIMA*, Naohiko YAMAUCHI*,***,
Satoshi MORIWAKI*,**** and Soichi OGAWA**

*(Faculty of Engineering, Osaka City University, 3-3-138, Sugimoto, Sumiyoshi-ku, Osaka 558)

** (Osaka Prefectural Industrial Technology Research Institute, 2-1-53, Enokijima, Nishi-ku, Osaka 550)

(Received August 5, 1991, Accepted October 5, 1991)

1. はじめに

低エネルギーイオンビームや励起中性粒子が製膜の分野で注目されつつある。著者らの一人はマルチキャピラリーを使ったイオン源^{1,2)}の開発を進めてきた。きわめて細い直円管を束ねて、これを通過する気体分子が形成するビーム状の分子線を高周波放電などでイオン化し、元のビーム形状をほぼ保ったままで低エネルギーのイオンビームをつくることを目的としている。

一方、励起中性粒子線源では、例えば、高周波の誘導結合によりつくられた磁界中に試料ガスを流し、グロー放電により生成された中性励起粒子を放電管先端のアーチャーより引き出す方法が用いられている。

これら2種類の線源について、指向性の強い粒子ビームをつくりたいと考えたが、2つの方法における差異はキャピラリー壁面で衝突を経験した粒子が利用可能か否かの点にある。すなわち、前者の方法では、衝突粒子、無衝突粒子を問はずビーム性のフローを形成する気体分子をまとめて、キャピラリーを通過後にイオン化する。

しかし、後者の方法では、まず励起中性粒子をつくり、これをキャピラリーを通して引き出すので、壁面との衝突を経験した粒子はもとの励起状態を保つことが難しいから、無衝突の粒子の様子を知っておく必要がると考えた。

円管を通過する気体分子については古くから³⁾調べられているが、いずれもいわゆるクラウジング係数的な考え方、すなわち、壁面との衝突の有無を区別せずに通過確率に注目したものである。

我々は、これら2種類の粒子線源における粒子の振舞いをあらかじめ調べておくためにモンテカルロ法によるシミュレーションを行った。分子流領域でのビームならば、単一の直円管についての結果を重ね合わせて総合特性を知ることができるはずなので、ここでは単一の直円管について検討した。

直円管を通過した気体分子のフローパターンは、数学的に方程式を解く方法で求めた Clausen³⁾, Dayton⁴⁾の例や, Davis⁵⁾, 間仁田, 中山⁶⁾のモンテカルロ法を用いてコンピュータ・シミュレーションにより求めた例などがある。いずれも基本的には壁面との衝突の有無を区別しない取扱い法である。

* 大阪市立大学工学部 (大阪市住吉区杉本)

** 大阪府立産業技術総合研究所 (大阪市西区江之子島)

*** 現在大阪府産業技術総合研究所

**** 現在大日本スクリーン製造株式会社

2. モンテカルロ法によるフローパターンの計算

2.1 シミュレーションの前提条件

直円管を通過する分子運動のシミュレーションにモンテカルロ法を導入するにあたって、次の4条件を仮定した⁷⁾。

- 1) 入口面で、入射気体分子の角度分布は余弦則に従う。
- 2) 分子どうしの衝突はない(分子流条件)。
- 3) 壁面に衝突した分子は余弦則に従って再放出される。
- 4) 出・入口面から出た分子は円管にもどらない。

仮定3)は、壁面に衝突した分子が衝突点に一度留まり、再放出される際に、入射角などのそれまでの履歴には無関係になると考えることである。余弦則に従わない例⁸⁾も報告されているが、分子流条件下で室温の実用表面におけるモデルとしては最も一般的であると考えられる。

なお余弦則に従う乱数の発生には逆関数⁷⁾を用いた。計算には NEC の PC-9801を用いた。

2.2 計算手順

モンテカルロ法によるシミュレーションプログラムの計算は以下の手順にしたがった。

- 1) 分子の入射位置を決定する。入射位置は入口面内のすべての点に等確率である。
- 2) 入射分子の方向を余弦則に従って決定する。
- 3) 分子と直円管の衝突点を計算する。

多数の分子について以下の計算を行なう。

- 4) 分子が出口面(入口面)に到達したか判断する。
- 5) 分子が管内にあるなら、円管内壁より余弦則にしたがって再放出を行なう。
- 6) 分子が管外に出たなら、フローパターンその他の算出に必要なカウントをする。

プログラムではフローパターン、通過確率、分子の衝突回数、通過した分子の最終衝突位置についての結果を出力することにした。

3. 計算結果

3.1 フローパターンについて

直円管の半径を R 、長さを L とし、 $L/R=1, 2, 5, 10, 100, 200$ の円管について各々10万個の入射分子に対するフローパターン、通過確率などを調べたあと、 $L/R=5$ および100の場合について各 10^6 個の分子を考えて再度調べた。得られた結果の一部を Fig. 1(a), (b)に示す。フローはその外形を線ではなく点であらわしてあり、円管

Fig. 1(a), (b) Flow patterns of molecules reflected (downward) and transmitted (upward) by a pipe of length (L) to radius (R) ratio of 5 for (a), 100 for (b).

の中心線 $A-A'$ のまわりに回転対称である(以下の図も同様である)。中心線 $A-A'$ を含む断面について、この軸からの偏角を一定角度($\pi/160$ (rad))ごとに区切って、各偏角の幅の中に飛来する粒子の量を示している。円管端面の中心と各点を結ぶベクトルの長さが、その方向の分子束強度(単位時間にその方向の単位立体角に飛んでいく分子数)に比例するように描いてある。なお、図ではその長さを最も長いものについて規格化してある。

3.2 鋭いビームを形成する分子について

中心軸方向($\theta=0$)に近い出射角($\theta < \tan^{-1} 2R/L$)をもつ通過分子はビームを形成する上で特に重要である。この点を考えつつ、すべての気体分子について円管を出るまでに壁面に衝突した位置や回数なども調べた。

通過分子束のフローパターンを L/R の値を変えて比べてみると、当然予想されることであるが、 L/R が大きくなるほど(すなわち円管が細長くなるほど)鋭いビーム部分が形成されてくる。この部分を形成する分子の

Fig. 2 Flow pattern of molecules transmitted without collisions with inner wall of the pipe ($L/R=5$).

運動を調べてみると、例えば $L/R=5$ の場合、全通過分子 (Fig. 1(a)) および無衝突通過分子 (Fig. 2) のフローパターンの比較から、ビームを形成する分子束は無衝突分子がその大半を占めていることがわかる。

しかし、管が細長くなるにつれてその様子は変わってくる。 $L/R=100$ のフローパターンでは無衝突分子が少なくにもかかわらず強いビーム性を示す。このような管では、通過分子の多くは管壁と 10^3 回以上の衝突を経験している。そして、円管の入口付近から出口付近にわたる広い範囲の壁面において、そこを離れる際に偶然円管の出口方向に飛び出したものがビーム形成に大きく寄与しており、ビーム部分の70%程度がこのような分子で占められている。

3.3 通過確率

通過確率 (クラウジング係数) は真空技術における重要な値でもあり古くからよく調べられている。ここで求めた通過確率を過去の別法による計算値と比較して良い一致が得られれば、本報の結果が適切なものであると判断できよう。ここで求めた円管の通過確率は、Clausing 自身が計算したクラウジング係数⁹⁾や近似式による値¹⁰⁾とはいずれもほぼ3%以内の差で良い一致を示している。

3.4 斜め入射した場合のフローパターン

円管が細長くなる程無衝突分子が鋭いビームの形成に寄与する割合が減少することを別途に確かめる意味で、すべての気体分子が適当な一定の入射角で円管に飛び込んでくる場合のフローパターンを調べてみた。ここでは全分子束を軸方向に対して $\theta=45^\circ$ の傾きで入射させて、すべての気体分子が必ず壁面との衝突を経験するようにしてみた。このときに得られたフローパターンを Fig. 3(b) に示す。壁面との衝突を経験した分子のみであるにもかかわらず先に求めた Fig. 1(b) によく似たフロー

Fig. 3(a), (b) Flow patterns obtained when all the molecules are injected with incident angle $\theta=45^\circ$ to the pipe axis. $L/R=5$ for (a), $L/R=100$ for (b).

パターン (前方へのビーム) が形成されている。

もちろん、 L/R 値が小さくて鋭いビーム形成が主として無衝突の分子により行われる円管、例えば $L/R=5$ では上と同様に $\theta=45^\circ$ で全分子を入射させると、得られるフローパターンは Fig. 3(a) のようになり Maxwell 分布をもつ入射気体分子によるもの (Fig. 1(a)) とは大きく異なったものとなる。

4. おわりに

直円管を通過する気体分子について、 $L/R=5$ と 100 の円管の場合を中心に調べた。一般に、

1) 円管が細長くなる (L/R が大きくなる) ほどビーム性は良くなるが、無衝突分子のビーム形成への寄与は減少する。

$L/R=100$ の管では、

2) ビーム性を示す分子 (R/L で定まる角度より小さい出射角を持つ粒子) の70%程度が壁面との衝突を経験したものである。それらの最終衝突位置は管壁の入口から出口にわたって広く分布しており、そこから出口に向かって飛び出してきた分子である。

3) R/L で決まる角度の外側へ広がる分子の大部分は、壁面と千回以上衝突を繰り返している。最後の衝突位置

は出口面の付近である。これは最終衝突位置から出口面までの短い長さの円管を用いた場合に対応するので、当然これらの分子は広い角度分布を持ち、ビーム性を損なう原因になる。

このような結果から考えて、キャピラリー内壁との衝突を問題にしない使い方、例えば上述のキャピラリー通過後のイオン化の場合には L/R の大きいキャピラリーの使用は有効である。しかし、壁面との衝突経験がない粒子の使用を望む場合に L/R の大きいキャピラリーを使用することには問題があることが分かる。

鋭いビーム性をもつ分子の流れをつくるために、2枚のスリットを用いてその間を差動排気する方法であれば、装置の準備が複雑になるが、後者のような目的に利用できる。

一般に、管のコンダクタンスを問題にするときには、通過分子の管壁との衝突の有無や管の出口での出射角などは問はず、すべての粒子をまとめて取り扱っている。一般に扱われているフローパターン（例えばRef. 3, 4）やクラウジング係数はこのような場合に相当するものである。しかし、キャピラリーを用いて粒子のビーム性を良くしようと考えるとき、その目的によってはこれらの粒子を分けて考える必要がある。すなわち、単にクラウジング係数（通過確率）を考えるのではなく、ビーム性

を示す（出射角が L/R で定まる角度内のもの）無衝突粒子、同じくビーム性を示す衝突粒子、出射角が大きくてビーム性を損なう成分となる粒子のそれぞれを区別して、 L/R に対して整理しておく必要がある。

謝辞 本研究を進めるに当たって、大阪工業大学一般教育科片山逸雄先生にモンテカルロ法に関する文献を紹介していただいた。ここにお礼を申し上げる。

〔文 献〕

- 1) S. Ogawa et. al: Nucl. Instrum. & Methods, B37/38 (1989), 163-165.
- 2) 小川倉一, 他: 真空, 33 (1990), 268-270.
- 3) P. Clausing: Ztschr. f. Phys., 66 (1930), 471.
- 4) B. B. Dayton: 1958 Natl. Symp. Vac. Technol. Trans. (Pergamon, 1957 p5).
- 5) D. H. Davis: Journal of Applied Physics 31 (1960) 1169.
- 6) 間仁田英子, 中山勝矢: 真空, 11 (1968), 46.
- 7) 岡野達雄, 中山光康: 日本真空協会昭和61年2月研究例会予稿集, 1.
- 8) F. C. Hurlbut: J. Appl. Phys., 28 (1957), 844.
- 9) P. Clausing: Ann. Phys. 12 (1932), 961.
- 10) 富永五郎: 真空, 14 (1971), 326.