表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮した 新しいモンテカルロ計算方法

吉田 肇^{*1}・城 真範^{*1}・平田 正紘^{*1}・秋道 齊^{*1}

New Method of Monte Carlo Calculation Using the Distorted Scattering Angle Distribution Depending on the Surface Roughness

Hajime YOSHIDA^{*1}, Masanori SHIRO^{*1}, Masahiro HIRATA^{*1} and Hitoshi AKIMICHI^{*1}

^{*1}National Institute of Advanced Industrial Science and Technology,
AIST Central3, 1-1-1 Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8568

(Received January 25, 2011, Accepted March 31, 2011)

A transmission probability W of gas molecules passing through a vacuum component is usually calculated using the Monte Carlo method. In the calculation, it is generally assumed that gas molecules are introduced to a smooth surface and scatter with cosine law. Since the W is influenced by the shape and/or roughness of the surface in practice, the precise calculation of W requires the inclusion of surface geometry. The conventional Monte Carlo method, however, needs very long time to calculate the W for a cylinder with many corrugations, in other words, rough surface. In this paper, a new method to decrease the time for a calculation with rough surface is described. In the new method, the scattering angle distribution distorted by corrugations is analytically calculated. The distorted distribution is used to determine the scattering angle of the gas molecules at the surface. In the case of a cylinder with the ratio of length to the radius L/r of 5, the ratio of the W with V-shaped corrugations to that without corrugations is 0.77 at minimum. Results of the calculation were obtained by both the new method and the conventional method, and are identical within 0.5%. The time required by the new method was more than 100 times shorter than that by the conventional one.

1. はじめに

分子流における気体の通過確率を計算するために、モンテカルロ法が使用される。一般にこの計算では、壁表面に凹凸が無く、気体分子は壁面で余弦則に従って散乱すると仮定する。しかし実際には、開口部の面積は同じでも、表面に凹凸がある場合は、通過確率(コンダクタンス)が異なることが、計算と実験の両面から示されている¹⁻⁸⁾。Davisらの研究¹⁾では、通過確率は、表面の凹凸の大きさや角度に依存することが示された。杉山ら³⁻⁶⁾や筆者らの研究⁸⁾では、通過確率の実測値は、壁表面が平坦な場合、余弦則を仮定した計算結果と良く一致するが、壁表面が粗い場合、通過確率の実測値は、凹凸の角度に依存して、余弦則を仮定した計算結果より小さくなることが示された。その一方、壁材料や凹凸の大きさによる通過確率への影響は小さかった。

本研究の目的は、壁表面の凹凸が気体の流れに影響を与える理由を明らかにし、この影響をモンテカルロ計算に加えることで、壁表面の凹凸による通過確率の変化を見積もれるようにすることである。

2.では、Davisらが行ったV字溝付き円筒導管のモンテカルロ計算¹⁾を再計算すると共に、新たな計算を加え、凹凸によってコンダクタンスが変化する原因を考察する。3.では、本研究で提案する表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮したモンテカルロ計算方法について述べる。4.はまとめである。

2. V字溝付き円筒導管の通過確率の計算

Fig. 1に、Davisらが行ったモンテカルロ法によるV字溝付き円筒導管の通過確率の計算結果¹⁾、及び同様の形状を本研究で再度計算した結果を示す。本研究の計算回数は 10^8 回、Davisらは5000~7500回である。管の長さ L と半径 r の比(L/r)を1から5まで変化させた。V字溝の深さは $0.05r$ で一定とし、垂直から取ったV字溝の角度 θ を 7° から 90° (平面)まで変化させた。V字溝の個数は、角度が小さくなるほど多いことになる。Fig. 1に示すように、V字溝付き円筒導管の通過確率 W は、溝が無い円筒導管の通過確

Fig. 1 Dependence of the ratio of W/W_0 , where W and W_0 mean the transmission probability for cylinders with corrugated surface and with flat surface, respectively, on the slope angle of corrugations from vertical. This is the recalculation of the result performed by Davis et. al..

^{*1} 鈷産業技術総合研究所 計測標準研究部門 (〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 つくば中央第3)

率 W_0 に比べ、 $\theta = 80^\circ \sim 90^\circ$ の間では若干大きい、 θ が 80° 以下では小さくなり、 θ が約 30° の時、最小値を持った。再計算の結果は、Davis らの結果と同傾向であった。円筒導管の開口部の面積は一定なので、この通過確率の変化は V 字溝の影響である。

次に、V 字溝の角度を、ある値（例えば $\theta = 84^\circ$ ）に決めて、V 字溝の深さを変化させて、モンテカルロ計算を行った。V 字溝の個数は、深さが浅くなるほど多くなる。次に、 θ を、 $8.9^\circ \sim 84^\circ$ までの間で、7 点変化させて同様に計算を行った。Fig. 2 は、円筒導管の長さ半径比 (L/r) を 5 とした時の、V 字溝の深さと半径の比 d/r と通過確率比 W/W_0 の関係を示した。V 字溝付き円筒導管の通過確率は、V 字溝の深さが浅くなると共に減少し、一定値に近づいた。また、V 字溝の角度が 32° の時、減少率は約 23% で最大となった。V 字溝の角度がなだらかで ($\theta = 64^\circ \sim 84^\circ$)、溝が深い時、通過確率は 1 より大きくなった。これは、円筒導管の平均内径が大きくなるためであると考えられる。

V 字溝が浅い時に、 W/W_0 が 1 より小さい値で一定となった理由を、以下のように考察した。Fig. 3 に、V 字溝がある時と無い時の気体の散乱角分布を模式的に示す。ここで、個々の気体分子は壁に対して垂直方向に余弦則で散乱すると仮定する。気体が図の左側から右側に流れている場合、気体の分子密度は左側の方が高いため、表面には右側よりも左側から多くの気体分子が入射する。表面が平面の場合には、左右どちらから気体分子が入射しても、入射した気体分子の平均の散乱角分布は変化しない。しかし、表面に V 字溝がある場合、流れに対向する右斜面により多くの気体分子が衝突し、左方向に散乱されやすくなる。この結果、V 字溝に入射した気体分子の平均の散乱角分布は、気体の流れの上流方向へ向かう成分が大きくなるので、通過確率は V 字溝が無い場合に比べ小さくなる。さらに V 字溝が急斜面になると、V 字溝内での繰返し衝突によりビーム効果が生じ、気体分子が多く散乱される角度は、円筒導管の中心軸に垂直方向になる。Fig. 1 で、 θ が 30° より小さくなると、通過確率が微増しているのは、気体分子が多く散乱する角度が、上流方向へ向いている場合より、円筒導管の中心軸に垂直方向を向いている方が若干流れやすいためであると考えられる。また、V 字溝の深さが極限まで浅くなっても、 W/W_0 は 1 に近づかないのは、この計算では、分子の大きさを無視しているためである。

3. 表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮したモンテカルロ計算方法

Fig. 2 の結果から、表面の凹凸が、ペローズのような大きく深い溝の場合と、配管の内表面にある微小な凹凸の場合で、気体の通過確率に及ぼす影響を、異なる方法で取扱うことができることがわかる。ペローズのように、溝の深さが半径の数分の 1 程度の場合、通過確率は、平均内径の変化と散乱角分布の変化の両方の影響を受けるため、現象としては複雑となるが、こうした大きな溝をモデル化し、モンテカルロ計算することは困難でない。

一方、配管の内表面にある凹凸のように、溝の深さが半径

Fig. 2 Dependence of the ratio of W/W_0 , where W and W_0 mean the transmission probability for cylinders with corrugated surface and with flat surface, respectively, on the ratio of the depth of corrugations to the radius, d/r . The ratio of the length to the radius of the cylinder, L/r , is 5.

(a) Corrugated surface

(b) Flat surface

Fig. 3 Schematic diagram for the scattering angle distribution with (a) corrugated surface and (b) flat surface.

の 100 分の 1 以下の場合（例えば、半径 3 mm の配管では、凹凸が $30 \mu\text{m}$ 以下）、平均内径の変化は無視できるので、通過確率は散乱角分布の変化のみの影響を受けると考えてよい。よって、現象を単純化できるが、この微小凹凸による散乱角度分布の変化をモンテカルロ法でその都度決定する方法は、計算資源にとって大きな負担となる。

そこで、表面の微小な凹凸をモンテカルロ計算の基本形状に入れるのではなく、凹凸によって変化した散乱角分布を予

め解析的に求めておき、この散乱角分布に従って気体分子を散乱させる方法を開発し、計算の効率化を試みた。凹凸によって変化した散乱角分布とは、溝に入射した気体分子が、溝の内部で1回又は複数回散乱した後、脱出する時の散乱角の確率分布である。溝の大きさは非常に小さいので、気体分子は溝に均一に入射すると仮定すると、この散乱角分布は、入射角と溝の形状の関数になる。この計算方法は、溝の大きさが、流路形状に比べ十分小さく、且つ、分子の大きさに比べて十分大きいという仮定が成立する時に適用できる。ここでは、最も単純なモデルとして、2次元V字溝付き円筒導管の通過確率を計算し、この新しい計算方法の妥当性を検証した。

3.1 2次元V字溝に入射した気体分子の散乱角分布

Fig. 4 に散乱角分布を求めるための模式図を示す。ここでは、ある角度 θ を持つV字溝に、気体分子が左側から一様に同じ角度 α で入射し、V字溝内で1回又は複数回散乱した後、散乱角 γ でV字溝から脱出する場合を考える。 α の取り得る値は -90° （平行入射）から 0° （垂直入射）、 θ の取り得る値は 0° から 90° （平面）で、 γ の取り得る値は -90° から 90° である。 α, θ, γ は、いずれも垂直からの角度とする。

計算は、(a)入射した気体分子はV字溝の左右両面に入射する $-\theta < \alpha \leq 0$ の場合と、(b)気体分子は右斜面の一部のみ入射する $-90^\circ < \alpha \leq -\theta$ の場合で分けて考える。それぞれの場合の散乱角分布を、3.1.1と3.1.2で示す。

3.1.1 左右両面に入射する場合（ $-\theta < \alpha \leq 0$ ）の散乱角分布の解析式

V字溝に入射した気体分子は、溝内で1回又は複数回散乱した後、最後に右斜面か左斜面のいずれかで散乱して、V字溝から脱出する。従って、V字溝に入射した気体分子の散乱角分布 f は、以下の式で表される。

$$f = P_R f_R + P_L f_L \quad (3.1)$$

Fig. 4 Schematic diagram to derive the scattering angle distribution. The distribution is different between the case (a) of $-\theta < \alpha \leq 0$ and the case (b) of $-90^\circ < \alpha < -\theta$, where α and θ mean the incident angle of a gas molecule into corrugations and the slope angle of corrugations from vertical, respectively.

P_R は最後に右斜面で散乱する分子の割合、 f_R は右斜面から散乱する分子の散乱角分布、 P_L は最後に左斜面で散乱する分子の割合、 f_L は左斜面から散乱する分子の散乱角分布である。

それぞれの解析結果は以下ようになった。詳細な導出方法は付録1に示してある。

$$\begin{aligned} f_R(\gamma) &= \cos \gamma, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq -\theta \text{ の時} \\ &= -\frac{\sin(\gamma - \theta)}{2 \sin \theta}, \quad |\gamma| < \theta \text{ の時} \\ &= 0, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} f_L(\gamma) &= 0, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq -\theta \text{ の時} \\ &= -\frac{\sin(\gamma + \theta)}{2 \sin \theta}, \quad |\gamma| < \theta \text{ の時} \\ &= \cos \gamma, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$P_R = \frac{\phi_R + \phi_L(1 - \sin \theta)}{2 - \sin \phi} \quad (3.4)$$

$$P_L = \frac{\phi_R(1 - \sin \theta) + \phi_L}{2 - \sin \theta} \quad (3.5)$$

$$\text{ここで, } \phi_R = \frac{\sin(\theta + \alpha)}{\sin(\theta + \alpha) + \sin(\theta - \alpha)}$$

$$\phi_L = \frac{\sin(\theta - \alpha)}{\sin(\theta + \alpha) + \sin(\theta - \alpha)}$$

3.1.2 右斜面にのみ入射する場合（ $-90^\circ < \alpha \leq -\theta$ ）の散乱角分布の解析式

$-90^\circ < \alpha \leq -\theta$ の場合、左斜面は影となるので、気体分子は右斜面の一部にのみ入射する。この場合、V字溝に入射した気体分子の散乱角分布 f' は、以下の式で表される。

$$f' = P'_{\text{out}} f'_R + P'_R f_R + P'_L f_L \quad (3.6)$$

ここで、第一項目は入射後1回目の右斜面における散乱で脱出する成分、 P'_R と P'_L は2回目以降の散乱において、最後に右斜面で散乱して脱出する割合と、左斜面で散乱して脱出する割合である。 f_R と f_L は(3.2)式、(3.3)式と同じである。 $f'_R, P'_{\text{out}}, P'_R, P'_L$ の結果は以下になる。詳細な導出方法は、付録2に示した。

$$\begin{aligned} f'_R(r) &= \frac{\sin(\gamma + \theta) - \sin(\gamma - \theta)}{S'}, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq \alpha \text{ の時} \\ &= -\frac{\sin(\gamma - \theta) \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)}\right)}{S'}, \quad \alpha < \gamma < \theta \text{ の時} \\ &= 0, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \end{aligned} \quad (3.7)$$

ここで、

$$\begin{aligned} S' &= 2 \sin \theta (\sin \alpha + 1) + \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)}\right) \\ &\quad \times (1 - \cos(\theta - \alpha)) \\ P'_{\text{out}} &= \frac{S'}{2 \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)}\right)} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Fig. 5 Comparison of scattering angle distribution that calculated by the analytical equation and that calculated by the two dimensional Monte Carlo calculation.

$$P'_R = \frac{(1 - P'_{out})(1 - \sin \theta) \sin \theta}{1 - (1 - \sin \theta)^2} \quad (3.9)$$

$$P'_L = \frac{\sin \theta (1 - P'_{out})}{1 - (1 - \sin \theta)^2} \quad (3.10)$$

3.1.3 解析的に求めた散乱角分布と2次元モンテカルロ計算で求めた散乱角分布の比較

Fig. 5 に、解析的に求めた散乱角分布と2次元モンテカルロ計算で求めた散乱角分布の比較を示す。2次元モンテカルロ計算の計算回数は 2×10^6 回である。

$\theta = 84^\circ$ の時は、V字溝はなだらかであるから、気体の散乱角分布は余弦則とほとんど変わらない。急峻なV字溝である $\theta = 32^\circ$ で、入射角 $\alpha = 40^\circ$ や 80° の場合、2. で考察したように、左側から入射した気体分子は左方向に散乱する傾向を持つことがわかる。 $\theta = 34^\circ \sim 84^\circ$ では、解析的に求めた散乱角分布と2次元モンテカルロ計算は3%以下で一致した。

さらに急峻なV字溝である $\theta = 7.1^\circ$ では、特に入射角 $\alpha = 0^\circ$ (垂直入射) で、解析式とモンテカルロ計算で差が大きくなった。2次元モンテカルロ計算の結果は、気体分子がこのように急峻なV字溝に入射した場合、ビーム効果によって、壁垂直方向へ散乱する傾向が持つことを示している。一方、解析では、V字溝内にある気体分子の密度勾配を無視しているので、ビーム効果を再現できない。これにより、2つの計算結果で差が生じたと考えられる。しかし、実表面の凹凸の斜度 θ は一般に 70° 以上なので⁸⁾、解析式でも実用上、問題は少ないと考えられる。

3.2 表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮したモンテカルロ計算方法のブロックダイアグラム

表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮し

Preparation of a table for scattering angle distribution (two dimension)

Monte Carlo calculation for a cylinder (three dimension)

Fig. 6 Block diagram for the new method of Monte Carlo calculation to calculate cylinders with corrugated surface.

Microsoft Excel - 散乱角分布の表の一例.xls

M27 = 0.140636441923122

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	θ	80°						
2								
3		1	2	3	4	5	6	7
4	Incident angle α	0	-1	-2	-3	-4	-5	-6
5	PL	0.5	0.498507	0.497013	0.495518	0.49402	0.492518	0.491011
6	PR	0.007596	0.007573	0.007551	0.007528	0.007505	0.007482	0.00746
7	Pout'	0.492404	0.493919	0.495436	0.496954	0.498475	0.5	0.501529
8								
9	Incident angle α							
10	Scattering angle γ	0	-1	-2	-3	-4	-5	-6
11	-90	0	0	0	0	0	0	0
12	-89	0.008726	0.008752	0.008778	0.008804	0.008831	0.008857	0.008883
13	-88	0.01745	0.017502	0.017554	0.017606	0.017658	0.017711	0.017763
14	-87	0.026168	0.026246	0.026324	0.026403	0.026481	0.02656	0.026638
15	-86	0.034878	0.034982	0.035087	0.035191	0.035295	0.0354	0.035506
16	-85	0.043578	0.043708	0.043838	0.043969	0.044099	0.04423	0.044361
17	-84	0.052264	0.05242	0.052576	0.052733	0.052889	0.053046	0.053204
18	-83	0.060935	0.061117	0.061299	0.061481	0.061664	0.061847	0.06203
19	-82	0.069587	0.069794	0.070002	0.07021	0.070419	0.070628	0.070838
20	-81	0.078217	0.078451	0.078684	0.078918	0.079153	0.079388	0.079623
21	-80	0.086824	0.087083	0.087343	0.087602	0.087863	0.088123	0.088385
22	-79	0.095404	0.095663	0.095921	0.09618	0.09644	0.0967	0.09696
23	-78	0.103956	0.104213	0.104471	0.104729	0.104987	0.105246	0.105506
24	-77	0.112476	0.112732	0.112989	0.113246	0.113503	0.113761	0.11402

Scattering angle distribution

Fig. 7 An example of a table of scattering angle distribution, which was calculated by the analytical equation.

たモンテカルロ計算方法のブロックダイアグラムを Fig. 6 に示す。手順は大きく2つの段階に分けられる。

まず、V字溝の角度 θ を決め、入射角 α を変えて、(3.1) 式と(3.6)式を使って散乱角分布を求め、表にする。この計

算は、汎用表計算ソフトを用いても十分可能であり、表の一例を **Fig. 7** に示した。ただし、(3.1)式と(3.6)式で求めた散乱角分布は2次元分布なので、これを3次元分布に変換しなければならない。2次元分布を3次元分布に変換する手順を付録3にまとめた。

次に、気体分子が壁に入射する際に、入射角 α を求め、この α に対応する分布を表（例えば Fig. 7）から直接、又は補完して読み出し、その確率分布に従ってモンテカルロ計算を行う。ここで言う入射角 α は、図 A-2 の XZ 投影面における入射角になることに注意する。

最終的には、円筒導管を通過した気体分子の総数 N_T と入口に戻った気体分子の総数 N_R から、円筒導管の通過確率 W を求める。

$$W = \frac{N_T}{N_T + N_R} \tag{3.11}$$

なお、 α の取る間隔を 1° から 5° まで変えた場合、最終的な円筒導管の通過確率の結果に与える影響は、 L/r 比が1～5の場合、0.05%以下であった。

3.3 散乱角分布を変化させるモンテカルロ計算（新プログラム）と、V字溝付き円筒導管のモンテカルロ計算（従来プログラム）の比較

本研究で提案する、散乱角分布を変化させるモンテカルロ計算（新プログラム）の妥当性を検討するため、従来の円筒導管の表面形状を変化させたモンテカルロ計算（従来プログラム）の結果と比較した。計算回数は 10^8 回である。

まず、新プログラムで、V字溝の角度 θ を 89.99999° とほぼ平面にした時の通過確率の計算結果と、従来プログラムで凹凸の無い円筒導管の計算結果、及び Szwemin⁹⁾ らの計算結果を比較した。また、計算のばらつきは以下の式で見積もった¹⁾。

$$\sigma = \sqrt{\frac{W(1-W)}{N}} \tag{3.12}$$

ここで、 W は通過確率、 N は計算回数（気体分子の総数）である。結果を **Table 1** にまとめた。

新プログラムの結果は、従来プログラムの結果とは0.007%～0.048%で、Szwemin らの結果とは0.002%～0.045%で一致した。本研究の計算結果は0.03%以下、Szwemin らの結果は0.002%程度ばらつきがあることから、新プログラムと従来の計算手法は、計算のばらつきの範囲内で一致した。

次に、Fig. 2 で示した従来プログラムの計算と同条件（V字溝の角度 θ , L/r 比、計算回数 N ）で、新プログラムを使って通過確率を計算し、結果を比較した (**Fig. 8**)。ここで、散乱角分布を解析式で表すことが困難である V 字溝の角度 θ が 32° 以下の計算は省いた。

Fig. 8 では、新プログラムの結果を図の左端にプロットしてある。これは、新プログラムの結果は、溝の大きさが流路形状に比べ十分小さいという条件に対応するためである。新プログラムの結果は、従来プログラムの結果を溝が浅い方向へ外挿した線上に位置しており、これは新プログラムの結果が定性的に正しいことを示している。従来プログラムの計算結果の一番左端の点と、新プログラムの計算結果の比較すると、両者の差は0.5%以下で一致した (**Table 2**)。しかし、

Table 1 Comparison of transmission probabilities calculated by Monte Carlo calculation using distorted scattering angle distribution (New method) and by normal Monte Carlo calculation for cylinders (Conventional method).

L/r	This study ($N=10^8$)				Szwemin et. al. ($N=10^{10}$) 〈Cylinder〉	
	New method 〈 $\theta=89.99999^\circ$ 〉		Conventional method 〈Cylinder〉			
	W	$2\sigma/W$	W	$2\sigma/W$	W	$2\sigma/W$
1	0.671984	0.014%	0.672030	0.014%	0.6719856	0.001%
3	0.420045	0.023%	0.420176	0.023%	—	—
5	0.310517	0.030%	0.310665	0.030%	0.3105261	0.002%

Fig. 8 Comparison of transmission probability W calculated by the new method and that calculated by the conventional method. The ratio of the length to the radius of the cylinder, L/r , is 5.

この差は計算のばらつきより大きく、新プログラムの限界に起因したものであるかもしれない。新プログラムの限界として、解析で求める際に生じた散乱角分布の不正確さ、V字溝内に均一に気体分子が入射していると仮定していること、新プログラムのV字溝は平面上にあるが従来プログラムのV字溝は円筒上にあること、などが挙げられる。また、従来プログラムの値が十分飽和していない可能性もある。一方、計算時間は、計算機の性能や条件により異なるため定量的な比較は難しいが、本研究で用いた計算機の場合、従来プログラムの100分の1以下となり、計算速度を大幅に向上させることができた。

新プログラムを用いて計算した L/r 比が100までのV字溝付き円筒導管の通過確率と溝のない円筒導管の通過確率の比 W/W_0 を **Fig. 9** に示す。 W/W_0 は L/r が10以下までは大きく減少した。これは、壁に衝突することなく直接通過する、すなわち表面の凹凸の影響を受けない気体分子の割合が、 L/r が大きくなると共に小さくなるためである。しかし、その後、 L/r が大きくなっても W_0/W の減少はあまり減少せず、 L/r が50以上ではほぼ飽和した。この結果は、管の長さ

Table 2 Comparison of transmission probabilities calculated by Monte Carlo calculation using distorted scattering angle distribution (New method) and by Monte Carlo calculation with corrugated surface (Conventional method). The ratio of length to radius of a cylinder (L/r) is 5.

θ	New method		Conventional method				W_N/W_C
	W_N	$2\sigma/W$	Number of corrugations	Depth of corrugation, D/r	W_C	$2\sigma/W$	
84	0.306614	0.030%	64	3.9×10^{-3}	0.307141	0.030%	0.99828
79	0.296703	0.031%		7.8×10^{-3}	0.297164	0.031%	0.99845
68	0.273586	0.033%		1.6×10^{-2}	0.274389	0.033%	0.99707
51	0.248337	0.035%		3.1×10^{-2}	0.247927	0.035%	1.00165
32	0.241123	0.036%		6.2×10^{-2}	0.239953	0.036%	1.00487

Fig. 9 Dependence of the ratio of W/W_0 , where W and W_0 mean the transmission probability for cylinders with corrugated surface and with flat surface, respectively, on the ratio of the length to the radius of cylinders, L/r .

が長くなっても、微小な V 字溝が通過確率に及ぼす影響は、30%以下に留まることを示している。

4. ま と め

本研究の目的は、気体流路表面の凹凸が通過確率を変化させる原因を明らかにし、この影響をモンテカルロ計算に加えることで、凹凸による通過確率の変化を見積もることができるようにすることである。

3.では、気体流路表面の凹凸が通過確率を変化させる原因には、平均内径の変化と、気体の散乱角分布の変化の2つがあることを明らかにした。V字溝付き円筒導管の通過確率は、V字溝の深さと共に減少し、V字溝の角度が32°の時、最大約23%減少した。

4.では、3.の考察に基づいて、実表面にある微小な凹凸のような小さな溝がある場合の通過確率の計算に有効な、表面の凹凸による気体分子の散乱角分布への影響を考慮したモンテカルロ計算方法を開発した。ここでは、最も単純なモデルとして、V字溝付き円筒導管の通過確率の計算を扱った。開発した新プログラムの結果は、凹凸による最大約23%の通過確率の減少を、従来プログラムと0.5%以下の差で計算できた。一方、新プログラムの計算時間は、旧プログラムの

1/100以下で、計算速度を大幅に向上させることができた。

また、新プログラムを用いることで、表面に微小な V 字溝がある円筒導管の通過確率は、管の長さが $L/r=100$ まで長くなっても、溝の無い円筒導管の通過確率に比べ、減少率は30%以下に留まること示した。

本研究で提案した方法は、V字溝以外の凹凸や円筒導管以外の計算にも、また、モンテカルロ直接法 (DSMC) を用いた計算においても有効であると考えられる。

付録 1 気体分子が V 字溝の左右両面に入射する場合 ($-\theta < \alpha \leq 0$) の、 f_R, f_L, P_R, P_L の導出

- (1) 右斜面と左斜面から散乱する分子の散乱角分布 f_R, f_L の導出

気体分子が V 字溝の右斜面に入射し、V 字溝内で多重散乱をした後、脱出する気体分子について考える。気体分子がある点 P に入射したとすると、点 P から散乱角 γ 方向に散乱する気体分子の密度 $n_P(\gamma)$ は、点 P の垂線と散乱角 γ がなす角 β の余弦に比例する。ここで、 $\beta = \gamma - \theta + 90^\circ$ であるから、 $n_P(\gamma)$ は以下の式で表される。

$$n_P(\gamma) = \cos \beta = \cos \left(\gamma - \theta + \frac{\pi}{2} \right) = -\sin(\gamma - \theta) \quad (\text{A.1.1})$$

散乱角 γ の絶対値が V 字溝の角度 θ より小さい場合 ($|\gamma| < \theta$)、気体分子は、右斜面のどの位置に衝突しても、この 1 回の散乱で V 字溝から脱出できる。気体分子が斜面から均一に散乱する場合、右斜面から脱出する散乱角 γ の気体分子の数 n ($|\gamma| < \theta$) は、(A.1.1) 式を 0 から 1 まで x で積分することで得られる。

$$n(|\gamma| < \theta) = - \int_0^1 \sin(\gamma - \theta) dx = -\sin(\gamma - \theta) \quad (\text{A.1.2})$$

一方、 $-90^\circ < \gamma \leq -\theta$ の時、気体分子は左斜面に衝突するため脱出できないものが出てくる。散乱角 γ_0 の気体分子で脱出できるものは、 $(-1, 0)$ を通る角度 γ_0 の直線と右斜面の交点を x_0 とした時、 x_0 から 1 までの範囲に入射した気体分子のみである。交点 x_0 は、

$$x_0 = \frac{\sin(\gamma + \theta)}{\sin(\gamma - \theta)} \quad (\text{A.1.3})$$

であるから、右斜面から脱出する散乱角 γ の気体分子の数 n ($-\pi/2 < \gamma \leq -\theta$) は、(A.1.3) 式を、 x_0 から 1 まで x で積分

することで得られる.

$$\begin{aligned} n(-\pi/2 < \gamma \leq -\theta) &= - \int_{x_0}^1 \sin(\gamma - \theta) dx \\ &= -\sin(\gamma - \theta) \left\{ 1 - \frac{\sin(\gamma + \theta)}{\sin(\gamma - \theta)} \right\} \\ &= 2 \sin \theta \cos \gamma \end{aligned} \quad (\text{A.1.4})$$

また, $\theta \leq \gamma < 90^\circ$ の方向に右斜面から散乱することはありえないので, $n(\theta \leq \gamma < \pi/2)$ は 0 である.

γ を横軸とし, この $n(|\gamma| < \theta)$, 又は $n(-\pi/2 < \gamma \leq -\theta)$ を縦軸としてプロットすると, 右斜面から脱出する気体分子の散乱角分布となる. この散乱角分布の面積が 1 となるように規格化すると, 確率分布として利用できるようになる. 散乱角分布の面積 S は以下ようになる.

$$\begin{aligned} S &= \int_{-\pi/2}^{-\theta} 2 \sin \theta \cos \gamma d\gamma + \int_{-\theta}^{\theta} -\sin(\gamma - \theta) d\gamma \\ &= 2 \sin \theta \end{aligned} \quad (\text{A.1.5})$$

ここで右辺第 1 項は $-90^\circ < \gamma \leq -\theta$ の (A.1.4) 式に対応し, 第 2 項は $|\gamma| < \theta$ の (A.1.2) 式に対応する.

まとめると, 右斜面から脱出する気体分子の散乱角分布 $f_R(\gamma)$ は, 以下の式で表される.

$$\begin{aligned} f_R(\gamma) &= \cos \gamma, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq -\theta \text{ の時} \\ &= -\frac{\sin(\gamma - \theta)}{2 \sin \theta}, \quad |\gamma| < \theta \text{ の時} \\ &= 0, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \end{aligned} \quad (\text{A.1.6})$$

左斜面の散乱角分布も同様の方法で求められ, 右斜面の分布と左右対称になる. 右斜面から脱出する気体分子の散乱角分布 $f_L(\gamma)$ は, 以下の式で表される.

$$\begin{aligned} f_L(\gamma) &= 0, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq -\theta \text{ の時} \\ &= \frac{\sin(\gamma + \theta)}{2 \sin \theta}, \quad |\gamma| < \theta \text{ の時} \\ &= \cos \gamma, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \end{aligned} \quad (\text{A.1.7})$$

(2) 最終的に右斜面と左斜面で散乱する分子の割合 P_R, P_L の導出

最初に気体分子が入射する時に, 右斜面に衝突する割合 ϕ_R と左斜面に衝突する割合 ϕ_L を求める. **Fig. A-1** に, ϕ_R と ϕ_L を求めるための模式図を示す. 左右両面に入射する場合 ($-\theta < \alpha \leq 0$), V 字溝の頂点 Y_0 と, V 字溝と x 軸の 2 つの交点 R, L とから, 入射角 α 方向に直線を 3 本引き, この 3 本の直線に垂直で点 L を通る直線 m を引いた時, ϕ_R と ϕ_L は, 線分 LA と線分 AB の長さの比に等しくなる. よって, ϕ_R と ϕ_L は以下の式で表される.

$$\begin{aligned} \phi_R &= \frac{\sin(\theta + \alpha)}{\sin(\theta + \alpha) + \sin(\theta - \alpha)} \\ \phi_L &= \frac{\sin(\theta - \alpha)}{\sin(\theta + \alpha) + \sin(\theta - \alpha)} \end{aligned} \quad (\text{A.1.8})$$

次に, 1 回の散乱で脱出できる分子の確率 P_{out} を求める.

$$P_{\text{out}} = N_{\text{out}} / N_{\text{total}} \quad (\text{A.1.9})$$

ここで, N_{out} は 1 回の衝突で脱出できる気体分子の総数,

Fig. A-1 Schematic diagram to derive the ratio of the number of gas molecules that collided with right side ϕ_R and those that collided with left side ϕ_L of the corrugation.

Table A-1 Flow table for gas molecules coming into a corrugation until they go out in the case of $-\theta < \alpha \leq 0$.

Number of collisions	Left side		Right side	
	In	Out	In	Out
1	ϕ_L	$\phi_L \sin \theta$	ϕ_R	$\phi_R \sin \theta$
2	$\phi_R(1 - \sin \theta)$	$\phi_R(1 - \sin \theta) \sin \theta$	$\phi_L(1 - \sin \theta)$	$\phi_L(1 - \sin \theta) \sin \theta$
3	$\phi_L(1 - \sin \theta)^2$	$\phi_L(1 - \sin \theta)^2 \sin \theta$	$\phi_R(1 - \sin \theta)^2$	$\phi_R(1 - \sin \theta)^2 \sin \theta$
4	$\phi_R(1 - \sin \theta)^3$	$\phi_R(1 - \sin \theta)^3 \sin \theta$	$\phi_L(1 - \sin \theta)^3$	$\phi_L(1 - \sin \theta)^3 \sin \theta$
5	$\phi_L(1 - \sin \theta)^4$	$\phi_L(1 - \sin \theta)^4 \sin \theta$	$\phi_R(1 - \sin \theta)^4$	$\phi_R(1 - \sin \theta)^4 \sin \theta$
...	...	...	...	...

N_{total} は散乱した気体分子の総数である. N_{out} は, (A.1.5) 式で求めた散乱角分布の面積に等しいから,

$$N_{\text{out}} = S = 2 \sin \theta \quad (\text{A.1.10})$$

である. 一方, 散乱した気体分子の総数 N_{total} は,

$$N_{\text{total}} = \int_{-\pi/2}^{\theta} -\sin(\gamma - \theta) d\gamma = 2 \quad (\text{A.1.11})$$

となるから, 1 回の衝突で脱出できる確率 P_{out} は,

$$P_{\text{out}} = 2 \sin \theta / 2 = \sin \theta \quad (\text{A.1.12})$$

となる. 左斜面から 1 回の散乱で脱出できる確率も, 同様に $\sin \theta$ となる.

Table A-1 に, 気体分子が, V 字溝内で 1 回又は複数回衝突し, V 字溝から脱出するまでの流れを示す. V 字溝に入射した気体分子は, 右斜面には確率 ϕ_R で, 左斜面には確率 ϕ_L に衝突する. 右斜面に衝突した気体分子は, (A.2.5) 式より, $\phi_R \sin \theta$ の割合で V 字溝から脱出でき, $\phi_R(1 - \sin \theta)$ の割合で左斜面に再入射する. この左斜面に再入射した気体分子は, $\phi_R(1 - \sin \theta) \sin \theta$ の割合で V 字溝から脱出でき, $\phi_R(1 - \sin \theta)^2$ の割合で, 右斜面に再々入射する. これを無限回繰り返す. 左斜面に入射した気体分子に対しても同様に考え, 右斜面から脱出したものを足合わせると, 最終的に右斜面から脱出する割合を求めることができ, これが P_R となる. P_L も同様に求めることができる.

$$\begin{aligned} P_R &= \phi_R \sin \theta + \phi_L(1 - \sin \theta) \sin \theta + \phi_R(1 - \sin \theta)^2 \sin \theta \\ &\quad + \phi_L(1 - \sin \theta)^3 \sin \theta + \dots \\ &= \phi_R \sin \theta \sum_{i=0}^{\infty} (1 - \sin \theta)^{2i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \phi_L \sin \theta (1 - \sin \theta) \sum_{i=0}^{\infty} (1 - \sin \theta)^{2i} \\
& = \frac{\phi_R \sin \theta + \phi_L \sin \theta (1 - \sin \theta)}{1 - (1 - \sin \theta)^2} \\
& = \frac{\phi_R + \phi_L (1 - \sin \theta)}{2 - \sin \theta} \quad (\text{A.1.13})
\end{aligned}$$

$$P_L = \frac{\phi_R (1 - \sin \theta) + \phi_L}{2 - \sin \theta} \quad (\text{A.1.14})$$

付録 2 気体分子が V 字溝の右斜面にのみ入射する場合
 $(-90^\circ < \alpha \leq -\theta)$ の, $f'_R, P'_{\text{out}}, P'_R, P'_L$ の導出

(1) 入射後 1 回目の右斜面における散乱で V 字溝から脱出する分子の散乱角分布 f'_R の導出

右斜面で気体分子が入射する場所は, $(-1, 0)$ を通る入射角度 α の直線と右斜面が交わる点を x_α とすると, x が x_α から 1 の範囲である. ここで, x_α は以下ようになる.

$$x_\alpha = \frac{\tan \alpha + \tan \theta}{\tan \alpha - \tan \theta} = \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \quad (\text{A.2.1})$$

$\alpha < \gamma < \theta$ の時, 気体分子はこの 1 回の散乱で V 字溝から脱出できる. 右斜面から脱出する散乱角 γ の気体分子の数 n ($\alpha < \gamma < \theta$) は, (A.1.1) 式を, x_α から 1 まで x で積分することを得られる.

$$\begin{aligned}
n(\alpha < \gamma < \theta) &= - \int_{x_\alpha}^1 \sin(\gamma - \theta) dx \\
&= - \sin(\gamma - \theta) \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) \quad (\text{A.2.2})
\end{aligned}$$

一方, $-90^\circ < \gamma \leq \alpha$ の時, 気体分子は位置によっては左斜面に衝突してしまう. この場合, 右斜面から脱出する散乱角 γ の気体分子の数 n ($-\pi/2 < \gamma \leq \alpha$) は, (A.1.4) 式と等しくなる.

$$n(-\pi/2 < \gamma \leq \alpha) = 2 \sin \theta \cos \gamma \quad (\text{A.2.3})$$

γ を横軸とし, この $n(\alpha < \gamma < \theta)$, 又は $n(-\pi/2 < \gamma \leq \alpha)$ を縦軸としてプロットすると, 気体分子の散乱角分布となる. さらに, この散乱角分布の面積が 1 となるように規格化すると, 確率分布として利用できるようになる. 散乱角分布の面積 S' は以下ようになる.

$$\begin{aligned}
S' &= \int_{-\pi/2}^{\alpha} 2 \sin \theta \cos \gamma d\gamma \\
&+ \int_{\alpha}^{\theta} - \sin(\gamma - \theta) \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) d\gamma \\
&= 2 \sin \theta (\sin \alpha + 1) \\
&+ \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) (1 - \cos(\theta - \alpha)) \quad (\text{A.2.4})
\end{aligned}$$

ここで右辺第 1 項は $-90^\circ < \gamma \leq \alpha$ の (A.3.3) 式に対応し, 第 2 項は $\alpha < \gamma < \theta$ の (A.3.2) 式に対応する. まとめて, 右斜面から脱出する気体分子の散乱角分布の基本形状 $f'_R(r)$ は, 以下の式で表される.

$$\begin{aligned}
f'_R(r) &= \frac{\sin(\gamma + \theta) - \sin(\gamma - \theta)}{S'}, \quad -\frac{\pi}{2} < \gamma \leq \alpha \text{ の時} \\
&= - \frac{\sin(\gamma - \theta) \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right)}{S'}, \quad \alpha < \gamma < \theta \text{ の時}
\end{aligned}$$

$$= 0, \quad \theta \leq \gamma < \frac{\pi}{2} \text{ の時} \quad (\text{A.2.5})$$

(2) 入射後 1 回目の右斜面における散乱で脱出する分子の割合 P'_{out} の導出

付録 1 と同様に, 最初に, 気体分子が入射する時に, 右斜面に衝突する割合 ϕ_R と左斜面に衝突する割合 ϕ_L を求めるが, この場合, 入射した気体分子は右斜面にしか衝突しないので, $\phi_R = 1, \phi_L = 0$ となる.

次に, 1 回の散乱で気体分子が脱出できる確率 P'_{out} を求める. P'_{out} は, 1 回の衝突で脱出できる気体分子の総数 N'_{out} と, 散乱する気体分子の総数 N'_{total} の商である. N'_{out} は (A.3.4) 式の面積 S' と同意である. また, N'_{total} は

$$\begin{aligned}
N'_{\text{total}} &= - \int_{-\theta-\pi}^{\theta} \sin(\gamma - \theta) \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) d\gamma \\
&= 2 \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) \quad (\text{A.4.1})
\end{aligned}$$

となる. よって, P'_{out} は以下の式で表される.

$$P'_{\text{out}} = \frac{2 \sin \theta (\sin \alpha + 1) + \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right) (1 - \cos(\theta - \alpha))}{2 \left(1 - \frac{\sin(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha - \theta)} \right)} \quad (\text{A.4.2})$$

(3) 1 回目以降の多重散乱において, 最終的に右斜面で散乱して脱出する割合 P'_R と, 左斜面で散乱して脱出する割合 P'_L の導出

Table A-2 に気体分子が V 字溝から脱出するまで, 複数回衝突する流れを示す. V 字溝の右斜面に衝突した気体分子は, P'_{out} の割合で V 字溝から脱出し, この散乱角分布の形状は f'_R である. 一方, 脱出できなかった気体分子の割合は, $(1 - P'_{\text{out}})$ でこれらは左斜面に再入射する. この左斜面に再入射した気体分子は, 左斜面の全面に入射するので, 散乱角分布の形状は f_L となり, V 字溝から脱出できる割合は $(1 - P'_{\text{out}}) \sin \theta$ となる. 一方, 脱出できなかった気体分子は, $(1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta)$ の割合で右斜面に再々入射するが, この時は右斜面の全面に入射するので, 散乱角分布の形状は f_R となり, V 字溝から脱出できる割合は $(1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta) \sin \theta$ となる. これらの無限級数を取ることで, P'_R と P'_L を求めることができる.

$$\begin{aligned}
P'_R &= (1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta) \sin \theta \\
&+ (1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta)^3 \sin \theta + \dots \\
&= (1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta) \sin \theta \sum_{i=0}^{\infty} (1 - \sin \theta)^{2i} \\
&= \frac{(1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta) \sin \theta}{1 - (1 - \sin \theta)^2} \quad (\text{A.4.3})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P'_L &= (1 - P'_{\text{out}}) \sin \theta + (1 - P'_{\text{out}}) (1 - \sin \theta)^2 \sin \theta + \dots \\
&= \frac{\sin \theta (1 - P'_{\text{out}})}{1 - (1 - \sin \theta)^2} \quad (\text{A.4.4})
\end{aligned}$$

付録 3 V 字溝からの分子の散乱角分布の 2 次元分布を 3 次元分布への拡張

Fig. A-2 に 2 次元分布を 3 次元分布に拡張するための模式図を示す. 3.2 で求めた 2 次元の散乱角分布は, 図 A-2 の XZ 投影面における散乱角 γ の確率分布に対応する. よって,

Table A-2 Flow table for gas molecules coming into a corrugation until they go out in the case of $-90^\circ < \alpha \leq -\theta$. The scattering angle distributions from the right side at the first collision and at after the second are shown as f'_R and f_R , respectively. That from the left side is f_L .

Number of collisions	Left side			Right side		
	In	Out	Scattering angle distribution	In	Out	Scattering angle distribution
1	0	0	—	1	P'_{out}	f'_R
2	$(1 - P'_{out})$	$(1 - P'_{out}) \sin\theta$	f_L	0	0	—
3	0	0	—	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta)$	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta) \sin\theta$	f_R
4	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta)^2$	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta)^2 \sin\theta$	f_L	0	0	—
5	0	0	—	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta)^3$	$(1 - P'_{out}) (1 - \sin\theta)^3 \sin\theta$	f_R
...	...	...		...	...	

Fig. A-2 Schematic diagram to convert the two-dimensional scattering angle distribution into the three-dimensional scattering angle distribution.

3.2で求めた散乱角分布に従って乱数を振り γ を決定し、
 $x = \sin \gamma$ (A.5.1)

より、散乱方向ベクトルの x 座標が決まる。

次に、3次元座標における単位ベクトルを考えたとき、
 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ (A.5.2)

$\tan \gamma = x/z$ (A.5.3)

を満たす半球上のある点 (x, y, z) を通る方向に、気体分子は散乱されるから、図 A-2 の YZ 投影面において、

$$z = \pm \sqrt{\frac{1-y^2}{1+\tan^2 \gamma}} \quad (\text{A.5.4})$$

の曲線状のいずれかの点を通る方向に気体分子は散乱する。ここで、余弦則においては、単位ベクトルの高さ z がその方向に散乱する確率と等しかったことから、この YZ 投影面においても、ある点 (y, z) を通る方向に散乱する確率 $g(y)$ は、その高さ z に等しくなるとした。

$$g(y) = z = \pm \sqrt{\frac{1-y^2}{1+\tan^2 \gamma}} \quad (\text{A.5.5})$$

この確率 $g(y)$ に従って乱数を振り y を決定する。この点が、散乱方向ベクトルの y 座標に対応する。これで、散乱方向ベクトルの x 座標と y 座標が決まったので、(A.5.2) 式より z 座標が決まる。

〔文 献〕

- 1) D. H. Davis, L. L. Levenson and N. Milleron: J. Appl. Phys., **35** (1964) 529.
- 2) M. Usami, T. Fujimoto and S. Kato: Nihon Kikai-gakkai Ronbun-syu (B), **54** (1988) 1042 [in Japanese].
- 3) W. Sugiyama, T. Sawada, H. Funaki and K. Nakamori: Nihon Kikai-gakkai Ronbun-syu (B), **62** (1996) 1307 [in Japanese].
- 4) W. Sugiyama, T. Sawada and K. Nakamori: Vacuum, **47** (1996) 791.
- 5) W. Sugiyama, T. Sawada, M. Yabuki and Y. Chiba: J. Appl. Surf. Sci., **169-170** (2001) 787.
- 6) W. Sugiyama, T. Sawada and M. Yabuki: Nihon Kikai-gakkai Ronbun-syu (B), **70** (2004) 610 [in Japanese].
- 7) *Shinku handbook*, ed. Ulvac, Inc., (Ohmusha, 2002) p. 45 [in Japanese].
- 8) H. Yoshida, M. Shiro, K. Arai, M. Hirata and H. Akimichi: J. Vac. Sci. Technol. A., **28** (4), (2010) 937.
- 9) P. Szwemin and M. Niewinski: Vacuum, **67** (2002) 359.