クリーンルーム内気中じんあい挙動解析*

都 築 浩 一^{*1}, 飯 野 利 喜^{*1}

A Numerical Simulation of Dilute Gas-Particle Flows in Cleanrooms

Koichi TSUZUKI and Toshiki IINO

A numerical simulation of dilute gas-particle flows is developed. Turbulent dispersion and Brownian motion of particles are calculated stochastically in the simulation. For calculation of the turbulent dispersion, determination of the time step for integrating the equation of particle motion is crucial, and several ways to determine the time step are examined. Finally, the simulation is applied to calculations of the particle dispersion in flows in cleanrooms.

Key Words: Turbulence, Multiphase Flow, Environmental Engineering, Mass Transfer, Cleanroom, Numerical Simulation

1. 結 言

半導体の製造プロセスでウェハ上にじんあいが付着すると製造不良の原因となる。半導体の集積度が上がりパターンが微細化するにつれて、除去すべきじんあいの径も微小なものとなり、ウェハの、じんあいによる汚染を防止することはますます重要になってきた⁽¹⁾。ところが、クリーンルーム内には、作業者や各種の装置など多くの発じん源が存在するので、ウェハの汚染防止には、それら発じん源から発生したじんあいがウェハに付着することなく、すみやかにクリーンルームから排出されるような気流分布を実現しなくてはならない。そのような気流分布を実現するためには、気流性状とともに気流中に浮遊するじんあいの挙動を理解することが必要となる。

本論文は、以上のような背景のもとに、気流中に浮遊する微小じんあいの挙動をラグランジェ的に計算するプログラムを開発し、クリーンルーム内のじんあい挙動解析に適用した結果を述べたものである。

2. 主 な 記 号

- 〈 〉: 平均値を示す
- C_c : カニングガムの補正係数
- D_p : じんあい径
- m_p : じんあい質量
- k : ボルツマン定数
- T : 温度
- q : 乱流エネルギー
- $\vec{U}_0$: 気流速度ベクトル
- $\vec{u}'_0$: 気流の乱流速度成分ベクトル
- $\vec{V}_p$: じんあい速度ベクトル
- β : 抗力係数
- ϵ : 乱流散逸率
- μ_i : 分子粘性係数
- ν_i : 分子動粘性係数
- ν_t : 乱流動粘性係数

3. じんあいの運動方程式

気流中に浮遊するじんあいの拡散を計算する方法としてラグランジェ的計算とオイラー的計算の2とおりが考えられる。両者を比較すると、ラグランジェ的計算はオイラー的計算よりも、プログラミング方法によ

* 昭和62年7月14日 東海支部三重地方講演会において講演、原稿受付 昭和61年10月3日。

^{*1} 正員、(株)日立製作所機械研究所(〒300 土浦市神立町502)。

っては、計算に必要なメモリ量が少なくすむ。本研究ではこの点を考慮してラグランジェ的計算方法を採用する。

対象となるじんあいに関して以下の仮定を設ける。

(1) じんあいは球形であり、その密度は気体の密度に比べて十分に大きい。

(2) クリーンルーム内の気流中のじんあい濃度は希薄であり、じんあい間の相互作用やじんあいによる流れ場・外力場への影響は無視できる。

(3) じんあいは十分に小さく、じんあい挙動のレイノルズ数 R_d に対して、

$$R_d = D_p |\vec{V}_p - \vec{U}_0| / \nu_t < 1 \quad (1)$$

が成立する。

以上の仮定により、じんあいの挙動は、既知の流れ場・外力場における次式によって記述される。

$$d\vec{V}_p/dt = -\beta(\vec{V}_p - \vec{U}_0) + \vec{F} + \vec{X} \quad (2)$$

$$\beta = 3\pi\mu D_p / m_p \cdot C_c \quad (3)$$

ここで $\vec{F}$ は重力などの外力

$\vec{X}$ は気体分子の衝突によるランダム力

ランダム力 $\vec{X}$ はブラウン運動を引き起こす。式(2)はランダム力 $\vec{X}$ のために確率的にしか積分できない。今時間刻み $\tau (> 1/\beta)$ を考え、時間 τ にじんあいが移動する範囲では $\vec{U}_0$ や $\vec{F}$ が一定とみなせるならば、時刻 t_0 に位置 $\vec{X}_{p_0}$ にて $\vec{V}_{p_0}$ なる速度をもっていたじんあいの、時間 τ 後の速度 $\vec{V}_p$ と位置 $\vec{X}_p$ は次式で与えられる⁽²⁾。

$$\vec{V}_p = \vec{V}_{p_0} e^{-\beta\tau} + (\Phi_0/\beta)(1 - e^{-\beta\tau}) + \vec{B}_1 \quad (4)$$

$$\vec{X}_p = \vec{X}_{p_0} + \frac{1}{\beta}(\vec{V}_p + \vec{V}_{p_0} - 2\Phi_0/\beta) \cdot \frac{1 - e^{-\beta\tau}}{1 + e^{-\beta\tau}} + \Phi_0\tau/\beta + \vec{B}_2 \quad (5)$$

ここで、 $\Phi_0 = \beta\vec{U}_{00} + \vec{F}_0$

$\vec{U}_{00}$ は時刻 t_0 の $\vec{U}_0$

$\vec{F}_0$ は時刻 t_0 の $\vec{F}$

$\vec{B}_1$ は速度のランダム変化で平均値零、偏差が、

$$\sqrt{\frac{NkT}{m_p}}(1 - e^{-\beta\tau})$$

のガウス分布に従う。

$\vec{B}_2$ は位置のランダム変化で平均値零、偏差が、

$$\sqrt{\frac{2NkT}{m_p\beta^2} \left(\beta\tau - 2\frac{1 - e^{-\beta\tau}}{1 + e^{-\beta\tau}} \right)}$$

のガウス分布に従う。

(N は対象とする系の次元数)

積分の時間刻み τ は次のように見積もる。

簡単のために式(2)の $\beta\vec{U}_0 + \vec{F}$ をまとめて Φ と記す。 Φ に関して位置 $\vec{X}_{p_0}$ におけるこう配 Φ_x を考え、 $|\Phi_x|$ が最大となる方向へのこう配を $\Phi_x^{\max}$ と記す。次にじんあいが時間 τ の間に $\Phi_x^{\max}$ 方向へ ΔX 移動するとして、

$$l = \Delta X / \tau \quad (6)$$

なる代表移動速度 l を定義し Φ を次式で近似する。

$$\Phi \approx \Phi_0 + \Phi_x^{\max} \cdot l \cdot \tau \quad (7)$$

l は定数であると仮定して式(7)を式(2)右辺に代入して積分を実行すると、 Φ を含む項は次式となる。

$$\Phi_0 \frac{1 - e^{-\beta\tau}}{\beta} + \frac{\Phi_x^{\max} \cdot l}{\beta} \left\{ \left(\tau - \frac{1}{\beta} \right) + e^{-\beta\tau} / \beta \right\} \quad (8)$$

式(8)の第1項が第2項よりも充分に大きくなるような τ を選べば Φ をほぼ一定と近似できる。さらにじんあいが微小で β が非常に大きくなれば、多くの場合、次の条件で τ を見積もることができるであろう。

$$\tau \gg \frac{1}{\beta} \text{ かつ } \tau \ll \frac{\Phi_0}{\Phi_x^{\max} \cdot l} \quad (9)$$

一例として、流体力以外にはじんあいに働く外力がない場合を考える。そのような場合では、一般に、壁面近傍で流速のこう配が大きい領域での時間刻みが問題となるであろう。流れは層流であるとし、その方向は x 方向であり、 y 方向に直線的な速度こう配があるとする。 y 方向へのじんあいの移動はブラウン拡散によるものである。じんあい径を $0.1 \mu\text{m}$ とすると、 $1/\beta$ は約 $2 \times 10^{-7} \text{ s}$ であり、 l としてブラウン拡散移動速度を採用すると約 $1.7 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$ となる。速度こう配を Φ_0/L とすると、式(9)は、

$$\tau \gg 2 \times 10^{-7}, \quad \tau \ll \frac{L}{l} = \frac{L(\text{cm})}{1.7 \times 10^{-3}(\text{cm/s})} \quad (10)$$

となり、仮に L を 10^{-4} cm としても、このような条件を満たす τ が存在することがわかる。

4. 乱流拡散

多くの場合、クリーンルーム内の気流は乱流であるから、式(2)中の気流速度ベクトルは乱流速度成分を含んだものでなくてはならない。

クリーンルーム内の気流分布を2方程式モデルなどの乱流解析を用いて計算すると、空間各位置における流速の時間平均値 $\langle \vec{U}_0 \rangle$ は得られても、乱流速度成分は直接は計算されない。このような場合、乱流速度成分を見積もる方法として、乱流エネルギー q の計算値を用いる方法がある⁽³⁾⁽⁴⁾。本プログラムでは、乱流の局所等方性を仮定して、

$$\langle \vec{u}'_0 \rangle = 0, \quad \langle \vec{u}'_0 \cdot \vec{u}'_0 \rangle = 2q \quad \dots\dots\dots (11)$$

の関係より、乱流速度成分 $\vec{u}'_0$ がガウス分布に従うとしてモンテカルロ法により $\vec{u}'_0$ を評価する方法をとる。そして式(2)中の $\vec{U}_0$ として、

$$\vec{U}_0 = \langle \vec{U}_0 \rangle + \vec{u}'_0 \quad \dots\dots\dots (12)$$

を代入する。

式(2)の $\vec{U}_0$ に乱流速度成分を含めるということは気流のラグランジュ的な一回一回のランダム変動の影響を考慮するということである。乱流のランダム変動が起こる時間間隔は乱流特性時間で決まってくるので、式(2)を積分するときの時間間隔もまた、乱流特性時間で規制されるはずである。

積分の時間刻み τ を決めるために、流体と全く同一に運動する仮想粒子すなわち流体粒子の等方乱流場での拡散を用いて検討を行う。流体粒子の速度は各位置における気流速度と同じになり、位置に関しては、積分の時間刻み τ の間は流速が一定であると仮定して、

$$\vec{X}_p = \vec{X}_{p0} + \vec{U}_{p0} \cdot \tau \quad \dots\dots\dots (13)$$

で計算する。

乱流の特性長さを l とすると乱流特性時間 t は、

$$t = l / \sqrt{\langle \vec{u}'_0 \rangle} \quad \dots\dots\dots (14)$$

で定義される。ここでは積分時間刻み $\tau = t$ として、 t を次の3とおりの方法で求める。

(1) 第1の方法

$$\left. \begin{aligned} l &= C_u^{3/4} q^{3/2} / \varepsilon \\ t &= l / \sqrt{2q} \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (15)$$

ここで C_u は定数であり 0.09 とする。

(2) 第2の方法

$$\left. \begin{aligned} l &= C_u^{3/4} q^{3/2} / \varepsilon \\ t &= l / |\vec{u}'_0| \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (16)$$

ここで $\vec{u}'_0$ は q を用いてモンテカルロ法で評価する。

(3) 第3の方法

$$\left. \begin{aligned} l &= \gamma_1 |\vec{u}'_0|^3 / \varepsilon \\ t &= l / |\vec{u}'_0| \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (17)$$

ここで γ_1 は定数であり 0.032 とする⁽⁵⁾。

なお文献(3)では第2の方法を用いている。

等方性乱流では、ランダムな変位がガウス分布に従う。変位がガウス分布に従うかどうかは、多数の粒子に対して1回のランダム変位を計算し、変位置量 (x, y, z) に関して、

$$\left. \begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle \\ \langle xy \rangle &= \langle xz \rangle = \langle yz \rangle = 0 \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (18)$$

が成立することを確認すればよい⁽⁶⁾。ここでは、10万個の粒子について、上記3とおりの方法で求めた τ と

式(13)を用いてランダム変位置量を計算した。なお、 $q = 0.0315 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\varepsilon = 0.162 \text{ m}^2/\text{s}^3$ を与えている。結果を表1に示すが、三つの方法いずれで求めた τ を用いても変位はガウス分布に従う。

さて、ランダム変位がガウス分布に従うならば、拡散係数 D が次のように定義される⁽⁶⁾。

$$\left. \begin{aligned} D &= n \langle r^2 \rangle / 6 \\ \langle r^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (19)$$

ここで n は単位時間に変位の起こる回数

3とおりの方法について、 $n = 1/\langle t \rangle$ として D を計算すると次のようになる。

(1) 第1の方法: $D = 2.37 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

(2) 第2の方法: $D = 1.71 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

(3) 第3の方法: $D = 5.04 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

今の場合、拡散係数は乱流動粘性係数に等しくなるので、通常2方程式モデルで用いられている定義

$$\nu_t = C_\mu q^2 / \varepsilon \quad \dots\dots\dots (20)$$

を用いると、 $5.51 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ を得て、第3の方法とほぼ等しい値となる。そこで次に第3の方法について、乱流エネルギー q の値を変えて今までと同様の計算で拡散係数を計算し、式(20)から求まる拡散係数の値と比較した。結果を表2に示すが、第3の方法で計算した拡散係数の値は式(20)で求まる値と良い一致を示している。

本プログラムにおけるじんあいの変位の計算、すなわち式(5)は、基本的に式(13)と同様の積分方法である。したがって、これまでの検討結果より、乱流中におけるじんあい運動方程式の積分時間刻みとしては、第3の方法で得られる t [式(17)] を用いるのが妥当と考える。

なお本プログラムにおいては、積分の時間刻みの間、じんあいが同一の乱流渦の中にあることを仮定する。

表1 ランダム変位の二次モーメント

	CASE (i)	CASE (ii)	CASE (iii)
$\langle x^2 \rangle$	0.107×10^{-4}	0.107×10^{-4}	0.123×10^{-4}
$\langle y^2 \rangle$	0.107×10^{-4}	0.107×10^{-4}	0.126×10^{-4}
$\langle z^2 \rangle$	0.107×10^{-4}	0.107×10^{-4}	0.126×10^{-4}
$\langle xy \rangle$	0.582×10^{-8}	-0.993×10^{-8}	-0.279×10^{-7}
$\langle xz \rangle$	0.206×10^{-7}	0.127×10^{-7}	0.642×10^{-7}
$\langle yz \rangle$	-0.136×10^{-7}	-0.174×10^{-7}	-0.307×10^{-7}
$\langle t \rangle$	0.226×10^{-1}	0.312×10^{-1}	0.124×10^{-1}

x, y, z in [m]
 t in [sec]

じんあいが微小でしかも外力が小さい場合はこの仮定は妥当であると思われる。しかし荷電したじんあいが静電気を帯びた装置近傍で強い電気力を受ける場合などでは、前述のようにして求めた積分の時間刻みの範囲に、じんあいが乱流渦を横切ってしまう可能性が充分考えられる。このような場合、じんあいが乱流特性長さを移動するのに要する時間と乱流特性時間のうち短い時間のほうを積分時間刻みとして用いる方法が提案されているが⁽⁹⁾、式(17)で定義する l がそのままそのような乱流特性長さとして使えるかどうか、今後の検討が必要である。

最後に、Snyder らによる乱流中の粒子拡散の実験値⁽⁷⁾と式(4)、(5)および第3の方法による積分時間刻みを用いた計算値との比較を行う。実験は、4種類の粒子について行われているが、そのうち、hollow glass は、粒径が大きいものの ($D_p=46.5\ \mu\text{m}$)、密度が小さく ($0.26\ \text{g/cm}^3$)、粒子と気流の相対速度が小さくて式(3)が成立すると考えられるので、計算値との比較は hollow glass について行う。計算では外力として重力を考慮する。図1は、主流に直角な面内の一方方向に対する粒子の変位の二乗平均について実験と計算を比較したものであり、両者は良い一致を示す。なお計算には800個の粒子を用いている。

5. クリーンルーム内じんあい挙動解析

4章までに述べた計算方法を用いて、クリーンルーム内のじんあい挙動を解析する。計算に用いたクリーンルームのモデルは、天井が全面空気吹出し、床が全面グレーチングになっている。

流れ解析は、有限要素法を用いた2方程式モデル乱流解析によって行う⁽⁸⁾。グレーチング床については、文献(8)に従って計算上の流路抵抗を仮定している。計算は二次元であり、要素は四辺形一次要素を用い、

表2 第3の方法と式(20)より算出した乱流拡散係数の比較

		$n\langle r^2 \rangle / 6$	$C_\mu q^2 / \varepsilon$
(1)	$q=0.0108$ $\varepsilon=0.162$	1.26×10^{-4}	1.38×10^{-4}
(2)	$q=0.0315$ $\varepsilon=0.162$	5.05×10^{-4}	5.51×10^{-4}
(3)	$q=0.0630$ $\varepsilon=0.162$	2.01×10^{-3}	2.20×10^{-3}

q in $[\text{m}^2/\text{s}^2]$
 ε in $[\text{m}^2/\text{s}^3]$

要素数はおよそ3000である。境界条件としては、入口境界において流速および q, ε の値を固定し、出口境界ではそれぞれノーマル微分を零としている。固体壁面に関しては、 q と ε について壁法則を用いている⁽⁸⁾。なお入口境界の q の値は入口主流運動エネルギーの1%であるとし、 ε については ν_t が ν_i の6倍程度となるように与えた。

図2(a)~(e)にじんあい挙動解析の結果を示す。計算はすべて装置の近くに作業者が立っているとして、作業者から発生したじんあいの拡散について行った。図2中の流線は、流れ解析で得られた平均流速ベクトルから求めている。図2(a)~(e)すべての場合について、天井吹出しにおける気流速度は35 cm/sとしている。計算に用いたじんあいは直径0.1 μm 、密度1 g/cm³である。初期条件としては初速度零とする。外力には重力のみを考慮している。また、計算上じんあいが人体や装置など固体壁に達したときはそこに付着して、再離脱はないと仮定した。図2(a)~(e)の計算は、じんあいが発生してから10 s間に拡散していくようすを、それぞれ500個のじんあいについて行ったものである。

図2の(a)と(b)は、作業者の姿勢やじんあい発生位置は同じであるが、パーティションの長さが異なる。図2(a)はパーティションが長く、装置とパーティションの間の流路抵抗が大きいために気流が流れにくく、そのためにじんあいは装置の上にあまり広がらずにスムーズに排出される。一方パーティションが短い図2(b)ではじんあいが装置の上に大きく広がってしまう。図2(c)はパーティションの長さは図2(a)と同じであるが、作業者が上体を傾けた場合である。この場合もじんあいはスムーズに排出されている。次

図1 粒子の乱流拡散変位

(a) 直立した作業者頭部から発生したじんあいの挙動
(仕切板が高い場合)

(b) 直立した作業者頭部から発生したじんあいの挙動
(仕切板が短い場合)

(c) 前かがみになった作業者の頭部から発生した
じんあいの挙動

(d) 直立した作業者の口から発生したじんあいの挙動

(e) 前かがみになった作業者の口から発生した
じんあいの挙動

- じんあい発生位置
- 固体壁に付着したじんあい
- ⊕ じんあい径 $0.1\mu\text{m}$
- じんあい密度 1g/cm^3
- 計算じんあい個数 500 個

図 2 クリーンルーム内のじんあい拡散

に図2(d), (e)は, 作業者の口から発生したじんあいの拡散を計算したものである。パーティションの長さや作業者の姿勢については, 図2(d)が(a)と同じであり, 図2(e)が(c)と同じである。図2(d), (e)とも, じんあいの大半は, 発生後10sたっても排出されずに滞留している。これは頭部や腕で囲まれた領域が渦流域になっていて, じんあい在那里に取り込まれてしまうからである。

以上の計算は二次元計算であり, その精度にはおのずと限界があるが, クリーンルームにおけるパーティションの長さの重要性や, クリーンルーム内に渦流域があるとじんあい排出されづらくなる点など, クリーンルーム内気流分布の設計にある程度の指針を与える。

6. 結 言

(1) 気流中に浮遊するじんあいの挙動をラグランジェ的に追跡し, ブラウン運動や乱流拡散を確率的に計算する解析法を確立した。

(2) じんあいの運動方程式を積分する際の時刻

みについて検討を行い, 時刻刻みの見積もり方法を示した。

また乱流中のじんあい挙動については式(17)で定義される時刻刻みが適当であることを示した。

(3) 解析プログラムをクリーンルーム内じんあい挙動解析に適用し, クリーンルーム内気流分布の設計ツールとして有効であることを示した。

文 献

- (1) Tolliver, D. L., *Proc. 3rd Int. Symp. VLSI Sci. Tech.*, (1985).
- (2) Ermak, D. L. and Buckholz, H., *J. Comput. Phys.*, 35-2 (1980), 169-182.
- (3) Gosman, A. D. and Ioannides, E., *AIAAJ.*, 81-0323 (1981).
- (4) Dukowicz, J. K., *J. Comput. Phys.*, 35-2 (1980), 229-253.
- (5) 谷編, 流体力学の進歩 乱流, (昭55), 155, 丸善.
- (6) Chandrasekher, S., *Rev. Mod. Phys.*, 15-1 (1943), 15-20.
- (7) Snyder, W. H. and Lumley, J. L., *J. Fluid Mech.*, 48-1 (1971), 41-71.
- (8) 池川・佐藤, 第7回流体力学における数値解析法シンポジウム報文集, (昭61), 205-212.