微小重力場における FZ 法単結晶成長問題* (自由表面に LSM を適用した Hybrid FEM-BEM による 3 次元流動解析)

河野 晴彦*¹, 棚橋 隆彦*²

Single Crystal Growing Problem in the FZ Method under Microgravity - (Three-dimensional Numerical Simulation with the Hybrid FEM-BEM applying LSM on the Free Surface)

Haruhiko KOHNO and Takahiko TANAHASHI*³

*³ Keio University, Dept. of Mechanical Engineering,
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama-shi, Kanagawa, 223-8522 Japan

This paper presents the hybrid finite element and boundary element method (FEM-BEM) with a level set method (LSM) for the analysis of a free surface deformed in the alternating current magnetic field. Three-dimensional numerical simulations in the floating zone (FZ) method under microgravity are carried out to investigate the deformation process of a silicon liquid bridge with two types of coil positions, the upper case and the middle case. The results clearly show the deformation processes. The liquid parts which are the same position as each coil yield to pressure caused by strong Lorentz force and both ends swell out. This phenomenon conforms well to behavior of melt in the real growing process qualitatively.

Key Words: Level Set Method, Hybrid FEM-BEM, Free Surface, FZ Method, Microgravity

1. 緒言

FZ 法は半導体を育成する手法の 1 つで、帯域溶融法とも呼ばれる。育成に際して CZ (Czochralski) 法の様に坩堝等を用いないため、製品は高純度・高抵抗率を有し、そのウェーハは耐圧特性が必要となるサイリスタ等のパワーデバイス基盤として用いられることが多い。大口径化に伴い、溶融帯幅をいかに狭くするかが問題となり、コイル形状にも工夫が要されている。

高周波誘導加熱がなされている溶融帯の側面は自由表面⁽¹⁾であり、溶融帯は自身の表面張力とローレンツ力によって維持されている。そのため、製造過程においては振動等の外乱により融液がこぼれて失敗することが多く、安定性に関する十分な知見が求められている。自由表面を有する流体の解析には VOF (volume of fraction) 法、ALE (arbitrary Lagrangian-Eulerian) 法⁽²⁾、LSM (level set method) 等⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾が挙げられるが、本研究では、解析格子を固定し、Euler

的に流体粒子を観察して界面を捕獲する Level Set 法を採用し、有限要素法により計算を行う。この手法は物体の大変形を伴う問題に対してより効果的であり、FZ 法における融液の変形を解析するのに適している。

交流磁場を有限要素法により解析する場合には、導体の数倍から 10 倍程度の空気領域も解析領域として要素分割を行い、空気領域で境界条件を導入する必要があるとされる。しかし、この場合には適切な空気領域の大きさを与える一般的な基準が存在せず、また、未知数も増大するといった短所が挙げられる。従って、本研究では、Level Set 法による解析の範囲外の空気領域における電磁場の計算には、半無限空気領域に対して有効な境界要素法を適用する。

FZ 法の解析は、これまでにいくつか報告されているが⁽⁶⁾、融液の変形を取り扱った例はきわめて少ない。そこで、本研究では、自由表面に Level Set 法を適用した Hybrid FEM-BEM⁽⁷⁾を構築し、FZ 法を模擬した微小重力交流磁場下における大変形液柱問題に対する 3 次元数値解析を行う。そして、得られた解析結果と、実際の育成プロセスにおける溶融帯の様子を定性的に比較することで、本スキームの有効性を確認する。

* 原稿受付 2000 年 9 月 27 日。

*¹ 慶應義塾大学大学院 (〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1)。

*² 正員、慶應義塾大学理工学部。

E-mail: taka@mech.keio.ac.jp

2. 記号

A: 磁気ベクトルポテンシャル
 B: 磁束密度
 E: 電界
 F: ローレンツ力
 H: 磁界の強さ
 H_1 : 近似 Heaviside 関数
 J: 電流密度
 J_f : 強制電流密度
 n: 法線ベクトル
 p: 圧力
 t: 時間
 v: 速度
 V: 体積
 V_0 : 体積初期値
 δ : 近似 Delta 関数
 ε : バンド幅
 ϕ_1 : 距離関数
 ϕ_2 : スカラーポテンシャル
 ϕ_p : 修正速度ポテンシャル
 μ : 透磁率
 μ_0 : 真空の透磁率
 ν : 動粘性率
 ρ : 密度
 σ_m : 電気伝導率
 σ_s : 表面張力
 τ : 疑似時間

3. Level Set 法

自由表面は、マクロな視点で見れば物理量が不連続に変化する面として捉えられるが、ミクロな視点で見ると、分子レベルの微視的な厚さを持って物理量が連続的に変化している。Level Set 法は、この概念を数値計算上の自由表面の解析に応用した手法で、物理量が連続的な変化をなすこの微小な幅を、格子幅の 3~5 倍程度の大きさに相当する ε まで広げることによって自由表面の特異性を消去し、あたかも 1 流体モデルのように 2 流体モデルを扱うことができる。Level Set 法 の概念を図 1 に示す。

Fig. 1 The idea of a level set method

2 つの流体の識別は、自由表面からの垂直距離を表す距離関数 ϕ_1 を導入して以下の様に定義する。

$$\begin{cases} \phi_1(\mathbf{x}, t) > 0 & \text{in fluid 2} \\ \phi_1(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{on free surface} \\ \phi_1(\mathbf{x}, t) < 0 & \text{in fluid 1} \end{cases} \quad (1)$$

また、諸物理量を、自由表面を中央に挟むバンド幅 2ε 内で連続的に変化させるために、以下に示す 2 つの近似超関数、近似 Heaviside 関数 H_ε と近似 Delta 関数 δ_ε を導入した。

$$\begin{cases} H_\varepsilon(\phi_1) = 0 & \text{if } \phi_1 < -\varepsilon \\ H_\varepsilon(\phi_1) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\phi_1}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi_1}{\varepsilon}\right) \right\} & \text{if } |\phi_1| \leq \varepsilon \\ H_\varepsilon(\phi_1) = 1 & \text{if } \phi_1 > \varepsilon \end{cases} \quad (2)$$

$$A = A_1 + (A_2 - A_1)H_\varepsilon \quad (3)$$

$$\begin{cases} \delta_\varepsilon(\phi_1) = \frac{1}{2\varepsilon} \left\{ 1 + \cos\left(\frac{\pi\phi_1}{\varepsilon}\right) \right\} & \text{if } |\phi_1| < \varepsilon \\ \delta_\varepsilon(\phi_1) = 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

(3)式における A_1 , A_2 にはそれぞれの流体が有する密度、動粘性係数、電気伝導率を代入する。また、(4)式を応力ベクトルの jump 量に乘じることによって表面圧から体積力に変換がなされ、Navier-Stokes 方程式の外力項に付加することができるようになる。この考えは CSF (continuum surface force) 法^⑧に基づくものである。

自由表面は次式で示される界面の運動学的条件に従って変形する。

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \phi_1 = 0 \quad (5)$$

(5)式は、界面の運動速度が流速に等しいことを表している。しかし、その様な形で全領域において (5)式を計算すると、各流体中の速度は自由表面 ($\phi_1=0$) とは異なるため、自由表面以外の場所で距離関数の性質が崩れることになる。それを防ぐために以下の式で再初期化 (reinitialization)^⑨を施す。

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} = S(\phi_1)(1 - |\nabla \phi_1|) \quad (6)$$

$$S(\phi_1) = \frac{\phi_1}{\sqrt{\phi_1^2 + \varepsilon^2}} \quad (7)$$

(7)式で示される $S(\phi_1)$ の絶対値は、 ϕ_1 の絶対値が小さい時に小さくなり、 ϕ_1 の絶対値が大きな時に大きな値をとる。この事は、自由表面近傍における再初期化における修正量は少なく、自由表面から離れるにしたがってその値が大きくなることを示している。 τ は疑似時間であり、実際の時間 t とは無関係である。

Level Set 法では自由表面が陰的に決定されるために、再初期化の過程で非物理的な体積変動が生じ、体積が保存されなくなる。これが Level Set 法の短所と言えるべき点であるが、以下の式によって体積の保存を満たすための修正を行う⁶⁾。

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + \{V_0 - V(t)\}(-P + \nabla \cdot \mathbf{n}) \cdot |\nabla \phi_1| = 0 \quad (8)$$

$$V_0 = \iiint H_\varepsilon(\phi_1) dx dy dz \Big|_{t=0} \quad (9)$$

$$V(t) = \iiint H_\varepsilon(\phi_1) dx dy dz \Big|_{t=t} \quad (10)$$

(8)式における P は計算安定化のための正の定数で、本研究においては 1 と設定した。また、(6)、(8)式はそれぞれ次式で示す移流方程式の形で記述できる。

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + S(\phi_1) \frac{\nabla \phi_1}{|\nabla \phi_1|} \cdot \nabla \phi_1 = S(\phi_1) \quad (11)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} + \{V_0 - V(t)\}(-1 + \nabla \cdot \mathbf{n}) \frac{\nabla \phi_1}{|\nabla \phi_1|} \cdot \nabla \phi_1 = 0 \quad (12)$$

(5)、(11)、(12)式は CIP 法⁹⁾を適用することによって高精度に解析した。

4. 電磁場の解法

4・1 A- ϕ 法 磁束密度と電界を磁気ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ とスカラーポテンシャル ϕ_2 を用いて表すと、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (13)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi_2 - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (14)$$

と書ける。また、アンペアの法則とオームの法則及び電荷保存の法則は以下に示すものである。

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (15)$$

$$\mathbf{J} = \sigma_m (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (17)$$

(16)式を(15)式に代入したものと、(16)式の両辺に発散をとった後(17)式を適用したものに(13)、(14)式を代入すると、以下に示す A- ϕ 法の基礎式が導かれる。

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{A}) \times \mathbf{v} = -\nabla \phi_2 - \frac{1}{\sigma_m} \nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} \right) \quad (18)$$

$$\nabla \cdot \left[\sigma_m \left\{ \nabla \phi_2 + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{A}) \times \mathbf{v} \right\} \right] = 0 \quad (19)$$

本研究では周波数が比較的小さい問題を扱っているため、クーロンゲージ

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (20)$$

を適用すると、(18)、(19)式は以下の様に簡単化される。

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{A}) \times \mathbf{v} = -\nabla \phi_2 + \frac{1}{\sigma_m \mu} \nabla^2 \mathbf{A} \quad (21)$$

$$\nabla^2 \phi_2 = \nabla \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (22)$$

4・2 境界要素法 境界要素法による解析は、注目した領域に対して境界のみを離散化するため、2次元問題を1次元的に、3次元問題を2次元的に取り扱うことができる利点がある。有限要素法では適当な境界条件が与えられたときには解くことができるが、渦電流問題等の開領域問題の場合には境界条件の設定が困難になる。従って、本研究で行う FZ 法の解析では、円柱格子外のコイルを含む空気領域において、無限または半無限領域場を適切に表現することができる境界要素法を適用することにする。この領域についての A- ϕ 法の基礎方程式は次式で与えられる。

$$\mathbf{J}_f = -\frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} \quad (23)$$

ここで $\mathbf{J}_f$ は強制電流密度である。

5. 二重格子法

格子節点上の磁気ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ およびスカラーポテンシャル ϕ_2 の値はマトリクスの逆行列を Skyline 法により計算することで得られるが、この時格子数は計算メモリに対応して限界があり、また、格子数が多いほど計算に多大な時間を要するという欠点がある。そこで本研究では、二重格子法を適用することによってこの問題を解決した。この手法は、速度場解析格子（初期設定格子）と電磁場解析格子の2種類を設定することによって、計算メモリの削減、及び計算時間の短縮をはかるものである。図2にその概要を示す。

Fig. 2 Linear interpolation of the magnetic field variables

まず、速度場解析格子 27 (3×3×3) 個をひとまとめとして、電磁場解析格子として適用する。ここで、その頂点の節点は、要素を形成する速度場解析格子に含まれる 8つの節点と一致する座標を持つ。つまり、この操作の結果、電磁場解析格子数は速度場解析格子数の 1/27 に相当する数となる。電磁場解析格子を用いて磁束密度、電流密度、ローレンツ力を計算した後は、それらの物理量を節点座標が等しい速度場解析格子の節点に移行し、他の節点上の電磁場に関する物理量を線形補間により求める。実際、磁束密度はビオ-サバールの法則によって得られるが、解析格子数が多くなるほど線形補間の操作とこの法則の誤差は小さくなる。この事は、解析格子数を増やすために二重格子法を採用した妥当性を保証するものである。

以上の操作により、少ないメモリ容量で短時間の内に、全解析要素上の節点に対応する電磁場の物理量を求めることができる。

6. 解析モデル及び基礎方程式

有限要素法による解析領域として図 3 に示すような円柱モデルを適用し、その周囲に 1 本のコイルが巻かれており、交流電流が流れている状態を設定する。ここで円柱格子内は、距離関数 $\phi_1=0$ を境に空気領域とシリコン液柱の 2 相が存在する。解析格子は 6 面体で、要素数と節点数はそれぞれ 44064, 46825 と設定した。シリコン液柱は微小重力場に置かれており、その温度は一定と仮定し、ジュール発熱及び温度場は考慮しないものとする。

Fig. 3 Mathematical model of the FZ method

以下に本解析で用いた基礎方程式を示す。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \mathbf{J} \times \mathbf{B} - \frac{1}{\rho} \sigma_s (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta_\varepsilon \quad (25)$$

尚、解析モデルの境界は non-slip 条件を適用した。初期状態では、空気、シリコン液柱ともに静止している。

表 1 に本研究に用いたシリコン融液と空気の物性値、表 2 に解析モデルの寸法と境界条件、及び表 3 にコイルを流れる交流電流のパラメータを示す。本研究では表 2 に示す H_2 の大きさを変化させることにより、コイルを液柱上部 (Case 1) と液柱中央 (Case 2) に設置する 2 通りの場合を考えた。

Table 1 Physical properties of silicon melt and air

Melt Density (silicon)	[kg/m ³]	ρ_1	2.33×10^3
(air)		ρ_2	2.08×10^{-1}
Kinematic Viscosity	[m ² /s]	ν_1	4.30×10^{-7}
		ν_2	3.84×10^{-4}
Surface Tension (1790K)	[N/m]	σ_s	8.00×10^{-6}
Electrical Conductivity	[S/m]	σ_{m1}	1.06×10^6
		σ_{m2}	0.00
Relative Magnetic Permeability	[-]	μ_1	1.00

Table 2 Conditions of mathematical model

Coil Outer Radius	[m]	R_1	2.30×10^{-2}
Air Field Radius	[m]	R_2	1.80×10^{-2}
Liquid Bridge Radius	[m]	R_3	1.10×10^{-2}
Height 1	[m]	H_1	2.50×10^{-2}
Height 2 (Case 1)	[m]	H_2	1.50×10^{-2}
(Case 2)			1.00×10^{-2}
Height 3	[m]	H_3	5.00×10^{-3}

Table 3 Magnetic field parameters of the coil

Current Density	[A/m ²]	j_f	5.00×10^6
Frequency	[Hz]	f	2.00×10^3

7. 速度場の離散化

非圧縮性流体における速度場の支配方程式は GSMAC (generalized simplified marker and cell) 有限要素法⁽¹⁰⁾により計算される。GSMAC 法は差分法の分野で用いられている HSMAC (highly simplified marker and cell) 法の有限要素法への応用であり、圧力と速度は連続の式による制約条件の下で Poisson 方程式を反復計算することにより、同時に補正されて求められる。この手法は、数値計算を行う上で重要な汎用性・高精度・経済性のある程度満足した優れた面を持つ。

最初に(25)式を、速度ベクトルと外力項については陽的に、圧力については陰的に離散化を行う時間進行法を採用すると以下の式が書ける。

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} - (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{J}^n \times \mathbf{B}^n - \frac{1}{\rho} \sigma_s (\nabla \cdot \mathbf{n}^n) \mathbf{n}^n \delta_\varepsilon^n \quad (26)$$

ここで圧力 p^{n+1} は修正量 p^c を導入することで、以下のように分解される。

$$p^{n+1} = p^n + p^c \quad (27)$$

次に(26)式を、中間流速 $\tilde{\mathbf{v}}$ を用いて以下の 2 式に分解する。

$$\frac{\tilde{\mathbf{v}} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^n - (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^n + \frac{1}{\rho} \mathbf{J}^n \times \mathbf{B}^n - \frac{1}{\rho} \sigma_s (\nabla \cdot \mathbf{n}^n) \mathbf{n}^n \delta_\varepsilon^n \quad (28)$$

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \tilde{\mathbf{v}}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^c \quad (29)$$

非圧縮流体である限り、連続の式は時間の経過を問わず常に成り立つ。従って、時間ステップ $n+1$ において

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (30)$$

が満足しているものとして、(29)式の発散をとると

$$\nabla \cdot \frac{\tilde{\mathbf{v}}}{\Delta t} = \frac{1}{\rho} \nabla^2 p^c \quad (31)$$

が導かれる。この(31)式は、圧力と速度に対する Poisson 方程式である。この式を同時緩和反復法で解くために、修正速度ポテンシャル ϕ_p を導入する。 ϕ_p は次式で定義される。

$$\phi_p = p^c \Delta t \quad (32)$$

ϕ_p を用いて(31)式と、時間ステップ $n+1$ の速度と圧力を表すと、以下の式となる。

$$\frac{1}{\rho} \nabla^2 \phi_p = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \quad (33)$$

$$p^{n+1} = p^n + \frac{\phi_p}{\Delta t} \quad (34)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}} - \frac{1}{\rho} \nabla \phi_p \quad (35)$$

(33) - (35)式は、数値計算上で(30)式の右辺絶対値が基準値以下となるまで反復計算される。

空間の離散化においては、重み関数を近似関数を構成する形状関数 N_α に選んだガレルキン (Galerkin) 法による定式化を行う。

8. 解析アルゴリズム

図 4 に解析アルゴリズムを示す。

Fig. 4 Algorithm of Hybrid FEM - BEM with LSM

最初に(28)式より中間流速 $\tilde{\mathbf{v}}$ を求め、その次に Poisson 方程式を(30)式の右辺絶対値が数値計算上 1.0×10^{-3} 以下になるまで反復し、速度と圧力を同時に補正して求める。時間ステップ $n+1$ における速度と圧力の値が求まった後は、速度、電気伝導率、比透磁率を電磁場解析格子に移行し、A- ϕ 法によって、磁束密度、電流密度、ローレンツ力を求める。得られた電磁場の物理量は速度場解析格子に移行され、線形補間により初期設定格子の全節点上に電磁場の情報が配置される。その後、自由表面の変形を Level Set 法により解析するが、本研究では再初期化における反復計算回数を 3 回と固定し、体積保存に関しては $|\phi_0 - v(t)|/v_0$ の値が 1.0×10^{-5} 以下になるまで反復計算を行う。Poisson 方程式及び Level Set 法体積保存式の最大反復回数は、それぞれ 1000 回と 3 回に設定した。また、計算時間の短縮を図るために、電磁場の計算は 2000 ステップに 1 回行い、次の計算までは一定値をとるものとする。時間ステップ Δt は 5.0×10^{-6} 秒とする。今回の GSMAC 法による Hybrid FEM - BEM, CIP 法, Level Set 法の適用に際しては、それぞれ有効性が確かめられている^{(9),(11)}当研究室で開発されたプログラムを使用した。

Fig. 5 Distributions of (a) electric current density, (b) magnetic flux density, and (c) – (e) Lorentz force in Case 1 and their minimum and maximum values

9. 解析結果

0.00 秒, すなわち計算開始直後に求めた Case1 の電流密度, 磁束密度, 及び 0.00 秒, 0.05 秒, 0.10 秒のローレンツ力の分布, さらに, それらの最大値と最小値を図 5 に示す。ここで電流密度は, 液柱高さ中心の水平断面上の分布を示したものであり, 他の磁束密度とローレンツ力は, 中心軸を通る垂直断面上の分布を示したものである。空気領域は電気伝導率が 0 のため, 誘導電流は生じない。しかし, シリコン融液内部においては電気伝導率を有するため, 磁束密度を打ち消す方向に誘導電流が流れる。ここで導体が広がりを持つとき, 特定の回路に従わず最も抵抗の少ない路に小回路を作って, 渦状に電流が流れる現象が起こる。これが渦電流と呼ばれるものだが, その挙動は図 5 (a) の電流密度の分布に見ることができる。また, ローレンツ力の分布は液柱の形状に対応して変化していることがわかる。この外力によって液柱がコイルから遠ざかるようにして変形するため, 液柱に働くローレンツ力の大きさは時間

Fig. 6 Comparison of the deformation process between the numerical results ((a) – (c) in Case 1, (d) – (f) in Case 2) and the behavior of melt in the real growing process ((g), (h))

と共に減少することになる。

図 6 は, 数値解析による Case1 と Case2 における液柱の形状変化を 3 次的に示したものと, 実際の育成プロセスにおける融液形状の変化を表した概要図と写真⁽¹²⁾を比較したものである。また, 図 7 は Case1 と Case2 における中心軸を通る垂直断面上の速度とその大きさ, 及び距離関数の分布を 2 次的に示したものである。ここで各経過時間における液柱の形状は, 最も外側に描かれた距離関数の等高線 ($\phi=0$) に対応する。液柱のコイルの高さに相当する場所において, 最も強いローレンツ力のために内側に融液が圧縮されることになる。その結果, 圧縮

Fig. 7 Two-dimensional distributions of the velocity and the level set function in Case 1 (a)–(c) and Case 2 (d)–(f)

Fig. 8 Comparison of the melt shape on the horizontal cut between (a) Case1 and (b) Case2

Fig. 9 Comparison of time evolution of max velocity between Case1 and Case2

Fig. 10 Circumferential velocity distributions in Case 1 at $r = 4.55 \times 10^{-3} m$, $z = 1.67 \times 10^{-2} m$ Fig. 11 Circumferential velocity distributions in Case 2 at $r = 4.55 \times 10^{-3} m$, $z = 1.25 \times 10^{-2} m$

による体積の減少に伴い融液は上底面に向かうことになるが、その様子はこれらの図が示す時間の経過に伴う形状の変化に見ることができる。そして、融液がこの強いローレンツ力によって絞られる様子は、

図 6 に示す実際の FZ 法における融液の挙動と定性的に良好に一致していることが確かめられる。Case1 ではコイルの設置位置が液柱高さ中心よりも高いため、上部の変形が底部の変形よりも大きくな

る。一方, Case2 ではコイルが液柱高さ中心に設置されているので, 無重力場より高さ中心において液柱の変形は対称となることがわかる。

(25)式に示す運動方程式右辺第 4 項は, 曲率に依存する項である。この項により流体は変形が緩和する方向, つまり, 曲率が減少する方向に作用するが, 本研究では, 第 3 項のローレンツ力項が外力として表面張力を大きく上回り, その力によって流れ場が支配される。その様子は図 7 の速度ベクトルの分布に見ることができる。また, 同図に記載された $V_{\max}$ は最大速度の大きさを表すが, 本研究ではサイクル誤差自己調整法⁽¹³⁾を採用しているため, 速度場の計算精度は Poisson 方程式の数値精度よりも高くなる。

図 8 は Case1, Case2 それぞれのコイル高さに相当する水平断面上の液柱の形状を表したものである。ここで, 外側の円は数値計算で使った円柱格子の輪郭を表す。ここで 2 つの直径を比較して見ると, Case2 の方が Case1 よりも大きいことがわかる。この事は, ローレンツ力によって絞られる度合いが, コイルと液柱との相対位置に依存することを意味する。

図 9 は, Case1 と Case2 における最大速度の大きさの推移を示したものである。0.03 秒経過するまでは両 Case ともほぼ同じ分布を示すものの, その後のこう配は Case2 において緩やかなものとなり, 最終的には Case2 の最大速度は Case1 の 1/2 以下となっている。

図 10, 11 は Case1 と Case2 の周方向における速度の大きさを示すものである。速度はいずれの時間においてもほぼ一定値をとっていることから, この図においても流れの軸対称性が確認できる。しかし, 細かく分析すると, いずれの場合においても 0.05 秒における分布では周の 1/8 に相当する波長を持って周期的に振動していることがわかる。さらに, 0.10 秒ではその振幅が増大し, 0.15 秒では振幅は再び減少することになる。Case2 では, その分布は非周期的なものに変化していることがわかる。0.15 秒において速度の大きさが減少していることは, 高さ中心における融液の変形が抑えられていることを意味する。

10. 結論

本研究で構築した自由表面に LSM を適用した FEM-BEM の混合手法を用いて, FZ 法を模擬した 3 次元数値解析を行い, 液柱形状の変形において実際の FZ 法による融液の変形挙動と定性的に良好に一致する結果が得られた。本研究で得られた結果をまとめると以下のとおりである。

- (1) コイルの位置を 2 通り設定し, 形状変化の違いを 3 次元的に見ることができた。
- (2) ローレンツ力によって液柱が絞られる度合いは, コイルの高さと液柱の相対位置に依存する。本研究では, 上部にコイルを設置した Case1 において, 高さ中心に設置した Case2 の場合より液柱が内部に向かって絞られる様子が確認できた。
- (3) 水平断面上の液柱の形状, 及び周方向の速度分布より, 本研究で扱った時間内では流れがほぼ軸対称を保っていることが確認できた。
- (4) 融液内の最大速度は, Case1 において Case2 の 2 倍の大きさになることが確かめられた。この事は, 形状変化の大きさの違いと直接結びつくことである。

今後は更なる高速計算の実現に向けて境界要素法の更なる改良, 及び温度場を導入し, 自由表面上のマランゴニ対流を考慮した解析を試みる所存である。

文 献

- (1) 棚橋隆彦・植原孝文, 計算工学, 2-1(1997), 24-32.
- (2) 木倉宏成・武口達・澤田達男・棚橋隆彦, 機論, 57-540, B(1991), 2632-2639.
- (3) Sussman, M., Smereka, P., and Osher, S., *J. Computational Physics*, 114(1994), 146-159.
- (4) 棚橋隆彦, CFD の基礎理論, (1999), アイピーシー.
- (5) Chang, Y. C., Hou, T. Y., Merriman, B., and Osher, S., *J. Computational Physics*, 124(1996), 449-464.
- (6) Guo, Z., Maruyama, S., and Togawa, S., *J. Crystal Growth*, 194(1998), 321-330.
- (7) Minowa, T., Morita, K., Takemoto, J., and Tanahashi, T., *CMES*, in press.
- (8) Brackbill, J. U., Kothe, D. B., and Zemach, C., *J. Computational Physics*, 100(1992), 335-354.
- (9) 植原孝文・柴田悦太郎・棚橋隆彦, 機論, 65-629, B(1999), 116-123.
- (10) Tanahashi, T., Okanaga, H., and Saito, T., *Inter. J. Numerical Methods in Fluids*, 11(1993), 479-499.
- (11) 棚橋隆彦, 松本昌昭, 科学技術振興事業団, 研究成果報告書, (2000), 1-184.
- (12) <http://www.msilab.psiweb.com/japanese/msilhist4.html>
- (13) Hirt, C. W. and Harlow, F. H., *J. Computational Physics*, 2(1967), 114-119.