

COMSOL Multiphysics Ver.5.2 専門モジュールイントロダクション

分子流モジュール

真空システムの低圧気体流をモデル化する

ソフトウェア

計測エンジニアリングシステム株式会社
東京都千代田区内神田 1-9-5 井門内神田ビル
2015 11.18

1. 分子流モジュールの概要

出典：<https://www.comsol.jp/molecular-flow-module>

低圧/低速気体流の正確なモデル作成

分子流モジュールは、複雑なジオメトリの低圧/低速気体流に従来利用できなかったシミュレーション機能を提供するために設計されました。このモジュールは、半導体の処理、粒子加速器、質量解析計などの真空システムのシミュレーションに理想的です。小さなチャンネルの用途（シェールガスの探査やナノ細孔材料における流れなど）にも対応できません。

分子流モジュールでは、高速の角度係数手法で定常状態の自由分子流をシミュレートします。等温分子流と非等温分子流をモデル化して、熱流束寄与を気体分子から自動的に計算できます。遷移流のシミュレーションには離散速度手法も組み込んでいます。

自由分子流と遷移流をモデル化する 2 つの手法

分子流モジュールでは、低速で低圧の流れを管理しやすく正確な結果が得られる方法で解決できるよう、これらの方式に対して 2 つの代替手法を用意しています。グラフィカルユーザーインターフェース (GUI) でモデル入力を受け取って、一連の方程式を完全に指定できるように構成された、2 つの専用のフィジックスインターフェースを利用できます。

~~~~~

自由分子流

自由分子流インターフェースは、角度係数手法で、クヌーセン数が 10 を超える流れをモデル化します。このフィジックスインターフェースでは、モデル化したジオメトリの体積の物理特性の解決はせず、表面のメッシュ化のみが必要です。ジオメトリのすべての表面の完全な散漫散乱（全体調整）と放出が前提となり、流れは、視線にある他のすべての表面に到着した流束を統合して計算します。すなわち、依存変数はジオメトリの表面にのみ存在し、解法プロセスは DSMC 方式よりはるかに高速です。さらに、このインターフェースは統計的散乱の影響は受けません。数密度は、自由分子流インターフェースにある方式で再構築します。

過渡流

遷移流インタフェースは、格子ボルツマン/離散速度法の修正法を利用したボルツマン BGK 方程式で、遷移流を解決します。DSMC 法と違ってこの解法は、統計的雑音の影響を受けません。気体分子の乱反射も、すべての表面で想定し、あらゆる方向から来る分子は効果的に表面で吸収し、続けてクヌーセン法により再放出します。このインタフェースでは、モデルジオメトリをメッシュ化して物理的空間を離散化し、速度求積法を選択します。これで、速度空間内のメッシュを表す依存変数セットを提供します。物理的空間と速度空間の両方で問題を解決できるよう、メッシュと求積法のいずれも、互いに無関係に調整できます。

高速で正確なシミュレーションのための最適な手法

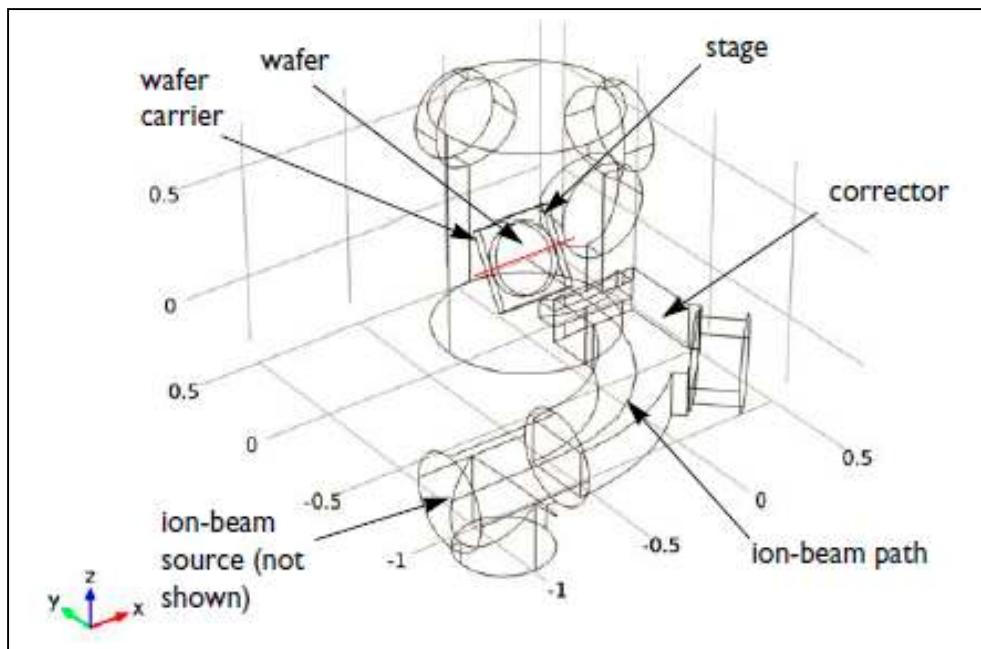
低圧気体は、従来方式の計算流体力学ツールではモデル化できません。これは、気体分子の平均自由行程が流れの長さスケールに匹敵するようになるため、動力学的効果が重要になるためです。流動の枠組みは、クヌーセン数 (Kn) で定量的に分類します。これは、気体流のジオメトリサイズに対する分子の平均自由行程を表します。

流れのタイプ	クヌーセン数
Continuum flow	
Slip flow	
Transitional flow	
Free molecular flow	

マイクロフレイディクスモジュールは、すべり流と連続流のモデル化に使用しますが、分子流モジュールは、自由分子流と過渡的流動の枠組みの流れを正確にシミュレーションするために開発されました。歴史的に見て、この枠組みの流れは、モンテカルロ直接 (DSMC) 法でモデル化されてきました。この方法は、システムで任意抽出した大量の粒子の軌道を計算しますが、モデル化プロセスに統計的雑音が紛れ込みます。真空システムに見られるような低速流の場合、DSMC による雑音があるとシミュレーションができなくなります。COMSOL は、代替手法として、遷移流の離散速度手法 (格子ボルツマン速度求積法) と分子流の角度係数手法を採用しました。

2. チュートリアル

イオンインプラント真空システム内の分子流



出典：INTRODUCTION TO MolecularFlow Module p. 15 以降

COMSOL を起動し、分子流の定常解析を行います。

手順

モデルウィザード

1. デスクトップの COMSOL アイコンをダブルクリックします。ソフトウェアが起動すると画面にモデルウィザードを使う（COMSOL モデルを新規作成）かブランクモデルを使う（手動で COMSOL モデルを新規作成）かを選択する画面が表示されます。ここではモデルウィザードを選択します。COMSOL がすでに起動している場合にはファイルメニューで新規を選択後にモデルウィザードを選択します。



2. 空間次元を選択ウィンドウで 3D をクリックします。

3. フィジックスを選択ツリーで流体流れ>希薄流を展開し自由分子流 (fmf) をクリックします。

4. 追加をクリックし、スタディをクリックします。
5. プリセットスタディの下のスタディツリーで定常を選択します。
6. 完了をクリックします。

グローバル定義

ウェハーの角度とポンプスピードの為のパラメータを設定します。

パラメータ

1. ホームツールバーのパラメータボタンをクリックします。

Linux および Mac : デスクトップのトップに近いところにあるコントロールを使います。

2. 設定ウィンドウのパラメータで、以下の値を入力します。

NAME	EXPRESSION	DESCRIPTION
theta	30	Wafer angle
pumpspeedcryo	12000 [1/s]	Pump speed for cryo-pumps
pumpspeedturbo	1500 [1/s]	Pump speed for turbo-pump

物理量は様々な単位で入力出来ます。対応している単位の詳細については COMSOL Multiphysics Reference Manual をご覧ください。

ジオメトリ

1. モデルビルダでコンポーネント 1>ジオメトリ 1をクリックします。
2. ジオメトリの設定画面で、単位の箇所、角度単位のリストよりラジアンを選択します。

インポート 1

イオンインプラントチャンバーの形状データをインポートします。

1. ホームツールバーで、インポートをクリックします。
2. 設定画面で、インポートの箇所、参照をクリックします。
3. アプリケーションライブラリフォルダ
¥Molecular_Flow_Module¥Industrial_Applications をブラウズし、ion_implanter.mphbin
をダブルクリックします。
4. インポートをクリックします。

ワークプレーン 1

1. ジオメトリツールバーで、ワークプレーンをクリックします。
2. ワークプレーンの設定画面で平面タイプの箇所に移動します。
3. 平面タイプのリストより座標を選択します。ポイント 3 に以下を入力します。
 - ポイント 3 : Y 座標 : $\sin(\text{theta}[\text{deg}])$
 - ポイント 3 : Z 座標 : $\cos(\text{theta}[\text{deg}])$

円 1

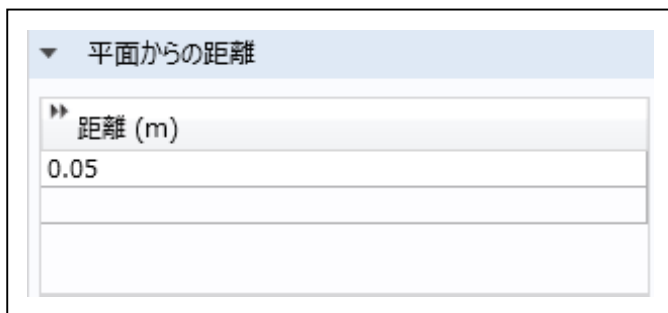
1. モデルビルダーで、ジオメトリ 1>ワークプレーン 1 の下の平面ジオメトリで右クリックし、円を選択します。
2. 円の設定画面で、サイズおよび形状の箇所で、半径に 0.15 と入力します。

正方形 1

1. 平面ジオメトリを右クリックし、正方形を選択します。
2. 正方形の設定画面で、サイズの箇所、サイド長に 0.35 と入力します。
3. 位置の箇所に移動し、ベースのリストより、中心を選択します。
4. ホームツールバーで、全て作成をクリックします。

押し出し 1

1. ワークプレーンをクリックし、ジオメトリツールバーで、押し出しをクリックします。
2. グラフィックスツールバーで、ワイヤフレームレンダリングをクリックします。
3. 押し出しの設定画面で、平面からの距離の箇所、以下の値を設定します。



4. 方向を反転チェックボックスを選択します。
5. 全オブジェクトを作成をクリックします。

差 1

チャンバーの領域からウェハーの領域を引き、チャンバー内の領域を 1 つのボリュームにします。

1. ジオメトリツールバーで、ブーリアン及び分割>差を選択します。
2. Imp1 のみ選択します。

3. 差の設定画面で、差の箇所へ移動します。差オブジェクトのアクティブボタンを選択します。
4. Ext1 のみ選択します。
5. 全オブジェクトを作成をクリックします。

定義

平均 1

1. 定義ツールバー上でコンポーネントカップリングをクリックし平均を選択します。
2. 平均の設定画面で、ソース選択の箇所へ、ジオメトリックエンティティレベルのリストでエッジを選択します。
3. エッジ 6, 33, 103 のみを選択します。この操作には、選択リストが利用出来ます。選択リストを開くには、ホームツールバーでウィンドウ>選択リストをクリックします。6, 33, 103 をクリックし、選択に追加をクリックします。選択リストを閉じるには、閉じるボタンをクリックします。

自由分子流

分子流 1

水素の自由分子流を計算する為にフィジックスを設定します。

1. モデルビルダでコンポーネント 1>自由分子流を開き、分子流 1 をクリックします。
2. 分子流 1 の設定画面で、分子流 1 の箇所へ、 $M_{n,G}$ に 0.002[kg/mol] と入力します。

壁 2

ウェハーを水素が 30sccm 出力するように設定します。

1. フィジックスツールバーで境界をクリックし、壁をクリックします。

2. 境界 42 のみ選択します。この操作には前の章で説明した選択リストを利用できます。
3. 壁の設定画面で、壁タイプの箇所、壁タイプリストより、アウトガス壁を選択します。
4. 流束で、以下を設定します。
 - 外向き流束のリストより、SCCM ユニット数を選択
 - $Q_{\text{sccm,G}}$ に 30 と入力

真空ポンプを設定します。

真空ポンプ 1

1. フィジックツールバーで境界をクリックし、真空ポンプをクリックします。
2. 真空ポンプの設定画面で、真空ポンプの箇所、ポンプ流束を指定リストで、ポンプ速度を選択します。
3. 境界 55 のみ選択します。
4. S_G に pumpspeedturbo と入力します。

真空ポンプ 2

1. フィジックツールバーで境界をクリックし、真空ポンプをクリックします。
2. 境界 8 のみ選択します。
3. 真空ポンプの設定画面で、真空ポンプの箇所、ポンプ流束を指定リストで、ポンプ速度を選択します。
4. S_G に pumpspeedcryo と入力します。

それぞれのポンプが個別の境界条件を必要なことに注意して下さい。なぜならば、分子流はポンプの設定で選択した計算領域に広がっているからです。

真空ポンプ 3

1. 真空ポンプ 2 を右クリックし、複製をクリックします。
2. 真空ポンプの設定画面で、境界選択の箇所、選択をクリアをクリックします。
3. 境界 25 のみ選択します。

真空ポンプ 4

1. 真空ポンプ 3 を右クリックし、複製をクリックします。
2. 真空ポンプの設定画面で、境界選択の箇所、選択をクリアをクリックします。
3. 境界 69 のみ選択します。

真空ポンプ 5

1. 真空ポンプ 4 を右クリックし、複製をクリックします。
2. 真空ポンプの設定画面で、境界選択の箇所、選択をクリアをクリックします。
3. 境界 33 のみ選択します。

数密度再構成 1

1. フィジックツールバーでエッジをクリックし、数密度再構成をクリックします。
2. エッジ 6, 33, 103 のみ選択します。

メッシュ 1

次にメッシュを作成します。

エッジ 1 と サイズ 1

ビームラインに細かいメッシュを追加します。

1. モデルビルダで、コンポーネント 1 のメッシュ 1 で右クリックし、その他の操作>エッジを選択します。
2. エッジ 6, 33, 103 のみ選択します。
3. エッジ 1 を右クリックし、サイズを選択します。
4. サイズの設定画面で、要素サイズの箇所で、カスタムボタンをクリックします。
5. 要素サイズパラメータの箇所で以下を設定します。
 - 最大要素サイズチェックボックスを選択します。
 - 関連する入力箇所に 0.005 と入力します。

サイズ

グローバルメッシュサイズを変更し、メッシュを細かくします。

1. モデルビルダで、メッシュ 1>サイズをクリックします。
2. サイズの設定画面で、要素サイズの箇所で、既定のリストより、さらに細かいを選択します。

フリーメッシュ 3 角形 1

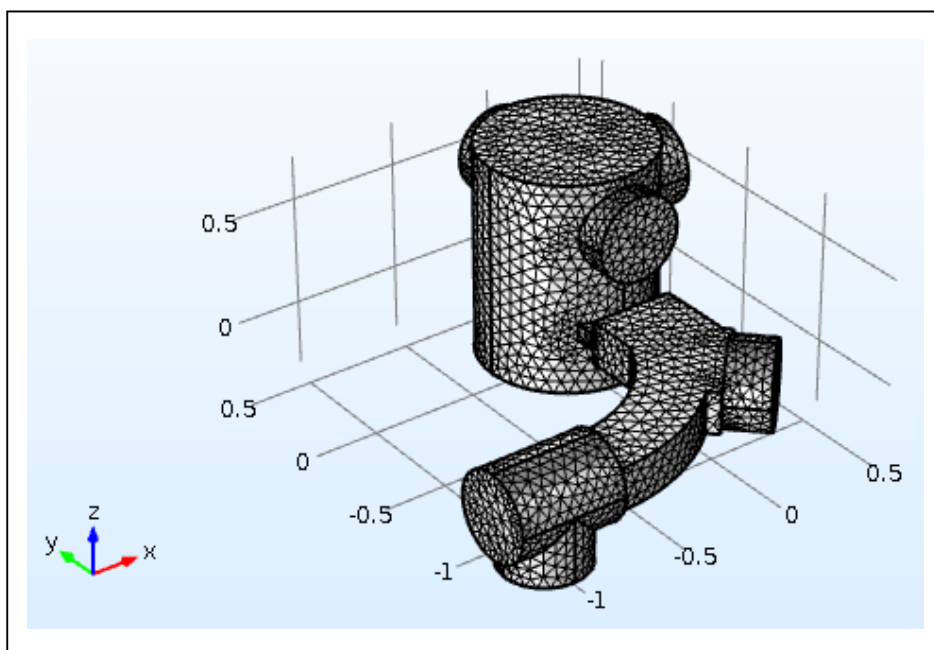
フリーメッシュ 3 角形 表面メッシュを追加します。これはグローバルメッシュサイズの設定を継承します。

1. モデルビルダで、メッシュ 1 を右クリックし、その他の操作>フリーメッシュ 3 角形を選択します。

2. フリーメッシュ 3 角形の境界画面で、境界選択の箇所、選択リストより全境界を選択します。

3. 全て作成をクリックします。

領域はメッシュ分割する必要はありません。なぜならモデルの表面のみ方程式が解かれるからです。表面とエッジとポイントのみメッシュ分割するか、またはすべての分子流の領域をメッシュ分割することが可能であることを注意して下さい。もしモデルが一部の領域のみメッシュがボリューム分割され、残りの部分が表面メッシュで分割される場合は、解は正しくありません。



スタディ 1

ウェハーの角度に対してパラメトリックスイープを設定します。スタディはすべてのパラメトリックスイープを完了するのに約3分かかります。代わりに時間を節約する為、1つの角度のケースを実行することも可能です。

1. モデルビルダでスタディ 1 ノードをクリックします。

パラメトリックスイープ

1. スタディツールバーでパラメトリックスイープをクリックします。
2. パラメトリックスイープの設定画面で、スタディ設定の箇所、追加をクリックします。
3. 範囲をクリックし、範囲のダイアログボックスに移動し以下を設定します。
 - スタートに 0 と入力
 - ステップに 20 と入力
 - 停止に 60 と入力
4. 追加ボタンをクリックします。
5. ホームツールバーで計算をクリックします。

結果

解の複製を作成し、選択を追加します。バキュームチャンバーの内部を見れるようにします。

データセット

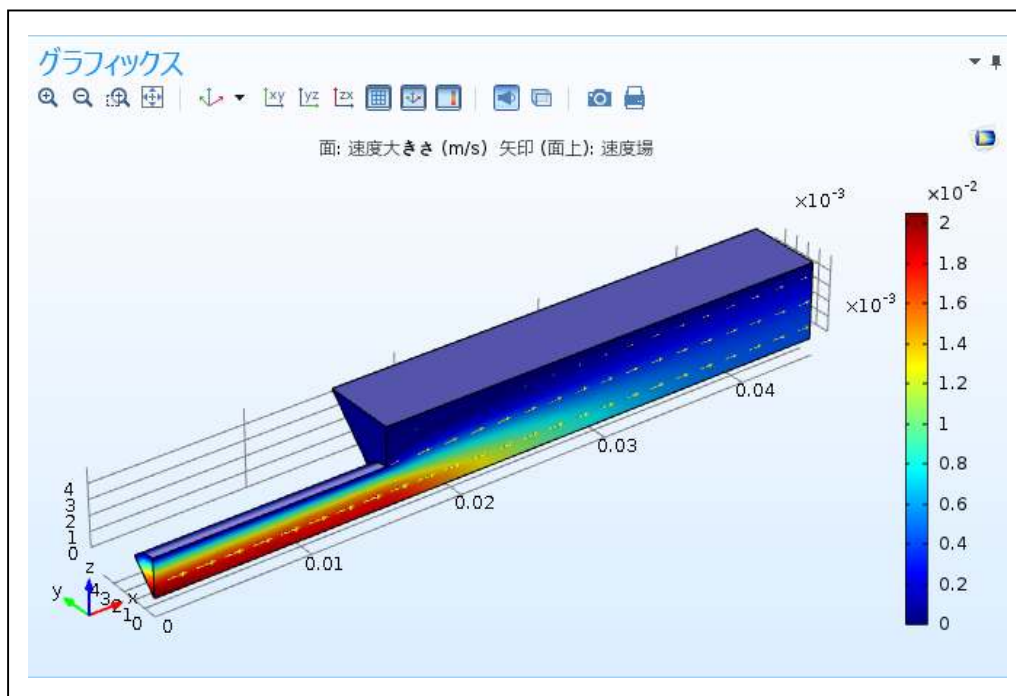
1. モデルビルダで結果>データセットノードを展開します。
2. スタディ 1/パラメトリック解 1 (2)を右クリックし、複製を選択します。
3. スタディ 1/パラメトリック解 1 (3)を右クリックし、選択を選択します。
4. 選択の設定画面で、ジオメトリックエンティティ選択の箇所、ジオメトリックエンティティレベルのリストより、境界を選択します。
5. 境界 2-15, 17, 16-69 のみ選択します。

入射分子流束 (fmf)

デフォルトのグラフを新しいデータセットを利用するように更新します。

1. モデルビルダの結果で、入射分子流束 (fmf) をクリックします。
2. 3Dプロットグループの設定画面で、データの箇所、データセットのリストより、スタディ 1/パラメトリック解 1 (3) を選択します。
3. 3Dプロットグループのツールバーで、プロットをクリックします。

結果がグラフィックス画面に表示されます。



以上