

クリーンルームの微粒子挙動シミュレーション

浦野 明*¹・本橋 比奈子*¹・深尾 仁*¹

Keywords : clean room, clean space, particle, simulation, Lagrange Method

クリーンルーム, 局所清浄空間, 微粒子, シミュレーション, ラグランジュ法

1. はじめに

クリーンルームの計画は、大きな空間全体を均一なレベルで清浄にする方式から、空間全体の清浄性を落とし、その一部のみ高度な清浄空間にする局所清浄方式にニーズが変化してきた。

局所空間と全体の空間は設計段階の清浄度のレベルは異なるものの、空間の境界は簡易な仕切りとなる場合が多いため、製品品質に直接影響する生産装置内外の気流・発生した微粒子の挙動・静電気などの変動要因が問題となることがある。したがって、これらの変動要因を設計の段階から的確に予測し制御する構造物・生産装置の計画手法が必要となりつつある。

クリーンルームの清浄性能を評価する際には、一般的に対象空間の換気回数が用いられ、詳細な検討には、気流の数値シミュレーションにより、風速の空間分布を予測することが行われてきた。

一方、清浄性に直接影響している微粒子の挙動は、気流のみならず静電気の影響も受けるので、両者の影響を考慮した予測手法が必要である。このような予測手法は過去に解析例があるものの¹⁾、実測との対応など更なる検討が必要と思われる。

本研究では、空調計画・建築・製造装置のレイアウト計画に反映することを目標にしたシミュレーションシステムの構築を行い、実験・理論解との比較を行った。

2. 解析システム

2.1 システム全体の概要

本解析システムは、気流の流れ・静電気を考慮した微粒子（エアロゾル）の運動を予測する。

流体中を運動する微粒子の解析手法として、オイラ

ー法とラグランジュ法がある²⁾。オイラー法は流体の運動方程式中にガス状に拡散する濃度として粒子群を考慮する方法であり粒子の濃度が濃い場合に相当である。一方、ラグランジュ法は、粒子一つ一つの運動方程式を解く方法であり、粒子の濃度が薄い場合に相当である。今回は、粒子の濃度が薄く、慣性の影響を考慮可能である、ラグランジュ法を採用した。また、粒子の存在が気流や電界に与える影響は少ないと考え、気流・電界を先に個別に解析し、その結果を用いて粒子の運動方程式を解く方法を用いるのが相当であると考えられる。

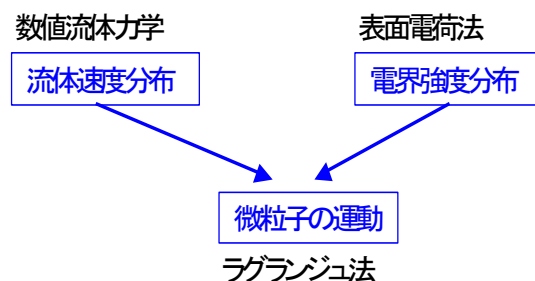


図-1 解析システムの流れ

Fig.1 Configuration of simulation system

以上の検討に基づき、図-1 のような解析システムを構築した。数値流体力学による気流解析と、表面電荷法による電界解析をそれぞれ独立して行う。気流による抗力と、電界によるクーロン力を外力として与えることにより、微粒子挙動を予測する。

2.2 電界強度分布の解析手法

電界（電場）の計算手法として、領域分割法は空間に電場に影響を与える物体が存在する場合、境界分割法は、空間の物体が電場に与える影響を無視できる場合に相当であると考えられる。

* 1 技術センター建築技術研究所環境研究室

表-1 気流解析の基礎方程式

Table 1 Primitive equation of CFD analysis

ここでは、空中の微粒子による電界が他の微粒子に与える影響は無視し、境界分割法の一つである表面電荷法を用いることを検討する。微粒子による汚染が懸念される対象物であるワーク(製品)表面を多数の微小三角形に分割し、それぞれの多角形が粒子 P に与える電場は代数式により求められる。重ね合わせ法により、それぞれの微小多角形による電界の合計値が点 P における電場である。電界の勾配を解析することにより、電位が求められ、これから物体に加わる力がクーロン力により求められる。

ワーク表面を分割した微小三角形要素の表面電荷密度を σ とする。ここで、微小三角形要素内の電荷の密度は一定とする。この三角形表面電荷が空間中の任意の点 $P(x, y, z)$ に生じる電位 ϕ は下式で与えられる。

$$\phi_i = \frac{\sigma \Delta S}{4\pi\epsilon_0 l_i} \quad (1)$$

ここで ΔS は微小要素 i の面積であり、表面電荷は $\sigma \Delta S$ であらわされる。また、

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9 \text{ [C}^2 \cdot \text{N} \cdot \text{m}^2] \quad (2)$$

である。距離 l_i は、微小多角形の中心点と点 P との距離で代表させる。

空間の電界 E [N/C, m · kg · s⁻²/A · s] (ベクトル量) は、電位 V (スカラー量) の勾配で求められ、次式で表される。

$$\vec{E} = -(\vec{i} \frac{\partial V}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial V}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial V}{\partial z}) = -\nabla V \quad (3)$$

点電荷 q を有する空間中の点 A にかかるクーロン力 F (ベクトル量) は電界 E を用いて

$$\vec{F} = q\vec{E} \quad (4)$$

で表される。

2.3 流体速度分布および微粒子の解析手法

流体速度分布は表-1 に示す標準 k-ε モデルによる等温の気流解析を行った。

ラグランジュ法による流速 u の流体中にある質量 m_d 、体積 V_d 、断面積 A_d の粒子の運動量方程式は、(9) 式で示される。

a) 連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \tilde{u}_j) = s_m \quad (5)$$

b) Navier-Stokes 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \tilde{u}_j u_i - \tau_{ij}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + s_i \quad (6)$$

c) 乱流モデル
乱流エネルギー k 及び、エネルギー散逸率 ϵ の輸送方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \tilde{u}_j k - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}) = \mu_t(P + P_b) - \rho \epsilon - 2\left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k\right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \tilde{u}_j \epsilon - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}) = C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \left[\mu_t P - 2\left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k\right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] + C_{\epsilon 3} \frac{\epsilon}{k} \mu_t P_b - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon 4} \rho \epsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (8)$$

各定数の値は以下の通りである。

$C_{\epsilon 1}$	σ_k	σ_ϵ	σ_h	σ_m	$C_{1,1}$	$C_{1,2}$	$C_{1,3}$	$C_{1,4}$
0.09	1.0	1.22	0.9	0.9	1.44	1.92	0.00144	0.33

$P_b > 0$ の場合は $C_{\epsilon 3} = 1.44$ 、それ以外の場合は $C_{\epsilon 3} = 0$ である。

t : 時間, x_i : 直交座標 ($i=1, 2, 3$), u_i : x_i 方向の流体の絶対速度成分, \tilde{u}_j : 速度 $u_{c,j}$ で移動する局所 (移動) 座標系に対する流体の相対速度 $u_j - u_{c,j}$, p : ピエゾ圧力 $= p_s - \rho \theta g_m x_m$ (p_s : 静圧, $\rho \theta$: 参照密度, g_m : 重力場成分, x_m : $\rho \theta$ が定義される基準座標, ρ : 密度), τ_{ij} : 応力テンソル成分, s_m : 質量ソース, s_i : 運動量ソース成分, T : 温度, m_m : 混合成分 m の質量分率, H_m : 成分 m の標準生成エンタルピー, Σ : すべての混合成分の和, \bar{c}_p : 温度 T での平均定圧比熱, c_p^θ : 温度 T_θ での基準比熱, $F_{h_i, j}$: x_j 方向の熱拡散エネルギーフラックス, S_h : エネルギーソース, h_t : 熱的エンタルピー

$$\mu_t = f_\mu \frac{c_\mu \rho k^2}{\epsilon}, \mu_{eff} = \mu + \mu_t, P = 2s_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, P_b = -\frac{g_i}{\sigma_{h,i}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$$

$$m_d \frac{du_d}{dt} = \frac{1}{2} C_d \rho A_d |u - u_d| (u - u_d) - V_d \nabla p + F_b \quad (9)$$

ここで右辺第 1 項は抵抗力 (C_d は抵抗係数), 第 2 項は搬送流体の圧力勾配 (∇p) の影響, 第 3 項は体積力である。第 3 項にクーロン力の影響を考慮する。

解析の際に固体表面の境界条件として以下を仮定した。

- ・ 微粒子が流体の運動量に及ぼす影響は無視する。
- ・ ワーク表面に接触した微粒子は 100% 附着し、ワーク以外の壁面に接近した微粒子は完全反発する。

- ・ 微粒子の(粒子同士, 流体, 固体に対する)熱的影響は無視する。

3. 微粒子挙動のテスト解析

3.1 解析対象と設定条件

解析システムの検証を行うため, Chirifu et. al. (1988)³⁾の実験と同様の解析を行い, 結果を実験値または理論解と比較した。

対象とする実験は, 図-2の形状のクリーンブース内の天井から微粒子を含む気流を流した場合の直径100 mmの円盤(シリコンウェハ)の帯電の有無による微粒子挙動の変化を検討したものである。実験結果の模式図⁴⁾を図-3, 4に示す。円盤に電荷をかけた場合は多くの微粒子が円盤に付着するが, 電荷がない場合は, 気流に乗って微粒子が流れ去る結果が得られている。

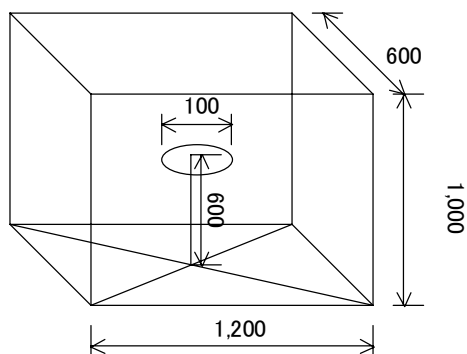


図-2 解析対象の形状 (単位 [mm])

Fig.2 Shape of the analysis model. (unit [mm])

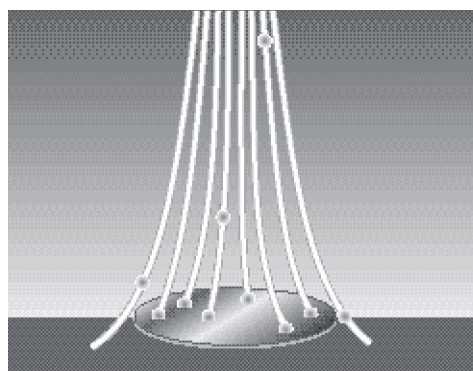


図-3 Chirifu et. al. (1988)³⁾の実験結果の模式図⁴⁾ (円盤に4[kV]の電荷をかけた場合)

Fig.3 A schematic daiagram⁴⁾ of Chirifu et. al. (1988)³⁾ experiment output. Surface voltage 4[kV].

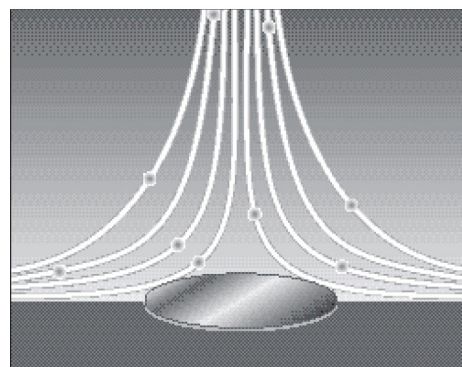


図-4 Chirifu et. al. (1988)³⁾の実験結果の模式図⁴⁾ (円盤に電荷がない場合)

Fig.4 A schematic daiagram⁴⁾ of Chirifu et. al. (1988)³⁾ experiment output. Surface voltage 0 [kV].

解析条件は, 実験に基づき以下のように設定した。

- ・ 吹き出し : 天井全面から下向き 0.3 m/sec,
乱流強度 5%
- ・ 吸い込み : 床全面
- ・ 室温 : 22°C
- ・ 微粒子 : 径 1.0 μm の PSL 粒子, 密度 1.05 [g/cc]
- ・ 円盤の帯電量 : 1.805×10^{-6} [C/m²] (4 [kV]相当)
- ・ 微粒子の電荷 : -1.01×10^{-17} [C]

なお, 上記の条件のうち円盤の帯電量は, 実験条件の 4 [kV]より, Sakata, et. al. (1989)⁵⁾による下記の式より換算した。

$$V = \frac{Q}{8\epsilon R} \quad (10)$$

ここで, V は円盤表面の平均電圧, Q は円盤の帯電量の合計値, ϵ は空気の誘電率である。また微粒子の電荷は, 荷電素量 1.602×10^{19} と Chirifu et. al. (1988)³⁾の実験による電荷の荷電量の平均値 63.2 を乗じて求めた。ここで, 微粒子の実際の電荷は荷電素量の整数倍の値をとるが, 今回は微粒子全体の平均的な挙動を再現するために, 平均値により代表させた。

阪田・岡田(1988)⁶⁾によると, 下向き気流中に設置された円盤表面に付着する微粒子は, 円盤中心点から垂直線上から一定の半径内の捕獲断面に初期位置がないとウェハ表面に到達せずに流れ去る。このため, Chirifu et. al. (1988)³⁾の実験ではクリーンブースの天井全面から微粒子を発生させていたが, 本解析ではウェハ中心から 5 cm直上の点から 1 mmの範囲で同時に 4 個発生させ, 1 秒おきに 2 回, 合計 8 個発生させた。

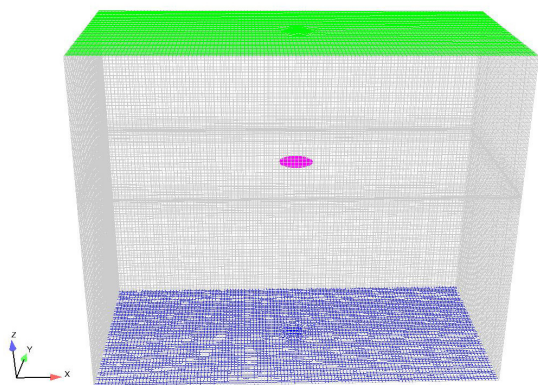


図-5 解析対象の格子

Fig.5 Analysis mesh of the simulation model.

流体解析に用いた解析格子は、図-5に示すように設定し、円盤近傍の鉛直方向の格子間隔は 1.25 mm とした。また、電界解析に用いる円盤の格子間隔は約 0.5 mm 前後の間隔で解析した。解析は、

- ・ Case-1: 円盤が 4 [kV]に帯電している場合
 - ・ Case-2: 円盤が帯電していない場合
- の 2 ケースについて行った。

3.2 電位分布の解析結果および理論解との比較

電位・電界は、円盤中心からの垂直線上の点について理論解を求めることができる。半径 R の絶縁体の円盤状に電荷密度が σ [C/m²] で帯電しているときの、円盤の中心軸上にあつて円盤からの距離が z の点 P の電位は

$$V = \frac{\sigma}{2\epsilon} \left[\left(z^2 + R^2 \right)^{1/2} - z \right] \quad (11)$$

となり、点 P の電界のスカラー値は、

$$E = \frac{\sigma}{2\epsilon} \left[1 - \frac{z}{\left(z^2 + R^2 \right)^{1/2}} \right] \quad (12)$$

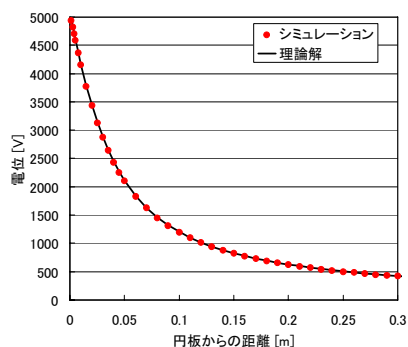


図-6 電位の解析と理論解の比較 (単位[V])

Fig.6 Electric potential comparison of simulation and theory analysis. (Unit[V])

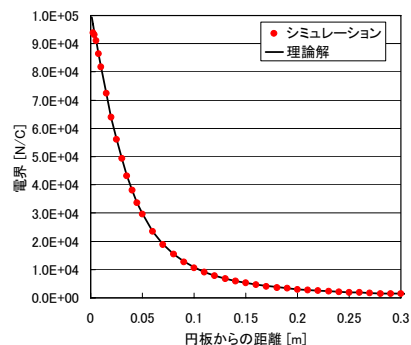


図-7 電界の解析と理論解の比較 (単位[N/C])

Fig.7 Electric field comparison of simulation and theory analysis. (Unit[N/C])

となる。シミュレーション結果と式(11), (12)による電位・電界の理論解との比較を行った結果を図-6, 7に示す。両者はほぼ一致している。

3.3 流体速度分布および微粒子の解析結果

図-8, 9に円盤中心を通る鉛直断面および円盤直上の水平断面の気流速度分布の解析結果を示す。また図-10, 11に円盤中心の 50 mm 上から発生した微粒子が円盤に付着または円盤下方に流れ去るまでの運動の軌跡について、Case-1, 2 それぞれのシミュレーション結果を示す。円盤が帯電せずクーロン力が働かない Case-2 では微粒子は気流に沿って円盤の下に流れ去り、円盤に付着した微粒子は 8 個中 2 個であった。一方、円盤が帯電した case-1 ではクーロン力の影響により、8 個中 6 個が付着した。図-3, 4と図-10, 11を比較すると粒子の運動の解析は実験とほぼ同様の結果が得られたと考えられる。

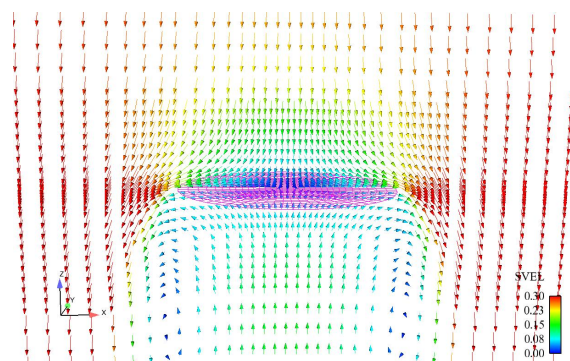


図-8 鉛直断面の気流の解析結果 (単位[m/sec])

Fig.8 Vertical profile of simulation output. (Unit[m/sec])

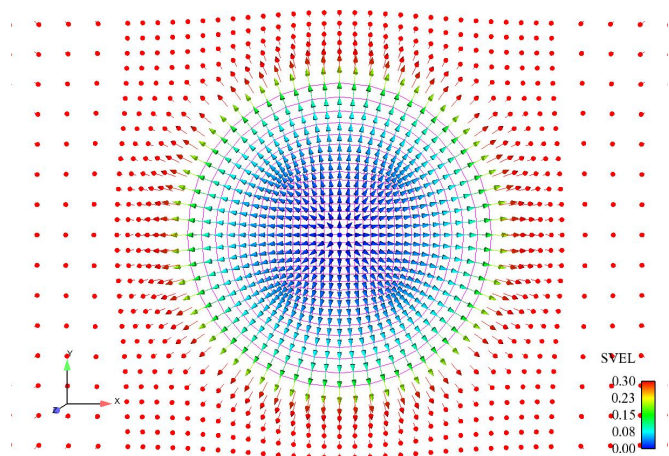


図-9 水平断面の気流の解析結果
単位[m/sec]

Fig.9 Horizontal profile of simulation output.
(Unit[m/sec])

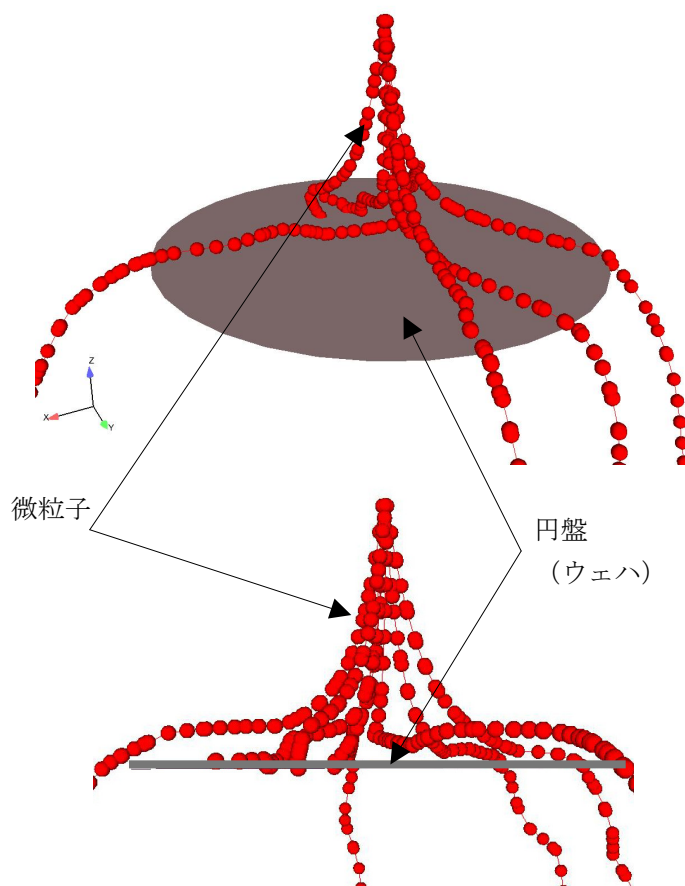


図-11 Case-2(帯電なし)の微粒子挙動の
解析結果(上:透視図, 下:断面図)

Fig.11 Particle movement simulation output of Case-2 (Non-charged disc surface). (Upper: perspectiv, lower: profile)

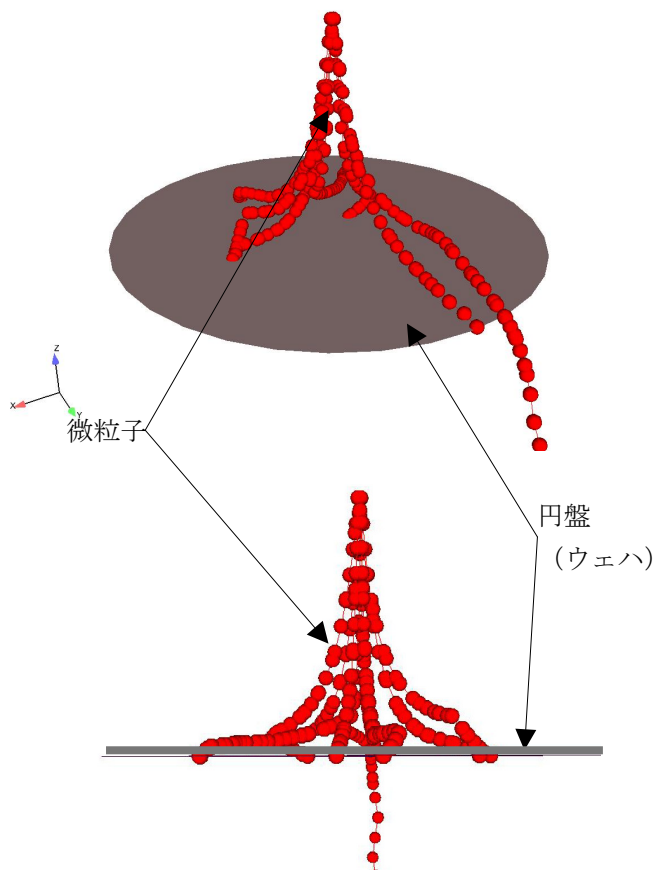


図-10 Case-1(帯電あり)の微粒子挙動の
解析結果(上:透視図, 下:断面図)

Fig.10 Particle movement simulation output of Case-1 (Charged disc surface). (Upper: perspectiv, lower: profile)

4. おわりに

本研究により構築・検証されたシミュレーションシステムにより、製造装置・人体からの発塵状況を可視化して把握することが可能になった。今後は本システムを用いて、ワークに微粒子が付着しないようにするためのクリーンルームのレイアウト計画に反映していく予定である。

参考文献

- 1) 斎藤正信・森岡宏次：クリーンルーム内の微粒子の挙動解析，第11回空気清浄とコンタミネーションコントロール年次大会，47-50，
- 2) 田之上健一郎ほか：荷電粒子の壁面沈着シミュレーション，静電気学会誌，26，2，71-77，2002.
- 3) Chirifu S, et. al :Study of Aerosol Deposition on Wafer Surface.
-Experimental Analysis-, Trans. SHASE, 37, 21-27, 1988.
- 4) Ion Systems: Air Ionization Theory and Practice, pp. 15, <http://www.mksinst.com/docs/UR/ionTFtechpapers.aspx>
- 5) Sakata S., et. al :Aerosol Deposition on Wafer Surface. - Theoretical Analysis-, Trans. SHASE, 40, 47-55, 1989.
- 6) 阪田総一郎，岡田孝夫: ウエハ表面へのエアロゾル超微粒子の付着，第7回空気清浄とコンタミネーションコントロール年次大会，21-28.