

回転磁場印加チョクラスキー法における Cylindrical Adaptive Mesh の導入

Introduction of Cylindrical Adaptive Mesh in Czochralski Process Applied Rotating Magnetic Field

- 林 圭祐, 首都大学東京, 東京都日野市旭が丘 6-6, E-mail : smokeandmirrorwits@gmail.com
柴田 祐樹, 首都大学東京, 東京都日野市旭が丘 6-6, E-mail : shibata-hiroki-assembler-1991@hotmail.co.jp
田川 俊夫, 首都大学東京, 東京都日野市旭が丘 6-6, E-mail : tagawa-toshio@tmu.ac.jp
Keisuke Hayashi, Tokyo Metropolitan University, 6-6, Asahigaoka, Hinoshi-shi, Tokyo, Japan 191-0065
Hiroki Shibata, Tokyo Metropolitan University, 6-6, Asahigaoka, Hinoshi-shi, Tokyo, Japan 191-0065
Toshio Tagawa, Tokyo Metropolitan University, 6-6, Asahigaoka, Hinoshi-shi, Tokyo, Japan 191-0065

The purpose of this research is to reduce the computational time for a typical buoyancy-driven liquid metal flow in magnetic Czochralski processes by introducing Cylindrical Adaptive Mesh (CAM), which is able to relax the CFL condition. The greatest feature of the present CAM is the reduction of the number of grids in the azimuthal direction especially in the vicinity of the central axis. It is exhibited that the oscillatory tendency of the buoyant convection flow in a cylindrical enclosure can be damped by the application of rotating magnetic field.

1. 緒論

半導体用の単結晶製造で用いられる代表的な手法の一つとしてチョクラスキー法 (Cz 法) がよく知られている。この手法は、径の大きな結晶が作れるというメリットがある反面、結晶の大口径化に伴い、対流が乱流化し、流れの制御が難しくなるといった問題点がある。また、対流は浮力対流が卓越し、坩堝の側壁から上昇した溶液は表面で中心に集まり、大きな下降流となる。これが温度振動の原因となり、結晶の品質を下げる。そこで、回転磁場を印加し、ローレンツ力を用いることで対流の制御する試みが既往の研究でなされている。坩堝は簡略化したモデルとして円筒容器を仮定し、円筒座標系による解析がよく行われている。しかし、極座標における構造格子は中心付近では格子幅が極端に小さく、中心で速度が大きくなるこのモデルにおいては CFL 条件が厳しくなるため、解析の妨げとなっている。

そこで、本研究では CFL 条件を緩和するため、外縁から中心付近にかけて周方向格子数を間引いた特殊な接合格子 (Cylindrical Adaptive Mesh) を提案し、その効果を議論する。更に、回転磁場の対流抑制効果を検証することを目的としている。

2. Cylindrical Adaptive Mesh (CAM) の概要

円筒座標による解析で問題となるのは、中心近傍における周方向格子幅の狭さである。結果として空間解像度が高過ぎ、更に CFL 条件は中心の格子サイズに拘束されることが多く、時間刻みを小さくせざるを得ないため解析には時間が掛ってしまう。一方、壁近傍の周方向格子幅が大きくなり過ぎ、空間解像度が低くなってしまふといった不都合も生じる。(Fig. 1 参照)

そこで本研究では Cylindrical Adaptive Mesh (CAM) を導入した。コンセプトとしては、中心において周方向格子数を減らし、側壁に向かって 2 倍ずつ増やすことで中心近傍の CFL 条件を緩和させつつ格子解像度を維持するといったものである。以下に CAM の特徴を記す。

1. 半径方向に N 個のブロックに分ける。
2. 円筒半径 r_0 に対しブロックの分割規則は以下の通り。
中心から外側に向かって各ブロックに $n = 0, 1, \dots, N-1$ のように番号を振れば、各ブロックの幅 l_n は、

$$l_0 = l_1, \quad l_n = \frac{r_0}{2^{N-n}} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1)$$

3. ブロックごとに周方向格子数 $J_{M,n}$ を設定。
 $J_{M,0} = 8, J_{M,n} = 2J_{M,n-1} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1)$

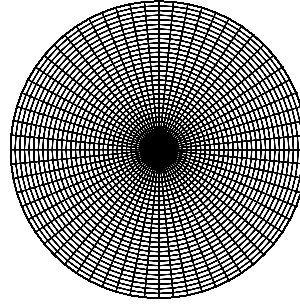


Fig. 1: Usual grid

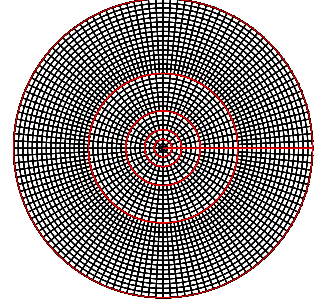


Fig. 2: CAM(N=5)

Fig. 2 に $N = 5$ の場合における CAM を図示する。

CAM において、接合部分では定義点位置が変化するため、特に半径方向の離散化に関してスキームを考案しなくてはならない。ここでは、スタガード格子を用い、流出面を基準とし、差分スキームを説明する。(Fig. 3)

半径方向へ差分する場合、各定義点に対して補間が必要となる場合が多い。以降に半径方向速度 u_c 周りの差分の例を示す。接合部分において基本的に Fig. 4 のように 9 パターンに分けて考える。図の青いセルは差分する際に基準とするセルである。差分式は Fig. 4 の各図と添え字が対応している。

まず、スカラー点の半径方向の差分を考える。 u_c 周りで離散化すると、半径方向内側の接合部 (Fig. 4 左上, 中上) では離散化に影響はないが、半径方向外側の接合部 (Fig. 4 右上) に対しては、

$$\left. \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{u_c} = \frac{(p_h + p_{he})/2 - p_c}{\Delta r} \quad (1)$$

のように簡単に補間値を用いて差分した。

次に半径方向ベクトルの定義点は、 u_c 周りで離散化すると、半径方向内側の接合部 (Fig. 4 左中, 中) に対しては、

$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{u_c} = \frac{u_h - u_l^*}{2\Delta r}, \quad u_l^* = \begin{cases} (3u_l + u_{lw})/4 \\ (3u_l + u_{le})/4 \end{cases} \quad (2)$$

半径方向外側の接合部 (Fig. 4 右中) に対しては、

$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{u_c} = \frac{(u_h + u_{he})/2 - u_l}{2\Delta r} \quad (3)$$

のように差分した。

最後に周方向ベクトルの定義点は、 u_c 周りで離散化すると、半径方向内側の接合部 (Fig. 4 左下, 中下) では離散化に影響はないが、半径方向外側の接合部 (Fig. 4 右下) に対しては、

$$\left. \frac{\partial v}{\partial r} \right|_{u_c} = \frac{v_h - (v_c + v_w)/2}{\Delta r} \quad (4)$$

のように差分した。

なお、プログラムのコーディングにおいて、周方向のインデックスは場合分けなどが多く、if 演算などを多用すると計算負荷が大きくなることが予想される。そこで、周期境界と整数演算処理 (余り演算など) を利用し、if 演算を避けるプログラミングをすることで速度を上げる工夫を施した。

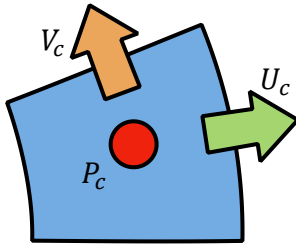


Fig. 3: Usual staggered mesh for the cylindrical coordinate system and the definition of the pressure and velocity points.

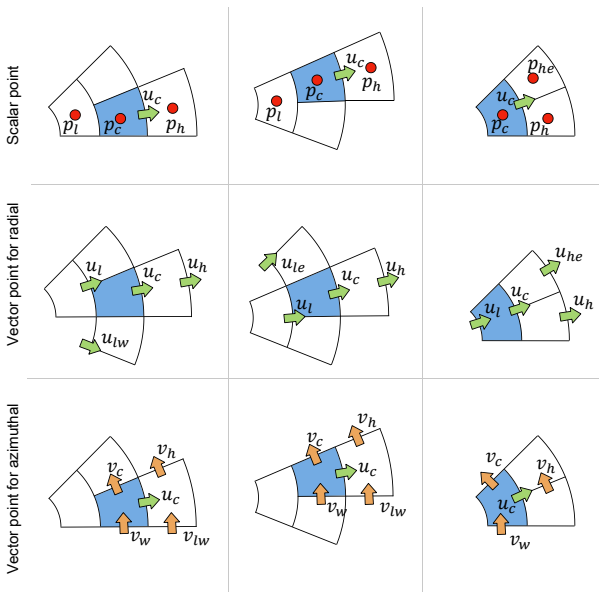


Fig. 4: All the patterns considered for difference method including joint boundary.

3. 無次元支配方程式

前述したように、Cz 法で用いる坩堝を簡易的に模擬した円筒容器を想定する。境界条件は上面は等温冷却、その他壁面は等温加熱し、流体は全面滑りなし条件とする。また、電流は壁面を貫かず (電気絶縁壁)、表皮効果は無視できるものとする。印加する磁場は軸に垂直な一様磁場を軸周りに回転させる。

以下に静止座標系での支配方程式を記す。

連続の式

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0 \quad (5)$$

運動方程式

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial \tau} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla}) \vec{U} = -\vec{\nabla} P + \frac{1}{Re_b} \nabla^2 \vec{U} + \frac{Ha^2}{Re_b} \vec{J} \times \vec{B} + \frac{Gr}{Re_b^2} T \vec{e}_z \quad (6)$$

エネルギー方程式

$$Pr Re_b \left\{ \frac{\partial T}{\partial \tau} + (\vec{U} \cdot \vec{\nabla}) T \right\} = \nabla^2 T \quad (7)$$

電荷保存則

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (8)$$

オームの法則

$$\vec{J} = -\vec{\nabla} \Psi + \vec{U} \times \vec{B} - \frac{\partial \vec{A}}{\partial \tau} \quad (9)$$

磁場の定義

$$\vec{B} = -\vec{e}_r \cos(\tau - \varphi) - \vec{e}_\varphi \sin(\tau - \varphi) \quad (10)$$

ベクトルポテンシャルの定義

$$\vec{A} = -\vec{e}_z \sin(\tau - \varphi) \quad (11)$$

方程式中の無次元数、無次元変数の定義は以下の通り。

<無次元数>

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}, \quad Re_b = \frac{r_0^2 \omega_b}{\nu}, \quad As = \frac{z_0}{r_0}$$

$$Ha = b_0 r_0 \sqrt{\frac{\sigma}{\rho \nu}}, \quad Gr = \frac{g \beta_0 (\theta_h - \theta_l) r_0^3}{\nu^2}$$

<無次元変数>

$$R = \frac{r}{r_0}, \quad Z = \frac{z}{r_0}, \quad \tau = t \omega_b, \quad P = \frac{p}{\rho r_0^2 \omega_b^2}$$

$$T = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_h - \theta_c}, \quad \vec{U} = \frac{\vec{u}}{r_0 \omega_b}, \quad \vec{J} = \frac{\vec{j}}{\sigma r_0 \omega_b b_0}$$

$$\vec{A} = \frac{\vec{a}}{r_0 b_0}, \quad \vec{B} = \frac{\vec{b}}{b_0}, \quad \Psi = \frac{\psi}{r_0^2 \omega_b b_0}$$

b_0 : 印加磁束密度	[T]	g : 重力加速度	[m/s ²]
r_0 : 円筒容器半径	[m]	z_0 : 円筒容器高	[m]
α : 熱拡散率	[m ² /s]	β_0 : 体膨張率	[1/K]
θ_0 : 基準温度	[K]	θ_h : 加熱面温度	[K]
θ_l : 冷却面温度	[K]	ν : 動粘性計数	[m ² /s]
ρ : 密度	[kg/m ³]	σ : 電気伝導率	[1/(Ωm)]
ψ : 電位	[V]	ω_b : 磁場回転角速度	[rad/s]

圧力と電位のポアソン方程式の解法にはそれぞれ SMAC 法を用い、差分スキームには移流項で対流型補間法、その他は二次中心差分を用いた。また、計算機には主に GPU (Radeon R9 280X) を用い、大規模な並列化を施した。

4. CFL 条件の緩和効果検証

本検証では磁場を印加せず浮力対流のみの場合を考える。熔融シリコンの物性値にはばらつきがあるが、 Pr は 10^{-2} オーダーと低く、坩堝を内の浮力対流は中心で激しい振動流となる。よって、特に条件が厳しいと予想されるのは温度の拡散項と、速度の移流項である。以下に拡散項、移流項の CFL 条件を記す。

$$CFL_{conv} : \frac{\Delta\tau|\vec{U}|}{\sqrt{(\Delta R)^2 + (R\Delta\varphi)^2 + (\Delta Z)^2}} < 1 \quad (12)$$

$$CFL_{dif} : \frac{2\Delta\tau}{Pr} \left(\frac{1}{\Delta R^2} + \frac{1}{(R\Delta\varphi)^2} + \frac{1}{\Delta Z^2} \right) < 1 \quad (13)$$

これを満たす時間刻みの最大値 $\Delta\tau_{max}$ を理論値とし、実際の計算において発散せずに計算可能な最大の $\Delta\tau$ と比較検証した。格子数は Tab. 1 の通り。ただし、CAM においてブロック数は 6 とし表中段における φ 方向格子数の最大値である。無次元数は $As = 2$, $Pr = 0.013$, $Gr = 9.98 \times 10^6$ とした。式 (12) における $|\vec{U}|$ の値は実際の解析を行った際の中心の速度を計測し、計算時間中最大速度の値を用いた。

Tab. 1: The grid numbers

Grid numbers	CAM	Usual
(R, φ, Z)	(64, 256, 128)	(64, 64, 128)
Total	1398784	540672

Tab. 2 に計算結果を示す。CAM による解析では通常円筒格子よりも格子数が多いにもかかわらず、理論値、実測値共に CFL 条件が 10 倍程緩和していることがわかる。また、理論値と実測値を比較した場合、実測値は若干 CFL 条件が厳しくなっているものの、オーダーとしては概ね妥当な見積もりが出来ている。なお、計算時間中に計測された最大速度は $|\vec{U}| = 2.8634 \times 10^4$ となった。

Tab. 2: Maximum value of $\Delta\tau$

	CAM	Usual
Convection term	2.14×10^{-7}	2.67×10^{-8}
Diffusion term	1.87×10^{-7}	3.80×10^{-9}
Measured value	5.00×10^{-8}	1.00×10^{-9}

5. 回転磁場による対流の抑制効果検証

磁場による対流抑制は、Cz 法における坩堝内の浮力対流によって発生する温度振動を結晶付近で抑制することが主な役割の一つとなる。そこで、上面近傍で異なる 3 点の温度をサンプルとして計測し、温度振動の様子を比べた。サンプル点の座標は、 $T_1(0, 0, 0.95z_0)$, $T_2(0.5r_0, 0, 0.95z_0)$, $T_3(0.95r_0, 0, 0.95z_0)$ とした。また、無次元数は以下の通り。 $As = 1.60$, $Pr = 0.374$, $Gr = 1.15 \times 10^6$, $Re_b = 6000$ とし、 Ha 数は $2, 20, 100$ の 3 パターン与えた。結果を Fig. 6 に示す。なお、最上段のグラフは浮力対流のみのものであり、下段 3 つとは時間スケールが異なる。

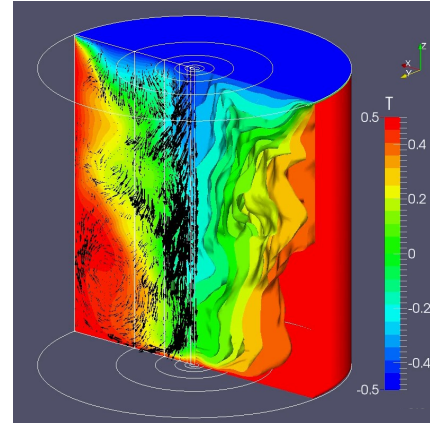


Fig. 5: Snap shot of temperature distribution and vectors of velocity in a cross-section

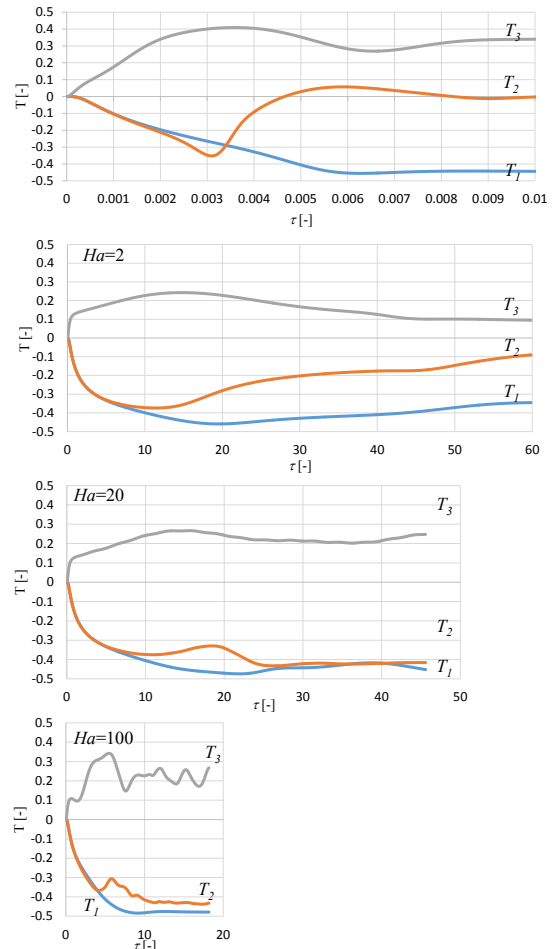


Fig. 6: Transient responses of the three temperatures for several Hartmann numbers.

$Ha = 2$ の結果をみると、浮力対流のみに比べて T_2 の振動が特に抑えられていることがわかる。磁場の強い $Ha = 20$ においては、どの点においても振幅が小さく、振動抑制効果が高くなっていることがわかる。しかし、 $Ha = 100$ の結果を見ると、ローレンツ力が強くなるためか高周波の振動がみられ、振幅も大きくなっている。以上より、振動を効果的に抑制するには最適なパラメータを与える必要があると考えられる。

6. 結言

CAM を提案し、中心の CFL 条件が厳しい Cz 法における浮力対流に対して CFL 条件の緩和効果があることを示した。また、回転磁場を印加した場合、温度振動の抑制効果を示し、更に効果の高いパラメータの最適値が存在することを示した。今後の課題として、妥当性の検証や様々なパラメータでの検証、上面での結晶の影響などを考慮した計算などが挙げられる。

参考文献

- (1) 梶島岳夫 (2007) : 「乱流の数値シミュレーション」, 養賢堂
- (2) 田川俊夫 (2013) : 「回転磁場により駆動される軸対称流れに及ぼす磁極数と電位の影響」 第 27 回数値流体力学シンポジウム
- (3) 田川俊夫, 江頭竜 (2012) : 「円筒容器内で回転磁場により駆動される液体金属の流れ」 日本機械学会論文集 78 巻 794 号
- (4) 平野博之 (2011) : 「流れの数値計算と可視化」, 丸善
- (5) 早川健士 (2012) : 「回転磁場印加チョクラルスキー法における導電性流体の流動解析」 首都大東京修士論文
- (6) 赤松正人 (1998) : 「水平方向一様磁場印加下におけるチョクラルスキー融液の再振動現象」 九州大学博士論文