

オートクレーブ内自然対流の3次元数値シミュレーション

伊東朋秋¹⁾ ・ 菊地正憲²⁾ ・ 平野公孝³⁾**3-Dimensional Numerical Simulations of Natural Convection in Autoclave**

Tomoaki ITO, Masanori KIKUCHI, Hirano KIMITAKA

Abstract

Recently, there is a strong demand for the crystal device because the demand for various multimedia products increases rapidly. Therefore, the technology that manufactures synthetic quartz in large quantities quickly is needed. The micro manufacturing technology such as the photolithography technology is widely applied in an electronic industrial field. Therefore, the material that is free from linear defect and lattice defect is requested. To keep the high quality, it is necessary to prevent micro particle called Inclusion from mixing internally during the growth process of crystal. In general, the synthetic quartz is manufactured by the hydrothermal growth method in an autoclave. In this research, an autoclave size is over 600mm diameter and 14m internal depth. It is difficult to experiment in the autoclave, because it has a high temperature of over 300°C and a high pressure about 1200 atmospheres. Therefore, it is important to clarify the flow field in the autoclave by the numerical analysis for the enlargement of the autoclave, the quality improvement of the synthetic quartz, the cost reduction and the processing technology development of the synthetic quartz.

Key Words:

Natural Convection, Autoclave, Synthetic Quartz, Numerical Simulations, The Hydrothermal Growth Method

1. はじめに

近年、多種多様なマルチメディア機器の需要が急速に増加し、それに伴い水晶デバイスの利用も急増している。また、人工水晶の電子工業分野において、電子部品、電子デバイスの小型化に伴い微細加工技術が幅広く応用されており、欠陥が少ない高品質の素材が求

められている。高品質のものを早く、大量に生産できる構造・技術が重要となっている。一般に人工水晶は図1に示すオートクレーブと呼ばれる耐圧容器内で水熱合成法により製造される。オートクレーブ内は300°C、1200気圧ほどの高温高圧となるため、実験による研究は困難である。従って、数値解析によりオートクレーブ内の流れの特徴を明らかにすることは、装置の大型化や人工水晶の品質向上、低コスト化、人工水晶製造技術発展のために重要である。

本研究では、数値流体解析ソフト FLUENT を用い

1) 機械システム工学専攻大学院生

2) 機械システム工学科教授

3) 機械システム工学科名誉教授

て数値解析を行い、オートクレーブ内の流れの解明、
 図2、図3に示すオートクレーブ内のバッフルと呼ばれる整流板が流れに及ぼす影響、育成枠が流れに及ぼす影響等を調べることを目的とする。

2. 解析方法と物性値

2.1 解析方法

本研究では流体解析プリプロセッサGAMBIT と Tgrid を用いてモデルとメッシュを作成し、有限体積法熱流体解析ソフト FLUENT を用いて解析を行った。FLUENT では全ての流れに対して、質量保存則と運動量保存則に関する支配方程式が有限要素法により解かれる。質量保存則に関しては連続の式、運動量保存則に関しては Navier-Stokes 方程式が解かれる。流れが乱流の場合、モデル化された方程式を解く。本研究のオートクレーブ内の流れは乱流であるため、RNG k-ε 乱流モデルを適用した。

2.2 物性値

解析を行うにあたり、高温・高圧でのオートクレーブ内流体の物性値が明確ではないため、オートクレーブ内流体に近いといわれている水を使用することにした。使用した水の物性値を表1に示す。数値解析では10℃ごとの間は直線補間としている。

表1 水の物性値

温度 °C	密度 kg/m ³	比熱 kJ/(kg・K)	熱伝導率 W/(m・K)	粘性係数 Pa・s×10 ⁻⁶
0	999.8	4.2178	0.552	1791.7
10	999.6	4.1922	0.578	1307.3
20	998.2	4.1818	0.598	1002.3
30	995.65	4.1784	0.614	797.3
40	992.2	4.1784	0.628	652.2
50	988	4.1805	0.641	546.3
60	983.2	4.1843	0.651	465.8
70	977.7	4.1891	0.66	404.1
80	971.8	4.1897	0.669	355
90	965.3	4.2052	0.676	314.8

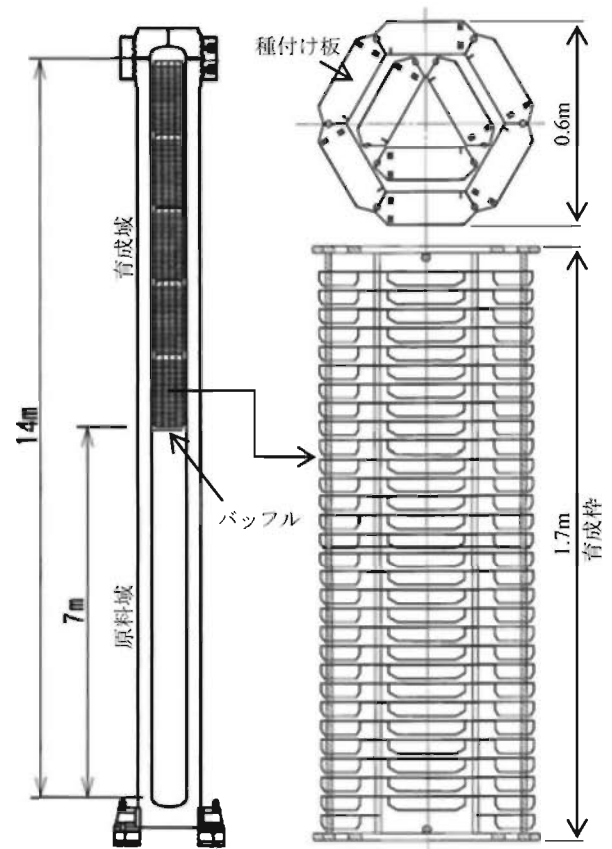


図1 オートクレーブと育成枠概要

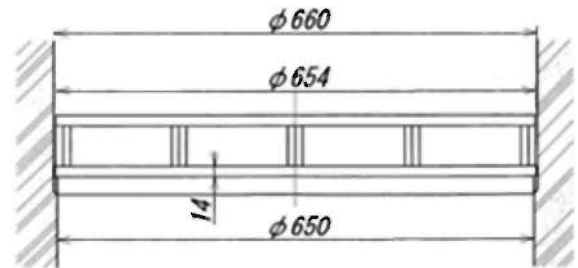


図2 バッフル詳細

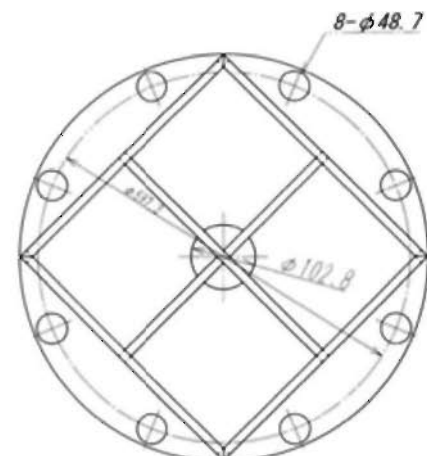


図3 バッフル

3. 2次元自然対流数値解析

3.1 解析の目的

まず、FLUENTによる自然対流解析の妥当性を検討するため、簡単な2次元モデルを用いてFLUENT解析結果と理論近似解³⁾を比較する。

3.2 流れ場の2次元モデルと境界条件

図4に解析に用いた2次元のモデルと境界条件を示す。上下の壁面は断熱、左右の壁面は直線温度勾配となっている。物性値に関しては2.2節で示した通りである。基準密度を 988.0kg/m^3 (水が 323K (50°C)の時の密度)とする。

3.3 解析条件

理論解が層流の場合を表すため、層流モデルを使用する。

3.4 解析結果と理論解の比較

図4の中段($z=0$)における流速と温度分布の解析結果と理論解との比較を図5、図6に示す。理論解と解析解との誤差がほとんどないことが分かる。最も大きな誤差で5%程であり、これはFLUENTにより、自然対流を十分に表現できることを示している。この解析方法を3次元での解析に適用する。

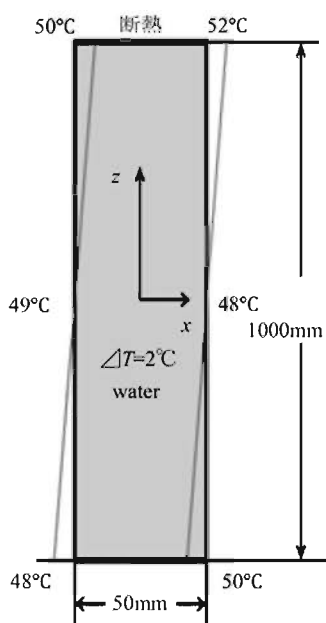


図4 2次元モデルと境界条件

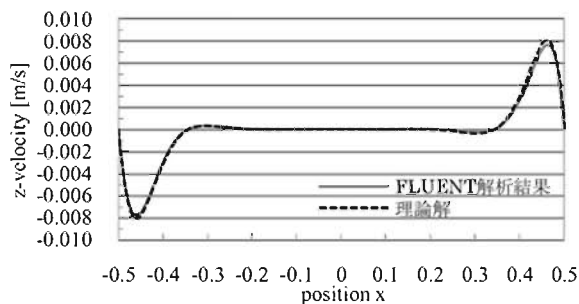


図5 $z=0$ における z 軸方向流速

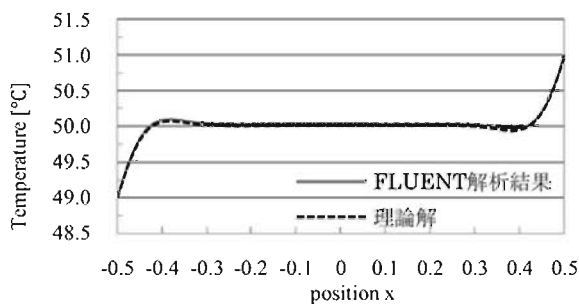


図6 $z=0$ における温度分布

4. オートクレーブ内自然対流 3次元数値解析

4.1 モデルについて

流れ場のモデルを図7に示す。オートクレーブのバツフルを中心とした上下3m(計6m)のモデルで、実際のオートクレーブの高さは約14mである。これはバツフルの影響を重点的に調べるためとメッシュ数節約のためである。解析では、下方の断面は壁面、上方の断面はそれより上方に流れ場が続いていると仮定した境界条件を課している。バツフルより下方2mは空洞で、それより下1mは水晶原石が敷き詰められていると仮定した多孔質媒体で近似する。4.3節で説明する。育成枠は図1で示す形状で作成した。ただし、メッシュの精度を良くするため、実際の厚さは1mmであるが5mmとしている。育成枠に対するバツフルの穴の位置が流動に影響を与える可能性が示唆されたため2つのモデルを用意した。図8に示す。

4.2 境界条件と物性値

図7に壁面の設定温度を示す。物性値については2.2節の通りである。基準密度を 988.0kg/m^3 (水が 323K (50°C)の時の密度)とする。モデル上方の断面に

は、速度条件は課さず、圧力を基準圧として、0Pa とした。また、この断面における温度は計算過程において得られる下降流に対して 300K (27°C) を課してある。

4.3 多孔質媒体について

多孔質媒体のモデル化は、標準的な流体の流れ方程式に、流動抵抗を表現する運動量ソース項を追加することによって行われる。ソース項は粘性損失と慣性損失で構成される。水晶原石が満たされている状態での粘性抵抗係数が未知であるため、今回は粘性抵抗係数 $\gamma=1000[1/m^2]$ とする。ほとんど抵抗のない $\gamma=0.5[1/m^2]$ のものと比較する。空隙率は未知であるため、今回は 0.5 としている。慣性抵抗はオートクレーブ内の流速が小さいため今回は無視している。

4.4 解析方法

計算は非定常で行うが初期値を決定するために、非定常計算の常套手段、すなわち、定常計算を行いそのあと非定常計算に切り替えて解析を行う。大きなタイムステップから徐々に小さなタイムステップに変えていくことで計算・時間コストを少なくする方法を用いる。

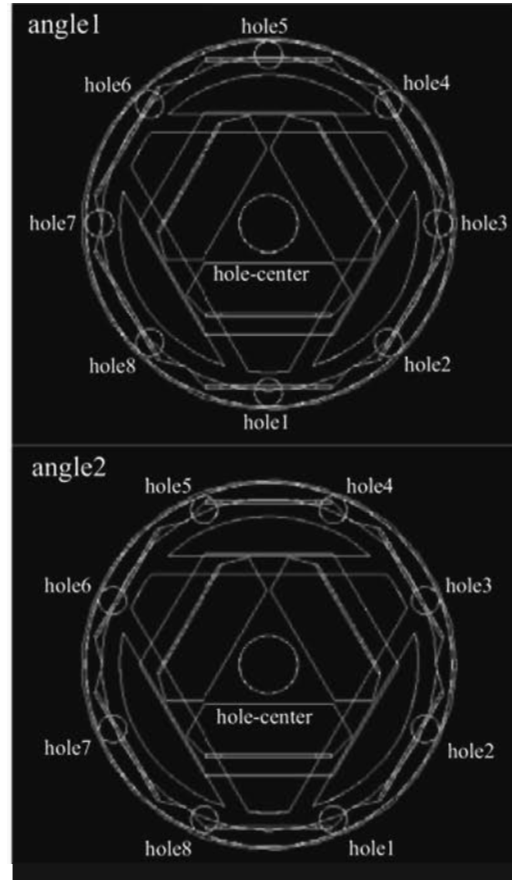


図8 2つのモデル

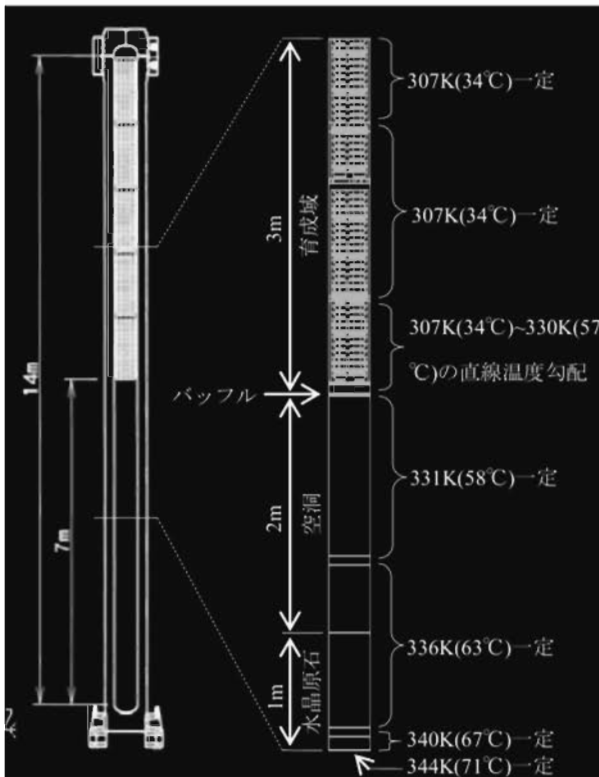


図7 流れ場のモデルと壁面の温度設定

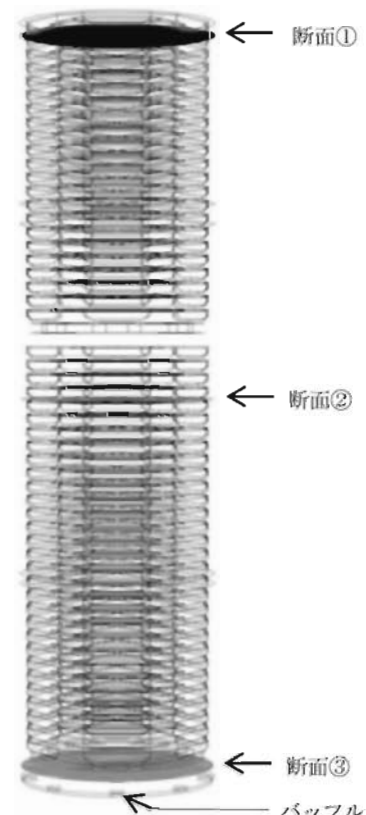


図9 参照水平断面の位置

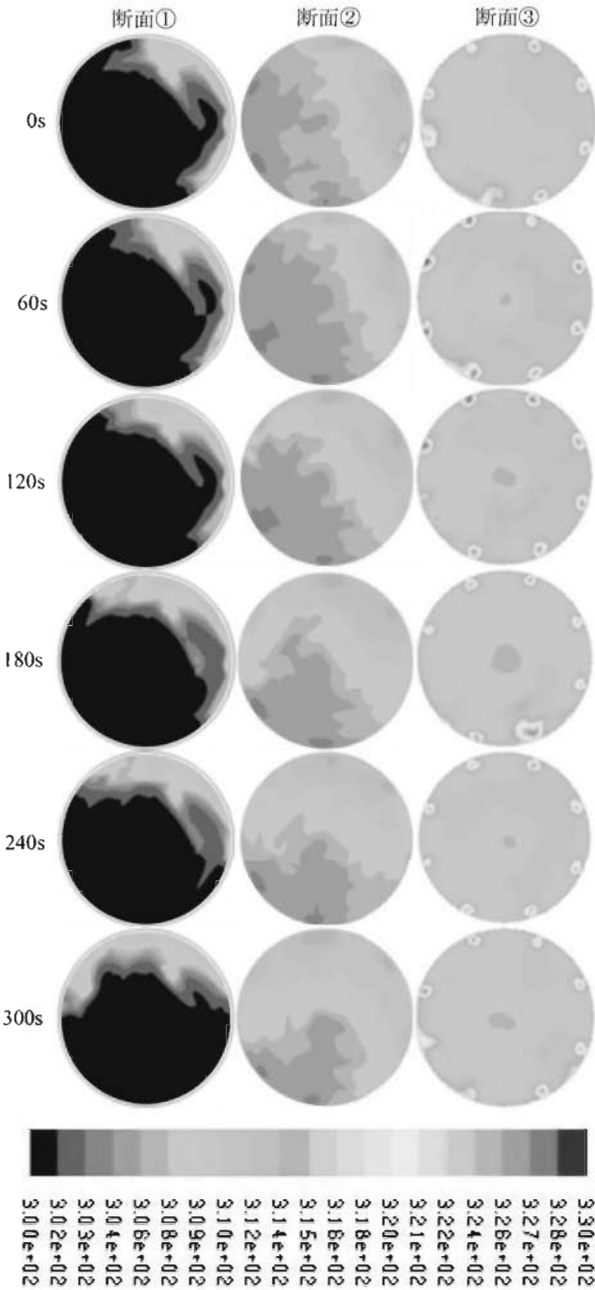


図 10 angle2, $\gamma=1000$ における
時間ごとの断面①, ②, ③の温度分布

4.5 解析結果および考察

図 9 に参照水平断面の位置, 図 10 に angle2, $\gamma=1000$ における時間ごとの断面①, ②, ③の温度分布を示す. この時間は解が収束したと判断した時点をもとに 0 秒と おいて, そこからの時間経過となる. 断面③より, 各 時間経過のほとんどのバツフル外周付近の温度が高 く, 中心の温度が低くなっている. 条件・時間にかか わらずバツフルの中心は下降流, 外周は上昇流となる. また, 時間経過とともに上昇流が小さくなり, 温度が

低くなるが, 再び上昇流が大きくなり, 温度が上昇す る箇所が見られる. これより, バツフルの中心が下降 流, 外周が上昇流という形が, オートクレーブ内では 安定した形であるといえる. 断面②より, 温度分布が 軸対象となっていないことが分かる. 温度が高い部分 と低い部分に分かれており, 大きな上昇流の塊と大き な下降流の塊で2分化していると判断できる. 断面①, ②より, 時間とともに温度の高い部分が時計まわり, もしくは反時計回りに移動していることが分かる. 断 面①, ②, ③のほとんどの断面の中心付近は, 周囲よ り温度が低い. 育成枠の中心は下降流である. ここでは angle1, angle2 と各粘性抵抗係数 γ による大きな違 いは確認できなかった.

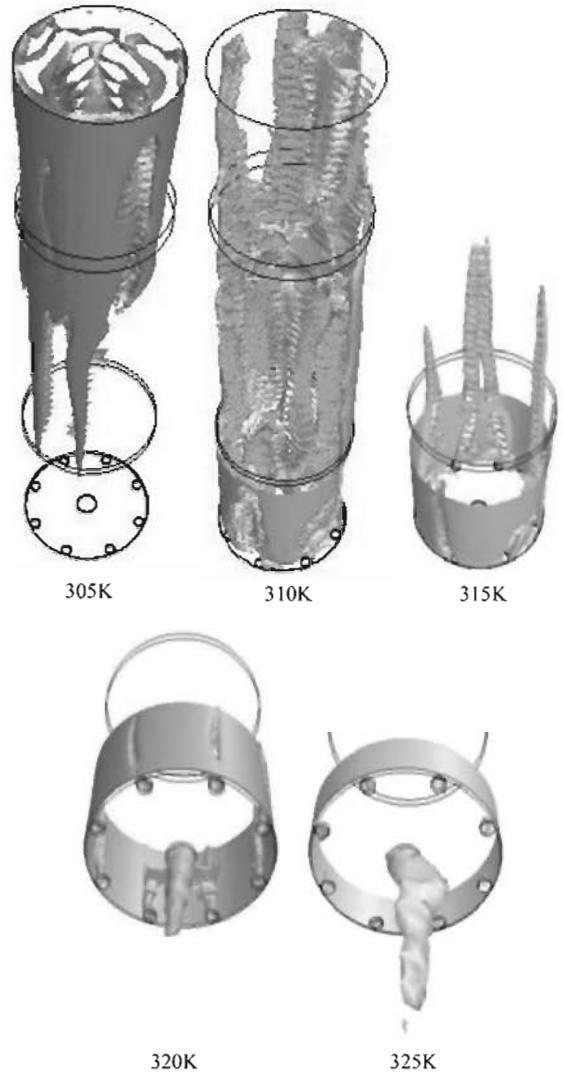


図 11 angle2, $\gamma=1000$, $t=300$ における
各等温度面

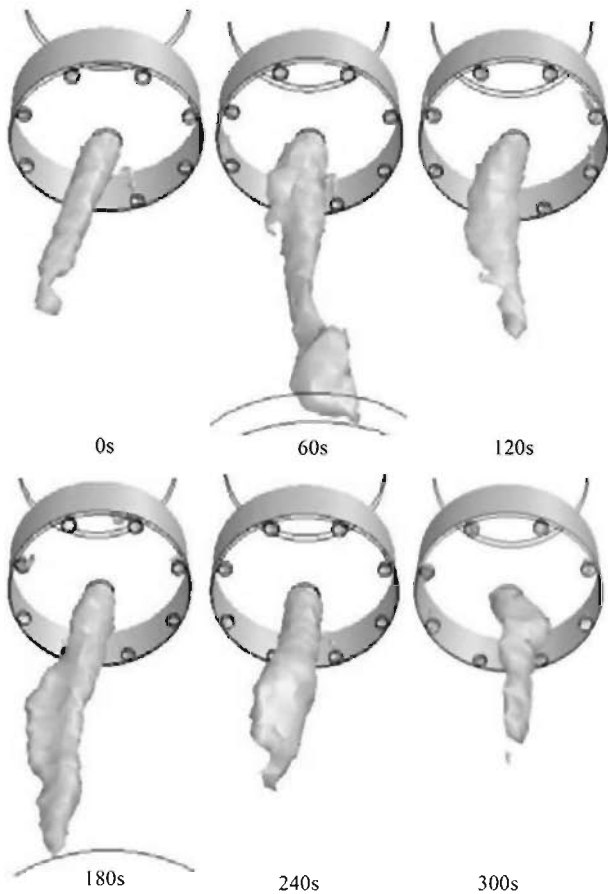


図12 angle2, $\gamma=1000$, における
325K 等温度面の時間変化

図11に angle2, $\gamma=1000$, $t=300$ における各等温度面を示す。図12に angle2, $\gamma=1000$, における325K等温度面の時間変化を示す。305K~315Kはバブルより上方, 320K, 325Kはバブルより下方の図となっている。これらより, 3次元での温度分布の軸対称性が見られないことが分かる。バブルより上方の各等温度面は時間経過による大きな変化は見られず安定していた。バブルより下方の等温度面は時間経過とともに複雑に変化する変動流れになっていると考えられる。バブルより下方2mは空洞になっており, 自由度があるためと考えられる。305K, 310Kの等温度面図より, バブルより上方では下降流の塊と上昇流の塊が存在していることが分かる。320K, 325Kの等温度面図より, バブルの中心が下降流, 外周が上昇流であることがわかる。バブルより上方の等温度面より上昇流は壁面に沿うような形となっていることが分かる。各 angle, 各抵抗粘性係数 γ による大きな違いは見られなかった。

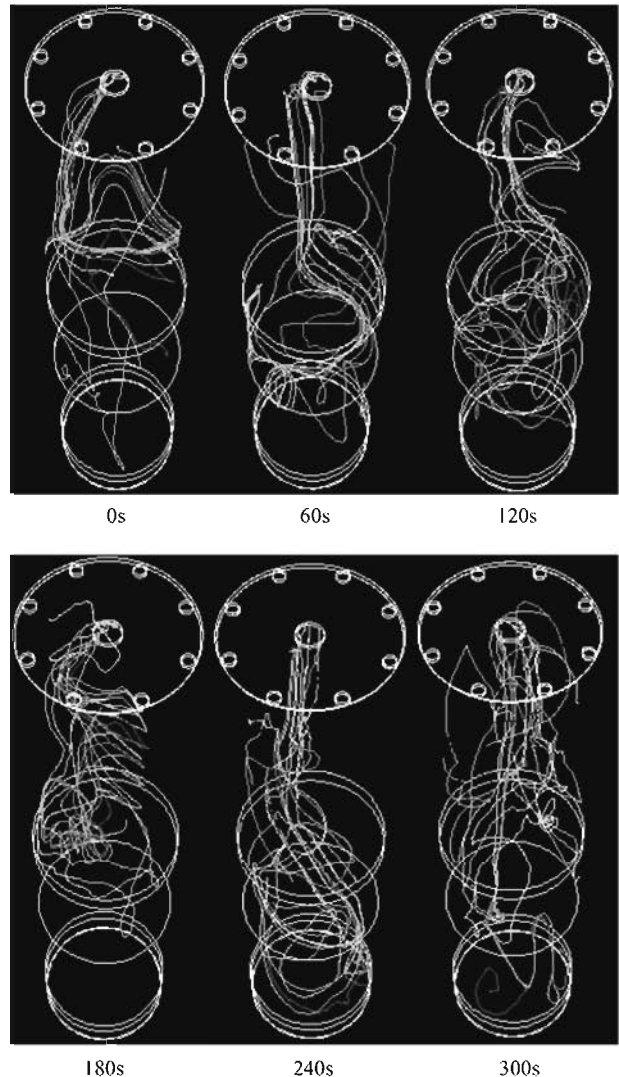


図13 angle2, $\gamma=1000$ における
バブルより下方の流線の時間変化

図13に angle2, $\gamma=1000$ におけるバブルより下方の流線の時間変化を示す。バブル中心の穴から全ての流線がバブルより下方に流れている。これよりバブル中心の穴は下降流であることが分かる。また, バブルのより下方の流れが時間により大きく変化していることが分かる。軸対象流れとはならず, 旋回流を伴う変動流れとなっている。2mの空洞が流れの変動性に関係していると考えられる。粘性抵抗係数 γ の違いを見たかったが, どちらにも水晶原石上面を通過したり, 上面付近でUターンしている流線があるためはっきりした違いは見られない。各 angle による大きな違いは見られなかった。

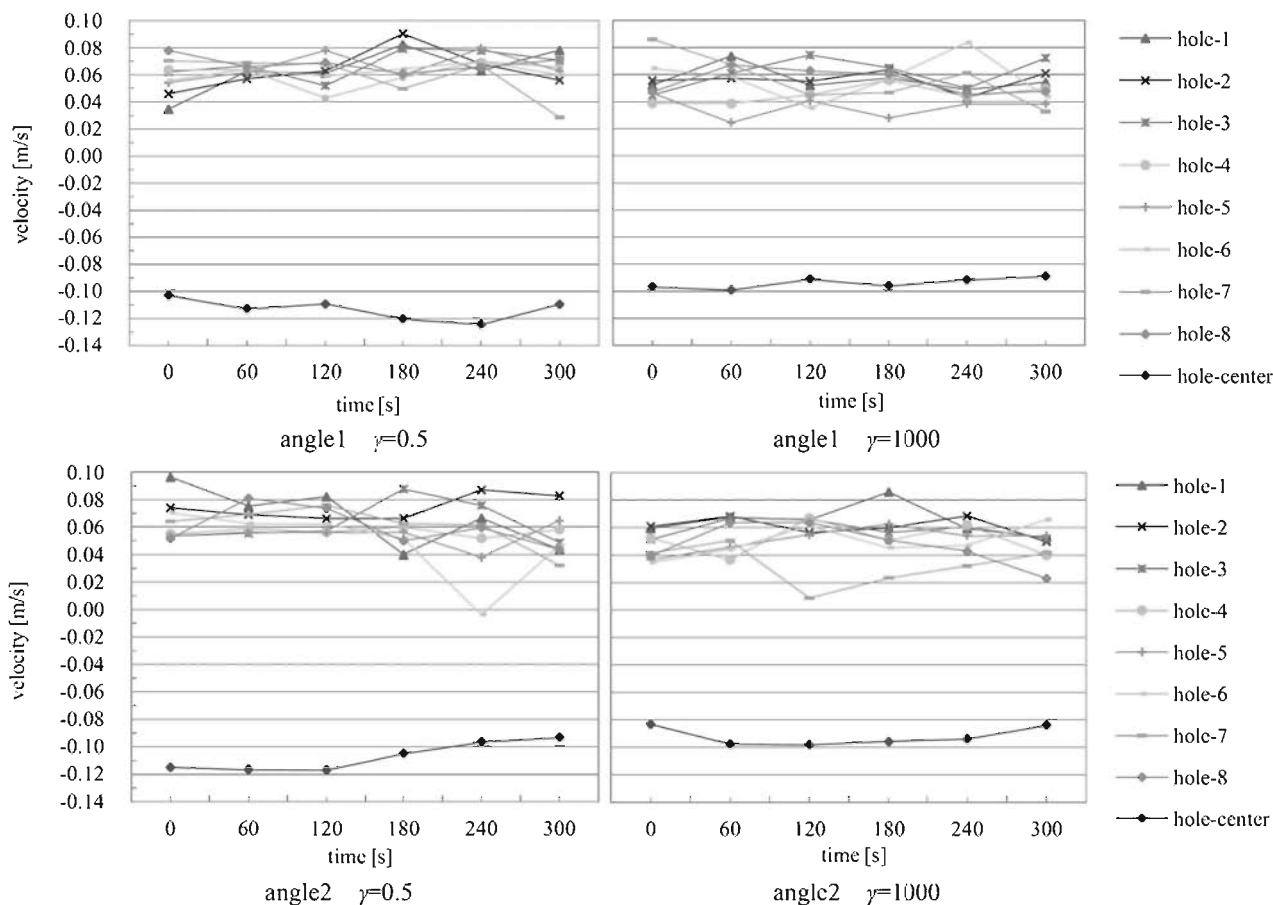


図 14 各条件におけるバツフル各穴の平均流速の時間

表 2 バツフル各穴の平均流速の時間平均

	angle1 $\alpha=0.5$	angle1 $\alpha=1000$	angle2 $\alpha=0.5$	angle2 $\alpha=1000$
hole-1	0.064	0.057	0.067	0.065
hole-2	0.063	0.056	0.074	0.060
hole-3	0.068	0.061	0.063	0.059
hole-4	0.061	0.045	0.057	0.051
hole-5	0.066	0.036	0.054	0.051
hole-6	0.062	0.057	0.048	0.050
hole-7	0.059	0.057	0.061	0.033
hole-8	0.068	0.055	0.060	0.047
hole-center	-0.113	-0.094	-0.107	-0.092

図 14 に各条件での時間ごとのバツフル各穴の平均流速、表 2 にバツフル各穴の平均流速の時間平均を示す。表 2 では、上昇流を正、下降流を負として表示している。図 14 より、時間ごとに流速が変動していることが分かる。バツフルより下方において時間ごとに流動の変化があるためその影響と考えられる。表 2 より、 $\gamma=0.5$ の時より $\gamma=1000$ の時の方が流速は小さく、流量が少ないといえる。これは、バツフルより下方に抵抗となる物質がある場合、すなわち抵抗が大きい場合、バツフルを通過する流量は少なくなることを示している。

第5章 結言

今後の課題

本研究では、オートクレーブ内自然対流の数値解析を FLUENT により行い、流動を様々な角度から考察し、以下の知見を得た。

- (1) FLUENT における数値解析によって自然対流を十分に表現できた。
- (2) 今回研究対象となったバップルにおいて、時間経過にかかわらず、バップルの外周の穴は上昇流、中心の穴は下降流であることがわかった。
- (3) バップルより下方2mは空洞のため時間経過によって流動が大きく変化することが分かった。
- (4) 育成枠に対するバップルの角度、穴の位置の違いによる流れへの明確な影響は無かった。
- (5) オートクレーブ内の下方に水晶原石が満たされていると、空洞の時よりバップルを通過する流量が少なくなることが分かった。今回の解析モデルでは多孔質媒体の粘性抵抗係数 α が約 $1000[1/m^2]$ 大きくなると、バップルの穴を通過する流体の速度は約 $1cm/s$ 小さくなった。
- (6) バップルより上方は、今回の解析モデルでは、上昇流と下降流が交互にすれ違うのではなく、大きな上昇流と下降流に2分化されることが分かった。
- (7) 育成枠の板と板の間にその幅スケールの渦が発生することがわかった。

本解析では常圧、 $100^{\circ}C$ 以下の水を用いており、実際は $300^{\circ}C$ 以上、 1200 気圧という高温高压のためその条件の違いがどれほど影響するのかが問題である。また、実際は水晶が水溶液に溶け込み、その濃度も関係する二重拡散問題であるため、それを考慮した解析が必要である。今回は解析コスト削減、CPU性能の制限のため、メッシュ数を少なくする必要があり、実際の装置全体を含めた解析ができなかった。オートクレーブ内は軸対象や面対象の流動や温度場となる可能性は低いいため、面対象の境界条件を課していないモデルでの解析がよい結果を得られると考えられる。逆をいえば、全体を含めなかったため対称な温度場や流動が現れなかった可能性がある。またバップル上下での微妙な圧力バランスが考えられるため、バップル上下を含めた方がよい。全体を含めた解析をする必要がある。

参考文献

- 1) 永井・浅原, 日本結晶成長学会誌, 16-2, (1989), 172.
- 2) 緒方 正文, 有限要素法によるオートクレーブ内自然対流の3次元数値解析, 平成13年度宮崎大学修士論文.
- 3) Batchelor, G.K. (1954), Heat transfer by free convection across a closed cavity between vertical boundaries at different temperatures, Quart. J. Applied Math. 12, pp. 209 - 233.