

石英玻璃合成炉的 CFD 模拟

CFD Simulation of the Fused Silica Glass Synthesis Furnace

王培勇^{1,2} 冯韬¹

1, 厦门大学航空系; 2, Vanderbilt University, Department of Mechanical Engineering

摘要: 合成石英玻璃沉积工艺采用化学气相沉积法 (CVD) 法在合成炉内实现; 合成炉的工作过程涉及到复杂的物理化学过程如湍流, 燃烧, 辐射, 两相流等等。本文对某公司的实际合成设备和工艺进行了详细精确的 CFD 数值模拟。模拟结果输出包含石英玻璃的表面温度和根离子浓度。模拟的温度分布和测量的光学均匀性一致, 表明温度是影响合成石英玻璃光学均匀性的重要指数之一。

关键词: 合成石英玻璃, 光学均匀性, CFD, CVD, STAR-CD

Abstract: The synthesis process of the fused silica glass uses chemical vapor deposition (CVD) method in a furnace. The process involves complicated physical-chemical phenomena such as turbulence, combustion, radiation, two-phase flow and so on. An simulation has carried out for a real furnace and process of a company, The simulation output includes temperature and radical concentration on the fused glass surface. The trend of the fused glass surface temperature is consistent with the measured refraction index showing that the surface temperature is one of the most important parameters influencing the refractive index uniformity.

Key words: Fused Silica Glass, Optical Uniformity, CFD, CVD, STAR-CD

1 背景介绍

合成石英玻璃沉积工艺采用化学气相沉积法 (CVD) 法, 主要过程为: 四氯化硅、氧气和氢气从燃烧器 (图 1) 的不同喷口喷出, 高温下反应生成石英液滴并在石英柱上沉积, 靶在旋转的同时慢慢退车以保持沉积面与燃烧器的距离恒定, 熔融石英微粒玻璃化形成圆柱形石英玻璃砣子 (图 2)。发生的主要反应过程有:



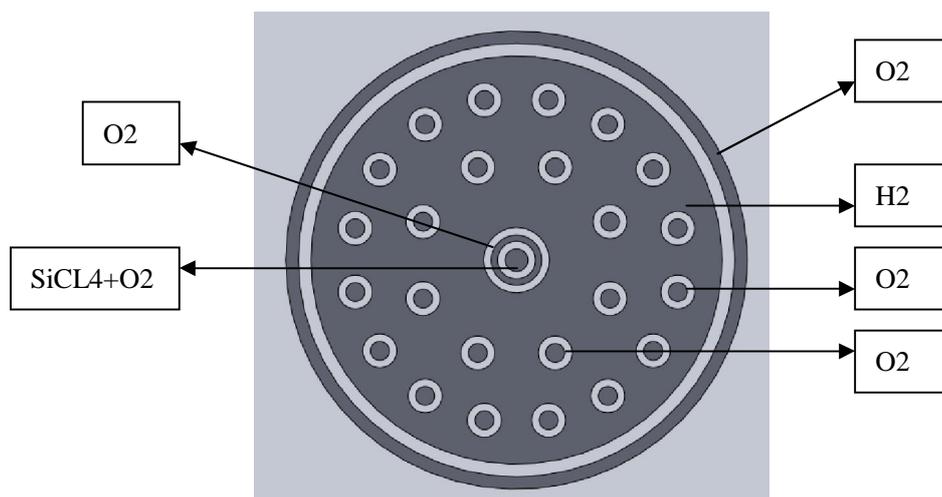


图 1 燃烧器

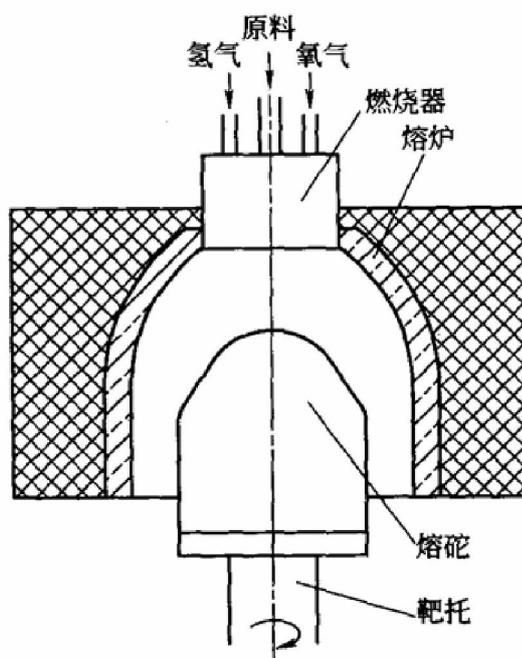


图 2 石英玻璃合成炉

2 网格

由于合成炉几何和边界的对称性，且通过计算论证石英柱的旋转对流场影响非常小（转速非常小，每分钟 5 转），所以我们只需模拟 1 / 4 的几何。这样可以减少计算时间。因为燃烧器喷口附近流场、扩散现象复杂，各物理量梯度很大，且对其模拟精度的高低将决定整个合成炉模拟精度。因此在燃烧区域网格尺寸小，网格密度大，在喷口附近，网格最小。使用不同大小的正方体网格，总网格数在 1 百 50 万左右，其中大部分分布在燃烧区域（图 3）。

燃烧器

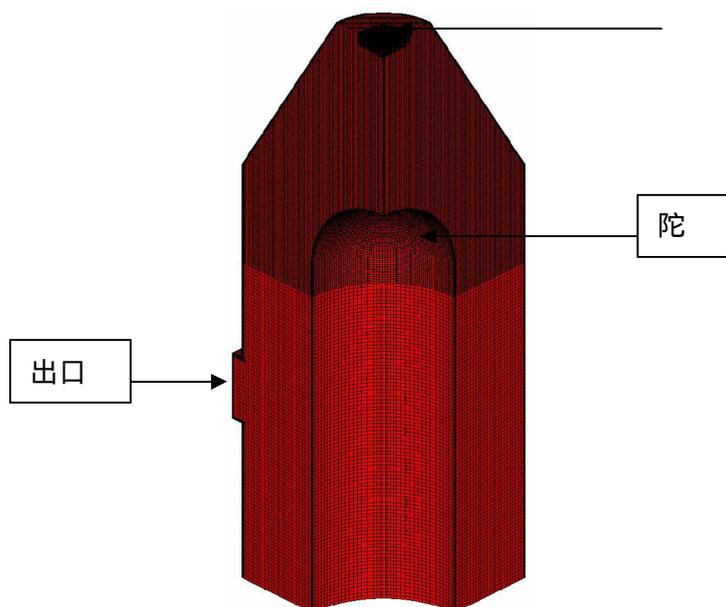


图3 网格

3 物理化学模型

合成炉内为三维稳态湍流反应流，炉内压力为微小负压，所以密度仅为温度的函数。比热是组分的平均值，单组分比热是温度的函数。由于燃料和氧化剂分别为纯 H_2 和纯 O_2 ，火焰温度可以高达 3100K，燃烧产物分解严重；在燃烧模拟中没有包含分解的根离子浓度，但是我们通过调节燃烧产物的比热来补偿强烈的燃烧产物的分解效果。湍流模型采用的是 K- ϵ 低雷诺数双方程模型和 Hybrid 壁面处理方法。热辐射模型为灰体波谱模型和 Discrete ordinate S4 辐射空间模型。燃烧模型选用是标准 EBU 模型。因为目前仅为定性计算，所以采用稳定的快速收敛 SIMPLE 一阶精度求解器。

3.1 湍流强度

计算表明合成炉内是低湍流强度流动，湍流扩散效果小于层流扩散效果（由于燃烧产生的高温使得层流热扩散和质量扩散大大加强），层流扩散效果起的作用比较大。燃烧区湍流黏度 μ_t 和湍流质量扩散系数 D_t 远小于层流黏度 μ_m 和层流质量扩散系数 D_m 。所以与强湍流不一样，不能简单的将 μ_m 和 D_m 看做常数处理。本算例将 μ_m 和 D_m 看做是温度的强函数，采用分子运动学理论计算。由于 H_2 是小分子，在燃烧过程中会有强烈的 Soret effect，所以计算中还考虑了 H_2 的热质量扩散。

3.2 热辐射

合成炉内混合气体包含 O_2 ， H_2 ， N_2 ， H_2O ， HCl 和 SiO_2 。其中 H_2O ， HCl 和 SiO_2 气体是辐射气体。由于 SiO_2 气体存在的时间和空间较短，较小，所以辐射效果可以忽略。 HCl 气体在局部小空间浓度较大，但是大部分空间浓度非常小，且由于 HCl 气体的辐射系数数据不足，所以目前的定性分析中仅考虑 H_2O 的辐射。由于是 H_2/O_2 火焰，燃烧后 H_2O 的含量接近 100% 且炉内温度很高， H_2O 的辐射效果非常强。 H_2O 的辐射是离散的波谱带，但是通常的燃烧计算将其作为灰体处理，其灰体辐射系数是分压和温度的函数且依赖于辐射空间几何尺寸。本文使用 Hottel chart (出自 Phil Smith) 的 H_2O 辐射系数和高温下宽波段光谱指数计算值 (出自 Coppalle and Vervisch) 进行拟合得到。

如果温度低于 1200K, 使用 PJS 模型; 如果温度高于 2100K, 使用 C & V 模型; 如果温度在这个区间内, 则在 Hottel char 中等于 1200K 的点和 C & V 中等于 2100K 的点之间线性插值, 这种方法虽然计算速度慢一些, 但是仍然比 Mbdak 模型 (适用范围为 300-3000K) 计算快, 并且准确度相当。

3.3 燃烧模型

本算例的 EBU 燃烧反应有:



燃烧生成的气态 SiO_2 很快就会冷凝为液滴。因为合成炉内 SiO_2 量相对较少, 所以我们将液态 SiO_2 也当着气态处理对计算精度影响不大。这样反应炉内全部为气态, 避免了引入多相流模型, 从而简化了计算。同时 SiO_2 的化学焓按液态物理处理以正确计算炉内温度。

4 计算结果和讨论

图 4 图 7 分别显示了某工况条件下炉内的温度和组分浓度分布。

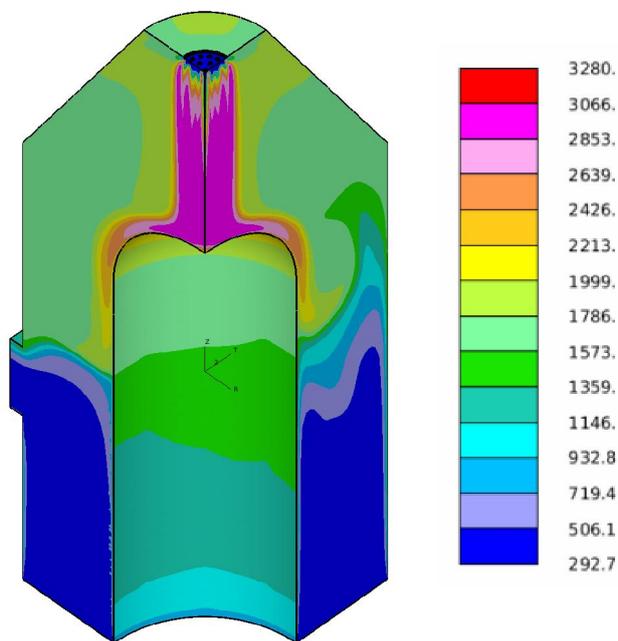


图 4 温度分布图

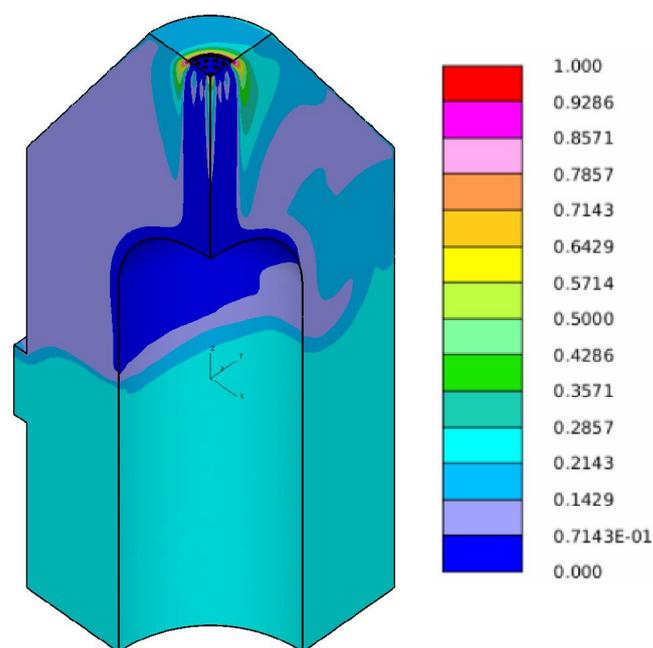


图 5 O₂质量分布图

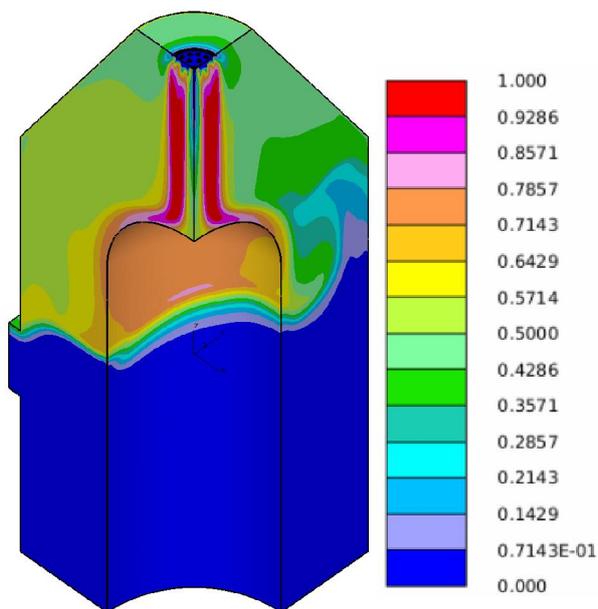


图 6 H₂O质量分数

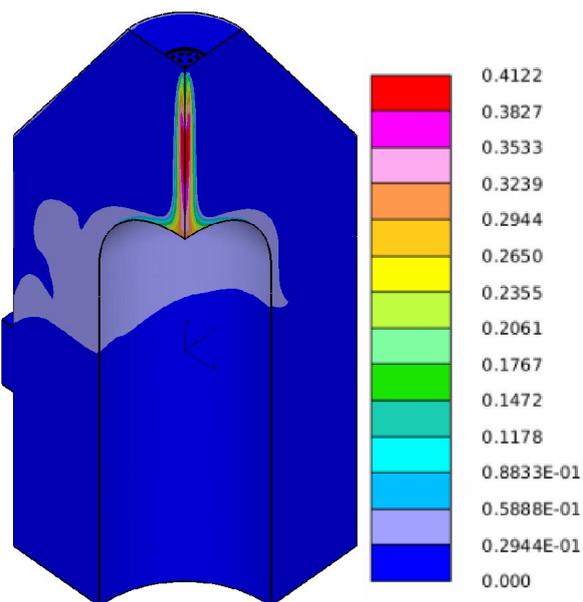


图 7 HCL质量分数

图 12显示了三工况料头半球面上的温度（90度平均）随半径（柱坐标，图 8）变化的趋势；图 9图 11显示了对应三种工况的玻璃产品折射率测量图。从图中可看出工况 1和工况 2的折射率都是低高低的趋势，而工况 3是中间高边上低的趋势，这与计算的温度曲线一致。

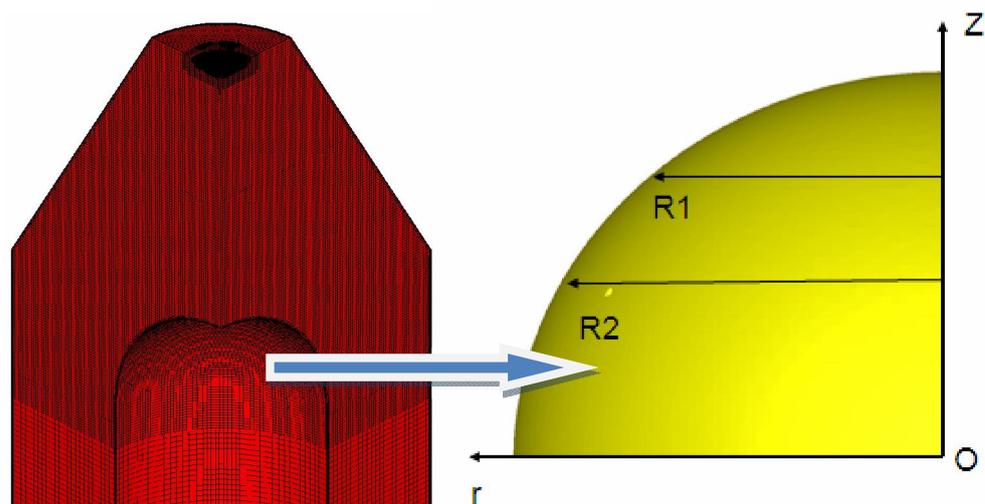


图 8 柱坐标定义

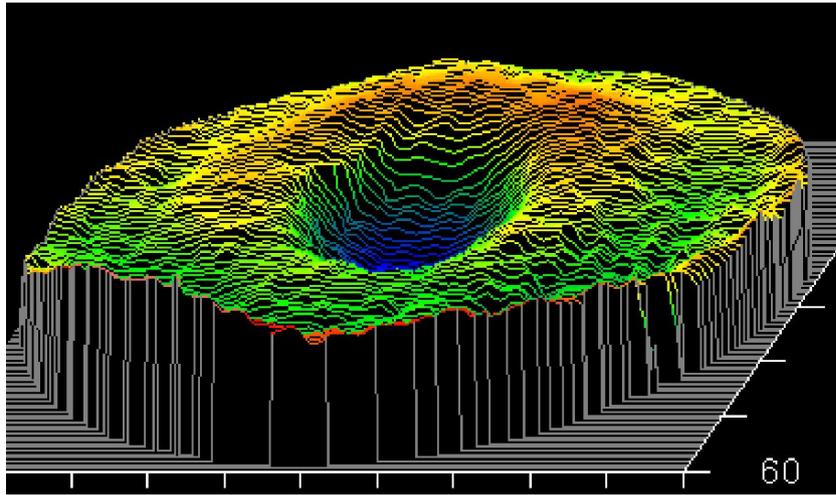


图 9 工况 1 折射率测量图

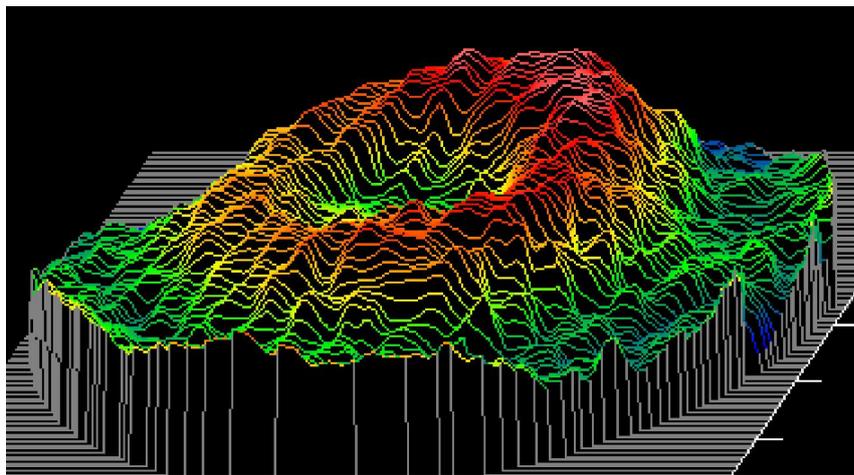


图 10 工况 2 折射率测量图

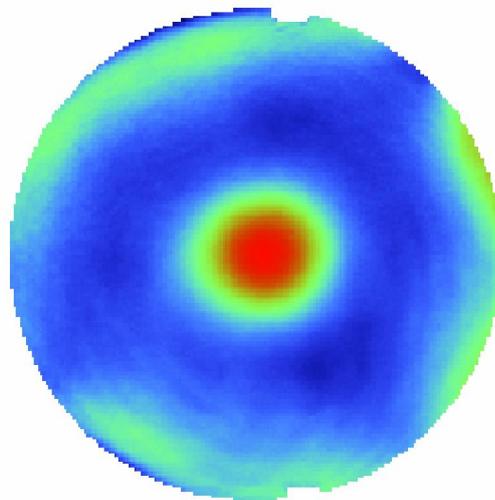


图 11 工况 3 折射率测量图

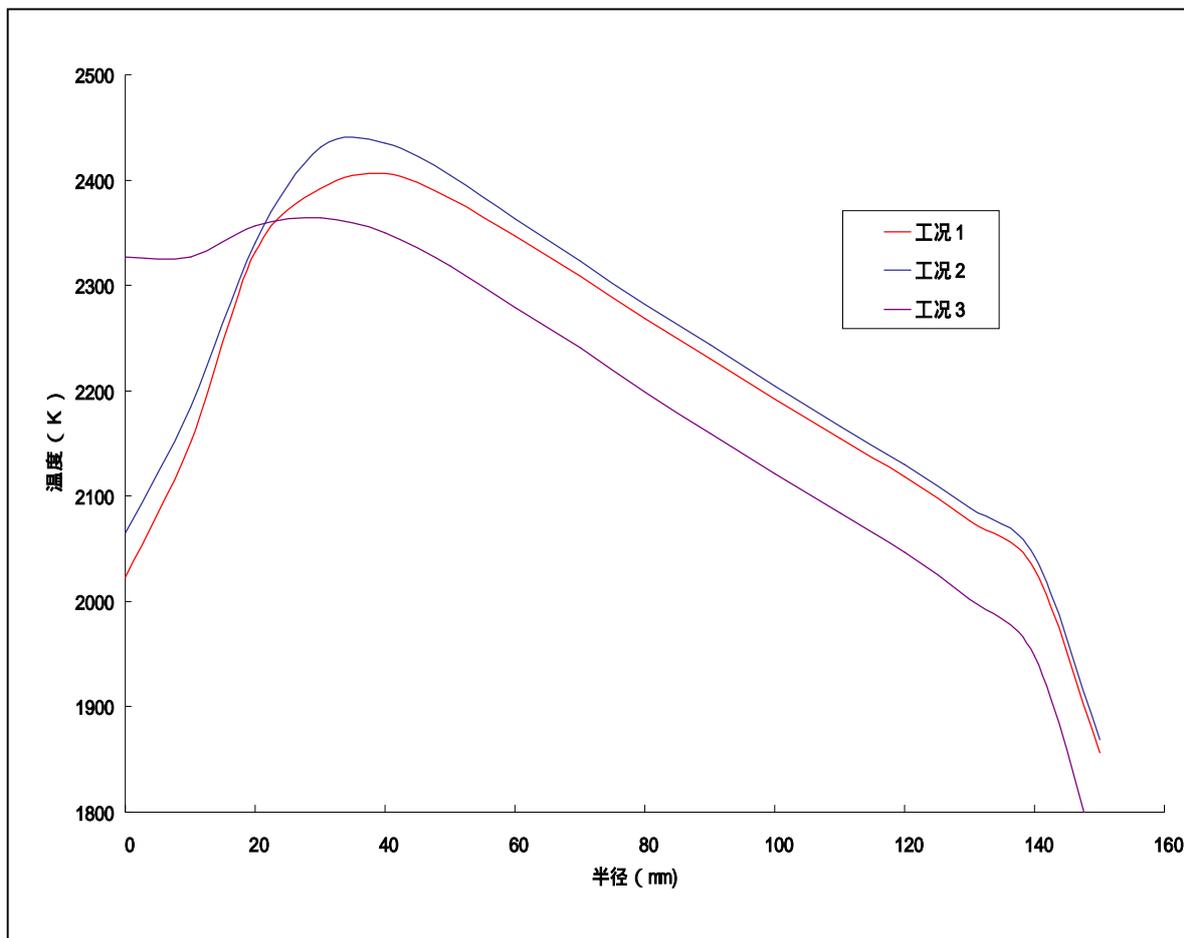


图 12 三种工况下料头球面温度变化图

在 CFD 计算中，为了计算稳定和快速，我们没有考虑 H_2O 和 HCl 的分解。实际上因为料头的温度高，料头表面 H_2O 会部分分解为 H_2 , O_2 , H , OH ; HCl 会部分分解为 H 和 Cl (CFD 温度计算中，通过比热调节已经考虑了分解对温度的影响)。因为溶解在液体 SiO_2 中的 OH 和 Cl 根离子浓度会影响其密度和折射率 [1,2], H_2 浓度会影响其对紫外激光的抗破坏力。所以他们的浓度也很重要。根据 CFD 输出的玻璃表面温度和气体组分，我们使用 CHEMKIN 程序计算了料头表面气相的离子浓度。图 12-图 15 分别显示了石英玻璃表面的 OH , Cl , H_2 和 H 浓度分布。

计算 OH 浓度 (图 13) 和实验结果比较：1, 计算结果工况 1 和工况 2 都是很明显的低-高-低的变化，与实验吻合。工况 3 计算结果则是中间出现 OH 平台。这也与温度曲线吻合。2, 计算结果工况 2 和工况 1 比较，低-高-低的趋势要强，而实验结果也是这样。3, 不过 OH 是降低折射率的， OH 趋势应该和折射率相反，这就造成了矛盾，具体的原因还在调查当中。

计算 Cl 浓度 (图 14) 和实验结果比较：1, 计算结果工况 1 和工况 2 都是很明显的低-高-低的

变化，与实验吻合。工况 3 计算结果则是单调减小，与实验值比较不太清楚（因为无法确认红色区域内是不是单调减小）。2, 计算结果工况 2 和工况 1 比较，低-高-低的趋势要弱，与实验结果相反。这说明 Q_L 对折射率的影响与 Q_H 相反，这也与文献一致。3, Q_L 是升高折射率的， Q_L 趋势应该和折射率一致。

计算 H_2 浓度（表面气相）（图 15）和实验结果比较：1, 3 个工况的计算 H_2 浓度都是低-高-低的趋势。与实验结果不一致。说明 H_2 浓度不是引起折射率不均匀的因素，这与文献报道结果一致。

计算 H 浓度（表面气相）（图 16）和实验结果比较：1, 3 个工况的计算 H 浓度都是低-高-低的趋势。与实验结果不一致。说明 H 浓度不是引起折射率不均匀的因素，这与文献报道结果一致。

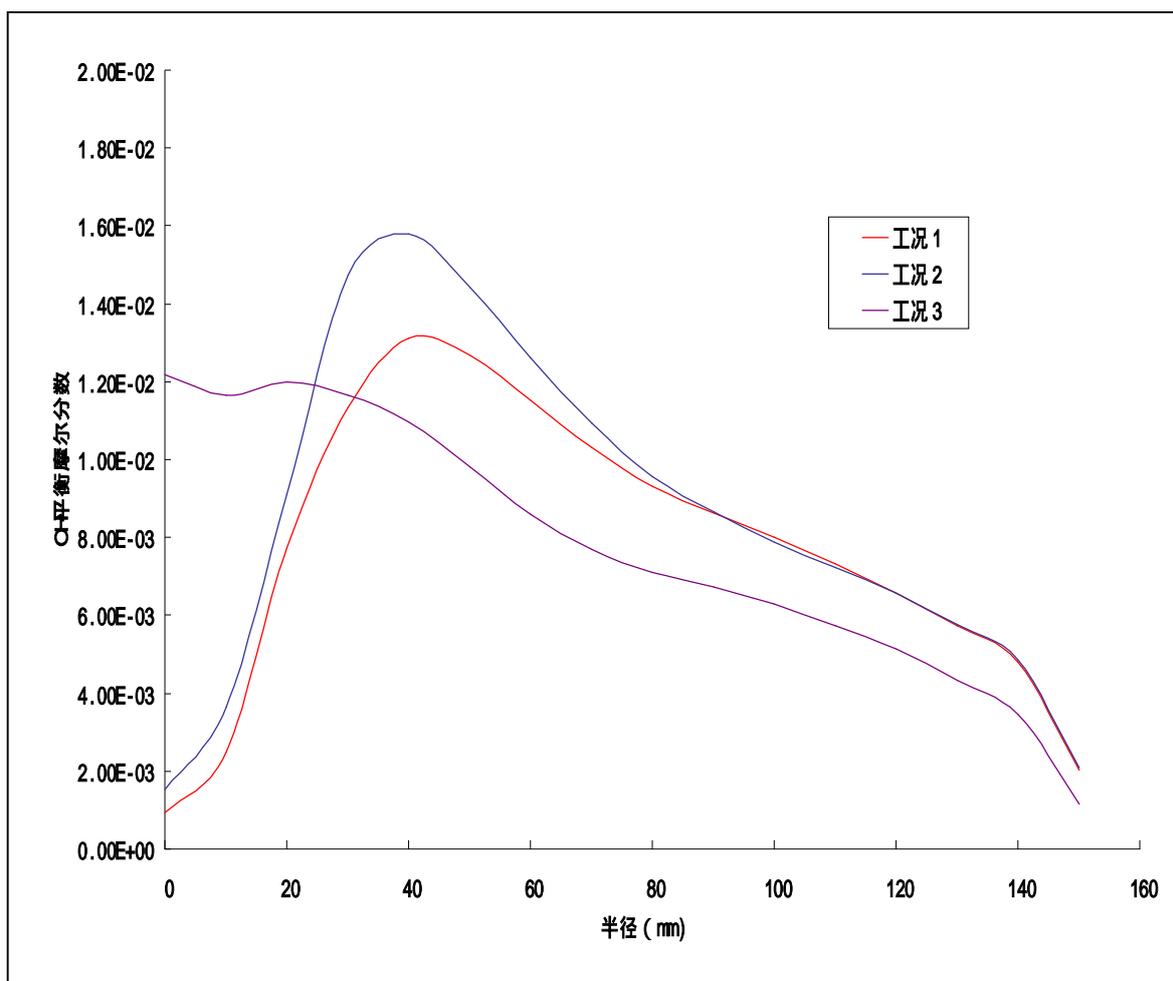


图 13 三种工况下料头球面 Q_H 平衡摩尔分数变化图

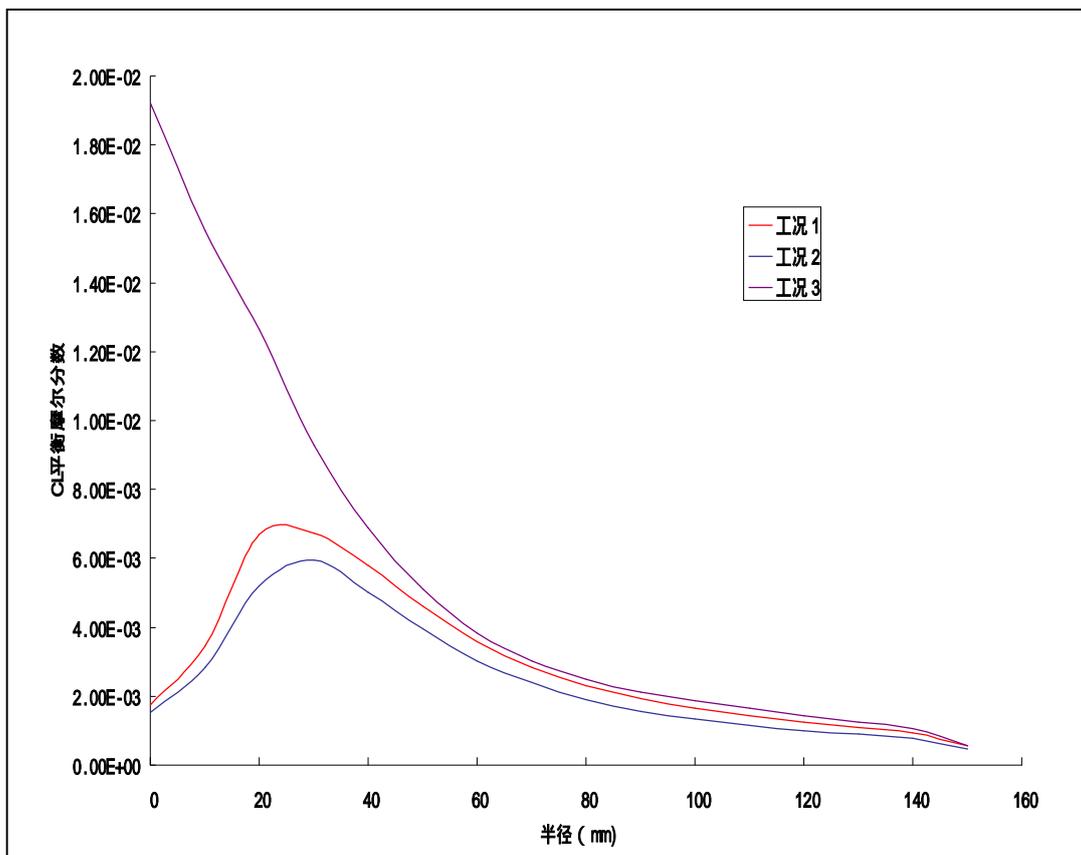


图 14 三种工况下料头球面 Cl平衡摩尔分数变化图

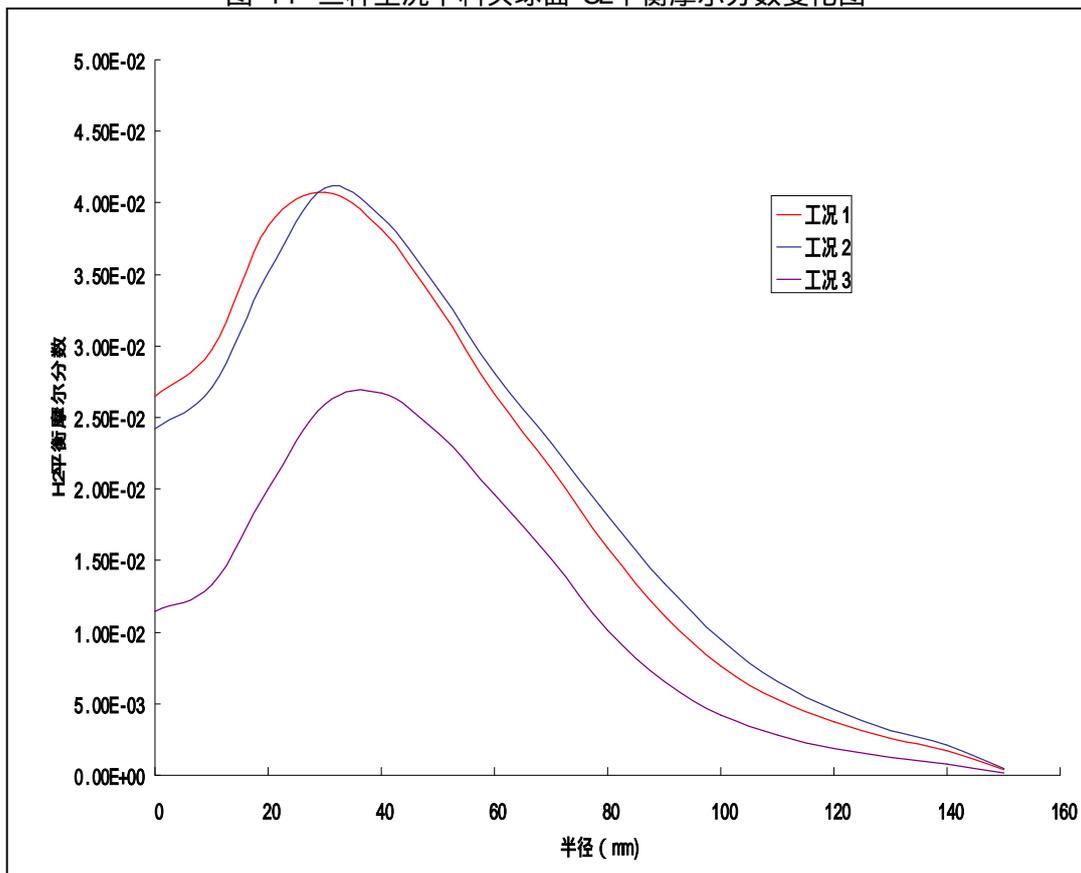


图 15 三种工况下料头球面 H2平衡摩尔分数变化图

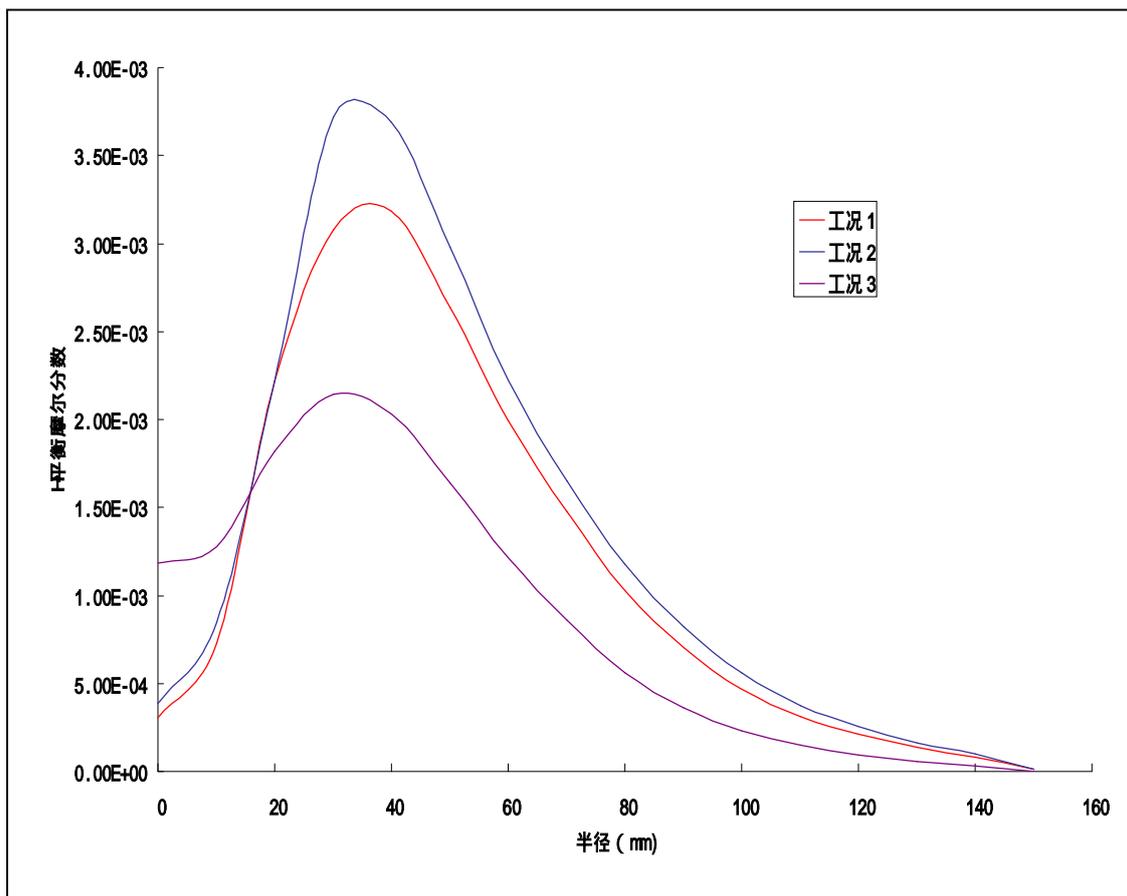


图 16 三种工况下料头球面 H平衡摩尔分数变化图

5 结论

1. 计算结果的温度分布和 CH 分布趋势一致。

2. 计算结果的温度, CH 分布与实验结果一致, 即工况 1 和工况 2 都是低-高-低趋势, 而且工况 2 趋势较强; 工况 3 则是中间有个平台。

3. 计算结果的 H , H_2 分布与实验结果不一致, 说明它们对折射率的影响不大, 这也与文献报道一致。

4. 计算结果的 CL 分布工况 1 和工况 2 都是低-高-低的趋势, 这与实验结果一致。不过工况 1 趋势较工况 2 强, 这与实验结果和 CH 趋势相反, 说明 CL 对折射率的影响和 CH 相反, 这与文献报道一致。工况 3 的计算结果是单调减少, 和实验值比较则不确定, 需要更好地解析中间红色区域的实验结果。

5. 总的来说, 温度和 CH 的计算结果与实验值相符, 是我们需要继续跟踪的参数。 H 和 H_2 与实验值不符, 不需要跟踪。 CL 可能需要跟踪。

6 参考文献

- [1] U. Haken, O. Hurbach, S. Ortner, H. Fabian; (2000) Refractive Index of Silica Glass: Influence of Fictive Temperature, *Journal of Non-Crystalline Solids* 265, 9-18
- [2] D.R. Sempolinski, T.P. Seward, C. Smith, N. Borrelli, C. Rosplock; (1996) Effects of Glass Forming Conditions on the KrF-excimer-laser-induced Optical Damage in Synthetic Fused Silica, *Journal of Non-Crystalline Solids* 203, 69-77