

# 基于 CFD 的 CVD 布气装置模拟与优化设计

王 毅, 杨晓辉, 白龙腾  
(西安航天动力研究所, 陕西 西安 710100)

**摘 要:** 采用流体力学有限元模拟方法, 对化学气相沉积(CVD)设备系统内流场进行模拟分析, 得到平板布气装置中孔径尺寸、孔径分布与预制体局部流场之间的关系, 由此优化设计了布气装置, 提高了 CVD 设备布气的均匀性和稳定性。

**关键词:** CFD; 布气装置; CVD

**中图分类号:** V258+.3-34 **文献标识码:** A **文章编号:** 1672-9374 (2014) 03-0046-06

## Optimization design of gas distributor for CVD reactor by CFD simulation

WANG Yi, YANG Xiao-hui, BAI Long-teng  
(Xi'an Aerospace Propulsion Institute, Xi'an 710100, China)

**Abstract:** The simulation analysis on flow field in the CVD (chemical vapor deposition) reaction chamber was performed with computational fluid dynamics (CFD) finite element simulation method. The relationship of the pore size and pore distribution of the gas distributor with local flow field in the prefabricated body was obtained, by which the design of the gas distributor was optimized, and the uniformity and stability of the flow field in the reactor were improved.

**Keywords:** CFD; gas distributor; CVD

## 0 引言

化学气相沉积 (chemical vapor deposition, CVD) 工艺能够在较低温度下完成材料制备, 并能实现材料在微观尺度上按照设定的化学成分计量比进行生长, 广泛应用于功能材料的制备领域。采用 CVD 工艺制备的 SiC 陶瓷和 C/SiC 复合材料在高温下强度和韧性高、耐腐蚀性好、密度低, 是高温结构材料之一, 在航空航天领域应用

前景广阔<sup>[1-6]</sup>。

CVD 工艺参数有: 气流场、温度场、压力、流速、预制体形状、预制体摆放位置等, 其中 CVD 反应器内部流场的均匀性对 CVD 沉积产物表面质量和最终形态影响较大。本文利用 CFD 技术模拟计算布气装置对 CVD 反应器内流场的影响, 根据模拟计算结果优化设计用于 CVD 设备的布气装置。

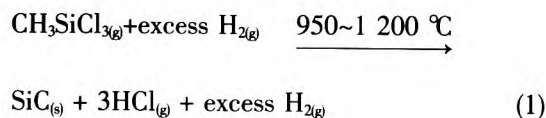
收稿日期: 2014-01-21; 修回日期: 2014-02-28

作者简介: 王毅 (1981—), 男, 博士, 研究领域为陶瓷基复合材料制备技术

## 1 建立布气系统气流分布数学模型

### 1.1 建立模型

CVD 工艺过程化学、物理变化比较复杂,基本化学反应过程是载气 ( $H_2$ ) 通过“鼓泡”的方式将液态先驱体一甲基三氯硅烷 ( $CH_3SiCl_3$ , MTS), 带入到反应器内, 同时通入平衡气体 Ar, 在一定的工艺条件下 MTS 在预制体表面发生(1)式所示的化学反应, 由此在预制体表面沉积生成 SiC 层。



实际应用的 CVD 反应器的反应过程和流体环境比较复杂, 为了确定布气系统气流分布数学模型的边界条件, 必须对真实的 CVD 反应器进行理想化处理, 理想的 CVD 反应器应具备以下条件: 1) 反应物气体边界层均匀, 各处沉积速度和沉积厚度一致; 2) 不存在回流, 控制气体在反应器内的停留时间, 减少非理想产物的形成; 3) 气流在预制体表面形成层流, 气体在预制体孔隙网络内扩散传质<sup>[3, 7-10]</sup>。

反应器内部的气体流动状态比较复杂, 属于典型的层流现象, 其中还包括多种气体混合、反应气体和生成气体的扩散与对流、相应的物理化学反应等现象。建模时需要做以下假设: 1) 反应器中的混合气体看作是一种理想气体; 2) 气流流动为定常不可压缩流, 即 CVD 过程为稳态过程, 气流状态与时间无关; 3) 忽略化学反应、浓度变化以及浓度变化所引起的自然对流和重力变化; 4) 不考虑气体在构件内部的扩散问题, 即气体仅在反应器中流动, 把构件假定成没有气体通过的实体; 5) 反应器为圆柱型, 在流场中异型构件为轴对称几何形状, 考虑到计算的准确性和 ANSYS-Fluent 软件的适用性, 对模型进行二维简化。根据上述假设, 反应器中二维不可压缩流的连续性方程和运动方程如下<sup>[11-12]</sup>:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (4)$$

式中:  $u$  和  $v$  为混合气体在  $y$  方向上的速度分量;  $p$  为压力;  $\rho$  为混合气体密度;  $\mu$  为混合气体的粘度系数。

### 1.2 网格划分及边界条件的确定

CVD 反应器模型如图 1 所示。反应气体从进气口 (gas inlet) 进入缓冲腔 (buffer chamber), 通过布气板 (gas distributor) 将反应气体均匀地送入沉积区, 在预制体表面 (悬空于腔体内, 未在图中标出) 反应得到涂层, 未反应的气体和反应副产物通过出气孔 (gas outlet) 排出反应器外。



图1 沉积反应器立体模型

Fig. 1 Stereo model of deposition reactor

模型为轴对称形状, 为简化计算, 可计算经过入口-出口截面的流场, 该截面可反映出模型流场分布情况。对反应室内计算区域划分非结构网格, 并定义边界。对流场内结构参数梯度变化较大的地方如布气板附近、沉积基体附近等区域, 利用网格自适应功能进行局部加密。其截面网格划分如图 2 所示。

在 CVD 反应器流场模型中, 主要流动介质是进入反应器的混合气体以及反应生成的气体产物。控制方程的边界条件为: 1) 入口处的径向速度为 0 m/s, 根据管径、流量估算值, 设定其轴向速度的平均值为 1 m/s; 2) 定义反应器器壁、构件边界及其内部挡板为无滑移边界条件, 各方向

流速分量值均为 0 m/s; 3) 出口边界取相对压强为 0 Pa, 相对于系统出口处的压强为 2.5 kPa (取实际 CVD 反应器出口处的压力值)。反应器内部混合气体可近似看成是  $H_2$ , Ar, MTS 以及 HCl 混合成的理想气体, 其混合气体的粘度和密度值分别为  $0.5079 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$  和  $23.82 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ 。在等温 CVD 过程中, 针对 MTS- $H_2$  (沉积 SiC 陶瓷材料) 体系, 反应器<sup>[13-16]</sup>的器壁上温度恒为工艺温度 1 273 K。根据粘度、截面平均速度、特征长度计算反应器内流体雷诺数  $Re$  来判断反应器内流体类型, 计算公式如下:

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \quad (5)$$

式中:  $\rho$  为流体密度;  $v$  为平均流速;  $d$  为管道直径;  $\mu$  为动力粘性系数。结合上述密度、流速及反应器尺寸数据计算可知,  $Re \approx 328$ , 远小于工程上常用的下临界雷诺数 ( $Re_{cr}$ ) 2 000。反应气体为层流, 需要采用层流模型进行计算<sup>[17]</sup>。

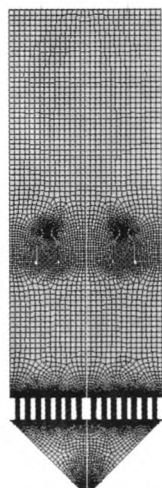


图 2 沉积腔体界面网格划分

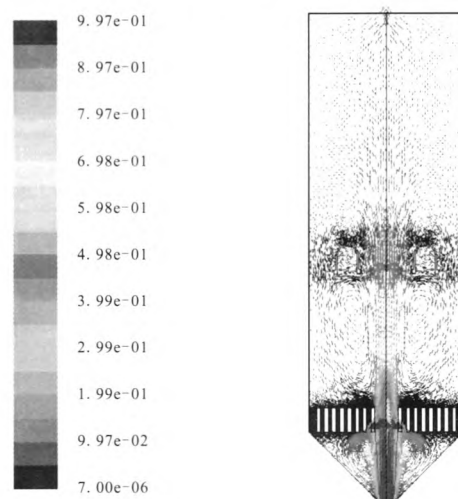
Fig. 2 Mesh generation of deposition reactor

## 2 数值模拟结果与分析

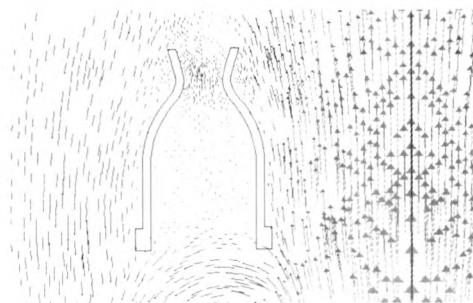
### 2.1 布气板中心开孔、入口气体流速 1 m/s 下对反应器内流场的影响

图 3 为布气板中心开孔 (直径与入气孔相同, 为 20 mm)、流速 1 m/s 情况下反应器内流场流速分布情况。由图可见, 在反应器轴向方向反应气体流速明显较快, 而在预制体局部流速则明显下

降, 同时出现流速不均、回流现象。



(a) 宏观流速分布



(b) 预制体周边局部流速分布

图 3 布气板中心开 20 mm 孔、入口流速 1 m/s 情况下流速分布

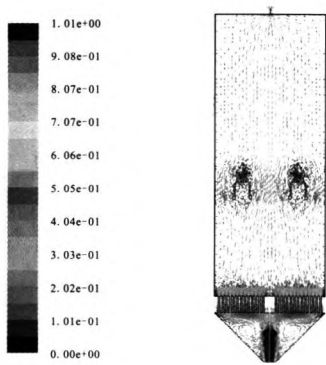
Fig. 3 Velocity distribution of gas distributor with 20 mm pore in center and flow velocity of 1 m/s at inlet in CVD reactor

将预制体周围局部流场放大 (见图 3(b))。由图可见, 反应气体快速从预制体外侧靠近轴心方向通过, 而在预制体内部流速明显下降。预制体靠近中心处流速快, 反应气体浓度大, 远离中心区域流速下降, 反应气体浓度较低。为了在预制体表面得到均匀致密的 SiC 涂层, 要求反应气体尽可能具备稳定、均匀的层流流动, 而如果布气板中心位置开孔, 会导致反应器内部轴向气流速度过快, 使预制体附近无法得到合适的反应气体。因此, 这种流场分布不利于在预制体表面形成均匀致密的 SiC 涂层。

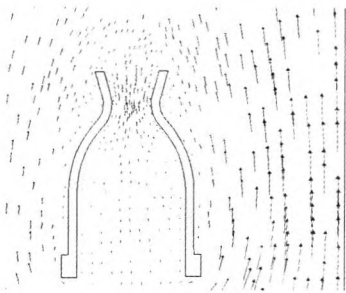
2.2 布气板中心无孔、孔均布状态下孔径对内流场流速的影响

2.2.1 孔径 5 mm, 入口处气体流速 1.0 m/s

由图 4(a)可见, 在布气板中心无孔的情况下, 反应器轴心区域的反应气流的速度明显较开孔状态下下降, 同边缘区域流速差距不大, 且没有明显回流等现象, 提高了反应器内部流场的均匀性。进一步分析预制体周边局部流速分布(见图 4(b))可见, 预制体内部气流流速较外部略低, 在喉部存在较大的反应气体聚集, 这与预制体的形状相关。同中心开孔的布气板相比, 内流场均匀性明显提高, 有利于在预制体内外表面得到均匀致密的 SiC 涂层。结合实际生产情况来看, 开孔直径不宜过小, 如果布气板上孔径过小, 在沉积过程中通孔很容易被反应副产物填充, 导致进气不畅, 反而影响实际流场的均匀性。



(a) 宏观流速分布



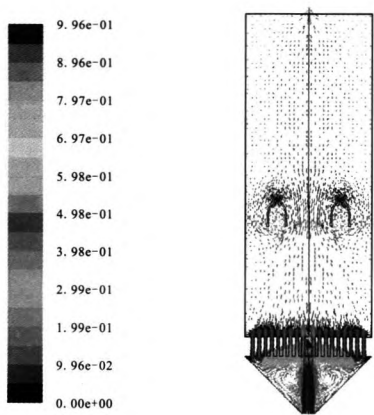
(b) 预制体周边局部流速分布

图 4 布气板中心无孔、入口流速 1 m/s、孔径 5 mm、均布情况下流速分布

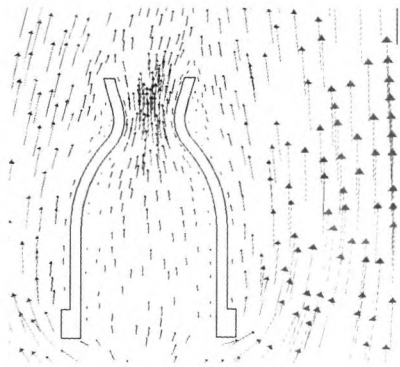
Fig. 4 Velocity distribution of gas distributor with flow velocity of 1 m/s at inlet and pore size of 5 mm, but without pore in the center

2.2.2 孔径 10 mm、入口处反应气体流速 1.0 m/s

图 5 为将布气板上开孔直径调整至 10 mm 后的内流场分布情况。同 5 mm 开孔情况相比, 内流场总体上仍表现出较为均匀的流速分布(见图 5(a)), 轴心处同其他区域流速差异并不明显。进一步分析预制体周围局部流速的分布情况(见图 5(b))可见, 同 5 mm 开孔相比, 预制体周边流速较快, 但没有明显滞留区域, 在预制体喉部反应气体流速加快, 这与预制体在喉部呈现收敛的形状有关。总体上流速保持稳定, 预制体内外均未发现回流、乱流情况, 说明内流场均匀稳定, 有利于沉积出致密、均匀的 SiC 涂层。



(a) 宏观流速分布



(b) 预制体周边局部流速分布

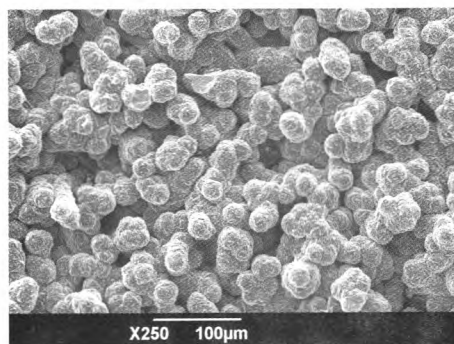
图 5 布气板中心无孔、入口流速 1m/s、孔径 10 mm、均布情况下流速分布

Fig. 5 Velocity distribution of gas distributor with flow velocity of 1 m/s at inlet and pore size of 10 mm, but without pore in the center

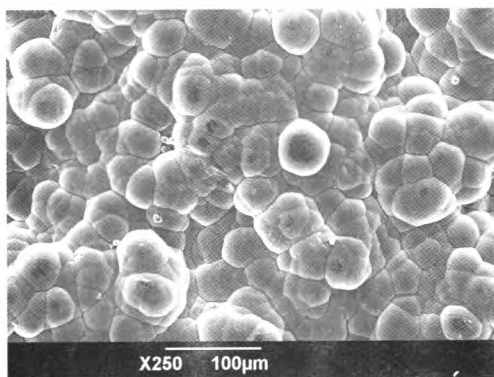
### 2.3 布气板结构对 SiC 沉积形貌的影响

根据 CFD 理论计算结果, 优化设计了布气板, 采用优化设计后的布气板完成了 SiC 涂层沉积工艺试验, 并对布气板改进前后所沉积的 SiC 涂层形貌进行了对比(见图 6 所示)。

布气板结构改进后, SiC 涂层的显微形貌发生了较大变化。采用中心开孔的布气板, 相同工艺制备的 SiC 涂层中 SiC 涂层存在较为明显的孔隙, 颗粒粗大。而采用 CFD 辅助设计改进的布气板, 制备的 SiC 涂层, 颗粒明显光滑, 且颗粒间孔隙较小, 涂层致密。



(a) 原中心开孔、孔均布布气板沉积 SiC 涂层



(b) 中心无孔、孔径 10 mm 均布布气板沉积 SiC 涂层

图 6 改进布气板前后同一反应器内  
SiC 涂层沉积情况对比

Fig. 6 Deposition quality comparison in the same  
reactor before and after improvement of gas distributor

### 3 布气板设计准则

通过 CFD 模拟, 得到的 CVD 设备用布气板设计准则是: 1) 布气板中心无孔, 以避免反应

器轴心气流速度过快, 工件附件反应器流速不足, 浓度下降; 2) 布气板孔径均布, 孔径应在 CFD 计算基础上适当扩大, 以免过细孔径遭到堵塞; 3) 布气板设计原则是必须降低反应器内回流现象, 使工件表面的反应气体尽可能为层流, 工件表面各处流速差异越小越好。图 7 为布气板结构设计示意图。

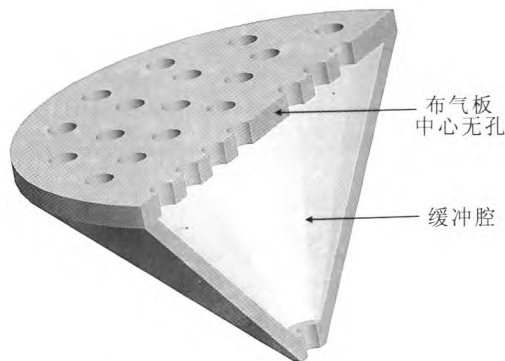


图 7 布气板(含缓冲腔)结构示意图

Fig. 7 Structural diagram of gas distributor  
with buffer chamber

### 4 结论

采用 CFD 方法, 对布气装置开孔位置和孔径对 CVD-SiC 反应器内流场的影响进行了有限元模拟分析, 优化设计了布气装置, 提高了 CVD 设备布气的均匀性和稳定性。研究获得如下结论:

1) 布气板中心开孔会导致反应器轴心区域流速过快, 影响预制体表面层流稳定性及预制体表面涂层质量。

2) 在布气板中心无孔的情况下, 开孔直径较小有助于提高反应器内部流场均匀性, 但不宜开孔过小, 过小的孔径在沉积过程中易被沉积产物堵塞。开孔直径 10 mm 较好。

3) 采用 CFD 模拟计算技术, 可有效模拟布气板结构对 CVD 沉积 SiC 的影响, 因此在使用新的反应器前, 应针对布气板设计、工件摆放等多种情况展开 CFD 模拟计算, 以确定最佳的反应器设计。



## 参考文献:

- [1] XU Yong-dong, ZHANG Li-tong, CHENG Lai-fei, et al. Microstructure and mechanical properties of three-dimensional carbon/silicon carbide composites fabricated by chemical vapor infiltration[J]. Carbon, 1998, 36(7-8): 1051-1056.
- [2] CHENG Lai-fei, XU Yong-dong, ZHANG Li-tong, et al. Oxidation behavior of carbon-carbon composites with a three-layer coating from room temperature to 1700 °C[J]. Carbon, 1999, 37(6): 977-981.
- [3] XU Yong-dong, CHENG Lai-fei, ZHANG Li-tong. Carbon/silicon carbide composites prepared by chemical vapor infiltration combined with silicon melt infiltration [J]. Carbon, 1999, 37(8): 1179-1187.
- [4] LANGLAIS F, LOUMAGNE F, LESPIAUX D, et al. Kinetic processes in the CVD of SiC from  $\text{CH}_3\text{SiCl}_3\text{-H}_2$  in a vertical hot-wall reactor[J]. Journal De Physique IV, 1995 (5): 105-112.
- [5] 徐永东, 张立同. 常压化学气相沉积 SiC 的组织结构及其稳定性[J]. 航空学报, 1997, 18(1): 123-126.
- [6] 何新波, 张长瑞. 碳纤维增强碳化硅复合材料的力学性能与界面[J]. 中南工业大学学报, 2000, 31(4): 342-345.
- [7] MIZUNO Y, UEKUSA S. Analysis of reaction gases flow in CVD processes [J]. Materials Science and Engineering: B, 1995, 35(1/3): 156-159.
- [8] MURALIDHAR V, ESWARAN V K, WADHAWAN. Modelling of transport phenomena in a low-pressure CVD reactor [J]. Journal of Crystal Growth, 2004, 267(3/4): 598-612.
- [9] KOMMU S B, KHOMAMI P. Simulation of aerosol dynamics and transport in chemically reacting particulate matter laden flows. Part II: Application to CVD reactors [J]. Chemical Engineering Science, 2004, 59(2): 359-371.
- [10] WEI Xi, CHENG Lai-fei, ZHANG Li-tong, et al. Numerical simulation for fabrication of C/SiC composites in isothermal CVI reactor[J]. Computational Materials Science, 2006, 38(2): 245-255.
- [11] 陈晋, 徐永东, 曾庆丰, 等. CVI 反应器内部气体流场的有限元模拟及优化设计 [J]. 航空材料学报, 2006, 26(5): 86-90.
- [12] 肖鹏, 熊翔, 黄伯云. 化学气相浸渗反应器内气体流场的数值模拟 [J]. 中南大学学报: 自然科学版, 2005, 5(5): 1-5.
- [13] 薛海鹏, 卢文壮, 沈飞荣, 等. 模具法制备 CVD 金刚石热沉片的温度场与流场研究[J]. 人工晶体学报, 2012, 41(4): 877-882.
- [14] 黄绍江, 谢红希, 侯惠君, 等. 等离子体化学气相沉积的布气装置之设计[J]. 广东有色金属学报, 2002, 12(1): 21-25.
- [15] 王成刚, 李桂琴, 陆利新, 等. 增强型等离子化学气象沉积炉均匀布气研究[J]. 计算机仿真, 2010, 27(6): 122-125.
- [16] 金捷, 朱红萍, 王成刚. PECVD 布气装置气流场的模拟分析[J]. 现代制造工程, 2012 (12): 93-96.
- [17] 姚连增. 晶体生长基础[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1995.

(编辑: 王建喜)