计算流体力学(CFD)在化学气相沉积(CVD)模拟仿真中的应用

张博闻[1,2]，吴　勇[1,2]，杨　甫[1]，夏思瑶[1]，黄天纵[1]，孟施旭[1]
(1. 武汉材料保护研究所有限公司，湖北 武汉　430030；
2. 特种表面保护材料及应用技术国家重点实验室，湖北 武汉　430030)

[摘　要] CVD工艺在工业生产中得到广泛应用,但CVD产物却受到许多参数的影响,而这些参数的变化如何影响沉积质量则需要重复试验才能得出结论。在CVD领域中引入计算流体力学(CFD)方法来对CVD过程进行数值模拟研究可以达到有效降低研发成本、提高沉积效率等目的。简要介绍了计算流体力学的概念;接着以ANSYS Fluent软件为例,简述了计算流体力学仿真分析的方法;最后分别综述了计算流体力学方法在建立CVD反应的研究模型、CVD反应器结构改进以及CVD工艺优化等方面的应用。

[关键词] CVD；计算流体力学；仿真方法；CFD应用
[中图分类号] TG156.8　　[文献标识码] A　　doi：10.16577/j.issn.1001-1560.2022.0259
[文章编号] 1001-1560(2022)09-0141-07

Application of Computational Fluid Dynamics in Chemical Vapor Deposition Simulation

ZHANG Bo-wen[1,2], WU Yong[1,2], YANG Fu[1], XIA Si-yao[1], HUANG Tian-zong[1], MENG Shi-xu[1]
(1. Wuhan Research Institute of Materials Protection Co., Ltd., Wuhan 430030, China;
2. State Key Laboratory of Special Surface Protection Materials and Application Technology, Wuhan 430030, China)

Abstract: Chemical vapor deposition (CVD) technique is widely used in industrial production, but the products of CVD technique are influenced by many parameters. To determine how the changes of the parameters influence the deposition quality, repeated experiments are needed to be carried out. By introducing computational fluid dynamics (CFD) method into CVD realm for the numerical simulation of the CVD process, the overall research costs can be reduced and the efficiency of deposition can be improved effectively. In this paper, the conception of computational fluid dynamics was briefly introduced, and then the analysis methods of CFD simulation were described with the instance of ANSYS Fluent software. Finally, the applications of CFD method in the establishment of research models of CVD reactions, structural improvement of CVD reactors and optimization of CVD technique were reviewed respectively.

Key words: CVD; computational fluid dynamics; simulation method; application of CFD

0　前　言

化学气相沉积(Chemical Vapor Deposition, CVD)是一种薄膜材料制备工艺,其原理可概括为:首先将成膜元素的前驱气体通入到反应器中,接着前驱气体在高温反应器内分解并发生沉积反应,最后成膜元素沉积到基体表面。CVD方法最初应用于物质表面沉积(耐热)涂层,如今已在粉末材料、陶瓷材料、精制金属材料以及半导体薄膜材料的制备等诸多领域得到广泛的应用[1-7]。但CVD工艺所沉积的产物受到反应器的几何结构、内部压力、反应温度、前驱体流量(流速)等多方面因素影响,又因反应器大多是负压的封闭空间,一些参数特别是不同流速下前驱体的分布状况难以直接观察或用仪器精准测量[8,9];同时CVD试验成本较高,难以通过重复试验来探究上述因素的变化对CVD沉积产物的具体影响。因此,引入计算机仿真技术来模拟反应过程逐渐成为了CVD相关领域的研究热点。本文综述了计算流体力学方法在化学气相沉积领域模拟仿真中的应用。

1　计算流体力学概述

1.1　计算流体力学原理

计算流体力学(Computational Fluid Dynamics,

[收稿日期] 2022-03-18
[基金项目] 国家重点研发计划“细长孔零件化学气相沉积涂覆关键技术示范应用”(2020YFB2010400)资助
[通信作者] 吴　勇(1962-),研究员,主要从事材料表面工程技术研究,E-mail:ywurimp@sina.com

CFD)是利用计算机强大的求解能力,对流体力学中各种复杂的控制方程进行数值方法的求解,同时对一些相关的物理现象,如流体的流动及传热进行分析的技术[10]。这种方法的本质是考虑如何在计算机上对连续的流体进行离散化,其中涉及到了简化物理问题、建立并求解控制方程、几何建模与网格划分、计算结果的后处理等技术。CFD 方法可总结为:以一系列有限离散点上的变量值的集合来代替在时间域或空间域上连续的物理量的场(速度场、温度场、压力场、密度场等),并建立关于这些离散点上的场变量之间关系的代数方程组,再通过数值方法求解代数方程组获得这些场变量的近似值,最终得到流场内各个位置上的基本物理量(如速度、压力、温度、密度等)的分布以及随时间变化的关系[11]。

1.2 常用的 CFD 软件

Fluent、CFX、Comsol、Phoenics 和 Star - CD 等均为 CVD 领域中常用的 CFD 仿真软件,其中 ANSYS 旗下的 Fluent 软件最受研究者们的青睐。借助高性能计算集群,ANSYS Fluent 可以让 CFD 仿真运行得更快的同时还能在拥有海量处理器的系统上进行线性扩展。ANSYS 还能优化处理器架构、模型分区算法、优化通信以及处理器间的负载均衡,在各种复杂仿真模型上提供准确的仿真结果。也有学者采用小众的软件进行 CFD 仿真计算,如 Moravejia 等[12]使用了计算流体动力学开源代码 MFIX[13]、Ramos 等[14]利用了 SiSIM 软件[15-17]等。当某些 CVD 反应包含带有流动的燃烧过程中的化学问题时,一些研究者选择运用 Chemkin 软件包来模拟这些复杂化学反应的求解问题[18-21]。

1.3 CFD 的优点

CFD 作为模拟流体流动的新手段,具有极高的经济价值,因其可以与 CAD 软件进行联合,从而缩短结构设计的时间,同时节省了设备调试与实验操作的费用,整体上降低了研发所需成本。CFD 对于纯理论研究方法来说,具有假设少、应用范围广的特点;对于实验来说,计算流体力学很少被马赫数和物体尺寸限制[22]。掌握 CVD 反应器内的气体流动特性和反应动力学对改进工艺和设计更有效的连续工艺具有重要意义[23]。

2 CVD 中的 CFD 仿真

2.1 模型建立

CFD 方法首先需对仿真对象建立几何模型,研究者们通常将 CVD 反应器作为仿真对象进行建模。也有研究者的建模对象选择更为具体,如朱黎明[8]与相颖杰[24]对 CVD 反应器内部结构中的前驱体流入喷嘴建立相应的模型。建立模型时研究者们可以选择建立二维或者三维模型,若 CVD 反应器结构简单且呈轴对称分布,则建立二维模型可提高模拟效率。但对于实际应用至工业生产中的 CVD 反应器来说,虽然二维模型可以较好地模拟对称面上的沉积,却忽略了反应器水平横截面方向上的传递现象,若考虑到反应器内部的三维流动与传热,同时兼顾水平横截面方向上的沉积均匀性,则选择建立三维模型更为合适[19]。此外,对于非轴对称的 CVD 反应器建立三维模型可以清楚地观察到反应器内部沉积的位置和图案[25]。

2.2 网格划分

划分网格本质是将建立的二维或三维模型的计算域划分为若干微小计算单元(计算节点)。常见的网格形状一般有三角形网格单元、四边形网格单元、四面体和六面体网格单元。而网格又分为结构化与非结构化网格,结构化网格是指计算域内划分的若干计算节点相互之间拥有相同或相似的拓扑结构,结构化网格仅限于结构简单的模型;非结构化网格的定义与结构化网格相对,非结构化网格可以对结构复杂的模型生成高质量网格。研究者需根据模型的结构复杂程度、计算耗时、基础硬件条件、重点计算区域等多维度综合考虑,最终来选择网格的形状与结构化、非结构化网格或混合网格对模型进行划分。由于对流、(层)湍流混合、扩散和燃烧的耦合使得 CVD 反应器某些区域附近流动复杂,温度、速度、组分浓度等变量存在较大梯度,该区域通常也是重点模拟区域,故需要小尺寸、高密度的网格以保证整个 CVD 反应器模型的模拟精度[21,25]。

2.3 控制方程建立

CVD 过程非常复杂,其中涉及到一些动量、能量以及热量等的变化,故研究者一般对 CVD 反应器内部流场作出如下假设:(1)整个 CVD 反应过程所涉及到的气体均为理想气体;(2)气体的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)忽略气体在构件内部的扩散问题,即气体仅在 CVD 反应器中流动[26]。遵循假设可以推出流体流动的基本方程,而 CFD 可以看作是在流动基本方程(连续方程、动量方程、能量方程、辐射传递方程、组分输运方程等)控制下对流体流动的数值模拟[11,27]。

2.3.1 连续方程

连续性方程又为质量守恒方程,将 CVD 反应器内部看作一个整体,无论气相沉积化学反应如何发生,反应物与生成物的质量如何变化,整体质量维持不变。

根据质量守恒定律得出连续性方程的表达式：

$$\nabla(\rho u) = 0 \tag{1}$$

2.3.2　动量方程

动量守恒方程满足牛顿第二定律，也称为纳维·斯托克斯方程（N-S 方程）。即：整体的总动量等于各微元体的动量之和，同时整体的动量变化率等于各微元体动量变化率之和[28]，其表达式为：

$$\nabla(\rho uu) = -\nabla P + \rho g + \nabla\left\{\mu[\nabla u + (\nabla u)^T] - \left(\frac{2}{3}\mu\right)(\nabla u) I\right\} = 0 \tag{2}$$

2.3.3　能量方程

当 CVD 过程存在热交换或者温度变化时，需满足热力学第一定律，即能量守恒定律，方程表达式为：

$$C_p \nabla(\rho u T) = \nabla(\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^{N} j_i \cdot \frac{\nabla H_i}{M_i} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} H_i \gamma_{i,k} R_k^g \tag{3}$$

2.3.4　辐射传递方程

在计算流体力学中，辐射传递方程也称为辐射传热方程，ANSYS Fluent 自带 5 种辐射传递模型。马东云[1]将 5 种辐射模型进行了对比，提出要在综合考虑反射与发射、光学厚度、半透明与镜面边界以及局部热源等因素后，再确定辐射传递模型，具体对比结果见表 1。

表 1　ANSYS Fluent 辐射传递模型对比[1]

Table 1　The comparisons of radiation transfer model in ANSYS Fluent[1]

辐射模型	优点	缺点
DTRM	相对简单，适用光学厚度范围广，可增加射线数量来提高计算精度	CPU 负荷较大，不包括散射效应，不适用于并行计算
P-1	CPU 负荷较小，适用光学厚度范围较广，考虑散射的影响，尤其适用于燃烧等问题	准确性差，较适用于预测小范围热源或者接收器的辐射通量
Rosseland	无需求解额外入射辐射的传输方程，计算速度快，CPU 负荷较小，适用于光学厚度大于 3 的问题	仅可用于光学深度比较大的情况，不能用于密度基求解器，只可采用压力基求解器
S2S	耗时较短，非常适用于封闭空间中没有介质的辐射问题	不可用于 participating radiation 问题、存在周期边界的求解模型及存在对称边界的问题等，CPU 负荷较大
DO	使用范围最广，内存和计算负荷适中，适用于求解燃烧以及燃烧中的面对面辐射问题，适用于半透明介质、表面辐射等所有光学区间问题	无显著缺点

2.3.5　组分输运方程

流体在运动过程中混杂有不同成分的物质或存在相互之间的反应，还需要遵循物质组分守恒定律，即满足组分输运方程[28]。其方程表达式为：

$$\nabla(\rho u Y_i) = -\nabla J_i \tag{4}$$

$$J_i = -\rho D_{i,j} \nabla Y_i \tag{5}$$

2.4　边界条件

将划分好的网格导入到 ANSYS Fluent 求解器中，模拟计算前需对求解器进行设置。少数研究者如 Satoshi等[29]以及 Sanchez 等[30]选择 H_2或 Ar 气体作为单一前驱体，而大多数研究者选择的前驱体为混合气体。若前驱体均为混合气体，在进入求解器后需选择 Species Model 组分输运模型，如图 1 所示，同时拟定前驱体成分、气体比例以及其物性参数。流场状态是由雷诺数 Re 决定，当 $Re \leqslant 2\ 300$ 时，流场状态一定为层流；当 $2\ 300 < Re < 4\ 000$ 时，流场状态介于层流与湍流之间；当 $Re \geqslant 4\ 000$ 时，流场状态为湍流[31]。求解器给出了层流模型以及多种湍流模型（大部分研究者选择的湍流模型集中在 k-ε 与 k-ω 模型），如图 2 所示，CVD 反应器内部流场复杂，研究者需根据其研究的具体参数来计算雷诺数 Re，从而选择正确的流场状态。

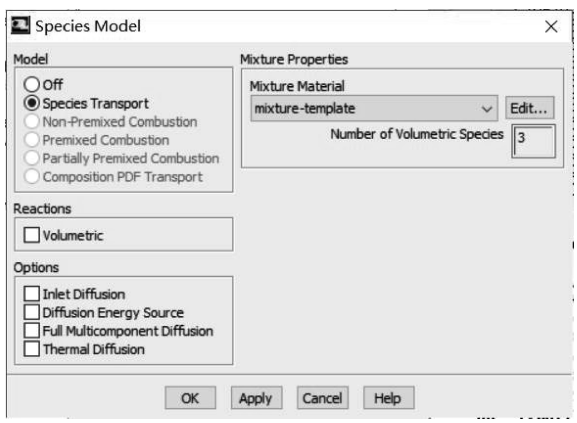


图 1　求解器中的组分输运模型

Fig. 1　The species transport models in the solver

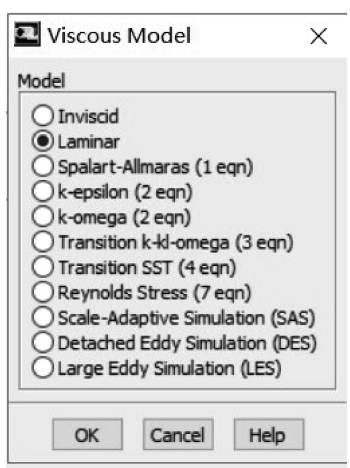


图 2　求解器中流场状态的选择

Fig. 2　The viscous models in the solver

虽然 ANSYS Fluent 提供了多种模型，但研究者一般在 CVD 反应器入口处选择速度入口（Velocity Inlet）

或者质量入口(Mass Inlet);反应器出口处一般选择压力出口(Pressure outlet)或者完全发展流动(Outflow);壁面(Wall)为无滑移(No Slip)边界条件。此选择及步骤仅作为参考,研究者还需通过本身研究的内容和具体参数来选择合适的边界条件。最后,选择合适的收敛精度与迭代步数,进行 CFD 模拟计算,计算后的残差曲线图如图 3 所示。

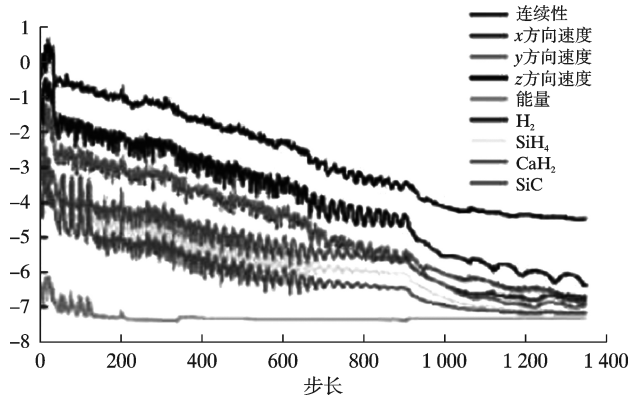
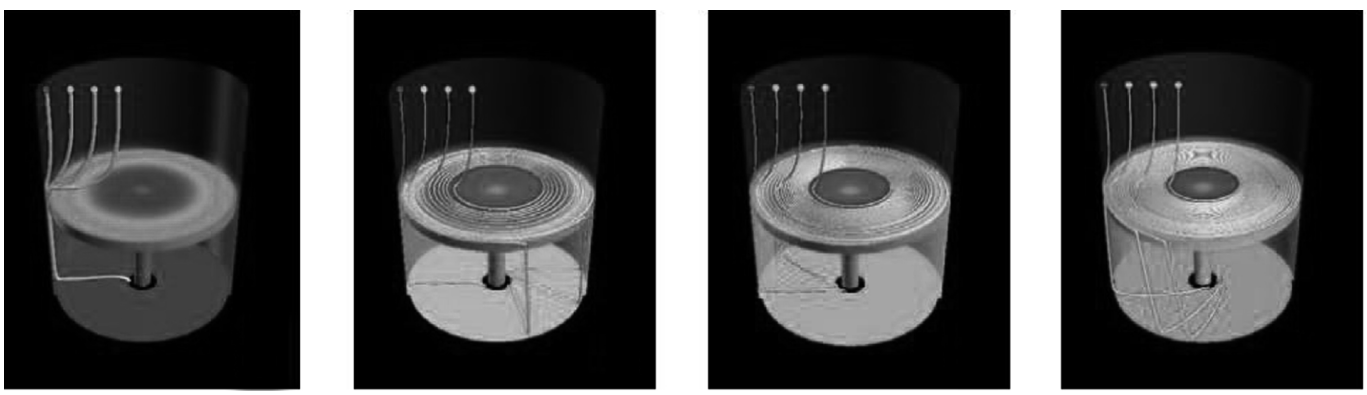


图 3 某 CVD 法制备 SiC 过程的模拟计算残差曲线图[4]

Fig. 3 The residual curve plot in a simulation for the process of SiC deposited by the CVD method[4]

2.5 后处理与结果分析

上述控制方程和边界条件构成了封闭的方程组,在 ANSYS Fluent 软件中,根据 CFD 原理,研究者们一般采用 SIMPIE(Semi-Implicit Method for Pressure linked Equations,即求解压力耦合方程组的半隐式方法)算法对压力与速度进行耦合;对压力离散的数值方法通常采用 Standard 算法;对各个控制方程(连续方程、动量方程、能量方程、辐射传递方程及组分输运方程)通常采用二阶迎风或二阶逆风差分格式进行离散化求解,最终得到数值模拟结果[9,19]。图 4~图 6 列举了研究者们对于 CFD 数值模拟结果通常关注粒子的运动轨迹和速度、温度、压力、浓度以及沉积速率等参数随时间变化的云图,也称为等值线图。

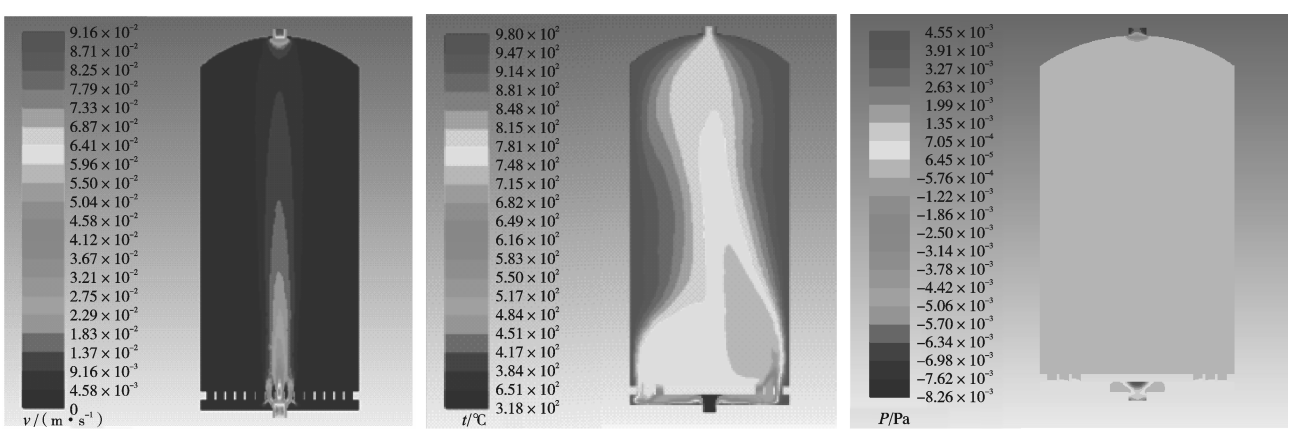


(a) 200 r/min (b) 400 r/min (c) 600 r/min (d) 800 r/min

图 4 某 CVD 旋转圆盘反应器不同转速下反应物粒子运动轨迹图[32]

Fig. 4 The pathline profiles of reactant particles in a rotating disk CVD reactor which under different speed[32]

注:图中出现的反应物粒子运动轨迹也可以称为流体粒子流动路径,指的是各个流体粒子遵循的轨迹,可以理解为“记录”了流体在一定时间内的流动路径[33]。



(a) 速度 (b) 温度 (c) 静压力

图 5 某制备铝化物涂层 CVD 反应器内流体速度、温度、静压力分布等值线图[34]

Fig. 5 The contour plots of fluid velocity, temperature, and static pressure distribution in a reactor for aluminide coating deposited by the CVD method[34]

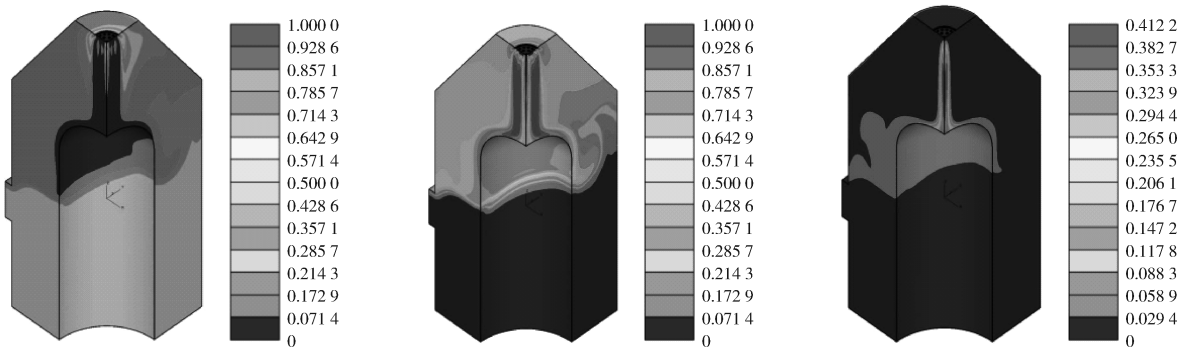


图 6　某 CVD 法合成熔融 SiO_2过程主要组分质量分数分布等值线图[21]

Fig. 6　The contour plots of the main reactants mass fraction in the process of the fused silica synthesis by the CVD method[21]

3　计算流体力学仿真在 CVD 中的应用

CVD 技术作为比较先进且成熟高效的材料制备方法,国内外已有相当数量的研究者们在进行化学气相沉积实验研究中引入计算流体力学方法进行仿真计算,本节将综述 CFD 在 CVD 材料制备领域中的相关应用。

3.1　应用于建立 CVD 反应的研究模型

虽然化学气相沉积技术大多是前驱体在基体上发生沉积反应,但不同类型材料的 CVD 原理不同,有些学者对其相关领域的 CVD 反应机理做出研究,提出相应的模型、算法或程序,并将结果应用于生产实践。Ramos 等[14]利用 CFD 仿真结果对 CVD 生产多晶硅的沉积反应机理做出研究,分别提出了改良西门子法与硅烷流化床法这 2 种 CVD 法生产多晶硅的传热模型;Liu 等[35]基于计算流体力学框架,搭建了由欧拉-颗粒模型和粒子数平衡模型的耦合数值程序,用于模拟 CVD 流化床反应器中的硅烷生产多晶硅的生长过程以及分析硅烷热解动力学模型对气态物质和多晶硅生长的适用性;Liu 等[36]基于计算流体力学框架以及 C_2H_2热解反应沉积 SiC 的机理,建立了一个计算流体力学-离散元-化学气相沉积多物理场模型,该模型可以用于研究 C_2H_2热解颗粒包覆过程以及 CVD 反应器内流化床层温度与前驱体流入速度对沉积速率和包覆效率的影响。

3.2　应用于 CVD 反应器结构改进

CVD 产物的沉积质量由 2 个关键因素决定,分别是反应器的结构以及 CVD 的相关工艺参数。一些学者侧重于使用 CFD 仿真计算来对 CVD 反应器进行结构改进,从而达到提升沉积质量的目的。例如,Huang 等[27]使用 CFD 仿真结果提出了 1 种将多个多晶硅 CVD 反应器串联连接的阳极工艺,从而有效降低改良西门子法制备多晶硅的生产成本;Lin 等[37]以 $Ga(CH_3)_3$和 AsH_3为原料制备 GaAs 为例,采用 CFD 数值模拟方法考察了垂直旋转 CVD 反应器中嵌入多孔介质对沉积速率的影响;相颖杰[24]基于 CFD 数值模拟方法,对制备 6.5%Si 硅钢 CVD 反应器喷嘴进行了结构优化,并提出了一种缝式喷嘴。

3.3　应用于 CVD 试验的工艺优化

一些研究者们则考虑利用计算流体力学来对反应器内相关物理量场的变化做出计算,结果用于 CVD 工艺的优化,从而提升沉积质量。Moravejia 等[12]采用 CFD 方法研究了 CVD 反应器内部的流体动力学与传热,分析了温度、气体流速以及前驱体气相组成对多壁碳纳米管催化生长的影响,从而找到了前驱体的最佳流速范围,对 CVD 反应器的实验工艺进行了优化;Sanchez 等[30]对反应前驱体的稳态层流与传热耦合问题进行了 CFD 数值求解,将结果用于预测碳纳米管在 CVD 反应器中的沉积速率随工艺参数变化而改变的范围以及整体工艺参数的优化;Mishra 等[38]为研究自然对流对传热和苯分解产生放热的影响,采用 CFD 计算方法模拟了反应器内部的温度场、速度场以及浓度分布,模拟结果用于优化 CVD 工艺,从而实现了碳纳米纤维在 CVD 反应器中的均匀生长。

4　结　语

CVD 作为一种较为新颖的材料制备方法,计算流体力学在其中的应用远不止上述所总结的几类,本文仅综述了较为常见的应用类型,但计算流体力学方法的本质是利用 CFD 软件针对具体研究对象及其实验参数推导出的若干控制方程进行离散化求解,从而得到仿真结果。因此本文根据以往的研究者们所进行的模拟实验而总结出的 CFD 使用方法可以推广至整个化学气相沉积领域,从而对后续相关研究者提供理论指导与支持。

此外,大多数研究者在运用 CFD 方法研究 CVD 沉

积过程时,通常仅探究单一变量对沉积产物的影响。但实际的 CVD 沉积过程受多因素、多变量之间相互作用的影响,因此后续相关研究者在进行仿真计算过程中应设计正交实验,用来研究影响沉积结果的多种变量之间的耦合,同时还应建立随时间变化的函数,以监测整个 CVD 沉积过程中各物理量的场的变化。

[参 考 文 献]

[1] 马东云. 异型热管 CVD 反应器硅烷分解过程流场模拟研究[D]. 天津:天津大学, 2017.
MA D Y. Numerical Simulation and Study of Flow Field in Silane Decomposition Process of CVD Reactor with Shaped Heat Pipes[D]. Tianjin: Tianjin University, 2017.

[2] 杨 西, 杨玉华. 化学气相沉积技术的研究与应用进展[J]. 甘肃水利水电技术, 2008, 44(3): 211-213.
YANG X, YANG Y H. Research and Application Progress of Chemical Vapor Deposition Technology[J]. Gansu Water Resources and Hydropower Technology, 2008, 44(3): 211-213.

[3] 田会娟. CVD 法制备纳/微结构 ZnO 反应过程中的流场模拟[J]. 唐山学院学报, 2015, 28(6): 61-64.
TIAN H J. Simulation of the Flow Field of the Reaction Process of Nano/Micron Zn0 Preparation by CFD[J]. Journal of Tangshan College, 2015, 28(6): 61-64.

[4] SEO J W, KIM J W, CHOI K, et al. Improvement of Uniformity in Chemical Vapor Deposition of Silicon Carbide by Using CFD[J]. Journal of the Korean Physical Society, 2016, 48(1): 170-175.

[5] 周亚荣, 徐艳华, 张荣蓓. 化学气相沉积法制备碳化硅过程的三维数值模拟[J]. 工业加热, 2018, 47(6): 34-42.
ZHOU Y R, XU Y H, ZHANG R B. 3D Numerical Simulation of Chemical Vapor Deposition Process of Silicon Carbide[J]. Industrial Heating, 2018, 47(6): 34-42.

[6] 刘 斌. 化学气相沉积制备多壁碳纳米管反应器内流场的数值模拟[J]. 工业加热, 2019, 48(4): 40-44.
LIU B. Numerical Simulation of the Reactor Flow Filed of Synthesis Multi-wall Carbon Nanotube by Chemical Vapour Deposition[J]. Industrial Heating, 2019, 48(4): 40-44.

[7] FAUZI F B, ISMAIL E, OSMAN M N, et al. Influence of mixed convection in atmospheric pressure chemical vapor deposition of graphene growth[J]. Materials Today: Proceedings, 2019(7): 638-645.

[8] 朱黎明. Co-Re 化学气相沉积设备与控制系统设计[D]. 成都:西南科技大学, 2019.
ZHU L M. Design of Co-Re Chemical Vapor Deposition Equipment and ControlSystem[D]. Southwest University of Science and Technology, 2019.

[9] 刘晓珑, 李镇江, 孟春雷. 基于 CAD/CFD 理论对连续制备 SiC 一维纳米材料 CVD 反应室结构的设计与模拟优选[J]. 青岛科技大学学报(自然科学版), 2015, 36(5): 524-529.
LIU X L, LI Z J, MENG C L. Design and Simulation Optimization of CVD Reaction Chamber of Continuous Preparation of SiC One-dimensional Nanomaterials Based on CAD/CFD Theory[J]. Journal of Qingdao University of Science and Technology(Natural Science Edition), 2015, 36(5): 524-529.

[10] 陈晓佳. 化学气相沉积设备尾气过滤系统的研究与分析[D]. 武汉:华中科技大学, 2015.
CHEN X J. Chemical Vapor Deposition Exhaust Filter System Research and Analysis[D]. Wuhan: Huazhong University of Science & Technology, 2015.

[11] 韩荣耀. CVD 金刚石膜钝头体飞行温度与压力的仿真研究[D]. 南京:南京航空航大大学, 2007.
HAN R Y. Simulation on the Temperature and Pressure Field of CVD Diamond Blunt Aircraft under Flight[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2007.

[12] MORAVEJIA M K, SOKOUTA F S, RASHIDI A. CFD modeling and experimental study of multi-walled carbon nanotubes production by fluidized bed catalytic chemical vapor deposition[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2011, 38: 984-989.

[13] LUNGU M, SIAME J, MUKOSHA L. Comparison of CFD-DEM and TFM approaches for the simulation of the small scale challenge problem 1[J]. Powder Technology, 2021, 378: 85-103.

[14] RAMOS A, FILTVEDT W O, LINDHOLM D, et al. Deposition reactors for solar grade silicon: A comparative thermal analysis of a Siemens reactor and a fluidized bed reactor[J]. Journal of Crystal Growth, 2015, 431: 1-9.

[15] BELLMANN M P, LINDHOLM D, Sørheim E A, et al. 3D dynamic simulation of heat transfer and melt flow in a Bridgman growth furnace for mc-silicon with PID temperature control[J]. Journal of Crystal Growth, 2013, 383(1): 119-125.

[16] MORTENSEN D, LINDHOLM D, FRIESTAD K, et al. Crystallization furnace modelling including coupled heat and fluid flow, stresses and deformations[J]. Energy Procedia, 2013, 38: 597-603.

[17] BELLMANN M P, LINDHOLM D, M´HAMDI M, et al. Method for gas flow and impurity control in directional solidification of multi-crystalline silicon[J]. Journal of Crystal

Growth, 2014, 399: 33-38.

[18] 樊友雯, 陈彩霞. 硅烷热解多晶硅气相沉积反应模型分析与验证[J]. 人工晶体学报, 2017, 46(2): 197-203.
FAN Y W, CHEN C X. Analysis and Verification of Reaction Model for Silane Pyrolysis Polycrystalline Silicon CVD [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2017, 46(2): 197-203.

[19] 倪昊尹. 西门子 CVD 多晶硅还原炉内传递与反应过程数值模拟研究[D]. 上海:华东理工大学, 2015.
NI H Y. Numerical modeling of transport and reaction process in Siemens CVD reactors[D]. Shanghai: East China University of Science and Technology, 2015.

[20] XENIDOU T C, BOUDOUVIS A G, TSAMAKIS D M, et al. An Experimentally Assisted Computational Analysis of Tin Oxide Deposition in a Cold-Wall APCVD Reactor[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2004, 151(12): C757-C764.

[21] FENG T, WANG P Y. CFD Simulation of the Fused Silica Synthesis Furnace[J]. Applied Mechanics and Materials, 2013, 284-287: 51-56.

[22] 余金伟, 冯晓锋. 计算流体力学发展综述[J]. 现代制造技术与装备, 2013(6): 25-26.
YU J W, FENG X F. A Review of the Development of Computational Fluid Dynamics[J]. Modern Manufacturing Technology Equipment, 2013(6): 25-26.

[23] RASHID S A, RASHID M Z A, MUSA M A, et al. Assessment of gas flow characteristics and reaction kinetics of chemical vapour deposition reactors for the production of nano-hybrid fibres[J]. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 2013(8): 254-261.

[24] 相颖杰. 用于连续 CVD 装置的缝式喷嘴结构研究[D]. 上海:华东理工大学, 2015.
XIANG Y J. Structure Research of the Slot Nozzle used in the Continuous CVD Device[D]. Shanghai: East China University of Science and Technology, 2015.

[25] OTHMAN S H, RASHID S A, MOHD T I, et al. 3D CFD Simulations: Effect of Operation Parameters on the Deposition of Photocatalytic TiO_2 Nanoparticles by MOCVD[J]. Chemical Vapor Deposition, 2015, 21: 99-110.

[26] 王 毅, 杨晓辉, 白龙腾. 基于 CFD 的 CVD 布气装置模拟与优化设计[J]. 火箭推进, 2014,40(3): 46-51.
WANG Y, YANG X H, BAI L T. Optimization design of gas distributor for CVD reactor by CFD simulation[J]. Journal of Rocket Propulsion, 2014,40(3): 46-51.

[27] HUANG Z Q, QIE S Y, QUAN X Y, et al. Numerical simulation of multiple polysilicon CVD reactors connected in series using CFD method[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2015, 93: 1 721-1 729.

[28] 许朝蓬. InN/InGaN 纳米结构的 CVD 生长研究[D]. 南京:南京邮电大学, 2018.
XU Z P. Study on Growth of InN/InGaN Nanostructure by CVD[D]. Nanjing: Nanjing University of Posts and Telecommunications, 2018.

[29] NISHIDA S, MUTA H, KURIBAYASHI S. Effect of Gas Flow Rate on the High-Rate, Localized Jet-Deposition of Silicon in SiH_4/H_2 PE-CVD[J]. Journal of Chemical Engineering of Japan, 2014, 47(6): 478-482.

[30] Sánchez A G, LVOVA L D, GARZA V L, et al. Computational Fluid Dynamics in the Carbon Nanotubes Synthesis by Chemical Vapor Deposition[J]. Materials Research Society Symposium Proceedings, 2012, 1479: 111-116.

[31] 吴望一. 流体力学[M]. 北京:北京大学出版社, 1982.
WU W Y. Fluid Mechanics[M]. Beijing: Peking University Press, 1982.

[32] HAN J H, YOON D Y. 3D CFD for chemical transport profiles in a rotating disk CVD reactor[J]. 3D Research, 2010 (2): 26-30.

[33] ALI M A, NAJIM S E, RISHACK Q A. CFD Analysisofa 200MW Tangential Gas Fired Furnace Boiler[J]. International Journal of Engineering Research & Technology, 2017, 6(8): 184-191.

[34] 张博闻, 吴 勇, 杨 甫,等. CVD 法制备铝化物涂层装置沉积室内前驱体流场仿真设计研究[J]. 材料保护, 2021, 54(5): 1-6.
ZHANG B W, WU Y, YANG F, et al.The analogue design research of precursor gas flow field in the deposition chamber for aluminide coating deposited by the CVD method[J]. Materials Protection, 2021, 54(5): 1-6.

[35] LIU S S, XIAO W D. CFD-PBM coupled simulation of silicon CVD growth in a fluidized bed reactor: Effect of silane pyrolysis kinetic models[J]. Chemical Engineering Science, 2015, 127: 84-94.

[36] LIU M L, CHEN M, LI T J. CFD-DEM-CVD multi-physical field coupling model for simulating particle coating process in spout bed[J]. Particuology, 2019, 42: 67-78.

[37] LIN C H, CHENG W T, LEE J H. Effect of embedding a porous medium on the deposition rate in a vertical rotating MOCVD reactor based on CFD modeling[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2009, 36: 680-685.

[38] MISHRA P, VERMA N. A CFD study on a vertical chemical vapor deposition reactor for growing carbon nanofibers [J]. Chemical Engineering Research and Design, 2012, 90: 2 293-2 301.

[编校:魏兆军]