



**HAL**  
open science

# SIMULATION DU TRANSFERT DE CHALEUR ET DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT DANS UN REACTEUR DE VAPODÉPOSITION

H. Chehouani, B. Armas, S. Benet, S. Brunet

► **To cite this version:**

H. Chehouani, B. Armas, S. Benet, S. Brunet. SIMULATION DU TRANSFERT DE CHALEUR ET DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT DANS UN REACTEUR DE VAPODÉPOSITION. Journal de Physique Colloques, 1989, 50 (C5), pp.C5-47-C5-56. 10.1051/jphyscol:1989509 . jpa-00229532

**HAL Id: jpa-00229532**

**<https://hal.science/jpa-00229532>**

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## SIMULATION DU TRANSFERT DE CHALEUR ET DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT DANS UN REACTEUR DE VAPODÉPOSITION

H. CHEHOUANI, B. ARMAS, S. BENET\* et S. BRUNET\*

CNRS/IMP, BP. n°5, Odeillo, F-66120 Font-Romeu, France

\*Université de Perpignan, Laboratoire de Physique Appliquée, F-66025 Perpignan Cedex, France

**RESUME** Les processus de transfert de chaleur et de quantité de mouvement sont étudiés dans un réacteur de vapo-déposition à axe vertical à paroi froide. La résolution des équations de l'hydrodynamique et de la thermique en formulation elliptique  $(\phi, \omega, \theta)$  conduit à une description fine des distributions de température et de vitesse à l'intérieur du réacteur sous balayage d'un gaz neutre. Les résultats des calculs montrent la présence de forts gradients localisés autour du substrat, ainsi qu'un phénomène de recirculation pour les faibles débits gazeux. L'influence des divers paramètres a été également examinée. Le cas d'un réacteur à axe vertical et à paroi chaude a été abordé.

**ABSTRACT** Heat transfer and quantity of movement processes were studied within a cold wall vertical C.V.D. reactor. The resolution of hydrodynamic and thermic equations with elliptic formulation  $(\phi, \omega, \theta)$  lead to an accurate description of temperatures and velocities within the reactor under inert gas flow. The results show high gradients around the substrate and a recycling flow for low rates. The influence of several parameters and the case of a hot wall reactor were also presented.

### 1 - INTRODUCTION

Le dépôt chimique de couches minces met en jeu des phénomènes de transferts avec des réactions chimiques dans la phase gazeuse et sur le substrat. Dans ce processus, les paramètres importants sont : la température, la pression totale, la composition de la phase gazeuse initiale et le débit gazeux. Actuellement, l'effort de recherche porte donc sur l'étude théorique et expérimentale de la phase gazeuse dans les réacteurs C.V.D., c'est-à-dire, la détermination de la distribution de température au voisinage du substrat, la pression partielle des diverses espèces ainsi que la distribution des vitesses des gaz.

Sur le plan expérimental, AVERSTEIN et al./1/ introduisent des particules de  $TiO_2$  dans le flux gazeux pour visualiser l'écoulement dans un réacteur horizontal. Ils obtiennent ainsi les données expérimentales de l'épaisseur de la couche stagnante. WAHL et al./2/ ont également utilisé des particules de  $TiO_2$  pour visualiser l'écoulement dans un réacteur vertical.

Pour l'étude des transferts de chaleur dans la phase gazeuse d'un réacteur de vapo-déposition à paroi froide, nous avons utilisé l'interférométrie holographique /3/. Elle permet de visualiser les champs de température, l'épaisseur de la couche limite thermique et ses instabilités /4/ en fonction des divers paramètres expérimentaux précédemment cités. Parallèlement à ceci la spectrométrie Raman a été utilisée pour la mesure de la température et de la concentration /5/.

Sur le plan théorique, plusieurs modèles mathématiques ont été élaborés cette dernière décennie. Parmi eux, celui qui a été le plus souvent utilisé repose sur le concept de la couche limite /1,6,7,8/. Ce genre d'approche n'est pas toujours valable. Dans la plupart des réacteurs de vapo-déposition, les effets de la convection naturelle perturbent considérablement la répartition des espèces gazeuses et de ce fait, le processus de dépôt. L'écoulement du fluide peut avoir une influence significative sur l'épaisseur du dépôt et l'uniformité de sa composition. En effet le processus de transfert de quantité de mouvement et de chaleur, régularise l'accès des réactifs au niveau des couches croissantes. Par conséquent les perturbations dues à l'écoulement, notamment celles engendrées par la convection naturelle peuvent avoir une grande influence sur la diffusion des espèces vers le

substrat. Une modélisation plus réaliste du fonctionnement d'un réacteur C.V.D. doit tenir compte des réactions chimiques et des transferts de quantité de mouvement (écoulement), chaleur (conduction, convection et rayonnement) et matière.

La complexité du processus C.V.D. résulte du fait que tous ces phénomènes se déroulent simultanément et sont fortement dépendant les uns des autres. Il en découle des équations fortement non-linéaires et couplées. Cependant, dans les systèmes à paroi froide utilisés dans les laboratoires, les réactifs sont très dilués dans le gaz vecteur. Il est possible alors de faire un découplage entre le transfert de masse, d'impulsion et de chaleur. Ainsi le même champ de température et d'écoulement peut être envisagé pour modéliser plusieurs réactions de vapodéposition.

## 2 - DESCRIPTION DU MODELE PROPOSE

Pour modéliser les mécanismes de transfert mis en jeu dans un réacteur C.V.D., nous avons considéré la totalité du réacteur et du substrat. Cette approche a été adoptée par certains auteurs [2,9,10]. Ce modèle consiste à écrire les équations de l'hydrodynamique et de la thermique sans l'hypothèse de la couche limite. Notre objectif est de prévoir ce qui se passe dans le réacteur lorsqu'on fixe des conditions expérimentales (Température du substrat et de la paroi, nature du gaz vecteur, pression et débit à l'entrée du réacteur). Le réacteur considéré est un tube en silice (40mm de diamètre) à axe vertical (Fig.1). Le substrat de 8mm de rayon et 8mm d'épaisseur est placé dans l'axe du réacteur. Il est chauffé au moyen d'un inducteur : tube de cuivre bobiné sur la paroi extérieure du réacteur. Ce type de réacteur a déjà été utilisé pour la mesure du champ de température par interférométrie holographique [3].

Afin de faciliter la mise en équation ainsi que le traitement numérique, nous avons formulé les hypothèses simplificatrices suivantes :

L'écoulement est supposé laminaire, incompressible, axisymétrique et vérifie l'hypothèse de Boussinesq.

Les propriétés thermophysiques sont considérées constantes et calculées à la température moyenne  $\bar{T}$ , entre la température du substrat et celle du gaz à l'entrée du réacteur.

Dans ces conditions les équations de transport s'écrivent.

### 2-1 Equation de continuité

$$U \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r} + \frac{\partial V}{\partial Z} = 0 \quad (2.1)$$

### 2-2 Equation de mouvement

$$U \frac{\partial U}{\partial r} + V \frac{\partial U}{\partial Z} = - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial r} + \nu \left[ \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{U}{r} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right] \quad (2.2)$$

$$U \frac{\partial V}{\partial r} + V \frac{\partial V}{\partial Z} = - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial Z} + \nu \left[ \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right] - \beta g (T - T_p)$$

### 2-3 Equation de l'énergie

$$U \frac{\partial T}{\partial r} + V \frac{\partial T}{\partial Z} = \nu \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} \right] \quad (2.3)$$

Ces équations sont rendues adimensionnelles par les changements de variables suivants :

$$\xi = \frac{r}{R_r}, \quad \eta = \frac{z}{R_r}, \quad P^* = \frac{P}{\rho_0 V_0^2}, \quad U^* = \frac{V}{V_0}, \quad \theta = \frac{T - T_p}{T_s - T_p}$$

Ce qui donne :

$$\frac{\partial U^*}{\partial \xi} + \frac{U^*}{\xi} + \frac{\partial V^*}{\partial \eta} = 0 \quad (2.4)$$

$$U^* \frac{\partial U^*}{\partial \xi} + V^* \frac{\partial U^*}{\partial \eta} = - \frac{\partial P^*}{\partial \xi} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 U^*}{\partial \xi^2} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{U^*}{\xi} \right) + \frac{\partial^2 U^*}{\partial \eta^2} \right] \quad (2.5)$$

$$U^* \frac{\partial V^*}{\partial \xi} + V^* \frac{\partial V^*}{\partial \eta} = - \frac{\partial P^*}{\partial \eta} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 V^*}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial V^*}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial \eta^2} \right] - \frac{Gr\theta}{Re^2}$$

$$U^* \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + V^* \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{1}{Pe} \left[ \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \right] \quad (2.6)$$

La formulation elliptique offre l'avantage d'éliminer la pression et de vérifier automatiquement l'équation de continuité. Une fonction de courant,  $\psi$ , est introduite en posant :

$$U^* = - \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \eta}, \quad V^* = \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi}; \quad \omega = \frac{\partial U^*}{\partial \eta} - \frac{\partial V^*}{\partial \xi}$$

Dans cette formulation, les équations du modèle s'écrivent :

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) = - \omega \quad (2.7)$$

$$- \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \left( \frac{\partial \omega}{\partial \xi} - \frac{\omega}{\xi} \right) + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \left( \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right) = \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 \omega}{\partial \xi^2} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\omega}{\xi} \right) + \frac{\partial^2 \omega}{\partial \eta^2} \right] + \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \quad (2.8)$$

$$- \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{1}{Pe} \left[ \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \right] \quad (2.9)$$

#### 2-4 Conditions aux limites

- Ecoulement à l'entrée

Nous le supposons établi avec un profil de vitesse parabolique, selon la loi :

$$V = -2V_0 \left( 1 - \left( \frac{r}{R_t} \right)^2 \right), \quad U = 0 \implies V^* = -2(1-\xi^2) \text{ et } \begin{cases} \psi = -\xi^2 (1-0,5\xi^2) \\ \omega = -4\xi \end{cases}$$

d'autre part, la température du gaz, est supposée égale à celle de la paroi du réacteur,  $\theta=0$ .

- Ecoulement sur les parois.

$$\phi = \text{Cte et } \omega = -\frac{1}{\xi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} \rightarrow \text{ où } n \text{ est la normale à la paroi.}$$

d'autre part :  $\theta = 0$  sur la paroi du réacteur  
 et  $\theta = 1$  sur la surface du substrat  
 - Ecoulement à la sortie de la zone d'étude :

Les conditions aux limites sont incertaines. Comme la plupart des auteurs/11,12/, nous supposons que l'écoulement est établi, ce qui se traduit par :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{\partial \omega}{\partial \eta} = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = 0$$

3 - RESOLUTION NUMERIQUE

Le système d'équations (2.7) à (2.9), avec les conditions aux limites indiquées sur la figure 1, est résolu numériquement par un schéma aux différences finies. Le domaine ABCDEFA a été discrétisé en 21 X 61 points. Le maillage est régulier selon les deux directions Or et Oz.

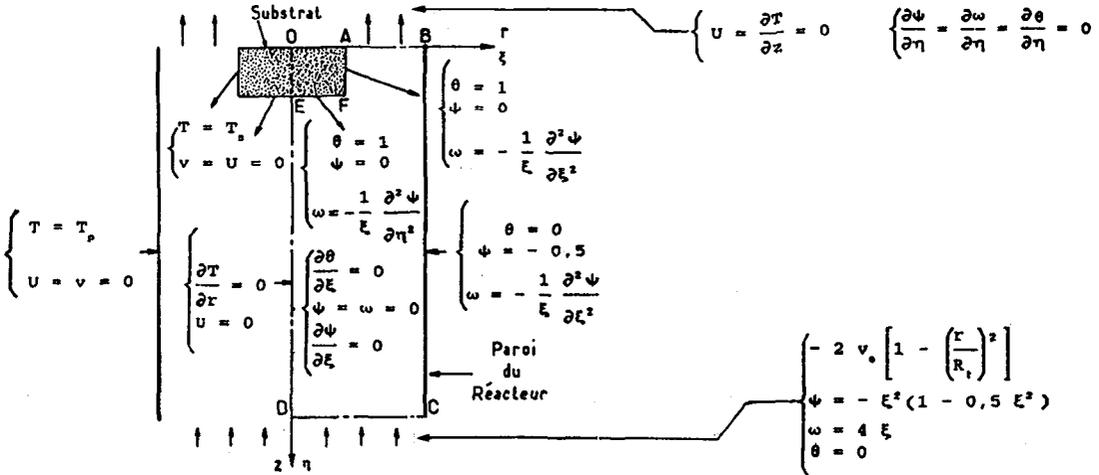


Figure 1 - Schéma du réacteur, conditions aux limites et dimensions.  
 (AB = 12mm, BC = 60mm, DC = R<sub>t</sub> = 20mm, ED = 52mm, AF = EF = R<sub>s</sub> = 8mm)

Les dérivées sont approximées, au noeud (i,j), par les différences centrées de type (3.1) et (3.2).

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f^{i+1} - f^{i-1}}{2 \Delta x} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f^{i+1} - 2f^i + f^{i-1}}{\Delta x^2} \quad (3.2)$$

Le système d'équations algébriques est résolu par une méthode itérative de Gauss-Seidel. Des paramètres de relaxation,  $\Gamma_\theta \sim 1$ ,  $\Gamma_\omega \sim 1$  et  $1 \ll \Gamma_\phi < 2$  sont introduits pour stabiliser la procédure de calcul et accélérer la convergence. Les cycles d'itérations successives sont arrêtés lorsque le critère de convergence (3.3) est satisfait pour chaque noeud.

$$\left| \frac{\Phi^{(N)} - \Phi^{(N-1)}}{\Phi_{\max}^{(N)}} \right| \ll \Gamma = 10^{-5} \quad (3.3)$$

Dans cette expression  $\Phi$  est l'une des variables à calculer respectivement au cycle itératif N et N-1.

Les calculs ont été faits à l'aide d'un ordinateur ND 550 (NORSK DATA). Le critère de convergence est généralement satisfait, après 500 itérations, avec un temps CPU de l'ordre de 5 minutes.

#### 4 - RESULTATS

Le modèle est appliqué dans le cas d'un réacteur tubulaire vertical de 40mm de diamètre intérieur et 500mm de hauteur. Nous avons limité la zone d'étude à une hauteur de 60mm. Le substrat, de forme cylindrique a un diamètre de 16mm et 8mm de hauteur.

Ce type de réacteur est couramment utilisé dans notre laboratoire. Le flux gazeux des réactifs est généralement très dilué dans un gaz vecteur (Ar, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>). On peut alors supposer, avec une bonne approximation, que le champ thermique ainsi que l'écoulement à l'intérieur du réacteur, sont imposés par le gaz neutre seul.

Il est intéressant d'étudier l'influence des divers paramètres notamment la nature du gaz porteur, la température, la pression et le débit gazeux à l'entrée du réacteur.

Les figures 2a- 2b représentent respectivement les distributions de température radiale et axiale avec une pression d'Azote de 40 KPa et un débit gazeux de 5,6 cm<sup>3</sup> /s. La température du substrat est supposée égale à 960°C et la température de la paroi est maintenue à 20°C. L'origine de l'axe Oz est choisie sur le substrat.

Les nombres adimensionnels caractérisant l'écoulement dans ces conditions ont pour valeurs : Re = 3, Pe = 2, Gr = 5.10<sup>4</sup>.

Ces figures révèlent de forts gradients au voisinage du substrat ainsi que l'établissement d'une couche limite thermique d'épaisseur sur l'axe de l'ordre de 8mm. Ce résultat est en assez bon accord avec celui trouvé par interférométrie holographique /3/.

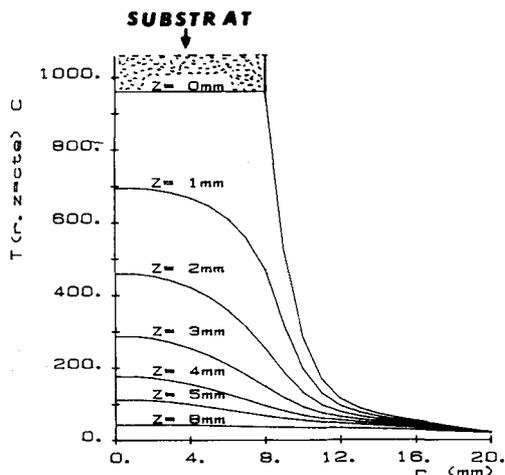


Figure 2a - Distribution radiale de température

Azote - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

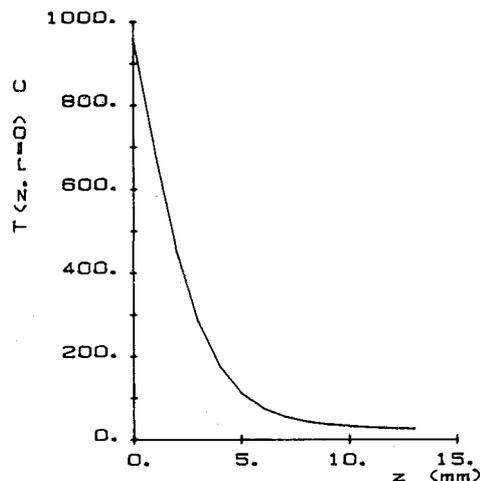


Figure 2b - Distribution axiale de température

Azote - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

En ce qui concerne l'aspect hydrodynamique, la figure 3a représente les lignes de courant (isovaleurs de la fonction de courant  $\psi$ ).

Cette figure met en évidence un phénomène de recirculation du gaz près du substrat. Il est dû à l'interaction entre le substrat chaud et la paroi froide du réacteur. Ce phénomène pourrait être gênant pour les processus de C.V.D. se déroulant dans les systèmes à paroi froide. En effet, il peut agir sur les temps de séjour des produits gazeux de la réaction.

Cette recirculation peut être éliminée en augmentant le débit gazeux

à l'entrée du réacteur. Nous avons représenté l'écoulement gazeux dans les conditions citées précédemment mais avec un débit très élevé, soit de  $40\text{cm}^3/\text{s}$  (vitesse moyenne à l'entrée du réacteur de l'ordre de  $8\text{cm/s}$ ) pour éliminer toute recirculation (Figure 3b).

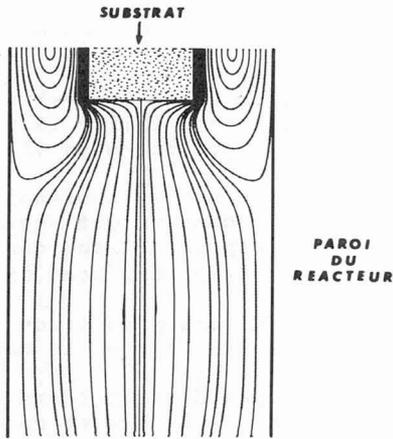


Figure 3a - lignes de courant ( $\psi = \text{constante}$ )  
Azote  $40\text{ KPa} - 5,6\text{cm}^3/\text{s} -$   
 $T_s 960^\circ\text{C} - T_p 20^\circ\text{C}.$

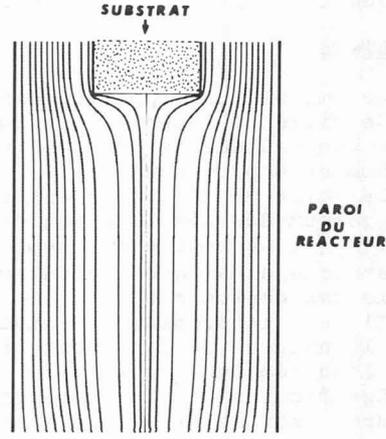


Figure 3b - lignes de courant  
Azote -  $40\text{ KPa} - 40\text{cm}^3/\text{s}$   
 $T_s 960^\circ\text{C} - T_p 20^\circ\text{C}$

En outre, il est important de remarquer le fort gradient de vitesse axiale qui s'établit dans le réacteur, engendré par la convection naturelle, Figure 4b.

En effet, le gaz peut avoir des vitesses nettement supérieures à celles de l'entrée du réacteur.

On peut majorer en première approximation la vitesse acquise par le gaz en convection naturelle par l'expression suivante :

$$V_c = \sqrt{g\beta\rho_s R_s (T_s - T_p)} = \sqrt{\frac{g\beta R_s^3 (T_s - T_p)}{\nu^2}} \frac{\nu}{R_s} = \sqrt{Gr} \frac{\nu}{R_s}$$

#### 4-1 Influence de la nature du gaz

##### 4.1.1. Cas de l'Argon

Ce gaz pourrait être utilisé comme gaz porteur dans les réactions de vapodéposition. Nous donnons ici, dans les mêmes conditions de température, de pression et de débit gazeux que précédemment, le champ de température radial s'établissant autour du substrat ainsi que la distribution de la vitesse axiale (4a,4b). Nous constatons l'analogie des résultats avec le cas de l'Azote, ce qui est conforme aux études expérimentales /3/. Ce résultat peut être expliqué par le fait que l'Argon et l'Azote ont des propriétés physiques très voisines.

##### 4-1-2 Cas de l'hydrogène

Ce gaz peut être utilisé aussi bien comme réducteur que comme gaz vecteur. Il serait intéressant d'étudier la thermique et l'hydrodynamique dans le réacteur sous courant d'Hydrogène. Les figures 5a et 5b nous montrent les champs de température qui s'établissent autour du substrat dans les mêmes conditions. On observe une diminution du gradient thermique autrement dit une augmentation de l'épaisseur de la couche limite thermique. Ceci peut être interprété par le fait, que d'une part l'Hydrogène est un gaz très conducteur de la chaleur, et d'autre part très léger; ce qui donne un nombre de Grashof faible ( $Gr=9.10^2$ ) par rapport aux autres gaz. Ainsi, le cas limite est réalisé lorsque  $Gr=0$ , le transfert de chaleur se fait uniquement par conduction, ce qui donne une couche limite s'étendant sur la totalité du réacteur.

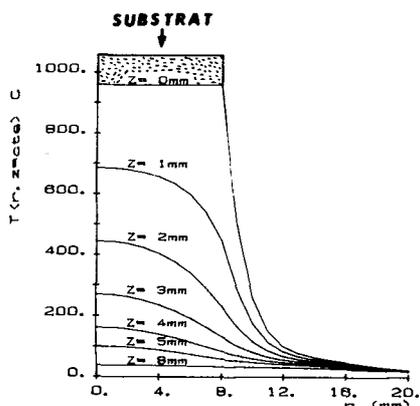


Figure 4a - Distribution radiale de température  
 Argon - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
 T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

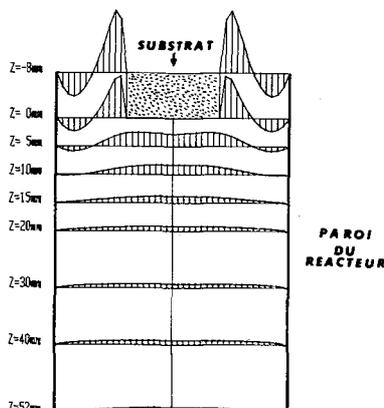


Figure 4b - Distribution radiale de la vitesse axiale  
 Argon ou Azote - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
 T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

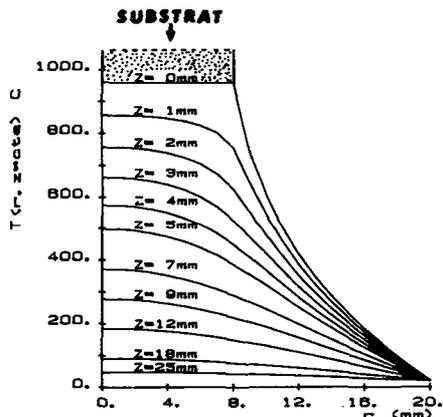


Figure 5a - Distribution radiale de température  
 Hydrogène - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
 T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

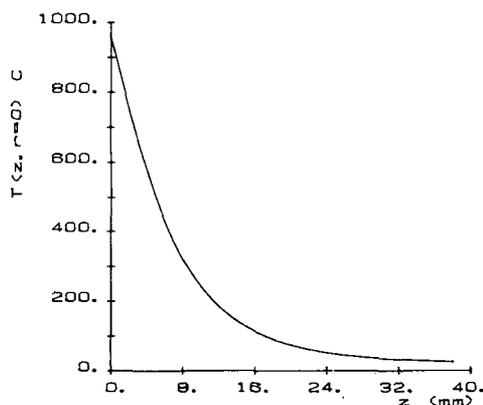


Figure 5b - Distribution axiale de température  
 Hydrogène - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
 T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C

D'un point de vue de l'hydrodynamique, nous notons que les lignes de courant sont moins serrées au niveau du substrat : l'influence de la convection est nettement moins importante. (figures 6a et 6b)

4-2 Influence de la pression

La pression totale dans le réacteur est un paramètre important. Pour le mettre en évidence, nous considérons l'Azote à 2.67 KPa, en maintenant fixes les autres paramètres. Une diminution de la pression entraîne, d'une part une diminution du nombre de Grashof (Gr est proportionnel à P<sup>2</sup>), et d'autre part, une augmentation de la vitesse à l'entrée du réacteur pour un débit fixe. Nous constatons que la couche limite thermique augmente considérablement et que l'écoulement ne présente pas de recirculation (figure 7a et 7b). Signalons que par interférométrie holographique /3/ le rôle de la pression sur la couche limite thermique a été mis en évidence.

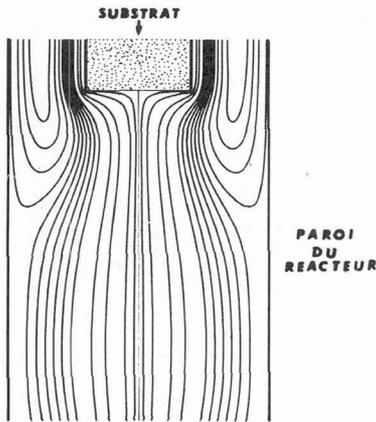


Figure 6a - Lignes de courant ( $\phi$ =constante).  
Hydrogène - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C.

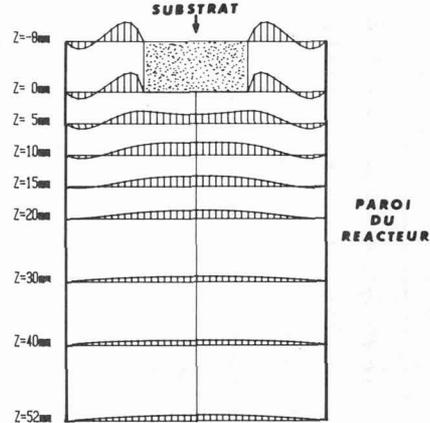


Figure 6b - Distribution radiale de la vitesse axiale.  
Hydrogène - 40 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C.

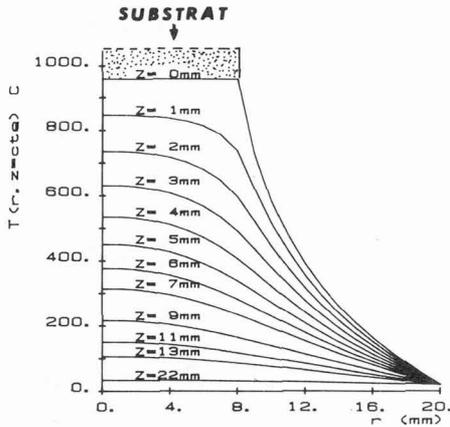


Figure 7a - Distribution radiale de température.  
Azote 2,67 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C.

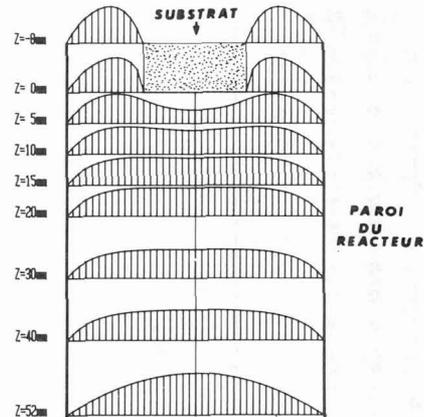


Figure 7b - Distribution radiale de la vitesse axiale.  
Azote 2,67 KPa - 5,6cm<sup>3</sup>/s -  
T<sub>s</sub> 960°C - T<sub>p</sub> 20°C.

4-3 Influence de la température de la paroi

Considérons le même réacteur tubulaire avec une paroi à la même température que le substrat, à savoir T<sub>s</sub> = T<sub>p</sub> = 800°C. Le gaz, N<sub>2</sub>, entrant par la partie inférieure du réacteur, est supposé à la température ambiante. Son profil de vitesse est parabolique avec une vitesse moyenne de 3cm/s soit un débit gazeux de l'ordre de 15,6cm<sup>3</sup>/s. La pression à l'intérieur du réacteur est de 40 KPa. La répartition des lignes de courant dans le réacteur (Figure 8a) nous montre que le gaz ne recircule pas. Ceci est dû au fait qu'il n'y a pas d'interaction thermique entre la paroi du réacteur et celle du substrat. L'effet de la gravité est moins important que dans le cas du réacteur à paroi froide. La figure 8b correspond aux profils radiaux de température pour différentes côtes z=cte, le long du réacteur. Nous constatons que la température est plus basse sur l'axe et qu'elle augmente en fonction de r jusqu'à la température de la paroi. Ce gradient diminue progressivement au fur et à mesure que le gaz s'approche du substrat.

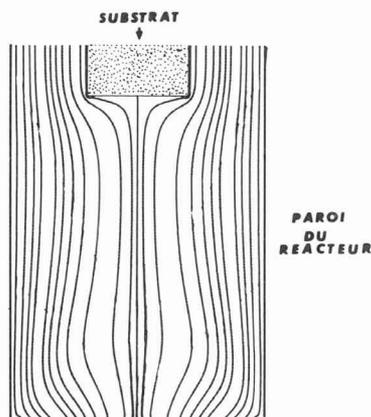


Figure 8a - lignes de courant  
( $\psi = \text{constante}$  dans un réacteur)  
à paroi chaude  
Argon 40 KPa -  $15,6 \text{ cm}^3/\text{s}$  -  
 $T_s 800^\circ\text{C}$  -  $T_p 800^\circ\text{C}$ .

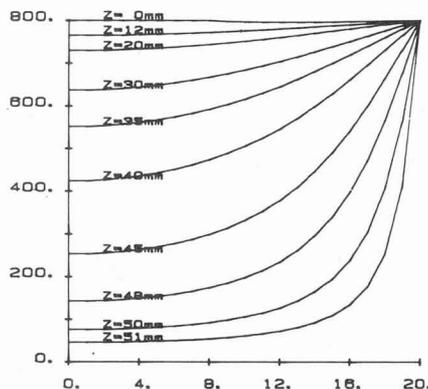


Figure 8b - Distribution radiale  
de température dans un réacteur  
à paroi chaude.  
Argon - 40 KPa -  $15,6 \text{ cm}^3/\text{s}$  -  
 $T_s 800^\circ\text{C}$  -  $T_p 800^\circ\text{C}$ .

## 5 - CONCLUSION

Cette étude a permis d'établir par le calcul les profils de température autour du substrat dans le cas d'un réacteur cylindrique à axe vertical couramment utilisé dans le laboratoire. L'influence des divers paramètres a été examinée.

Les résultats obtenus sont en bon accord avec les mesures réalisées par interférométrie holographique sur ce même réacteur /3/.

Par ailleurs, nous avons déterminé les écoulements sous balayage d'un gaz neutre. Ceci constitue une bonne approche pour modéliser les réactions de dépôt avec des teneurs en réactifs très faibles ou bien avec des cinétiques très lentes. Nous avons mis en évidence les effets de la convection naturelle. En effet, un phénomène de recirculation prend naissance dans les systèmes à paroi froide pour les faibles débits gazeux. Ce phénomène peut être très gênant; il pourrait perturber le processus de croissance cristalline. Or, il est toujours souhaitable dans les réactions de dépôt, d'éliminer les produits gazeux provenant de la réaction en les entraînant loin de la surface réactionnelle (substrat). En d'autres termes il est bon que le temps de séjour de ces espèces soit limité de façon à mieux contrôler les mécanismes de croissance. Nous avons précisé les conditions requises pour éviter la recirculation du gaz. Ainsi une augmentation du débit gazeux ou bien une diminution de la pression totale dans le réacteur agissent dans le sens d'une diminution des effets de la convection naturelle. Nous remarquons cependant que dans le système à paroi chaude analysé, ce phénomène est moins important, mais des gradients thermiques peuvent subsister. Ces gradients sont fonction entre autres du débit gazeux à l'entrée du réacteur. De plus, cette étude a également permis de mettre en évidence des gradients de vitesse qui peuvent agir sur la diffusion des réactifs vers le substrat et par suite sur l'uniformité de l'épaisseur du dépôt et sa composition.

## REMERCIEMENTS

Les auteurs remercient la Société Européenne de Propulsion (Division propulsion à poudres et composites, Centre de Recherches de Bordeaux. Le Haillan 33160 SAINT MEDARD EN JALLES) dont le financement a permis la réalisation de ce travail. Ils remercient également D. JEANDEL et C. SURRY (Ecole Centrale de Lyon 69131 ECYLLY) pour les fructueuses discussions qu'ils ont eues en ce qui concerne le traitement numérique des équations.

## NOMENCLATURE

a	: diffusivité thermique, $\lambda/\rho_o C_p$	$m^2/s$
Cp	: chaleur spécifique à P=Cte	J/Kg/K
g	: accélération de la pesanteur	$m^2/s$
Gr	: nombre de Grashof, $g\beta(T_s - T_p)R_t^3/\nu^2$	
P	: pression totale dans le réacteur	Pa
Pe	: nombre de Peclet, $RePr$	
Pr	: nombre de Prandtl	
r	: coordonnée radiale	m
Re	: nombre de Reynolds, $V_o R_t/\nu$	
R <sub>s</sub>	: rayon du substrat	m
R <sub>t</sub>	: rayon du réacteur	m
$\bar{T}$	: température moyenne $(T_p + T_s)/2$	K
T <sub>p</sub>	: température de la paroi du réacteur	K
T <sub>s</sub>	: température du substrat	K
U	: vitesse radiale	m/s
V	: vitesse axiale	m/s
V <sub>o</sub>	: vitesse moyenne à l'entrée du réacteur	m/s

Symboles grecs

$\beta$	: coefficient d'expansion thermique	
$\eta$	: coordonnée axiale adimensionnelle, $z/R_t$	
$\theta$	: température adimensionnelle = $(T - T_p)/(T_s - T_p)$	
$\bar{\lambda}$	: conductivité thermique moyenne	w/m/K
$\nu$	: viscosité cinématique moyenne	$m^2/s$
$\psi$	: fonction de courant	
$\rho_o$	: densité de référence, PM/RT <sub>p</sub>	Kg/m <sup>3</sup>
$\xi$	: coordonnée radiale adimensionnelle, $r/R_t$	
$\omega$	: vorticit�	

## BIBLIOGRAPHIE

- /1/ Eversteyn, F.C., Severin, P.J.W., Brekel, V.D. and Peek, H.L., J. Electrochem. Soc. 117 (1970) 925.
- /2/ Wahl, G., Hoffmann, R., Rev. Int. Htes Temp. Réfrac. 17 (1980) 7.
- /3/ Bénét, S., Bergé, R., Brunet, S., Charar, S., Armas, B., Combescure, C., Rev. Int. Hts. temp. Réfrac. 19 (1982) 77.
- /4/ Bes, R.S., Mora, V.C., Bénét, S., Armas, B., Chem. Engin. World Congres III, Tokyo Japan (1986)
- /5/ Dazard, J.B., Bouix, J., Favre, R., and Vincent, H., Proc. of the 3rd European Conf. On CVD, Ed Hintermann, H.E., (1980) 104
- /6/ Bar, V.S., Gilbert, S.L., J. Of Cristal Growth, 31 (1975) 284
- /7/ Schlichting, H., Boundary Layer Theory, McGraw Hill N.Y., 6th Ed, (1968) 26
- /8/ Vandenbulcke, L., Vuillard, G., J. Electrochem. Soc., (1970) 278
- /9/ Jensen, Houthan, C., Moffat, H., Proc. Of the Fifth European Conf. On CVD, Ed. Carlsson, J.O., and Lindstr m, J., (1985) 73
- /10/ Condoret, J.S., Constant, G., Couderc, J.P., Demengeot, V., Duverneuil, P., Entropie n°125/126. (1985) 136
- /11/ Sugawara, K., J. Electrochem Soc. 119 (1972) 1749
- /12/ Mazille, J.E., Thèse 3 me cycle, Grenoble (1973).