

기상반응을 이용한 초미립 SiC 입자 제조에 관한 수치모사

The Numerical Simulation for Ultrafine SiC Powders Synthesis by Using the Vapor Phase Reaction

유용호 · 어경훈 · 소명기

강원대학교 신소재공학과 : 0361)250-6265

1. 서론

본 연구에서는 기상반응을 이용한 초미립의 SiC입자를 제조하는 공정을 모델링하여 SiC 초미립자의 생성 및 성장 메커니즘을 이론적으로 규명하고 이론치와 실험치를 비교 평가하여 고기능성 SiC초미립 분말을 제조하기 위한 공정변수의 영향을 분석하여 궁극적으로 공정 최적화 조건을 찾고자 하였다. 이를 위해 튜브형 가열로 반응기를 이용하였으며 반응기내의 열전달식, 반응물의 수지식, SiC 입자의 0차, 1차, 2차 모멘트에 대한 수지식을 고려하였으며 에어로졸의 동력학식에서는 화학 반응속도, 에어로졸 생성속도, 에어로졸의 충돌, 확산, 열영동(thermophoresis)현상등을 고려하였다. 기존의 모델 연구방법으로 SiO₂와 TiO₂ 입자에 대한 생성, 성장 및 전달현상에 대한 연구결과가 보고되어 있으나 초미립 SiC 입자에 대한 연구는 거의 이루어지지 않고 있다. 본 모델 연구에서는 SiC 입자의 튜브 내 축방향에 대한 상미분 방정식을 이용하였으며 에어로졸 입도분포의 가정으로는 log-normal분포식을 가정하였다. 반응변수로서 반응온도, 반응물 농도, 기체 유량등을 변화시키며 튜브형 가열로 반응기에서 생성되는 SiC미립자의 크기와 농도를 계산하였다.

2. 실험방법

반응에 가장 중요한 영향을 미치는 변수인 반응온도 구배는 반응관의 거리(Z)에 따라 측정하였으며 이를 regression하여 위치에 대한 함수로 정의하여 사용하였고 제시된 C, M₀, M₁, M₂ 각각에 대한 모델식은 4개의 연립 상미분방정식으로서 Fehlberg 45차 Runge-Kutta method를 이용한 RKF45 subroutine을 사용하여 적분하였다. 수치모사에 의하여 반응기 내에서의 C, M₀, M₁, M₂의 변화를 계산하였으며, 튜브형 가열로 반응기에 의한 SiC의 변환율, SiC의 평균 입자크기, 입자의 표준편차등을 계산하였으며, 실험치와 이론치의 입자크기를 비교 평가하였다.

3. 결과

튜브형 가열로 반응기에서 연속식, 물질수지식, 에어로졸의 0차, 1차, 2차모멘트식을 고려하여 모델식을 세워 SiC 초미세 분말 제조공정의 수치모사 결과를 제시하였다. 계산 결과 반응온도가 낮을수록, 또는 TMS농도와 총유량이 높을수록 생성된 SiC 입자의 농도가 높게 나타났고, 반면에 반응온도와 TMS의 초기농도가 높을수록 그리고 총유량이 감소할수록 SiC 입자의 크기는 증가하였다. 제시된 이론치와 실험치의 입자 크기를 비교한 결과 유사한 경향을 나타내었다.