

# Simulation of Flow Field and Optimization of Process Uniformity in Semiconductor Thin Film CVD Equipment Chamber

Yanli Qi

Piotech Chuangyi (Shenyang) Semiconductor Equipment Co., Ltd., Shenyang, Liaoning, 110171, China

## Abstract

This article focuses on the theoretical exploration of the flow field in the cavity of semiconductor thin film chemical vapor deposition (CVD) equipment, and systematically analyzes the inherent correlation between flow field characteristics and process uniformity. By reviewing the theoretical application framework of computational fluid dynamics in CVD chamber flow field simulation, the influence mechanism of key factors such as inlet mode, gas parameters, and chamber structure on flow field distribution was explored. The construction principle of the flow field simulation model was explained from a theoretical perspective, and the variation laws of flow field characteristics under different conditions were analyzed. Based on theoretical analysis, potential paths for optimizing process uniformity were proposed.

## Keywords

semiconductor thin film; CVD equipment; Cavity flow field; Numerical simulation; Process optimization

## 半导体薄膜 CVD 设备腔体流场仿真与工艺均匀性优化研究

戚艳丽

拓荆创益(沈阳)半导体设备有限公司, 中国·辽宁 沈阳 110171

## 摘要

本文围绕半导体薄膜化学气相沉积(CVD)设备腔体流场展开理论探索,系统分析了流场特性与工艺均匀性之间的内在关联。通过梳理计算流体力学在CVD腔体流场仿真中的理论应用框架,探讨了进气方式、气体参数及腔体结构等关键因素对流场分布的影响机制。从理论层面阐述了流场仿真模型的构建原理,剖析了不同条件下流场特性的变化规律,并基于理论分析提出了工艺均匀性优化的潜在路径。

## 关键词

半导体薄膜; CVD 设备; 腔体流场; 数值仿真; 工艺优化

## 1 引言

化学气相沉积作为制备高质量半导体薄膜的核心技术,其工艺过程的稳定性与精确性直接决定了薄膜的物理化学性能。CVD 设备腔体作为薄膜沉积的核心反应空间,其内流场特性对反应气体的传输、混合、吸附及反应过程具有决定性影响,是制约薄膜均匀性的关键因素。

随着计算技术的进步,数值仿真方法已成为研究复杂流场问题的重要手段。通过构建精准的物理模型与数学方程,CFD 技术能够直观呈现腔体内气体流动、热量传递与物质运输的动态过程,为理解流场与工艺均匀性的关联提供了有效工具。当前,学界对 CVD 腔体流场的研究已从早期

的经验性探索转向理论驱动的系统性分析,但在流场多物理场耦合机制、复杂结构下的流动规律及优化策略的普适性等

## 2 CFD 仿真模型的理论构建

计算流体力学为 CVD 腔体流场的理论研究提供了系统化的分析工具,其仿真模型的构建需要基于严谨的物理理论与合理的简化假设,以准确捕捉流场的关键特性。仿真模型的构建过程涉及几何建模、网格划分、控制方程选择及边界条件设定等多个环节,每个环节的理论合理性都直接影响仿真结果的可靠性。

几何模型的构建是流场仿真的基础,其理论核心在于在保证关键结构特征的前提下实现合理简化。实际 CVD 腔体结构往往较为复杂,包含进气系统、排气系统、衬底承载台、加热装置等多个部件,完整复刻所有细节会导致计算量

【作者简介】戚艳丽(1985-),女,中国黑龙江佳木斯人,硕士,工程师,从事集成电路高端薄膜装备制造研究。

急剧增加,甚至超出当前计算能力。因此,几何建模过程中需要基于理论分析对结构进行简化处理,对于对流场影响较小的细微结构,如微小的连接缝隙、表面粗糙度等,可以适当忽略;而对于进气口、出气口、喷淋头等对流场分布起决定性作用的关键部件,则需精确建模。几何模型的简化程度需要在计算精度与效率之间寻求平衡,通常需通过理论分析判断结构特征对流动的影响程度,确定合理的简化方案。例如,当研究重点为气体在衬底表面的分布时,对腔体远端的非关键区域可采用较大程度的简化,以减少计算资源的消耗。

网格划分作为连接几何模型与数值计算的桥梁,其理论依据在于将连续的流场空间离散为有限的计算单元,通过数值方法求解控制方程。在网格划分过程中,需要基于流动理论对网格进行优化设计,在流场变化剧烈的区域,应采用加密网格以捕捉局部流动细节;而在流场变化平缓的区域,则可适当降低网格密度,以提高计算效率。网格类型的选择也需根据腔体结构特征与流动特性确定,对于复杂几何形状,非结构化网格具有更好的适应性;对于规则结构区域,结构化网格能够提供更高的计算精度。此外,网格独立性验证是确保仿真结果可靠性的重要环节,通过理论分析不同网格密度下计算结果的变化趋势,确定满足精度要求的最小网格规模。

控制方程的选择需基于流场的物理特性,反映流动过程的基本规律。CVD腔体流场的仿真通常采用连续性方程、动量方程、能量方程及组分输运方程构成的方程组,描述质量、动量、能量及物质组分的守恒规律。连续性方程基于质量守恒定律,反映流体密度与速度场之间的关系;动量方程描述流体运动与所受作用力之间的平衡,包含惯性力、压力梯度、粘性力等作用项;能量方程基于能量守恒定律,考虑热传导、对流及化学反应热等能量传递过程;组分输运方程则描述各反应气体组分的浓度变化,包含对流、扩散及化学反应源项。对于不可压缩流体,可采用简化的连续性方程;对于高马赫数流动,则需考虑流体的可压缩性。

边界条件的设定是仿真模型理论合理性的重要保障,其需要基于实际物理过程进行准确描述。进气口边界条件通常根据工艺参数设定,包括气体流速、温度、组分浓度等,理论上应反映气体进入腔体时的初始状态。对于速度入口边界,需根据质量流量守恒计算入口流速;对于压力入口边界,则需设定入口总压与静压。出气口边界通常设定为压力出口,反映腔体的排气压力,理论上应保证气流在出口处充分发展,各物理量的法向梯度为零。壁面边界条件的设定需考虑流体与壁面的相互作用,对于固体壁面,通常采用无滑移边界条件,即壁面处流体速度为零;对于加热壁面,需根据加热方式设定温度边界或热流边界,反映壁面的传热特性。衬底表面作为薄膜沉积的关键区域,其边界条件还需考虑化学反应动力学特性,设定合理的反应速率模型,以反映反应

物在表面的消耗与产物的生成过程。对称边界条件可用于具有几何对称性的腔体结构,通过理论分析利用对称性简化计算模型,减少计算量。<sup>[1]</sup>

### 3 流场特性的理论影响因素分析

进气方式、气体参数及腔体结构作为影响流场特性的三大核心因素,其理论作用规律构成了流场调控的基础。

进气方式通过决定气体初始流动方向与分布形态,对整个腔体流场产生根本性影响。轴向进气方式中,气体沿腔体轴线方向进入反应空间,理论上易形成中心区域的高速射流,这种射流效应会导致气体在衬底表面形成中心高边缘低的流速分布,进而造成反应物浓度的径向差异。射流的强度与范围受入口流速与腔体直径比的影响,流速越高、腔体直径越小,射流效应越显著,流场的不均匀性也越强。径向进气方式通过腔体侧壁引入气体,理论上能够更快地实现气体在横截面上的扩散,但由于气流冲击壁面后的反射作用,易在进气口对侧形成回流区,导致该区域气体更新缓慢,形成浓度低谷。喷淋式进气作为一种优化的进气方式,通过多孔结构将气体分散为多个细小气流,理论上可实现气体的初步均匀分布,减少射流与回流现象。喷淋头的结构参数,如孔径大小、分布密度、喷射角度等,对气体初始分布具有关键影响,合理设计的喷淋结构能够有效降低流速梯度,为后续流场均匀性奠定基础。

气体参数的变化通过改变流动状态与传输特性,对流场分布产生显著影响。气体流量作为核心参数,其理论影响主要体现在对雷诺数的调控上,流量增加会导致雷诺数增大,推动流动状态从层流向湍流过渡。在层流范围内,适当提高流量可加快气体更新速率,减少副产物积累,但过高流量会使流动进入过渡流或湍流状态,引发流场扰动。气体组分比例通过改变混合气体的物理性质影响流场特性,不同气体的密度、粘度差异会导致流动行为的变化,尤其在多组分气体混合过程中,组分扩散效应可能引发自然对流,改变流场结构。气体进口温度不仅影响气体物理性质,还会改变腔体的温度梯度分布,进而影响自然对流强度。当进口气体温度与腔体壁面温度差异较大时,自然对流作用增强,可能与强制对流形成复杂的耦合效应,破坏流场的稳定性。

腔体结构作为流场的约束空间,其几何特征直接决定流动路径与分布形态。腔体长径比是影响流场均匀性的关键参数,理论上过长的腔体易导致气体在流动过程中逐渐衰减,形成沿轴向的浓度梯度;而过大的直径则可能使中心区域气体流速过低,形成滞流区。内部构件的布置对局部流场具有重要调控作用,气体分布板通过节流与分流作用,能够有效改善进气的均匀性,其开孔率与分布方式需要根据流动理论进行优化设计。衬底承载台的形状与高度会改变近表面流场特性,合理的设计能够促进反应气体向衬底表面传输,减少边界层厚度,提高传质效率。挡板等导流结构可用于抑

制回流与漩涡,引导气体流动方向,但其布置不当可能引发新的流动扰动,反而降低流场均匀性。<sup>[2]</sup>

#### 4 工艺均匀性优化的理论路径

基于 CVD 腔体流场特性的理论分析,工艺均匀性优化需要从流场调控、参数匹配及结构设计等多个维度构建系统性策略,通过理论指导实现薄膜沉积过程的精准控制。优化策略的核心在于建立流场特性与工艺均匀性之间的定量关联,通过调控关键影响因素实现目标流场的构建。

流场仿真驱动的参数优化是实现工艺均匀性的重要路径,其理论基础在于通过数值模拟揭示参数变化对流场的影响规律,建立参数、流场、均匀性的映射关系。进气参数的优化需重点关注流量与流速的匹配,基于层流流动理论,在保证反应气体充分更新的前提下,控制雷诺数处于稳定层流范围,减少湍流扰动。进气组分的优化需考虑各组分的扩散系数差异,通过调整组分比例与进口浓度,平衡不同气体的传输速率,减少因扩散差异导致的浓度不均匀。温度参数的优化应致力于构建均匀的温度场分布,减少自然对流干扰,理论上可通过优化加热装置布局、控制升温速率等方式实现温度梯度的最小化。同时,需考虑温度与气体物理性质的耦合效应,通过理论计算确定最佳温度区间,兼顾反应活性与流场稳定性。

腔体结构的优化设计是改善流场均匀性的根本途径,其理论依据在于通过改变流动空间形态调控流场分布。进气系统的结构优化需聚焦于气体的初始分布均匀性,喷淋头设计应基于流体分布理论,采用多孔均匀分布结构,使气体喷出后形成均匀的速度场。理论研究表明,喷淋孔的孔径与间距需根据气体流量与粘性特性进行匹配,确保各孔道流量一致。腔体扩张角的优化可有效抑制射流效应,通过理论计算确定合理的扩张角度,使高速气流在进入腔体后平稳减速,减少中心与边缘的流速差异。内部导流结构的布置应基于流动仿真结果,在易形成回流与死区的位置设置导流板,引导气体流动路径,消除局部滞流现象。衬底区域的结构优化需重点关注近表面流场特性,通过设计合理的承载台高度与形状,促进反应气体向衬底表面的传输,减少边界层厚度,提高浓度分布均匀性。

多物理场耦合调控是应对复杂流场问题的理论创新方向,其核心在于综合考虑流体流动、热量传递与化学反应的

相互作用,建立多场耦合的理论分析框架。流场与温度场的耦合调控需通过理论计算量化自然对流与强制对流的相互作用,通过优化进气参数与温度分布,实现两种对流效应的协同或抑制,避免流场扰动。流场与化学反应的耦合调控应基于反应动力学理论,分析不同流场条件下反应速率的分布规律,通过调控流场使反应速率的空间分布与目标薄膜均匀性匹配。多目标优化算法为复杂参数空间的寻优提供了有效工具,理论上可通过建立以均匀性、效率、能耗为目标的优化模型,采用遗传算法、粒子群算法等智能优化方法,求解 Pareto 最优解集,为工艺参数选择提供理论依据。这种多目标优化思路能够综合平衡各项性能指标,避免单一目标优化导致的顾此失彼问题。

动态调控策略为应对工艺波动提供了理论解决方案,其核心在于建立流场特性的实时监测与反馈调节机制。基于流场仿真的虚拟传感技术可通过理论模型预测关键位置的流场参数,为实时调控提供依据。动态进气调节系统能够根据流场监测结果实时调整各进气口的流量与比例,实现流场的在线优化。理论研究表明,采用自适应控制算法可有效补偿工艺扰动对流传场的影响,维持流场稳定性。此外,基于机器学习的工艺优化方法通过挖掘历史仿真数据与实验数据,建立流场参数与工艺均匀性之间的非线性映射模型,实现工艺参数的智能预测与优化,为复杂 CVD 过程的精准调控提供了新的理论路径。

#### 5 结论

本研究通过计算流体力学(CFD)数值模拟方法,对半导体薄膜 CVD 设备腔体的流场特性进行了系统性仿真分析,探究了气体流动状态、压力分布及反应物输运行为对薄膜沉积均匀性的影响规律。基于仿真结果,提出了优化腔体结构设计、调整进气参数及优化晶片台温度分布的工艺改进方案,显著提升了薄膜厚度与成分的均匀性。<sup>[3]</sup>

#### 参考文献

- [1] 吴勇,郭于洋,孙清云,等.CVD金刚石薄膜与涂层制备技术及关键领域应用研究进展[J].表面技术,1-23.
- [2] 潘红星,吴晓磊,宋军营,等.基于QC方法降低CVD单晶金刚石激光加工裂纹研究[J].超硬材料工程,2025,37(02):33-38.
- [3] 赵丹,向星承,詹宇,等.立式雾化辅助CVD系统的设计与实现[J].微纳电子技术,2025,62(01):158-163.