

管式 PECVD 反应室流场仿真优化及应用研究

周佑丞^{1,2,3}, 张春成^{1,2,3}, 赵志然^{1,2,3}, 谭 瞻^{1,2,3}, 王 锦^{1,2,3}, 成秋云^{1,2,3}

(1. 湖南红太阳光电科技有限公司, 湖南 长沙 410000; 2. 国家光伏装备工程技术中心, 湖南 长沙 410000;

3. 中国电子科技集团第四十八研究所, 湖南 长沙 410000)

[摘 要] 利用 Star-CCM 流体仿真软件,按照常规工艺参数,对管式等离子增强化学气相沉积(PECVD)设备反应室腔体进行三维建模仿真,研究搭载不同结构石墨舟的反应室腔体内部流场分布,结合仿真数据,分组实验验证镂空石墨舟块对镀膜均匀性的影响。实验结果表明:镂空舟块能有效改善石墨舟的舟中及舟尾舟片间的气流分布,提高薄膜生长的均匀性。

[关键词] PECVD; 反应室; 石墨舟; 流场动力仿真; 镀膜均匀性

[中图分类号] TN304.55

[文献标志码] B

[文章编号] 1003-8884(2022)02-0052-04

DOI:10.19611/j.cnki.cn11-2919/tg.2022.02.012

0 引言

目前,在半导体或光伏制造领域中,等离子增强化学气相沉积(PECVD)技术被广泛应用于沉积高品质纳米级薄膜^[1-2],随着硅片尺寸日益增大和工艺时间逐步压缩,镀膜均匀性成为了工艺沉积过程中的关键难点^[3]。

影响镀膜工艺均匀性的因素主要有温度、流速、压力、淀积功率^[4]等,近几十年来,国内外科研学者针对前述因素做了大量的研究工作。夏焕雄^[5]等对四种不同稳流孔反应腔室进行了热流场仿真,得到了腔室内温度与流场的分布特性。李志明^[6]等对 MOCVD 反应腔室进行流体仿真,研究了薄膜厚度分布与反应室涡旋的关系。Ding, JN^[7]等研究了在 PECVD 系统中,电极等工艺参数对生长薄膜均匀性的影响。

本文针对大尺寸硅片提出了一种镂空石墨舟块结构用于改善石墨舟中、舟尾中间硅片片内/片间均

匀性,以某企业生产的管式 PECVD 反应腔室进行三维建模仿真,分析对比不同结构石墨舟下的反应室内部流场分布,并实验验证镂空舟块对镀膜均匀性的改善情况。

1 仿真模型建立

1.1 反应室结构模型

图 1 所示为管式 PECVD 反应腔室的简化三维模型图,其工艺原理为:装满硅片的石墨舟被送入石英反应腔体,通过炉尾端电极引入装置与高频电源可靠接触,工艺气体从炉口法兰进入,压力稳定后,高频电源辉光放电产生等离子体促进气体分子分解、电离、化合沉积在硅片上形成薄膜,反应完的气体通过真空泵从炉尾抽口抽走。

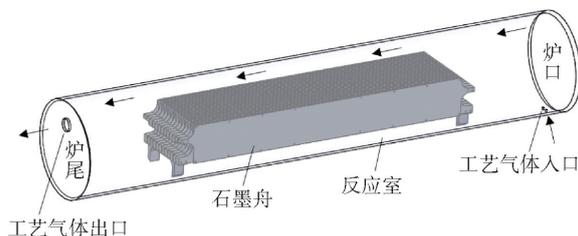


图 1 管式 PECVD 反应室腔体简化模型示意图

图 2 所示为两种石墨舟结构对比,石墨舟块主要用于支撑固定石墨舟片,在不影响强度的情况下,对石墨舟舟块镂空,仿真观察镂空前后石墨舟片间的气流分布,验证气流场与石墨舟结构的相应关系。

[收稿日期] 2021-12-02

[作者简介] 周佑丞(1987—),男,湖南常德人,工程师,硕士,主要从事光伏装备/工艺设计研发及项目管理工作,现任湖南红太阳光电科技有限公司产品一部 PECVD 产品经理。

[基金项目] 湖南省创新型省份建设专项(2019TP2048)

[引用格式] 周佑丞,张春成,赵志然,等.管式 PECVD 反应室流场仿真优化及应用研究[J].有色设备,2022,36(2):52-55.

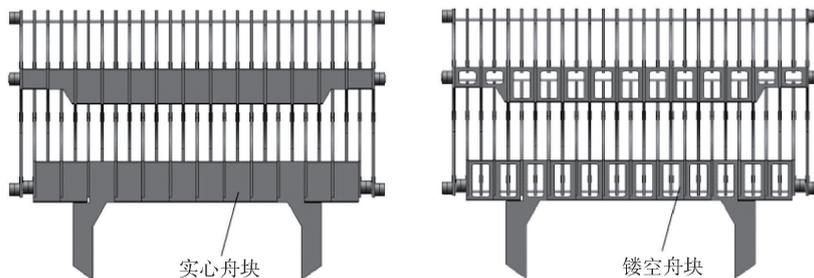


图2 两种石墨舟侧视图

1.2 数学仿真模型

PECVD 沉积反应通常发生在 (700 ~ 900) K、(180 ~ 260) Pa 条件下, 反应室内气体流动很低, 可以认为是连续不可压气体^[8]。本文主要研究不同石墨舟结构下反应腔体内的气流分布, 暂不考虑气体分子间的化合反应及温度场的影响, 故仿真控制方程主要包括连续性方程和动量守恒方程。

其中, 连续性方程:^[9]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (1)$$

式中 ρ —气体密度;

V —气体速度矢量;

t —时间。

动量守恒方程:

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_i V) = \nabla \cdot (\mu \nabla u_i) - \frac{\partial P}{\partial x_i} + s_{M_i} \quad (2)$$

式中 μ —气体的动力粘度;

P —石英管内静压力;

u_i —石英管内工艺气体速度分量;

$\frac{\partial P}{\partial x_i}$ —管内静压力沿 X 、 Y 、 Z 轴三个方向的梯度;

s_{M_i} —除压力源外的沿 X 、 Y 、 Z 轴三个方向的广义源项。

1.3 边界条件

本文使用 Star-CCM 流体仿真软件建立连续流体模型, 进口边界设置为 Mass Flow Inlet, 出口边界设置为 Pressure Outlet, 为简化模型, 采用单一的 NH_3 质量流作为流体介质, 其流速设置为 10 L/min, 出口处压力设置为 300 Pa, 流体模型设置为标准 K-Epsilon Turbulence 湍流模型^[8]。

2 流场仿真结果分析

图3所示为两种石墨舟在反应室内部的整体流

线仿真云图对比, 由图可以明显看出, 镂空的石墨舟结构, 内部流体速率明显提升, 且流动更加顺畅, 整体呈螺旋型流线由炉口流向炉尾。

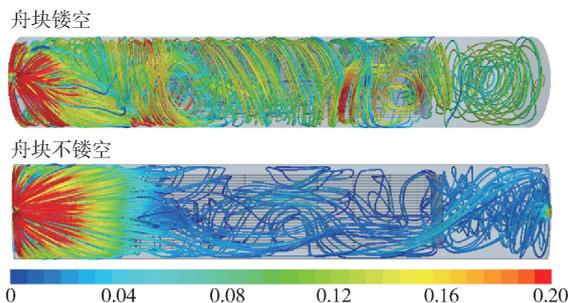


图3 反应室内整体流线仿真云图对比

为更好的观测仿真结果, 选取石墨舟正负极板的中间面为观测面, 石墨舟采用 27 片舟叶对称设计, 共 26 个监测面。本文选取左侧第 1、第 13 两个监测平面分别研究舟块镂空对石墨舟外片及中间片流场的影响。

图4、图5所示分别为第1监测面、第13监测面流线仿真云图对比, 由图分析可知, 石墨舟块镂空后, 监测面速度明显提升, 整体流率明显增加, 有利于石墨舟舟尾的气体沉积反应; 同时, 监测面1的流率明显高于监测面13, 即边片的反应速率高于中间片的反应速率, 改进石墨舟后, 监测面13的流率也得到显著提升, 即石墨舟舟块镂空对舟尾硅片及舟

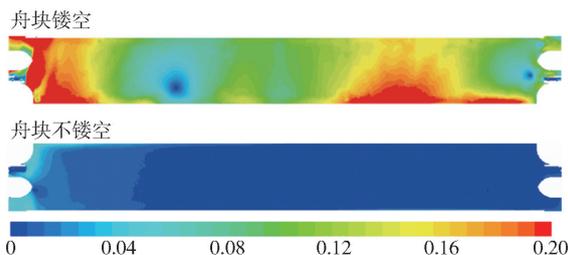


图4 第1监测面流线仿真云图对比

中硅片的气体沉积均匀性均有明显的改善效果。

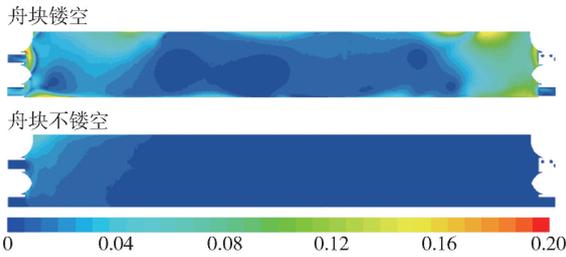


图 5 第 13 监测面流线仿真云图对比

3 实验验证结果分析

基于上述仿真分析结论,笔者选取某企业 2GW PERC 电池生产线 PECVD 设备做为验证平台,分别搭载实心舟块和镂空舟块的石墨舟,验证两种情况下镀膜均匀性的技术指标。图 6 为换上镂空舟块的石墨舟实拍图。



图 6 镂空 210 硅片石墨舟

实验采取相同的温度、气体流量及放电功率,硅片采用单晶 210 硅片,厚度为 $170 \pm 30 \mu\text{m}$,实验取片按舟头、舟中、舟尾,每段各取两外侧及中间片共计 9 片,采用椭圆仪测量膜厚,片内均匀性按 5 点取

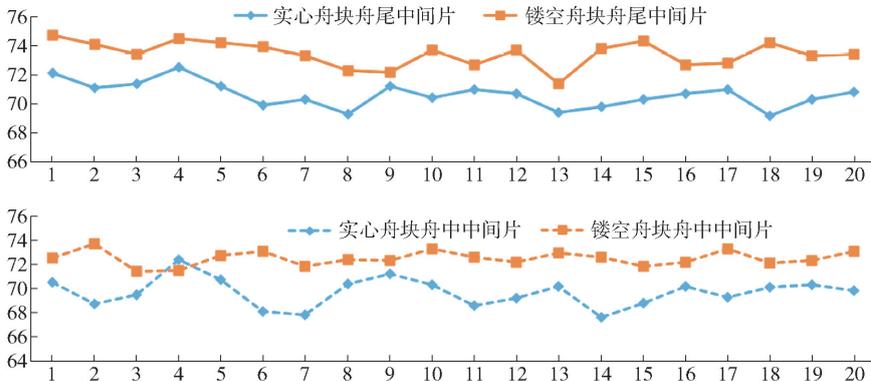


图 8 两种石墨舟舟中舟尾中间片膜厚片内平均值对比

样法,均匀性计算公式为:均匀性 = (最大值 - 最小值) / (2 × 平均值) × 100%。

图 7 所示为两种石墨舟膜厚片间及片内均匀性对比,由图可知,采用镂空舟块,片间均匀性偏差及片内均匀性偏差均有一定程度降低。舟块的镂空改善了反应气体在石墨舟极板之间的流动,促使反应气体在极板之间淀积更充分,特别是舟中及舟尾中间槽的改善效果明显。

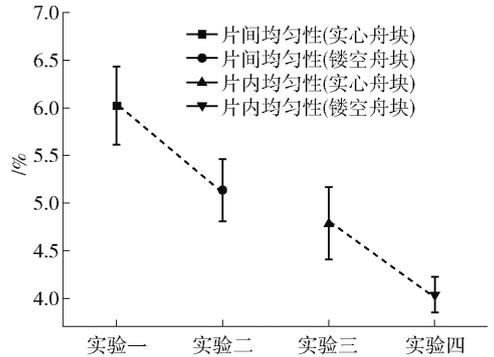


图 7 两种石墨舟片间片内均匀性对比

图 8 所示为两种石墨舟舟中中间片及舟尾中间片的膜厚片内平均值对比,由图可明显看出,采用镂空舟块,舟中和舟尾中间硅片膜厚片内平均值提高了 2~3 nm,极大的改善了传统石墨舟中间硅片发红偏薄的工艺情况,有效的提高了整舟的片间均匀性。

4 结论

本文针对 PECVD 大尺寸硅片镀膜均匀性的难点,从改善气体流速的角度出发,针对石墨舟进行特殊设计,解决舟中和舟尾中间硅片的发红偏薄问题,从而提高整舟的片间均匀性。

利用 Star-CCM 流体仿真软件对实际反应室结构进行一定的简化建模, 观测气体在石墨舟极板及反应腔室内的流动分布, 重点监测镂空舟块对气体流速的改善效果。最后根据仿真结果, 在某企业 PERC 电池产线 PECVD 机台进行实验验证, 实验结果表明, 镂空石墨舟的片间均匀性及片内均匀性均有一定的提高。

PECVD 工艺反应是一个复杂的多物理场、多相参数耦合的化学沉积反应过程, 更准确全面的仿真除了流场, 还需要考虑热场、等离子场、电磁场等多相化学耦合反应, 后续会从热场及温度的角度出发, 考虑进一步优化整舟均匀性的各项措施。

[参考文献]

- [1] 陶涛, 苏辉, 谢自力, 等. PECVD 法氮化硅薄膜生长工艺的研究[J]. 微纳电子技术, 2010, 47(5): 267 - 272.
- [2] 郑达敏, 赵增超, 刘舟, 等. 高效太阳能电池技术及其核心装备国产化进展[J]. 有色设备, 2021(5): 78 - 82.
- [3] S. Johannes, G. Luca, Marc H., et al, Surface passivation of crystalline silicon by plasma-enhanced chemical vapor dep-

osition double layers of silicon-rich silicon oxynitride and silicon nitride, [J]. Appl. Phys., 2011, 109(3): 034105.

- [4] H. F. W. Dekkers, S. D. Wolf, G. Agostinelli, et al., Requirements of PECVD SiNx:H layers for bulk passivation of mc-Si, Sol. Energ. Mat. Sol. C., 2006, 90(18 - 19): 3244 - 3250.
- [5] 夏焕雄, 向东, 牟鹏, 等. PECVD 腔室热流场数值仿真研究[J]. 人工晶体学报, 2012, 41(4): 1030 - 1036.
- [6] 李志明, 郝跃, 张进成, 等. 氮化物 MOCVD 反应室流场的仿真与分析[J]. 人工晶体学报, 2010, 39(1): 226 - 231.
- [7] Ding JN, Zhao YZ. Effect of electrode architecture and process parameters on distribution of SiH₃ in a PECVD system[J]. Vacuum, 2011, 86(3): 344 - 349.
- [8] 蔡健栋, 李健, 王钢, 等. 多孔介质在 PECVD 应用的仿真研究[J]. 机械设计与制造, 2017(5): 123 - 126.
- [9] 王福军. 计算流体力学分析-CFD 软件原理与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004.

Simulation Optimization and Application Research of Flow Field in Tubular PECVD Reactor

ZHOU You-cheng, ZHANG Chun-cheng, ZHAO Zhi-ran, TAN Zhan, WANG Jin, CHENG Qiu-yun

Abstract: Using Star-CCM fluid simulation software, according to the conventional process parameters, the 3D modeling and simulation of the reaction chamber of tubular plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) equipment was carried out, and the flow field distribution in the reaction chamber equipped with graphite boats of different structures was studied. Combined with the simulation data, the influence of hollow graphite boats on the film coating uniformity was verified by grouping tests. The test results show that the hollowed boats can effectively improve the airflow distribution among the center, the rear and the blade of the graphite boat, and improve the uniformity of film growth.

Key words: PECVD; reaction chamber; graphite boat; dynamic simulation of flow field; film coating uniformity

