DOI: 10.3901/JME.2014.19.112

面向布气均匀性的竖直式喷淋头 布气系统优化设计*

夏焕雄 向 东 牟 鹏
(清华大学机械工程系 北京 100084)

摘要: 竖直式喷淋头布气系统在半导体工艺腔室类设备中广为采用,其布气均匀性是决定半导体工艺均匀性的关键因素之一。以布气均匀性为驱动,对竖直式喷淋头布气系统进行优化设计。在优化策略设计中为解决传统参数优化方法优化喷淋头多孔板面时需要预先确定拓扑结构、人为缩小参数空间造成系统分辨率低的问题,提出描述喷淋头多孔板面等效阻抗模型,将喷淋头板面小孔结构和布局的优化问题转换为喷淋头板面对气体流动的阻抗特性优化问题,进而建立了高分辨率的喷淋头板面阻抗分布优化模型。优化的喷淋头板面阻抗分布使得喷淋头的布气不均匀性(在 N_2 质量流量 1.0417×10^{-4} kg/s、腔室压力 266 Pa 典型工艺条件下)由 0.36% 降低至 0.03%。采用 CFD 数值试验对优化的竖直式喷淋头布气系统在入口气体质量流量 $6.2500 \times 10^{-5} \sim 1.6667 \times 10^{-4}$ kg/s、腔室压力 133~665 Pa 的工艺范围内进行测试,结果表明:优化的喷淋头系统布气效果均优于对照的喷淋头系统,其布气不均匀性均好于 0.35%。针对喷淋头板面小孔布局及结构,列举 3 种拓扑调整方案,并根据阻抗优化结果给出对应的优化的几何配置实例。

关键词: 喷淋头; 多孔介质; 优化设计

中图分类号: TH122; TN305

Numerical Optimization of a Showerhead System for the Distribution of Gas Flow Uniformity

XIA Huanxiong XIANG Dong MOU Peng
(Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract: A vector showerhead gas delivery system is widely applied to integrated circuit manufacturing equipments, including process chamber, and the uniformity of gas distribution is one of the key factors to affect the process uniformity. The uniformity of gas distribution is taken as an objective to drive the optimization design of the vector showerhead system. In order to solve the problem that the conventional parameter optimization methods for the showerhead porous face plate need a pre-determined topology and narrow the parameter dimension that leads to a poor system resolution, an equivalent impedance model is proposed to describe the showerhead porous face plate in the optimization strategy. This model translates the optimization problem of the holes structure and layout into optimizing the flow impedance feature of the showerhead face plate, and then a high-resolution optimization model can be established for the distribution of the impedance. The nonuniformity of gas distribution of the optimal showerhead system is reduced from 0.36% to 0.03% (under the process condition of 1.0417×10^{-4} kg/s of nitrogen and 266 Pa). A CFD numerical experiment is applied to test the performance of the optimal showerhead system under the varied conditions that the inlet mass flow is $6.2500 \times 10^{-5} \sim 1.6667 \times 10^{-4}$ kg/s and the pressure is 133-665 Pa. The result shows that the performance of the optimal showerhead system is better than the compared one at the entire range of the process condition, and the nonuniformity is under 0.35%. Finally, 3 topology adjustment cases for the layouts and structures of the holes on the showerhead face plate are shown, and the optimal geometry configuration instances are illustrated correspondingly.

Key words: slotted quad-beam structure; accelerometer; piezoresistive; micro-electro-mechanical systems

0 前言

布气系统是半导体设备工艺腔室中最重要的

部件之一。在薄膜沉积工艺中,布气系统通过控制反应气体的物质输运,进而控制反应前驱物到达晶圆表面的浓度分布,最终控制沉积薄膜的工艺效果。因此,布气系统对工艺均匀性的调控具有至关重要的作用^[1-2]。喷淋头是半导体设备中最典型的布气系统之一^[3-4]。随着晶圆直径由 100 mm 到 450 mm 不

* 国家科技重大专项资助项目(2011ZX02403-004)。20131021 收到初稿,20140519 收到修改稿

断增大, 特征尺寸由 130 nm 到 22 nm 不断缩小, 半导体制造对工艺均匀性要求越来越高, 其装备设计中喷淋头布气系统的设计也在不断改进; 如在喷淋头腔内增加挡板、穿孔板, 优化喷淋头板面小孔结构和布局^[2,5], 设计多层^[6]、分区进气喷淋头^[7-8]等, 都是为了满足越来越苛刻的工艺均匀性的需求。

图 1 为某种等离子增强的化学气相沉积(Plasma enhanced chemical vapor deposition, PECVD)设备反应腔室 2D 轴对称简图, 基台上方是竖直式喷淋头布气系统。反应气体由喷淋头入口流入, 经喷淋头板面布气后均匀地流入腔室, 在腔室内射频电磁场的作用下激发为等离子, 并发生复杂的物理化学反应得到沉积前驱物, 最后通过物质输运到达基台上的晶圆表面, 并发生表面反应生成薄膜。对于轴对称的圆柱形 PECVD 反应腔室而言, 布气均匀性直接影响沉积薄膜的均匀性^[9-10]。在其设备设计中, 通常采用计算流体动力学(Computational fluid dynamics, CFD)技术或工艺试验对喷淋头布气系统的布气均匀性进行测试。图 1a、图 1b 所示工艺腔室 a、b 两种结构的竖直式喷淋头布气系统是某 PECVD 设备的两代布气系统的改进结构, 在喷淋头腔内 a 配置小挡板、b 配置大穿孔板。采用 CFD 对喷淋头系统 a、b 的布气均匀性进行测试, 并以喷淋头板面下方 1 mm 处的气体轴向流速分布作为衡量喷淋头布气系统的布气均匀性指标, 则二者布气均匀性的 CFD 测试结果如图 2 所示, 其在半径为 165 mm 范围内不均匀度分别为 0.87%、0.83%。

图 1 某 PECVD 工艺腔室轴对称简图

提高喷淋头系统布气均匀性通常是通过改善喷淋头入口结构来实现的(如图 1a 演变为图 1b)。但如果不在入口处采用增加挡板或穿孔板, 而通过优化喷淋头板面上的小孔结构和布局改善布气均匀

性, 将使得布气系统结构更简单。理论上优化喷淋头板面, 将比改善喷淋头入口结构具有更高的布气均匀性的潜能。显然, 在工艺腔室 a、b 的基础上直接移除入口处的挡板或穿孔板, 而喷淋头板面小孔不作任何调整(图 1c 所示工艺腔室 c), 其布气均匀性必然变差, 图 2 所示在入口 N_2 质量流量 $1.041\ 7 \times 10^{-4}$ kg/s、腔室出口压力 266 Pa、温度 300 K 的条件下, 测试三种喷淋头系统的布气效果。结果表明工艺腔室 c 的喷淋头系统的布气效果较腔室 a、b 中心区域轴向流速偏差明显过大, 其在半径为 165 mm 范围内不均匀度为 1.01%。

图 2 工艺腔室 a、b、c 喷淋板下方 1 mm 处轴向流速对比

以下将以喷淋头系统布气均匀性为驱动, 通过优化工艺腔室 c 的喷淋头板面小孔结构和布局获得比工艺腔室 b 更高的布气均匀性, 同时消除中心区域流速偏差。如果采用传统参数优化方法优化喷淋头多孔板面, 则需要预先确定拓扑结构, 且只能采用少量参数描述数千小孔的板面, 这既将优化结果限制在预先确定的拓扑结构范围内, 又使得系统分辨率较低。为此, 提出多孔介质阻抗模型, 从统一的阻抗特性中优化喷淋头板面小孔结构和布局。

1 多孔介质阻抗建模

喷淋头板面具有多孔特性, 如图 1 中所示的某 PECVD 工艺腔室 a、b 的喷淋头板面上以正六边形图案均匀分布约 4 000 个直径为 1 mm 的小孔。传统的仿真优化方法处理时, 一般需要先确定小孔结构及布局的几何拓扑特征, 这样得到的优化结果只能基于提前设定的几何特征; 另外, 针对数千小孔, 仅采用几个参数对其几何配置进行参数化, 使得优化空间人为缩小, 系统分辨率相对较低。而将喷淋头多孔板面视为多孔介质, 讨论、优化板面小孔的流动阻抗特征, 能够避免传统仿真优化方法遇到的上述问题。多孔介质模型假设具有以下两点限制^[11]: ① 流体通过介质时不会被加速, 主要是因

为多孔介质模型没有考虑体积阻塞;② 多孔介质对于湍流计算是近似的。

对喷淋头板面建立多孔介质等效模型的合理性除了板面几何结构具有多孔特性外,还需作如下解释:① 多孔介质模型没有考虑体积阻塞,导致介质附近的绝对流速与实际差别较大,但分析喷淋头布气均匀性比较的是流速分布的相对关系,而不关心其绝对值;② 典型 PECVD 工艺条件下,气体在喷淋头板面小孔内流动的平均雷诺数 $Re < 3.5$,流态为层流。

图 3 所示喷淋头板面等效多孔介质阻抗模型。考虑到喷淋头板面上小孔方向均沿 z 方向,于是在多孔介质内部气体流动是一维的,即 z 方向的流动阻力是有限值,而 r 方向的流动阻力是无穷大。建立流体数值计算模型时,将计算域划分为网格单元,由于气体在喷淋头板面多孔介质内的流动具有上述特性,于是每一个网格单元的气体流动只与 z 方向上的网格单元气体流动相关,而与其他网格单元气体流动无关。

图 3 竖直式喷淋板等效阻抗模型

建立数值优化之前,需要在流体计算域中设定一些流动状态的采集点作为优化系统的输入和输出(或间接地反应优化系统的输入输出)。针对竖直式喷淋头系统可在板面上表面沿 r 方向均匀分布 $N+1$ 个输入采集点,在板面下表面沿 z 方向与之对应的位置均匀分布 $N+1$ 个输出采集点。每一对输入输出采集点之间的多孔介质考虑为一个流动阻抗。以下推导每一对输入输出采集点之间的流动阻抗与气体输入采集点流速 $v_{in,i}$ 、压力 $p_{in,i}$ 和输出采集点流速 $v_{out,i}$ 、压力 $p_{out,i}$ 之间的关系。

流体以层流状态在简单均匀多孔介质内流动,其压力降与流速之间的关系可由 Darcy-Forchheimer 定律^[12]描述,取两项近似表达如下

$$dp = -\left(\frac{\mu}{\alpha} \mathbf{v} + a\rho|\mathbf{v}|\mathbf{v}\right)dL \quad (1)$$

式中 L ——小孔长度矢量;

$\mathbf{v}$ ——流体流过小孔的速度;

p ——流体压力;

ρ ——流体密度;

μ ——流体动力黏度;

$1/\alpha$ ——黏滞阻尼系数;

a ——惯性阻尼系数,在 $Re < 10$ 的流动状态下,惯性阻尼项可以忽略^[12-14],即 $a=0$,于是定义图 3 中的阻抗为黏滞阻尼系数。

气体在喷淋头板面中沿 z 方向一维流动方程表达如下。

质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

动量方程

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{\mu}{\alpha} v_z \quad (3)$$

理想气体状态方程

$$\frac{p}{\rho} = \frac{R_M T}{M} = C \quad (4)$$

式中, R_M 为气体常数($R_M=8.314 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$); M 为 N_2 气的摩尔质量($M=0.028 \text{ kg/mol}$); 考虑喷淋头板面近似为等温体,温度为 T ,则 C 为常数。

在第 i 对输入输出采集点处求解上述方程式(2)~(4)可得

$$\left[\frac{1}{\alpha}\right]_i = \frac{p_{in,i} v_{in,i}}{2\mu L} \left(\frac{1}{v_{out,i}^2} - \frac{1}{v_{in,i}^2} \right) \quad (5)$$

另外,附带可得 $p_{in,i} v_{in,i} = p_{out,i} v_{out,i} = -CQ_i/A_i$,其中 Q_i 为输入采集点处微元面积 A_i 上的气体质量流量。

观察式(5)易知,可以通过调节喷淋头板面阻抗 $[1/\alpha]_i$,来调节输出采集点的流速或质量通量。多孔介质阻抗建模无须预先确定喷淋头板面小孔拓扑结构,这就使得后续的优化无须基于某一种特定的拓扑。另外,模型本身对输入输出层上采集点对数 N 没有限制,其系统分辨率仅受限于网格划分的精度。

2 优化策略

2.1 优化目标

良好的薄膜沉积工艺均匀性要求喷淋头较高的布气均匀性。喷淋头布气均匀性可采用喷淋头板面输出采集点质量通量面不均匀度 N_U 评价,表达如下

$$\min : N_U = \frac{1}{N^2} \sum_{i=0}^{N-1} \left| \frac{\rho_i v_i - \bar{Q}_m}{\bar{Q}_m} \right| i + \left| \frac{\rho_{i+1} v_{i+1} - \bar{Q}_m}{\bar{Q}_m} \right| (i+1) \quad (6)$$

式中, $\rho_i v_i = p_i v_i / C$ (由于只在输出采集点上计算, 因此式(6)省略了下标中的 out 标记); $\bar{Q}_m = Q_m / (\pi R_{sh}^2)$ 为喷淋头板面上平均气体质量通量, Q_m 为入口总质量流量, R_{sh} 为喷淋头板面有效半径。

2.2 设计变量

等效阻抗模型将喷淋头小孔结构优化问题转换为阻抗分布优化问题, 因此, 设计变量取为喷淋头板面阻抗序列 $[1/\alpha]_i$ 。如图 3 所示阻抗序列 $[1/\alpha]_i$ 的 $N+1$ 个元素沿喷淋头板面半径方向均匀分布。

2.3 优化迭代式

喷淋头板面阻抗分布优化过程, 实质上是根据布气均匀性调整设计变量序列 $[1/\alpha]_i$ 的过程。布气均匀性可由图 3 所示布置在流场中的输出采集点序列获得, 其不均匀度可由目标函数式(6)评价。而在布气均匀性与设计变量序列调整之间需要构造优化迭代式, 驱动设计变量序列朝着极小化不均匀度 NU 的方向调整。

由式(5)知, 可通过优化喷淋头板面阻抗 $[1/\alpha]_i$ 分布, 使得板面输出采集点的质量通量在 r 方向上趋于一致, 进而实现极小化不均匀度 NU 。于是, 阻抗优化迭代表达式可写为

$$\left[\frac{1}{\alpha} \right]_i^* = \frac{\bar{Q}_m C}{2\mu L} \left(\frac{p_{in,i}^2}{(\bar{Q}_m C)^2} - \frac{1}{v_{out,i}^2} \right) \quad (7)$$

式(7)表明, 阻抗 $[1/\alpha]_i$ 的优化是以当前输入采集点的压力 $p_{in,i}$ 及输出采集点的轴向流速 $v_{out,i}$ 为调节参数(也可以选择 $p_{out,i}$ 和 $v_{in,i}$ 作为调节参数, 但应当优先选取稳定性和连续性较好的物理量作为调节参数, 这样优化迭代的收敛性也会较好), 以平均气体质量通量为调控目标。

2.4 优化约束条件

在确保一定的布气均匀性下, 整个喷淋头板面的阻抗还可以相对变小或变大, 于是, 式(6)、(7)描述的优化问题是欠约束的。因此, 需要寻找一种约束, 来限制阻抗的整体偏移。可以令优化前后喷淋头板面对外呈现的面平均阻抗始终保持不变。

由第 1 节式(2)~(4)可推导得板面平均阻抗为

$$\left[\frac{1}{\alpha} \right]_{\text{mean}} = \frac{-\frac{CQ_m N^2}{2\pi R_{sh}^2}}{\sum_{i=0}^{N-1} \frac{p_i v_i \alpha_i i + p_{i+1} v_{i+1} \alpha_{i+1} (i+1)}{2}} \quad (8)$$

为了使新的阻抗面平均值 $[1/\alpha]_{\text{mean}}$ 保持不变, 对式(7)迭代更新的所有采集点的阻抗值 $[1/\alpha]_i$ 进行修正, 修正系数为 $1/\kappa$, 令

$$\left[\frac{1}{\alpha} \right]_i^{**} = \frac{1}{\kappa} \left[\frac{1}{\alpha} \right]_i^* \quad (9)$$

将式(9)的阻抗倒数替换式(8)的, 可得

$$\kappa = \frac{-\frac{CQ_m N^2}{2\pi R_{sh}^2}}{\left[\frac{1}{\alpha} \right]_{\text{mean}} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{p_i v_i \left[\frac{1}{\alpha} \right]_i^* i + p_{i+1} v_{i+1} \left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i+1}^* (i+1)}{2}} \quad (10)$$

于是, 由式(7)、(9)、(10)计算得到的喷淋头板面阻抗分布相对板面的外部流场而言, 其呈现的面平均阻抗始终保持不变。

2.5 优化迭代稳定性控制

气体流动具有高度非线性, 其数值迭代过程中, 迭代稳定性需要一定的控制, 为此, 对式(9)得到的阻抗引入迭代松弛因子 f ($0 < f < 1$), 在优化迭代第 $k-1$ 到 k 步时, 令

$$\left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k}^{***} = \left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k-1} + f \left(\left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k}^{**} - \left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k-1} \right) \quad (11)$$

式中, $[1/\alpha]_{i,k-1}$ 是第 $k-1$ 步得到的第 i 对采集点处优化的阻抗值。

由于阻抗经过了式(9)修正处理, 满足阻抗面平均值等于 $[1/\alpha]_{\text{mean}}$, 然而再经过式(11)松弛处理后得到的新的阻抗值就不能保证阻抗面平均值仍然等于 $[1/\alpha]_{\text{mean}}$, 因此, 还需要进行式(9)、(10)修正处理, 使其阻抗面平均值保持不变。将所有采集点上的的倒数代入式(10)替换, 得到 κ^{***} , 于是第 k 步优化的第 i 对采集点最终阻抗值为

$$\left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k} = \frac{1}{\kappa^{***}} \left[\frac{1}{\alpha} \right]_{i,k}^{***} \quad (12)$$

2.6 优化流程

由于将喷淋头板面等效为阻抗模型, 使得结构优化问题转变为阻抗优化问题, 于是无须进行几何及网格模型重构, 使得 CFD 在优化迭代中的重复计算效率得以提高。图 4 为实施优化策略的一般优化

图 4 优化策略一般实施流程

流程。具体的优化过程采用商业软件 Fluent 与其用户自定义函数(User defined function, UDF)协作的方式实现。其中 Pecvd 工艺腔室中稳态流场的计算任务由 Fluent 求解器完成; 前述调整喷淋头板面阻抗序列的优化算法通过在 UDF 中自编特定算法代码实现。图 5 为在商业软件 Fluent 上实施喷淋头板面阻抗序列优化的详细流程。

图 5 Fluent 求解器与 UDF 协作的详细优化流程。

3 喷淋头板面阻抗分布优化

按照图 5 中的优化流程, 对图 1c 所示的 PECVD 工艺腔室的喷淋头板面阻抗分布进行优化。取采集点对数 $N=166$ (系统分辨率为 1 mm), 取初始条件及边界条件如下。

(1) 入口 N_2 质量流量 $1.041\ 7 \times 10^{-4}$ kg/s, 气体考虑为理想气体。

(2) 出口压力 266 Pa。

(3) 腔室内部近似认为常温 300 K。

(4) 初始喷淋头板面阻抗, 即面平均阻抗 $[1/\alpha]_{\text{mean}} = 9.39 \times 10^8 \text{ m}^{-2}$ 。

图 6a 所示喷淋头板面输出层轴向流速 $v_{\text{out},i}$ 的初始分布及每一步优化结果, 其布气不均匀度 N_U 分别为 0.355 8%, 0.098 6%, 0.038 7%, 0.028 6%, 0.028 4%; 图 6b 所示板面初始阻抗分布及每一步优化的阻抗分布。

图 6 喷淋头输出层流速及阻抗分布数值优化结果 (松弛因子 $\beta=0.1$)

图 6 表明经过本文的优化方法得到了较好的优化效果, 通过优化喷淋头板面阻抗分布其布气不均匀性 N_U 由初始模型下的 0.36% 降低至 0.03%。

对于 PECVD 而言, 工艺条件可能会随着工艺类型的不同而有所变化, 在此针对前述优化结果采用 CFD 方法做简要的数值测试。图 7 是对图 6 中第 4 步优化的喷淋头板面阻抗分布所做的数值测试结果。

图 7 优化的喷淋头布气系统测试结果

二维输入参数测试条件为: ① 入口 N_2 质量流量 $6.250\ 0 \times 10^{-5} \sim 1.666\ 7 \times 10^{-4}$ kg/s; ② 出口压力 133~665 Pa;

图 7 中指出: 在二维输入参数空间内, 优化的喷淋头布气系统布气不均匀性在 0.015%~0.350%, 且在多种类型的 PECVD 工艺条件下优化的喷淋头布气系统均具有较图 1b 更好的布气均匀性。

4 喷淋头板面小孔几何配置设计

前述采用多孔介质阻抗等效的方法, 以喷淋头板面出口流量均匀性为驱动目标, 对喷淋头板面阻抗分布进行了优化, 且在腔室压力 266 Pa, N_2 质量流量 $1.041 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$ 的条件下得到了较好的优化结果。但还需将优化的阻抗分布, 逆向等效转换为喷淋头板面上小孔几何配置。

从等效阻抗的角度描述喷淋头板面小孔对气体流动的群体效应是归一化的方法, 其优化结果能够衍生出无穷种具体的几何配置。从实际的喷淋头板面小孔设计及制造来看, 通常会改变小孔直径、小孔布局、小孔结构, 以下以此 3 种配置方式为简单案例, 将前述优化得到的喷淋头板面阻抗分布结果映射为小孔几何配置。

4.1 配置小孔直径

简单圆柱孔形成的多孔介质沿小孔轴向的黏滞阻尼系数 $1/\alpha$ 可近似表达为

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\frac{33}{2} \frac{1}{d} + 32 \frac{L}{d^2}}{Lf} \quad (13)$$

式中, d 为小孔直径, L 为小孔长度, f 为孔隙率。

图 8 所示小孔在喷淋头板面上按正六边形图案分布, 正六边形边长为 l 。正六边形每一个顶点及中心各布置一个小孔。则孔隙率 f 可表达为

$$f = \frac{\pi d^2}{2\sqrt{3}l^2} \quad (14)$$

图 8 喷淋板上圆柱小孔按正六边形图案布置

将式(14)代入式(13)可解析得到小孔直径 d 与黏滞阻尼系数 $1/\alpha$ 的函数关系。当 $L=8 \text{ mm}$, $l=5 \text{ mm}$, $1/\alpha$ 取前述第 4 步得到的优化结果, 则小孔直径 d 与其距喷淋头板面中心半径距离 r 的函数关系如图 9 所示。

图 9 小孔直径沿喷淋板径向分布图

对于小孔所在位置而言, 半径 r 是根据正六边形图案参数 l 离散地取值, 因此, 对应的小孔直径 d 也是在图 9 所示的连续函数曲线上离散地取值。

4.2 配置小孔分布

图 10 提供了一种小孔在喷淋头板面上的分布图案。图案所示小孔在等间隔的圆周上均匀分布。针对第 i 个圆周上的小孔, 采用所在圆周半径 r_i , 周向间隔角度 θ_i 两个参数描述; 显然 $r_i = i\Delta r$, 其中 Δr 为圆周之间的间隔。则孔隙率 f_i 可近似表达为

$$f_i = \frac{\pi d^2}{4\theta_i \Delta r^2} \quad (15)$$

如果取 $d=1 \text{ mm}$, $\Delta r=5 \text{ mm}$, $L=8 \text{ mm}$, 则将式(15)代入式(13)可解析得到 θ_i 与黏滞阻尼系数 $1/\alpha$ 的函数关系。当 $1/\alpha$ 取前述第 4 步得到的优化结果, 则小孔周向间隔角度 θ_i 与所在圆周半径 r 的函数关系如图 11 所示。

图 10 喷淋板上圆柱小孔按圆周均布图案布置

图 11 喷淋板径向圆周上小孔分布等间隔角度 θ 分布图

另外, 由 θ_i 容易得到第 i 个圆周上等角度间隔分布的小孔的个数为 $[2\pi/\theta_i]$, 其中方括号 $[\]$ 表示就近取整。

4.3 配置小孔结构

图 12 提供的小孔分布图案同图 8, 不同的只是圆柱孔改为台阶孔。于是, 可通过调节台阶孔的 A 、 B 段孔径 d_1 、 d_2 及其孔深 L_1 使其阻抗满足优化的阻抗分布。

图 12 喷淋板上台阶孔按正六边形图案布置

台阶孔板面可近似看成由 A 、 B 孔分别形成的两层穿孔板的串联, 有 $L/\alpha = L_1/\alpha_1 + (L - L_1)/\alpha_2$, 其中 $1/\alpha_1$ 、 $1/\alpha_2$ 、 $1/\alpha$ 分别表示上层、下层穿孔板及二者串联后总体黏滞阻尼系数。于是根据式(13)、(14), 易导出台阶孔结构参数与喷淋头板面的黏滞阻尼系数的函数关系。当喷淋头板面厚度 $L=8$ mm, 小孔间距 $l=5$ mm, 且固定 $d_1=2$ mm, $d_2=0.8$ mm, 通过调节台阶孔 A 段深度 L_1 , 实现阻抗分布满足前述第 4 步的优化结果。图 13 给出了台阶孔 A 段深度 L_1 与其径向位置 r 的函数关系。小孔是根据正六边形图案离散地布置在喷淋头板面上的, 因此 r 的取值是离散的。

图 13 台阶孔 A 段深度沿喷淋板径向分布图

5 结论

(1) 以竖直式喷淋头系统布气均匀性为驱动, 直接对喷淋头板面进行了优化, 使得喷淋头系统在无需入口挡板匀气的情况下, 对工艺腔室的布气不均匀性由 0.36%降低至 0.03%。二维工艺条件输入

的数值测试结果表明: 在 $6.2500 \times 10^{-5} \sim 1.6667 \times 10^{-4}$ kg/s、133~665 Pa 的工艺条件下, 优化的喷淋头系统布气效果均优于对照的喷淋头布气系统, 其布气不均匀性均好于 0.35%。

(2) 提出的多孔介质阻抗建模优化方法具有较高的系统分辨率, 对喷淋头板面小孔几何配置近似连续优化。

(3) 将喷淋头板面小孔几何配置优化通过多孔介质模型转换为板面小孔阻抗特性优化, 使得优化前无须确定小孔结构及布局的拓扑关系; 而阻抗特性优化结果可以衍生出各种具体几何配置, 本文最后根据喷淋头板面小孔阻抗特性优化结果, 列举了 3 种拓扑调整方案, 分别给出了优化的几何配置实例。

参考文献

- [1] KIM Y J, BOO J H, HONG B, et al. Effects of showerhead shapes on the flowfields in a RF-PECVD reactor[J]. Surface & Coatings Technology, 2005, 193: 88-89.
- [2] XENIDOU T C, PRUD'HOMME N, ALOUI L, et al. Shape optimization of a showerhead system for the control of growth uniformity in a MOCVD reactor using CFD-based evolutionary algorithms[J]. ECS Transactions, 2009, 25(8): 1053-1060.
- [3] ECONOMOU D J, PARK S K, WILLIAMS G D. Uniformity of etching in parallel plate plasma reactors[J]. Journal of The Electrochemical Society, 1989, 136(1): 188-198.
- [4] SOBBIA R, SANSONNENS L, BONDKOWSKI J. Uniformity study in large-area showerhead reactors[J]. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2005, 23(4): 927-932.
- [5] PHILLIPS B, RODRIGUEZ R G, LAU L D, et al. Effect of showerhead configuration on coherent Raman spectroscopically monitored pulsed radio frequency plasma enhanced chemical vapor deposited silicon nitride thin films[J]. Plasma Chemistry and Plasma Processing, 2004, 24(2): 307-323.
- [6] DA SILVA A N R, MORIMOTO N I. Gas flow simulation in a PECVD reactor[C]//2002 International Conference on Computational Nanoscience and Nanotechnology, April 21-25, 2002, San Juan Marriott Resort and Stellaris Casino, Puerto Rico, USA. Computational Pubns, 2002: 360.
- [7] CHOO J O, ADOMAITIS R A, HENN-LECORDIER L, et al. Development of a spatially controllable chemical

- vapor deposition reactor with combinatorial processing capabilities[J]. Review of Scientific Instruments, 2005, 76(6): 62217.
- [8] SREENIVASAN R, ADOMAITIS R A, RUBLOFF G W. Demonstration of spatially programmable chemical vapor deposition: Model-based uniformity/nonuniformity control[J]. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 2006, 24(6): 2706-2715.
- [9] SANSONNENS L, HOWLING A A, HOLLENSTEIN C. A gas flow uniformity study in large-area showerhead reactors for RF plasma deposition[J]. Plasma Sources Science and Technology, 2000, 9(2): 205-209.
- [10] CAQUINEAU H, DESPAX B. Influence of the reactor design in the case of silicon nitride PECVD[J]. Chemical Engineering Science, 1997, 52(17): 2901-2914.
- [11] ANSYS Inc. ANSYS13.0 user's guide[M]. Pennsylvania: ANSYS Inc, 2010.
- [12] TENG H, ZHAO T S. An extension of Darcy's law to non-Stokes flow in porous media[J]. Chemical Engineering Science, 2000, 55(14): 2727-2735.
- [13] VAN DER SMAN R G M. Prediction of airflow through a vented box by the Darcy-Forchheimer equation[J]. Journal of Food Engineering, 2002, 55(1): 49-57.
- [14] ANT L M, MITRA S K, SECANELL M. Absolute permeability and Knudsen diffusivity measurements in PEMFC gas diffusion layers and micro porous layers[J]. Journal of Power Sources, 2012, 206: 153-160.
- 作者简介: 夏焕雄, 男, 1987 年出生, 博士研究生。主要研究方向为 IC 装备设计、IC 装备建模仿真优化技术。
E-mail: xiahx10@mails.tsinghua.edu.cn
向东(通信作者), 男, 1972 年出生, 博士, 副研究员, 博士研究生导师。主要研究方向为绿色设计与制造、IC 装备设计与制造。
E-mail: xd@mail.tsinghua.edu.cn

国家自然科学基金委员会机械工程学科 2012/2013 年度结题项目简介

聚乙烯表面仿生聚合物刷的构建及其生物摩擦学特性研究

项目负责人: 熊党生(E-mail: xiongds@163.com)

依托单位: 南京理工大学

项目批准号: 50975145

1. 项目简介

置换关节常处在边界润滑和混合润滑状态, 磨损是导致其无菌松动和晚期失效的主要因素。本研究模仿天然关节软骨表层滑膜腔的刷型结构与润滑功能。(1) 在人工关节承载材料—聚乙烯表面构建聚合物刷, 研究表面接枝聚合物刷的生物相容性与润湿性能, 研究聚合物刷的表面形态、结构、接枝率及其对摩擦学行为的影响, 研究模拟体液环境下聚合物刷的润滑与磨损失效机理;(2) 研究制备了在聚乙烯表面可“再生”聚合物刷的块体材料, 研究了接枝工艺对材料力学、生物相容性和摩擦学性能的影响。优化接枝改性材料的制备工艺。该研究对摩擦界面在分子尺度润滑设计与改性具有重要的理论和应用指导意义。

2. 主要创新点及主要研究进展

(1) 提出在人工关节聚乙烯承载界面仿生制备聚合物刷, 并在接近生理载荷(3~5 MPa)下评价了其摩擦磨损性能, 发现聚乙烯表面接枝磷酸胆碱(MPC)等聚合物刷后, 其生物相容性和耐磨性得到明显提高, 起始摩擦系数显著下降, 但随滑行距离增加不断上升, 直到与未改性聚乙烯的相同, 说明接枝的聚合物刷被逐渐磨掉。

(2) 为解决表面接枝聚合物刷容易磨掉和摩擦系数上升问题, 首次提出制备聚乙烯表面可“再生”聚合物刷的块体材料。采用对聚乙烯粉体接枝后再热压成型方法制备出了具有持续减摩耐磨功能的改性聚乙烯块体材料。改性材料表面与溶液接触后会舒展出接枝分子刷, 表面聚合物刷被磨掉后, 露出新表面会“长出”新的聚合物刷, 故可起到长期润滑作用。利用紫外光辐照技术, 在超高分子量聚乙烯粉末表面分别接枝亲水性单体丙烯酸(AA)、N,N-二甲基-N-(甲基丙烯酰氧乙基)氨基丙磺酸内盐(MPD SAH)、丙烯酰胺(AM)等, 再通过真空热压成型制备出改性块体材料。改性材料的延伸率大于 300%的 ISO 标准, 摩擦系数和磨损率比未改性材料显著降低。优化了改性材料的制备工艺, 为形成新型人工关节承载界面材料奠定了理论与技术基础。