

# 热丝化学气相沉积金刚石薄膜空间场的数值分析 \*

李建国<sup>1,2)</sup> 刘实<sup>1)</sup> 李依依<sup>1)</sup>  
胡东平<sup>2)</sup> 季锡林<sup>2)</sup> 梅军<sup>2)</sup> 周德惠<sup>2)</sup>

1) 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016

2) 中国工程物理研究院结构力学研究所, 绵阳 621900

**摘要** 根据热丝化学气相沉积 (HFCVD) 金刚石薄膜的几何特点和工艺参数, 建立了该系统的二维温度场、速度场和密度场的耦合模型。利用该模型对沉积大面积金刚石薄膜的空间场进行了模拟计算, 研究了沉积参数对空间场的影响。结果表明, 衬底处的温度分布和质量流密度的计算值与实测值相吻合。只有气体进口速度对质量流密度的均匀性影响最大, 其它沉积参数对衬底温度的均匀性、质量流密度的均匀性影响不大。从热丝阵列的最低温度出发, 优选出沉积 100 mm×100 mm、高质量金刚石薄膜比较适宜的热丝几何参数。

**关键词** 热丝化学气相沉积, 耦合模型, 空间场, 模拟计算

中图法分类号 TB383

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2005)04-0437-07

## NUMERICAL ANALYSIS OF SPACIAL FIELD IN HOT FILAMENT CHEMICAL VAPOR DEPOSITION DIAMOND FILM

LI Jianguo<sup>1,2)</sup>, LIU Shi<sup>1)</sup>, LI Yiyi<sup>1)</sup>, HU Dongping<sup>2)</sup>, JI Xilin<sup>2)</sup>, MEI Jun<sup>2)</sup>, ZHOU Dehui<sup>2)</sup>

1) Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

2) Institute of Structure Mechanics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900

Correspondent: LI Jianguo, Tel: (0816)2488646, E-mail: jiangli@imr.ac.cn

Manuscript received 2004-05-27, in revised form 2004-11-26

**ABSTRACT** Two-dimension coupled model of the temperature field, velocity field and density field was developed according to the geometry and technology parameters in hot filament chemical vapor deposition (HFCVD) diamond film. The spacial field during large area diamond film deposition was simulated using this model to study the influence of deposited parameters. The calculated results about the temperature and the mass flow density on the substrate are consistent with experimented ones. The inlet gas velocity obviously affects the uniformity of the mass flow density, and the other deposited parameters have little influence on the distributions of the temperature and mass flow density. The optimal hot filament geometry parameters to deposit high quality diamond films with an area of 100 mm×100 mm are gained on the basis of the minimum temperature along hot filament array.

**KEY WORDS** HFCVD, coupled model, spacial field, simulation

经过二十多年的发展, 化学气相沉积金刚石薄膜的技术已逐渐成熟, 发展了不同的沉积方法, 如热丝化学气相沉积 (HFCVD) 法、微波等离子 (MPCVD) 法、火焰燃烧法、直流等离子辅助法等。其中 HFCVD 技术发展最早, 具有工艺研究成熟, 成膜质量高, 设备简单, 生长参

数易于控制, 生长过程稳定, 易扩大生长面积, 易批量生产, 适宜于生产工业应用的金刚石薄膜等优点 [1]。但是由于 HFCVD 金刚石薄膜的反应气体利用率较低、生长速率慢、生长不均匀, 从而限制了金刚石薄膜的大规模应用。因此, 人们从实验和数值计算方面摸索和优化金刚石薄膜沉积过程的空间场 (温度场、速度场和浓度场) 和沉积参数之间的关系, 从而可以有效地沉积大面积、高质量的金刚石薄膜, 提高其产业化应用的能力。实验能反映热丝化学气相沉积金刚石薄膜的真实情况, 但实验受到许多因素的影响和制约而不能获得较全面的信息, 数值计算能

\* 中国工程物理研究院结构力学研究所创新基金资助项目 04cxj-30

收到初稿日期: 2004-05-27, 收到修改稿日期: 2004-11-26

作者简介: 李建国, 男, 1972 年生, 博士生

弥补实验的不足。由于 HFCVD 系统较复杂，在建立其自适应数学模型时具有许多困难，于是出现了很多不同简化模型，目前对于 HFCVD 系统的数值计算主要采用一种或两种传热方式分析衬底处的温度场<sup>[2-5]</sup>。而对反应室内温度场、速度场和浓度场的耦合计算，以及对热丝阵列附近的空间场分析较少。由于衬底的温度、热丝阵列附近的温度、反应气体的压力、浓度、速度等参数对膜的生长速率、形貌、结构和性能都有不同程度的影响<sup>[6,7]</sup>，这些参量的分析和研究对于理解薄膜的沉积机理、改进实验装置、提高工艺水平具有重要意义。本文建立了一种二维的自适应模型，从热辐射、热对流和热传导三者耦合传热理论上，采用温度、压力和速度场的整体求解法计算了整个系统中热量传递和气体流动情况，并与实验结果相比较，分析了模型的可行性。

## 1 计算模型的建立及计算方法

### 1.1 物理模型

HFCVD 法沉积金刚石薄膜的装置如图 1 所示，在金刚石薄膜的沉积过程中，入射气体 ( $\text{CH}_4$  与  $\text{H}_2$  之比为 1 : 99) 从气瓶中以一定的温度和压强 ( $T_0=300 \text{ K}$ ,  $P_0=0.2 \text{ MPa}$ )，及一定的流量  $u_{y,0}$  通过一根直径为 6 mm 的管道垂直入射到直径 400 mm, 高 500 mm 的腔体，利用真空泵不断抽气使腔内气压维持在 3000 Pa。在距腔体底部 250 mm 处，固定有  $n$  根钨丝，相邻两丝间距为  $h$ ，钨丝直径为  $d$ ，长度为 150 mm。通过比色计监测并控制钨丝的温度为 2533 K。反应室壁通过循环水冷却。 $\text{H}_2$  和  $\text{CH}_4$  在热丝附近热裂解成活性氢原子、活性碳原子基团 ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$  等)，在气体的流动和温度梯度的作用下向钼盘衬底 (100 mm × 100 mm) 输送这些活性原子和基团，钼盘与钨丝的距离为  $H$ ，在钼衬底上以  $\text{sp}^3$  键进行脱氢和键合成金刚石结构。

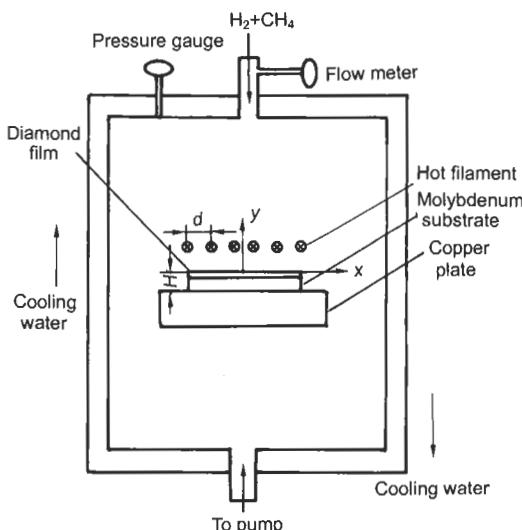


图 1 热丝化学气相沉积金刚石薄膜的结构示意图

Fig.1 Schematic diagram of HFCVD diamond film

### 1.2 数学模型

HFCVD 金刚石薄膜的反应室内存在传导、对流和辐射三种传热方式，气体的状态参数，如温度、速度、密度都将发生变化。换热过程包括气体由对流换热而被加热；气体沿流动方向和垂直方向热传导；气体与衬底及铜台的对流换热；热丝对衬底及铜台的辐射传热；衬底与铜台的热传导等方式。同时，速度场和浓度场随腔体中温度的变化而变化，因此这是一个耦合传热的问题。

为了简化实际问题，对反应室内的气体流动与换热作如下假设：(1) 气体是 Newton 流体；(2) 气体流动形式为稳态、层流和非边界层型流动；(3) 气体在固体内壁面上满足无滑移边界条件；(4) 沿热丝长度方向上各截面的空间场分布情况相同。

为了简化数学模型，假定流体采用纯氢的质量密度，并且忽略化学活化反应造成的热量变化，这是因为反应室内气流几乎为全纯氢 (99%)，而甲烷的量很小 (1%)。沿热丝垂直方向 ( $x$  轴) 且垂直反应室中轴 ( $y$  轴) 建立二维稳态、层流、低压、忽略重力和耗散影响的不可压缩理想气体的计算模型，使用一组质量、动量和能量守恒的方程组描写 HFCVD 系统反应室中的气体流动和传热。

1.2.1 控制方程组 对于本文所确定的坐标系统，描述该沉积系统物理问题的微分方程组如下：

连续性方程

$$\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

式中， $u_x$ ,  $u_y$  分别为气体沿着  $x$  方向,  $y$  方向的速度分量， $\rho$  为密度。

动量方程

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + u_x \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + u_y \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial y} = \\ & -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \\ & \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + u_x \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial x} + u_y \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} = \\ & -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中， $\mu$  为动力粘性系数， $P$  为压力， $t$  为时间。

能量方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \mu_x \frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial y} = \\ & K \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q_h \end{aligned} \quad (3)$$

式中， $C_p$  为比热， $K$  为导热系数， $T$  为温度， $Q_h$  为附加的辐射热源项。

在反应室中的气体为强迫对流，压力保持恒定，故忽略压缩的影响，将反应室内的气体作为不可压缩理想气体处理，密度随温度的变化关系为  $\rho = \frac{P}{RT}$ 。

由于  $\text{H}_2$  (对称原子) 为辐射的透过体， $\text{CH}_4$  量少，参与辐射的作用可以忽略，故参与辐射的仅是温度不同的

各种固体表面。离开某个表面的辐射由自身辐射和对入射辐射的反射组成。反射的部分依赖于周围物体对其入射的辐射,而这部分(入射)辐射可表示为其余表面(发出)的辐射热流。对于表面*i*,其发出的总辐射热流为

$$q_{\text{out},i} = \varepsilon_i \sigma T_i + (1 - \varepsilon_i) q_{\text{in},i} \quad (4)$$

式中,  $q_{\text{out},i}$  为离开表面 *i* 的总辐射热流,  $\varepsilon_i$  为发射率,  $\sigma$  为 Stefan-Boltzman 常数,  $q_{\text{in},i}$  为从周围物体发出的入射辐射热流。

某个表面接受到其余表面的入射辐射量是这两个表面角系数  $X_{ij}$  的函数

$$q_{\text{in},j} = \sum_{i=1}^N q_{\text{out},i} X_{ji} \quad (5)$$

将式(5)代入式(4)得

$$q_{\text{out},i} = \varepsilon_i \sigma T_i^4 + (1 - \varepsilon_i) \sum_{j=1}^N q_{\text{out},j} X_{ji} \quad (6)$$

两个有限大小表面 *i*, *j* 之间的角系数为

$$X_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_j} \int_{A_i} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{\pi r^2} dA_i dA_j \quad (7)$$

式中,  $A_i$ ,  $A_j$  分别为微元面 *i*, *j* 的面积,  $\theta_i$ ,  $\theta_j$  分别为两微元面之间的连线与各自法线所成的角度。

**1.2.2 边界条件** 流动边界条件:所有固体外表面上,  $u_x = u_y = 0$ , 气体入口速度为  $u_{y,0}$ , 出口边界条件采用压力出口边界条件。热边界条件:通过实验测定和适当修正后, 反应室壁的温度为  $T_w=350$  K, 热丝温度  $T_f=2533$  K。

**1.2.3 求解方法** 将固体区域(反应室壁、热丝、衬底和支撑台)和气体区域(反应室内的 H<sub>2</sub>)的传导、对流、辐射作为一个耦合换热问题进行求解。在不同的区域

采用不均匀网格离散技术,在速度场计算中联立求解温度场,辐射传热作为能量方程的一个源项单独用一个子程序求解。整个控制方程组的求解是一个大的迭代过程,采用松弛因子的方法控制各变量的收敛,使用 SIMPLE 方法求解控制方程组,对反应室内的温度场、速度场和密度场进行了计算。

## 2 计算结果及讨论

由于化学气相沉积金刚石薄膜时,气相反应发生在热丝和衬底处,故对该处温度和气体分布情况进行分析。

### 2.1 空间场分布

当热丝与衬底间的距离  $H=8$  mm, 热丝直径  $d=0.8$  mm, 气体进口速度  $u_{y,0}=500$  ml/min, 热丝根数  $n=19$  时, 热丝及衬底附近处的温度场和速度场分布如图 2 所示, 左边的温度场显示最高温度位于热丝处, 由于热丝的离散分布, 在热丝附近的温度呈周期性的起伏变化, 在热丝至衬底方向, 这种起伏现象逐渐减弱, 并且温度迅速下降, 在距离热丝 8 mm 的衬底处, 温度下降了 1361 K, 衬底中心处的温度为 1172 K。图 2 右边为气体绕丝流动情况, 近热丝处的高温场引起气流速度增大, 在热丝的极近区域内, 由于气体与丝之间的摩擦, 气流速度减少, 导致了热丝和衬底之间的气体较少, 出现了“热阻”或“热绕流”现象<sup>[8]</sup>。即在高温区, 单位长度上气流滞留时间明显地增长。因此, 化学气相反应是在热丝处进行的。

衬底表面温度测量值和计算值分布曲线如图 3 所示, 从图中可以看出, 二者都在中心热丝正下方处的温度最高, 这是由多根热丝和多种传热方式的热量叠加造成的。远离中心, 测量值和计算值的温度都呈弧形向两边逐渐降低。尽管本文的计算结果在数值上与实验所得到的具体数值存在差异, 但两者的变化趋势和规律非常相似。在实际的生长系统中, 热丝的碳化、变形、气相化学反应和表面化学反应以及其它一些因素都会影响到空间场的分布, 另外这种差异的形成也有理论分析上假设和近似方面的原因。因

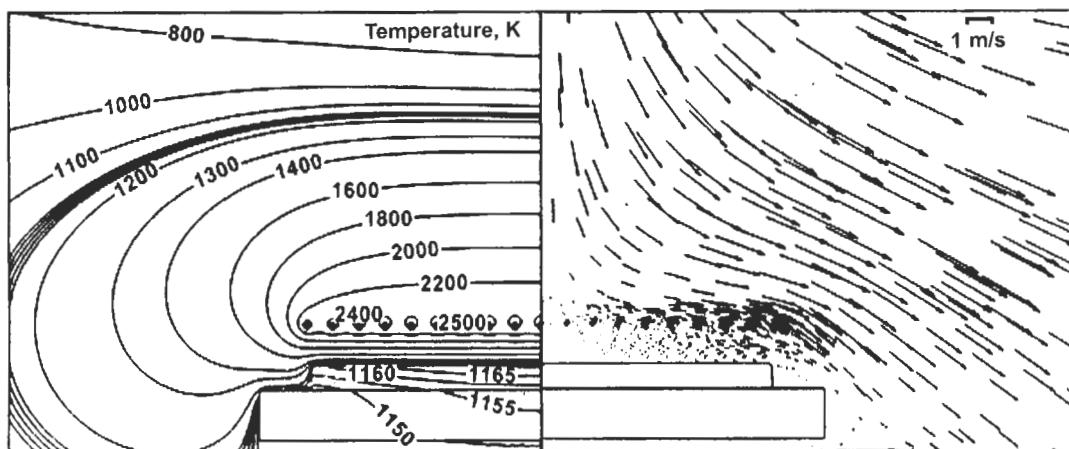


图 2 温度场和速度场

Fig.2 Simulated temperature field (left) and velocity field (right) (distance  $H=8$  mm, diameter  $d=0.8$  mm, inlet gass flow  $u_{y,0}=500$  ml/min, filament numbers  $n=19$ )

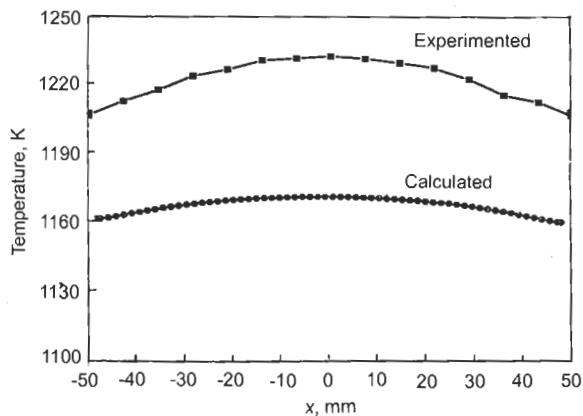


图 3 衬底表面温度的实验值和计算值比较

**Fig.3** Comparison between calculated and experimental temperatures on the substrate surface

此,本文所用的模型是合理的,分析方法可行。

## 2.2 沉积参数对衬底温度分布的影响

当热丝直径和数量保持不变,气体入口速度不变时,观察衬底温度分布与热丝衬底间距  $H$  的关系。 $n=19$ ,  $d=0.8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min 时的计算结果见图 4a。从温度分布中可以看出,当热丝与衬底间距增大时,衬底上的温度整体下降,即可通过调整热丝衬底间距来获得合适的沉积金刚石薄膜温度;并且衬底中心与边缘的温差减小,整个衬底上的温度分布均匀性得到了少许改善。

图 4b 为  $n=19$ ,  $H=8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min 时,衬底温度随热丝直径变化的关系图,从图中可以看出,随着热丝直径的增大,衬底温度整体提高,衬底中心与边缘的温差也有所增大。

图 4c 为  $n=19$ ,  $H=8$  mm,  $d=0.8$  mm 时,气体进口速度对衬底温度的影响,随着速度的增加,衬底温度整体下移,而衬底中心与边缘的温差没有变化,即气体进口速度大时,从衬底表面带走的热量也多,而对衬底温度的均匀性没有贡献。

图 4d 为  $H=8$  mm,  $d=0.8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min 时,衬底温度随热丝根数变化的关系图,随着热丝根数的增加,对衬底的辐射能量也增大,故整个衬底表面的温度得到了提高,同时衬底中心与边缘的温差变大,从 13 根热丝的  $\Delta T=5$  K 增加到 21 根热丝的  $\Delta T=12$  K,对衬底温度的均匀性影响不大。

图 5 为  $n=19$ ,  $H=8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min,  $d=0.8$  mm 时通过热墙(即热丝阵列)的温度分布,在该位置处的温度呈周期性的起伏变化,热丝处的气体温度达到了热丝的温度值,但在两热丝之间的温度相对于热丝下降了约 220 K。基于上面的工艺参数,改变其中一个参数值获得热丝阵列处的温度分布与之类似,只是两丝之间的最低温度  $T_{min}$  不相同,不同沉积参数下的  $T_{min}$  见表 1 所示,  $T_{min}$  随热丝根数  $n$ 、热丝与衬底间距  $H$  和热

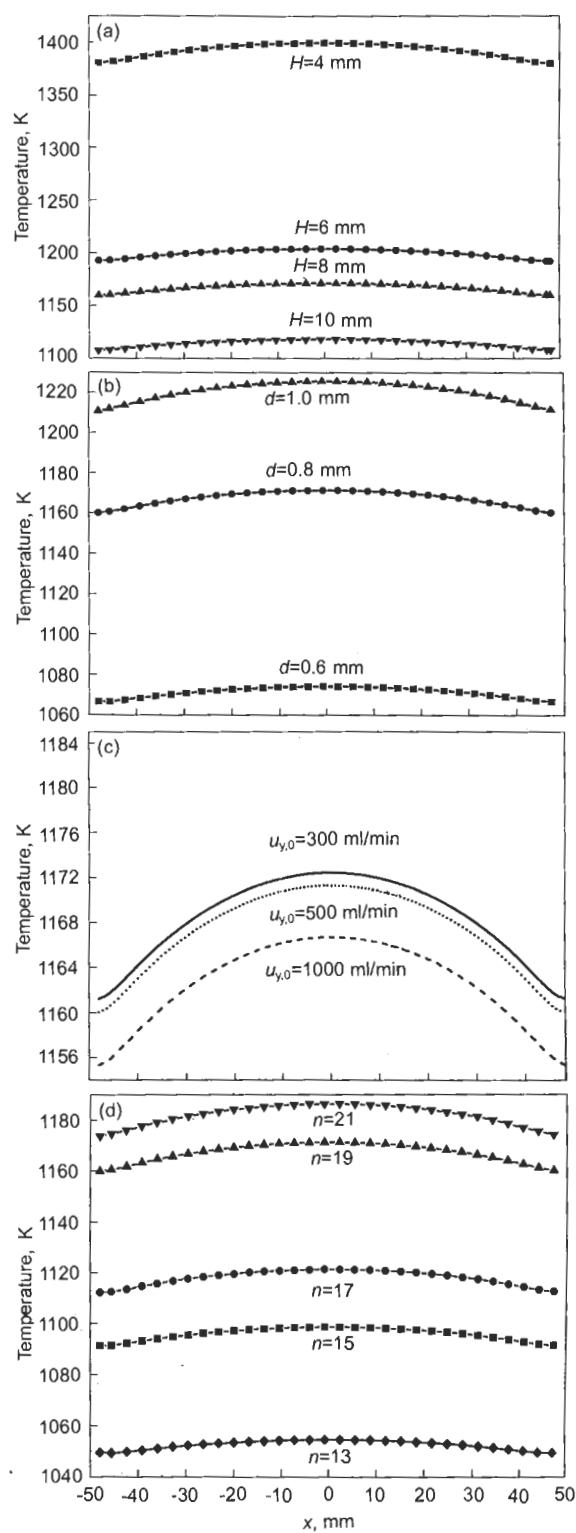


图 4 不同沉积参数对衬底表面温度场的影响

**Fig.4** Influence of deposited parameters  $H$  (a),  $d$  (b), inlet gas velocity  $u_{y,0}$  (c) and filament number  $n$  (d) on the temperature field on the surface of the substrate  
 (a)  $n=19$ ,  $d=0.8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min  
 (b)  $n=19$ ,  $H=8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min  
 (c)  $n=19$ ,  $H=8$  mm,  $d=0.8$  mm  
 (d)  $H=8$  mm,  $d=0.8$  mm,  $u_{y,0}=500$  ml/min

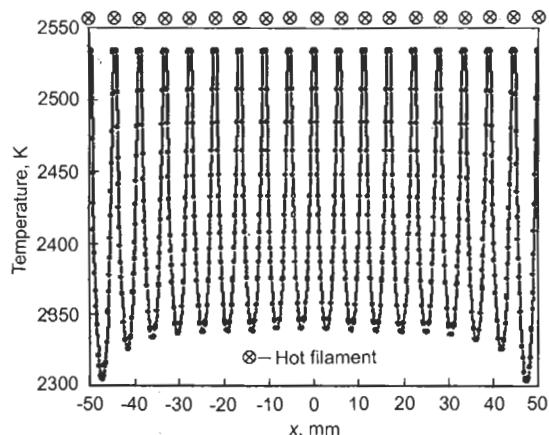


图 5 气体沿热丝阵列的温度分布

Fig.5 Temperature distribution of gas along hot filament array

表 1 沉积参数对热丝阵列处最低温度的影响

Table 1 Influence of deposited parameters on the minimal temperature along hot filament array

$n$	$T_{\min}$ K	$H$ mm	$T_{\min}$ K	$d$ mm	$T_{\min}$ K	$u_{y,0}$ ml/min	$T_{\min}$ K
21	2332	10	2325	1.0	2338	1000	2285
19	2304	8	2304	0.8	2304	500	2304
17	2265	6	2264	0.6	2254	300	2313
15	2215	4	2234				
13	2144						
10	2050						

丝直径  $d$  的增加而增加, 随气体的进口速度  $u_{y,0}$  增大而减小。

温度在 HFCVD 金刚石薄膜中起着至关重要的作用。要沉积出一定面积的高质量、均匀的金刚石薄膜, 就要获得均匀分布的衬底温度场。由于衬底本体的连续性, 从而形成了衬底温度的连续性, 从上面衬底温度场的计算可知, 各种工艺参数对衬底温度的均匀性贡献不大, 衬底中心与边缘的温度差约为 10 K 左右, 只是影响了衬底的整体温度。热丝温度是热丝法化学气相沉积金刚石薄膜的一个关键因素, 热丝提供足够的温度, 使得气体活化并裂解成原子氢和碳氢基团。已有的大量实验证明, 热丝温度太低(低于 2173 K), 气源裂解很不充分, 产生不了足够数量的对金刚石薄膜生长有利的活性基团, 比较容易在衬底上形成石墨或类金刚石相, 得不到较好的金刚石膜<sup>[9]</sup>; 温度过高, 则会使热丝变形和蒸发, 影响参数的空间分布和金刚石薄膜的质量。比较适宜的气源分解温度范围为 2173—2573 K。从温度场的分析可知, 仅仅要求热丝的温度达到气体的离解温度还不够, 这是因为大多数的气体温度与热丝温度相差很多, 因此如何合理布置热丝, 使得热丝的温度足够高和衬底的温度比较均匀外, 还要求两热丝之间的温度达到气体的离解温度, 才能将气体最大效率地离解成有利于金

刚石沉积的前驱物。从上面衬底温度场的计算和表 1 中的结果可以得出, 热丝数量在 15 根以上时, 热丝阵列的最低温度  $T_{\min}$  满足气体的分解温度, 且随热丝数量的增加而提高, 同时也提高了成本和复杂程度, 因此, 考虑到气体进口速度对温度影响很小,  $n=15$ ,  $d=0.8$  mm,  $H=8$  mm 这样的热丝布置比较适宜于 100 mm×100 mm 大面积金刚石薄膜的沉积。

### 2.3 沉积参数对质量流密度的影响

采用 HFCVD 方法沉积高质量、均匀金刚石薄膜时, 除了对衬底和热丝的温度有要求外, 还需要一种驱动力来输送含碳基团和原子氢, 使之能从气相到达衬底表面, 一般温度梯度可以提供这一驱动力, 对流和简单气体流动也能提供。质量流密度是气体的密度和速度之积, 质量流密度能很好地反映这些驱动力。图 6 为不同工艺参数对衬底处的质量流密度的影响, 可以看出, 衬底处的质量流密度都呈锥形分布, 即中间的气体质量流密度低, 而两边高, 衬底中心区比边缘区获得少的供给薄膜生长的含碳基团和原子氢, 故衬底中心区的金刚石薄膜生长速率比衬底边缘低, 导致了金刚石薄膜不均匀沉积。这主要是由于高温热丝阵列形成的热障使得气体出现了“热阻”或“热绕流”现象, 从而造成在热丝阵列边缘的气流速度大, 而中间小的现象, 同时通过热丝阵列的气体明显减少, 这是 HFCVD 金刚石薄膜不均匀沉积和低效率的原因之一。另一个原因是衬底对气流的阻挡作用, 改变了气流的方向, 使得气流向衬底的边缘流动, 从而造成了中间质量流密度底, 而边缘高。图 7 是没有衬底和铜台情况下(其它条件相同)在与热丝不同距离处的质量流密度, 可以看出, 除了距热丝越近处的波动外, 中间分布都比较均匀, 均匀区达到了 50% 以上, 因此, 衬底上质量流密度的不均匀性主要是由于衬底本身的阻挡作用造成的, 同时在计算中不考虑衬底对气体的阻挡作用是不准确的。随着热丝根数的增加, 热丝之间的距离减小, 气体通过热障的几率就减少, 故质量流密度相应地减少(图 6a), 但减少的程度有限; 随着热丝直径的减小, 质量流密度有稍许的增加(图 6b); 而随着热丝与衬底间距离的增加, 质量流密度也有少量的增加,  $H=4$  mm 时质量流密度的波动是由于热丝的离散分布造成的(图 6c); 当  $u_{y,0}$  增加时, 有助于气体冲破热丝阵列的热阻塞, 减少热绕流, 强化外传质, 即衬底上的质量流密度提高, 而且提高的程度非常明显, 加速了金刚石膜的形核和生长, 但不均匀性相应地增加了(图 6d), 因此, 高速率和均匀性沉积金刚石薄膜是一对相互制约的矛盾。图 8 是实验中沉积金刚石薄膜测得的生长速率曲线。该曲线在形状上与衬底上质量流密度非常相似, 即衬底中间的生长速率最低, 而边缘较高。故利用本模型能够很好地解释 HFCVD 金刚石薄膜不均匀沉积现象。通常在沉积金刚石薄膜过程中, 采取缓慢转动衬底能够满足高效率沉积, 又能保证膜的均匀性。

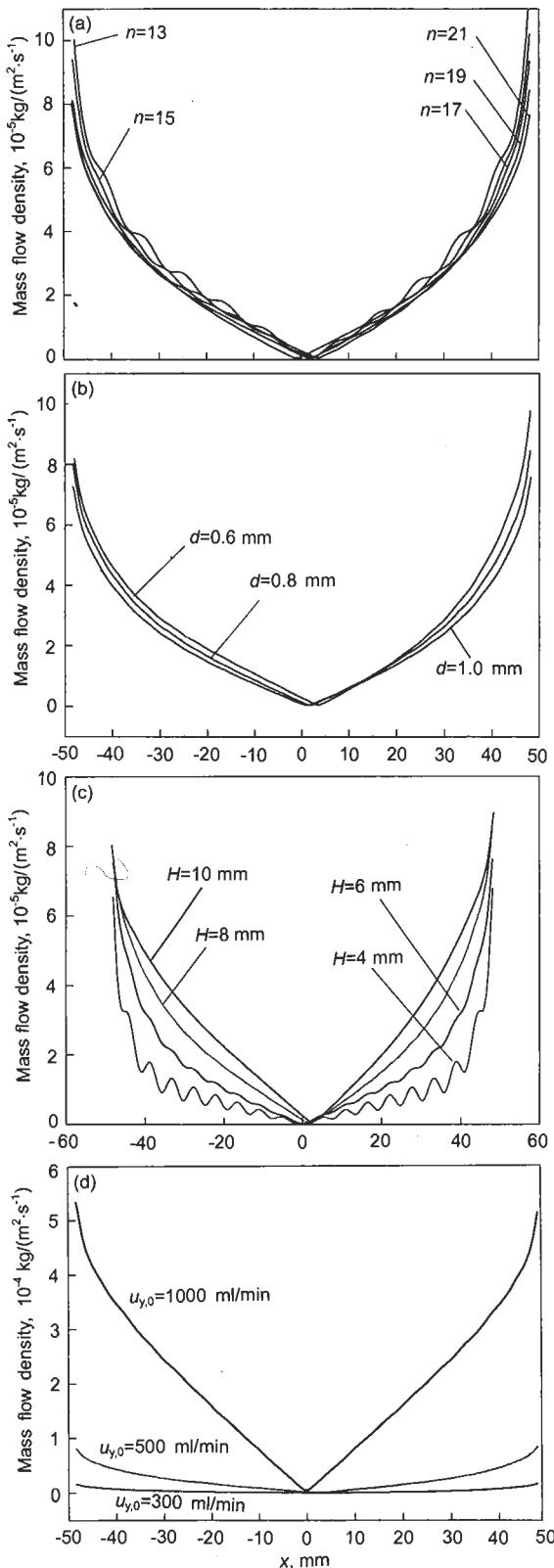


图 6 不同沉积参数对衬底表面处的质量流密度的影响

**Fig.6** Influence of deposited parameters  $n$  (a),  $d$  (b),  $H$  (c) and  $u_{y,0}$  (d) on the mass flow density on the surface of substrate  
 (a)  $d=0.8 \text{ mm}, H=8 \text{ mm}, u_{y,0}=500 \text{ ml/min}$   
 (b)  $H=8 \text{ mm}, n=19, u_{y,0}=500 \text{ ml/min}$   
 (c)  $n=19, d=0.8 \text{ mm}, u_{y,0}=500 \text{ ml/min}$   
 (d)  $n=19, H=8 \text{ mm}, d=0.8 \text{ mm}$

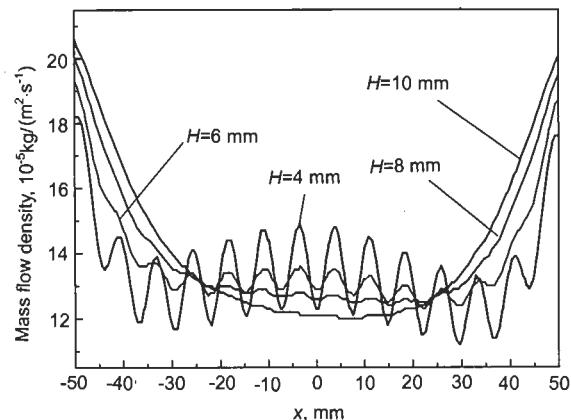


图 7 没有衬底和铜台情况下距热丝不同位置处的质量流密度

**Fig.7** Mass flow density at different positions from hot filament without substrate and copper plate ( $n=15$ ,  $d=0.8 \text{ mm}$ ,  $u_{y,0}=500 \text{ ml/min}$ )

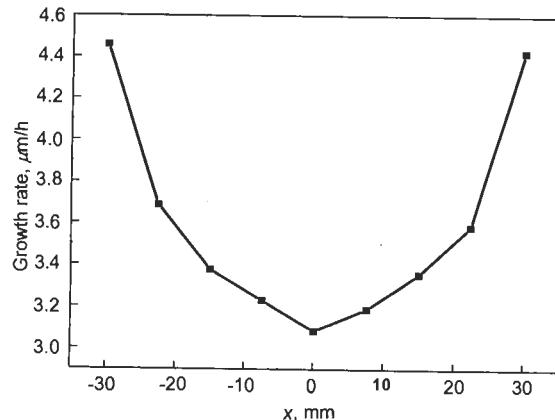


图 8 衬底上金刚石薄膜的生长率

**Fig.8** Measured growth rate of diamond film on Mo substrate

### 3 结论

根据热丝化学气相沉积金刚石薄膜的几何和工艺条件,对该系统内的传导、强迫对流和辐射相耦合的传热和流动问题进行了计算,求解了沉积大面积金刚石薄膜的反应室内处于稳定的二维温度场、速度场和密度场,其数值计算结果与实测值吻合较好,可为金刚石薄膜沉积工艺的优化提供依据。

(1) HFCVD 大面积金刚石薄膜的各沉积参数对衬底温度的均匀性影响较小,改变这些参数只是整体上提高了衬底的温度。衬底温度随热丝衬底间距、气体进口速度的增加而降低,随热丝直径和热丝根数的增加而提高。从热丝阵列的最低温度出发,优选出沉积  $100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ 、高质量金刚石薄膜比较适宜的热丝几何参数:热丝根数  $n=15$ ,热丝与衬底间距  $H=8 \text{ mm}$ ,热丝直径  $d=0.8 \text{ mm}$ 。

(2) 由于热丝阵列的热绕流作用,特别是衬底本身的阻挡作用,造成了金刚石膜的不均匀沉积。热丝与衬底间

距离、热丝根数和直径对质量流密度的均匀性影响不大,而气体进口速度对质量流密度的均匀性影响最大,适当减少进口速度,可以提高均匀性,同时使得沉积速率降低。

#### 参考文献

- [1] Banholzer W. *Surf Coating Technol*, 1992; 53: 1
- [2] Wolden C, Mitra S, Gleason K K. *J Appl Phys*, 1992; 72: 3750
- [3] Wang A Y, Sun C, Wang B, Gong J, Huang R F, Wen L S. *Acta Metall Sin*, 2001; 37: 1217  
(汪爱英, 孙超, 王冰, 宫俊, 黄荣芳, 文立时. 金属学报, 2001; 37: 1217)
- [4] Song X M, Zhang X W, Wang B, Chen G H, Yan H. *J Beijing Polytechnic Univ*, 1999; 25: 91
- [5] Qi X G, Chen Z S. *Mater Sci Eng*, 2001; 19(3): 29  
(戚学贵, 陈则韶. 材料科学与工程, 2001; 19(3): 29)
- [6] Mark C M, Wen L H, Michael E C, David S D. *J Appl Phys*, 1994; 76: 7567
- [7] Dai D H, Zhou K S. *Deposition Technology and Application of Diamond Film*. Beijin: Metallurgical Industry Press, 2001: 118  
(戴达煌, 周克崧. 金刚石薄膜沉积制备工艺与应用. 北京: 冶金工业出版社, 2001: 118)
- [8] Chen Y, Yu J, Chen G C. *Vacuum*, 1998; 6: 11  
(陈岩, 于杰, 陈广超. 真空, 1998; 6: 11)
- [9] Spitsyn B V, Bouilov L L, Derjaguin B V. *J Cryst Growth*, 1981; 52: 219