

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ

ХАРЬКОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

КРЕМЕНЧУГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ МИХАИЛА ОСТРОГРАДСКОГО

В. М. Левыкин, И. В. Шевченко, И. Г. Оксанич

**МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ  
ТЕХНОЛОГИИ МОНИТОРИНГА И  
ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА  
ВЫРАЩИВАНИЯ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

**Монография**

Кременчуг  
Издатель ЧП Щербатых А. В.  
2014

УДК 519.876.5:548.52

ББК 32.843.308

Л 36

*Рецензенти:*

доктор технічних наук, професор **В. М. Томашевський**

доктор технічних наук, професор **О. Ф. Тарасов**

Рекомендовано Вченою радою Харківського національного університету радіоелектроніки Міністерства освіти і науки України (протокол № 27 від 27.12.2013)

Рекомендовано Вченою радою Кременчуцького національного університету ім. М. Остроградського Міністерства освіти і науки України (протокол № 8 від 31.05.2012)

**Левикін В. М.**

Л 36 Модели и информационные технологии мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводников: монографія / Левикін В. М., Шевченко І. В., Оксанич І. Г. – Кременчук: Видавець ПП Щербатих О. В. 2014. – 216 с.

ISBN 978-617-639-051-0

Монографія є розвитком методів, моделей та інформаційних технологій моніторингу та оптимізації теплових параметрів технологічного процесу вирощування монокристалів напівпровідників. Розв'язана задача безперервного моніторингу температурних полів системи розплав-кристал у процесі вирощування та задачу автоматизованої оптимізації параметрів теплового екрана в тепловому вузлі.

Призначено для наукових і інженерно-технічних працівників, аспірантів, а також може використовуватися студентами різних спеціальностей для набуття знань і практичних навичок вирішення завдань управління якістю безперервних технологічних процесів.

**УДК 519.876.5:548.52**

**ББК 32.843.308**

**ISBN 978-617-639-051-0**

© Левикін В. М., Шевченко І. В.,  
Оксанич І. Г., 2014

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
РАЗДЕЛ 1. АНАЛИЗ ПРОБЛЕМ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО.....	11
1.1. Особенности технологического процесса выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского.....	11
1.2. Влияние тепловых условий и режимов выращивания на структуру монокристаллов и образование дислокаций.....	21
1.3. Математические методы исследования процессов тепломассопереноса и их роль в обеспечении качества монокристаллов.....	28
1.4. Анализ концепций и проблем мониторинга сложных технологических систем и процессов.....	36
1.5. Анализ существующих методов и средств автоматизированного управления процессом выращивания монокристаллов.....	41
1.6. Анализ подходов к реализации функций мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов.....	45
1.7. Задача оптимизации условий остывания слитка в ростовой камере.....	50
РАЗДЕЛ 2. РАЗРАБОТКА КОНЦЕПТУАЛЬНЫХ ОСНОВ ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ.....	53
2.1. Концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов.....	53
2.2. Разработка модели структуры информационно- аналитической системы управления качеством процесса выращивания.....	55
2.3. Обобщенная структура взаимосвязей в комплексе моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов.....	61

2.4. Разработка модели подсистемы поддержки принятия оперативных решений.....	63
2.5. Разработка модели структуры подсистемы оптимизации геометрических параметров теплового экрана.....	70
2.6. Метод построения информационной технологии диагностики состояния сложного технологического процесса.....	71
<b>РАЗДЕЛ 3. МЕТОДЫ, МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ МОНИТОРИНГА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ПРОЦЕССЕ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ.....</b>	<b>76</b>
3.1. Нейросетевая модель расчета температурного поля в расплаве.....	76
3.2. Нейросетевая модель для расчета температурного поля в слитке.....	86
3.3 Метод моделирования процесса кристаллизации на базе нечеткого клеточного автомата.....	93
3.4. Модель расчета температуры фонового нагревателя...	104
3.5. Информационная технология мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов.....	109
<b>РАЗДЕЛ 4. МЕТОДЫ, МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ ЗА СЧЕТ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТЕПЛОВЫХ ЭКРАНОВ РОСТОВОЙ УСТАНОВКИ.....</b>	<b>121</b>
4.1. Математическая модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения.....	122
4.2. Модель расчета тепловых условий.....	132
4.3 Метод и модель оптимизации конфигурации и положения теплового экрана.....	140
4.4 Информационная технология оптимизации геометрических параметров теплового экрана.....	147

РАЗДЕЛ 5. ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕПЛОВЫХ УСЛОВИЙ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ GaAs.....	151
5.1. Экспериментальные исследования по синтезу математической модели для косвенного измерения температуры фонового нагревателя.....	151
5.2. Реализация метода и модели оптимизации геометрических параметров теплового экрана в установке для выращивания арсенида галлия.....	165
5.3. Применение подсистемы мониторинга температурных полей.....	170
5.4 Исследование влияния тепловых условий на термоупругие напряжения и плотность дислокаций в слитках GaAs, выращиваемых по ЛЕС-технологии...	172
5.5 Экспериментальное исследование закономерностей распределения остаточных напряжений и дислокаций в пластинах GaAs.....	178
5.6 Программное обеспечение.....	187
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	197
ЛИТЕРАТУРА.....	199

## ВВЕДЕНИЕ

Современные темпы развития микроэлектроники, с одной стороны, обусловлены успехами в области полупроводниковой технологии, с другой – выдвигают всё более жесткие требования к качеству производимых материалов. Степень повышения качества материалов электронной техники зависит от двух основных факторов – совершенства технологического оборудования и совершенства систем управления режимом выращивания монокристаллов. И в том и в другом аспекте на передний план выдвигается третий фактор – использование современных информационных технологий.

Согласно определению, информационная технология – совокупность методов, производственных и программно-технологических средств, объединенных в технологическую цепочку, обеспечивающую сбор, хранение, обработку, вывод и распространение информации [1]. Рассматривая сущность информационной технологии как таковой, можно увидеть, что наличие метода подразумевает и наличие модели, как основы для разработки соответствующих процедур и алгоритмов и создания инструментальных программных средств.

Современный этап развития информационных технологий пришел на смену этапам, основу которых составляла технология программирования формализованных знаний. После исчерпания возможностей данных технологий дальнейшее развитие информационной индустрии потребовало поиска альтернативных решений трудно формализуемых задач. Поэтому актуальной сегодня является ориентация аналитиков и программистов на создание информационных технологий, облегчающих непрограммирующим специалистам процесс решения их профессиональных задач и формализации их индивидуальных знаний. Общая схема действий в процессе разработки информационных технологий может быть представлена рядом этапов, на каждом из которых решаются определённые научные и инженерные задачи.

На этапе идентификации производится постановка задачи, которая должна быть решена в результате разработки и применения информационной технологии. Проводится анализ проблемной области с целью выявления факторов, наиболее заметно

влияющих на результат. В общем случае при построении информационных технологий приходится сталкиваться со структурно-параметрической идентификацией, когда вначале определяется структура модели исследуемого объекта или процесса, а затем, на этапе параметрической идентификации, определяются неизвестные параметры модели [2].

Получив общее представление о структуре модели, исследователи переходят к сбору и анализу информации о системе с целью получения полной картины информационных потоков, учитывающей их структуру, направление и интенсивность. При этом выделяется весь объём входной и выходной информации, которая подвергается структурированию. Например, выделяют входные регулируемые и контролируемые параметры, которым в свою очередь приписывают ряд атрибутов, позволяющих сформировать каталоги входных информационных единиц, что впоследствии облегчает проведение статистического анализа и структуризации данных. Основной целью статистического анализа является получение данных об интенсивности информационных потоков, позволяющих оптимизировать процесс их передачи, как на программном, так и на физическом уровне. В результате статистического анализа выявляются и другие важные характеристики обрабатываемой информации, в том числе – время, в течение которого данные остаются актуальными и востребованными системой. Это позволяет своевременно элиминировать устаревшую информацию и, таким образом, не перегружать информационную систему избыточными данными. Кроме того, на этапе структуризации данных формируется набор первичных, вторичных, промежуточных и конечных данных, необходимых для обеспечения функционирования информационной системы, а также данных, интерпретируемых как знания. При этом для каждой информационной единицы указываются её название, формат, источник и получатель.

Ядром информационной технологии является набор методов и моделей, обеспечивающих получение выходных данных путём соответствующих обработки и преобразования входных. В процессе разработки моделей и методов проводятся как численные, так и натурные эксперименты с исследуемой системой. Объём, репрезентативность и информативность полученных в ходе экс-

периметров данных во многом определяют степень адекватности используемых моделей и эффективности методов, а также полноту баз данных и баз знаний.

Когда процесс разработки моделей и методов завершён, приступают к поиску оптимальных вычислительных процедур, обеспечивающих с одной стороны устойчивость к возмущениям входных параметров и достаточный уровень точности, а с другой – учитывающих ограничения по вычислительным затратам.

После того как модели и методы проработаны до такой степени, что могут применяться как самостоятельные единицы, приступают к разработке механизмов их согласованного функционирования. На этом этапе разрабатывается алгоритмы взаимодействия непосредственно связанных частей информационной системы.

Разработка информационной технологии заключается в описании всех информационных процессов и разработке единого алгоритма функционирования информационной системы. При этом детально описываются все процедуры, начиная с получения и обработки первичной, “сырой” информации и заканчивая выдачей выходной информации на устройство вывода в удобном для пользователя формате.

Когда все вышеперечисленные этапы создания информационной технологии успешно завершены, проводится разработка программного обеспечения. Современное программное обеспечение, как правило, имеет модульную структуру, что позволяет при необходимости легко расширять функциональные возможности информационной системы путём модернизации или разработки и внедрения новых модулей.

Важным вопросом развития современных технологий мониторинга технологических процессов являются пути перехода от классических систем прямого измерения и контроля значений технологических параметров к методам и средствам получения необходимой дополнительной информации о текущем состоянии и динамике процесса. Эту информацию можно получить путём всесторонней обработки оперативных и ретроспективных данных, полученных уже существующими контрольно-измерительными средствами. Современное развитие методов математического моделирования и интеллектуальных технологий



обработки информации приобрело уровень, который позволяет значительно повысить информативность систем мониторинга и достоверность оценки параметров сложных физических процессов, таких, как выращивание монокристаллов полупроводников.

В настоящее время арсенид галлия (GaAs) является одним из самых применяемых полупроводниковых материалов при производстве разнообразных приборов и микросхем [3, 4]. Получение монокристаллов GaAs в Украине базируется в основном на методе Чохральского с жидкостной герметизацией расплава (ЛЕС-метод). В выращенных монокристаллах GaAs наблюдается образование и размножение дислокаций различного типа. Иногда они группируются в скопления, сильно ухудшающие структуру слитков. Для многих областей применения монокристаллов наличие дислокаций, особенно их скоплений, нежелательно. Исследованиями установлена прямая связь между величинами температурных градиентов, температурными напряжениями и количеством дислокаций [5, 6].

Термические напряжения, возникающие в процессе охлаждения слитка, частично снимаются при появлении дислокаций. В свою очередь, дислокации вызывают напряжения в выращенном кристалле после его охлаждения. Термические напряжения можно уменьшить подбором физических параметров теплового узла и условий выращивания, обеспечивающих уменьшение градиентов температуры в слитке в процессе выращивания и охлаждения. В частности, исследования показывают, что особенности экранировки существенно влияют на характер роста (дислокационный или бездислокационный) и структуру выращиваемого кристалла [6, 7].

Таким образом, анализ механизмов формирования структурного совершенства в выращиваемых монокристаллах GaAs позволяет сделать вывод, что они обусловлены, главным образом, следующими факторами: несовершенством конструкции теплового узла ростового оборудования и несовершенством способов контроля и регулирования тепловых условий на разных стадиях процесса выращивания.

Исходя из изложенного, можно сделать вывод, что актуальной является разработка комплекса методов, моделей, алгоритмов и инструментальных средств, позволяющих с помощью

установленных критериальных закономерностей, оптимизировать выбор конструктивных параметров оборудования, а также регулировать технологические параметры процесса выращивания монокристалла.

В связи с этим целью предлагаемой работы является разработка методов, моделей и информационных технологий, направленных на решение двух задач:

1. Обеспечение возможности непрерывного мониторинга температурных полей системы расплав-кристалл в процессе выращивания для коррекции теплового режима в случае наступления неблагоприятных ситуаций.

2. Оптимизация конструкции элементов теплового узла, для минимизации неравномерности и уровня температурных градиентов в выращиваемом слитке монокристалла.

# РАЗДЕЛ 1

## АНАЛИЗ ПРОБЛЕМ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

### 1.1. Особенности технологического процесса выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского

В настоящее время методом Чохральского выращивают более 70% всех монокристаллов кремния и; германия и около 90% арсенидов и фосфидов галлия. Первые выращивают и в вакууме, и в атмосфере инертных газов под давлением до 1 ат. Полупроводниковые соединения выращивают в атмосфере компрессированного инертного газа, создаваемого над расплавом разлагающегося полупроводникового соединения, покрытого слоем герметизирующей жидкости, которая препятствует испарению летучего компонента. Такой вариант осуществления процесса Чохральского получил название метода жидкостной герметизации (LEC) [8].

Современная установка для выращивания монокристаллов полупроводников представляет комплекс сложных систем, отражающих самые последние достижения науки и техники. Ее вакуумная система может обеспечить поддержание в камере остаточного давления менее  $1 \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст.; система теплового контроля – поддержание температуры нагревателя с точностью  $\pm 0,1^\circ \text{C}$ ; система подъема тигля и заправки имеет точность  $\pm 1\%$ , а система их вращения  $\pm 10\%$ ; система непрерывного контроля диаметра выращиваемого монокристалла обеспечивает отклонение в пределах  $\pm 1$  мм на диаметре до 80 мм. Согласование и управление всеми системами автоматики современной установки осуществляется при помощи ЭВМ.

Все современные установки общего назначения для выращивания монокристаллов наиболее распространенных полупроводников методом Чохральского имеют резистивный нагрев, осуществляемый с помощью разрезных графитовых нагревателей. В особых случаях, например для получения монокристаллов элементарных полупроводников с малым содержанием кислорода

методом гарнисажной плавки, применяют электроннолучевой нагрев [9].

**Тепловой узел.** В камере печного блока установки для выращивания монокристаллов полупроводников методом Чохральского главным элементом является тепловой узел. Его конструкция непосредственно определяет тепловые условия, в которых находятся расплав и монокристалл в ходе процесса его выращивания. Тепловой узел состоит из подставки тигля, нагревателя и системы экранов, так называемой экранировки. Схемы наиболее распространенных тепловых узлов с резистивным нагревом показаны на рис. 1.1.

По характеру атмосферы в рабочей камере установки для осуществления метода Чохральского разделяют на вакуумные и газовые. Последние обычно рассчитаны на работу при нормальном (до 0,7 ат) давлении. Для выращивания монокристаллов разлагающихся полупроводниковых соединений, например фосфидов, применяют установки, камеры которых рассчитаны на высокие (до 100 ат и более) давления инертного газа.

Подставку и нагреватель изготавливают из графита плотных марок (МПП-6, МПП-8 и т.п.). Выбор материала экранов зависит от характера атмосферы, в которой работает тепловой узел. В вакууме, где теплопередача происходит в основном излучением, экраны изготавливают из полированных листов жаропрочного металла, например молибдена. При работе в газовой среде, особенно находящейся под высоким давлением, применяют экраны из графита или непрозрачного (спеченного) кварца. Тепловой узел – наиболее мощное средство управления тепловыми условиями процесса выращивания монокристалла полупроводника. От его конструкции зависят устойчивость роста, стабильность диаметра и структура выращиваемого монокристалла. Решение первой задачи требует создания слегка выпуклого в расплав фронта кристаллизации, решение второй – поддержания неизменных градиентов температуры в расплаве и решение третьей – создания и поддержания в течение всего процесса заданной формы фронта кристаллизации [11 – 13].

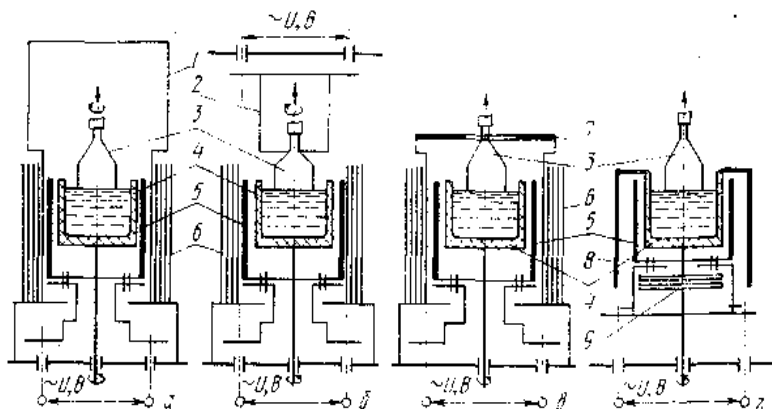


Рис. 1.1 – Схемы наиболее распространенных тепловых узлов с резистивным нагревом, применяемых в установках для выращивания монокристаллов полупроводников методом Чохральского: *a* и *в* – пассивные (полузакрытая и закрытая); *б* – активная; *г* – открытая, подвижная: 1 – верхний боковой экран; 2 – нагреватель кристалла; 3 – кристалл; 4 – графитовая подставка с кварцевым тиглем, содержащим расплав; 5 – нагреватель тигля; 6 – боковые экраны; 7 – потолочный экран; 8 – вращающийся боковой экран; 9 – донные экраны.

Все эти задачи обычно решают путем подбора соответствующих конструкций подставки, нагревателя и экранировки, совокупность которых и создает данный тепловой узел. Такой узел предназначен для выращивания монокристалла определенного полупроводника, с определенной структурой, в определенных условиях (диаметры монокристалла и тигля, масса расплава в тигле, атмосфера в камере, конструкция камеры и пр.). Воздействие отдельных элементов теплового узла на градиенты температуры в расплаве и монокристалле носит комплексный характер. Изменение одного элемента, как правило, требует соответствующего изменения других с целью сохранения первоначальных тепловых условий.

**Подставка тигля.** Несмотря на кажущуюся внешнюю простоту, конструкция подставки существенно влияет на градиенты

температуры в расплаве и монокристалле. Так, если дно подставки намного толще боковых ее стенок, то отвод тепла от расплава в осевом направлении, а, следовательно, и градиент температуры в данном направлении уменьшаются. Другой пример – увеличение толщины стенок подставки влечет за собой повышение температуры нагревателя. В результате при наличии теплового узла типа, показанного на рис. 1.1, *а*, в окружающее монокристалл пространство над тиглем поступает большее количество тепла. Это влечет за собой изменение осевых и радиальных градиентов температуры в растущем монокристалле.

**Нагреватель.** Основные варианты нагревателей могут обеспечивать и боковой (рис. 1.2,*а*), и донно-боковой (рис. 1.2, *б*) подводы тепла к находящемуся в тигле расплаву. Первый вариант создает плавный радиальный и резкий осевой градиенты температуры по расплаву, второй позволяет решать обратную задачу. Изменяя конфигурацию нагревателя и положение в нем греющих элементов можно осуществить подвод тепла к расплаву в любом требуемом направлении. Аналогично задачу решают, изменяя положение подставки тигля относительно нагревателя.

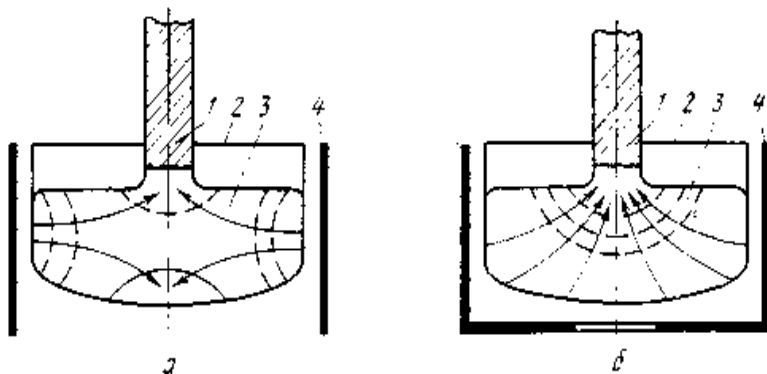


Рис. 1.2 – Форма изотерм (пунктир) и потоков тепла (стрелки) в расплаве при использовании бокового (*а*) и донно-бокового (*б*) способов подвода тепла к расплаву: 1 – кристалл; 2 – тигель; 3 – расплав; 4 – нагреватель

**Экранировка.** Существующие системы экранировки тигля с расплавом можно разделить на закрытые (см. рис. 1.1, *в*) и от-

крытые (см. рис. 1.1, з). Первые обеспечивают малые осевые и радиальные градиенты температуры по расплаву в тигле. Одновременно в результате поступления тепла в область над тиглем, ограниченную потолочным экраном, градиенты температуры в выращиваемом монокристалле также уменьшаются. При открытой системе экранировки, вследствие повышенных потерь тепла с открытой поверхности расплава, осевые градиенты по расплаву значительно больше. Конструкция экранировки выращиваемого монокристалла определяется требуемыми осевыми и радиальными градиентами температуры в нем. Для облегчения управления ими экранировка может быть как пассивной, так и активной; последняя представляет собой нагреватель сопротивления (см. рис. 1.1, б). Последний не только обеспечивает создание требуемого градиента температуры в монокристалле, но может служить для охлаждения его с нужной скоростью после окончания процесса выращивания; это также уменьшает напряжения в кристалле и улучшает его структуру.

Показанный на рис. 1.1, з вариант теплового узла с вращающейся экранировкой, при условии соблюдения строгой соосности её с тиглем, обеспечивает высокую симметрию теплового поля в расплаве. Это сводит к минимуму знакопеременные напряжения в кристалле и уменьшает вероятность возникновения двойниковых дефектов [12].

Процесс выращивания по Чохральскому состоит из следующих стадий:

а) оплавление монокристаллической затравки и кристаллизация на ней самых первых порций расплава (затравливание);

б) наращивание монокристалла от размеров так называемой шейки, выращенной на затравке, до номинального диаметра (выход на диаметр);

в) рост монокристалла постоянного диаметра;

г) создание так называемого обратного конуса и отрыв монокристалла от поверхности расплава;

д) охлаждение выращенного монокристалла.

**Затравливание.** Дефекты структуры, возникающие на стадии затравливания, представляют собой дислокации, наследуемые из затравки. Поэтому качеству подготовки структуры должно быть уделено особое внимание. Чтобы количество дис-

локаций в выращиваемом монокристалле было незначительным, содержание их в затравке также должно быть минимальным. Поверхностные повреждения, возникающие при вырезке затравки из ранее выращенного монокристалла, удаляют химическим травлением и полировкой [7].

В момент контакта холодной затравки с поверхностью расплава в ней, в результате теплового удара (термоудара), происходит размножение дислокаций. Для предотвращения этого затравку перед погружением в расплав прогревают путем выдержки над ним до возможно более высоких температур.

Сечение затравки должно быть минимальным, так как, во-первых, плотность дислокаций, наследуемых монокристаллом, прямо пропорциональна отношению площадей сечения затравки и выращенного на ней монокристалла; во-вторых, термоудар в затравках малого сечения меньше, чем в затравках большого сечения. Так, например, при изменении сечения затравки с исходной плотностью дислокаций около  $6 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$  с  $12 \times 12 \text{ мм}^2$  до  $2 \times 2 \text{ мм}^2$ , плотность дислокаций в зоне термоудара упала с  $2 \cdot 10^6$  до  $1,5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$ . Протяженность зоны термоудара по длине затравки также тем меньше, чем меньше ее сечение.

После погружения конца затравки в расплав и оплавления его с целью удаления поверхностных дефектов приступают к операции выращивания так называемой шейки. Она представляет собой тонкий и длинный монокристалл. Диаметр шейки не должен превышать линейного размера поперечного сечения затравки, обычно имеющего форму квадрата или треугольника. Длина шейки должна составлять несколько ее диаметров. Выращивание шейки осуществляют с большой линейной скоростью, что создает большие осевые градиенты температуры. Это способствует сильному пересыщению вакансиями области монокристалла вблизи фронта кристаллизации. В результате взаимодействия с вакансиями проросшие из затравки в шейку дислокации полностью вытесняются [5, 12].

**Выход на диаметр.** При выходе монокристалла на диаметр основным условием, предотвращающим увеличение плоскости дислокаций, является малый угол разрачивания, снижающий термические напряжения. Так, если при величине угла разрачи-



вания  $60^\circ$  плотность дислокаций в слитке составляла около  $10^5 \text{ см}^{-2}$ , то при уменьшении угла разращивания до  $10^\circ$  она сокращается до  $10^3 \text{ см}^{-2}$  [12].

**Рост цилиндрической части монокристалла.** На стадии роста монокристалла постоянного сечения (диаметра) ведущую роль в формировании монокристаллической структуры играют тепловые условия процесса. Они определяют осевые и радиальные градиенты температуры в кристалле и расплаве, от которых зависят форма фронта кристаллизации и термические напряжения в монокристалле, а также размеры переохлажденной области расплава вблизи фронта кристаллизации [12].

Схема тепловых потоков и изотерм в кристалле и расплаве показана на рис. 1.3. Поток тепла  $Q_H$ , поступающий к тиглю от нагревателя, равен сумме потоков тепла, отводимых излучением от расплава  $Q_{И.Р.}$ , теплопроводностью  $Q_{Т.К.}$  и излучением  $Q_{И.К.}$  от кристалла. Соотношение этих потоков определяет характер градиентов температуры, а следовательно, и изотерм в выращиваемом монокристалле ( $T_1 - T_3$ ).

Радиальный градиент температуры ( $G_r$ , град/см) определяется разностью температур в сечении кристалла на его поверхности  $T_{\Pi}$  и в центре  $T_{Ц}$ :

$$G_r = \Delta T / \Delta r = (T_{Ц} - T_{\Pi}) / r, \quad (1.1a)$$

где  $r$  — радиус кристалла.

Осевой градиент температуры в кристалле ( $G_x$ , град/см) определяется разностью температур по его длине:

$$G_x = \Delta T / \Delta x = (T_1 - T_2) / x, \quad (1.1b)$$

где  $x$  — расстояние по длине кристалла, см.

Радиальный градиент температуры зависит в основном от величины тепловых потерь с поверхности кристалла  $Q_{И.К.}$  и возрастает с их увеличением. Поэтому его можно изменять, экранируя или подогревая растущий кристалл.

Существенное влияние на отвод тепла от кристалла оказывает характер окружающей его атмосферы. В газовой среде тепловые потери с поверхности кристалла выше, чем в вакууме, где они происходят только вследствие излучения. В газовой же среде к отводу тепла добавляются потери тепла в основном за счет

конвекции газа, переносящего тепло от горячих частей монокристалла на холодные стенки камеры установки, в которой производили его выращивание. Потери тепла конвекцией возрастают с увеличением давления газа и его теплоемкости.

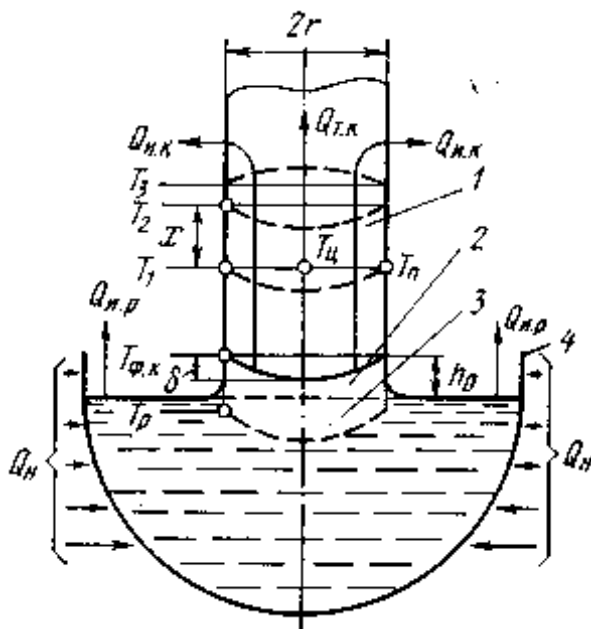


Рис. 1.3 – Схема тепловых потоков в системе расплав-кристалл при выращивании монокристалла методом Чохральского: 1 – кристалл; 2 – столбик расплава; 3 – переохлажденная область расплава; 4 – тигель;  $\delta$  – стрела прогиба фронта кристаллизации;  $h_0$  – высота столбика расплава  $T_{фк}$  – температура на фронте кристаллизации;  $T_p$  – температура изотермы, ограничивающей переохлажденную область расплава.

Осевой градиент зависит от распределения температуры по длине кристалла, т. е. в конечном счете, от тех же факторов, которые управляют радиальным градиентом. Таким образом, осевой и радиальный градиенты взаимосвязаны. Помимо этого, осевой градиент зависит и от скорости кристаллизации. С увеличением ее он уменьшается, что является следствием выделения

повышенных количеств тепла (скрытой теплоты плавления) на фронте кристаллизации [10].

Характер радиального и осевого градиентов температуры обуславливает форму фронта кристаллизации. При определенном соотношении их он может иметь наиболее благоприятный для роста монокристалла плоский характер. Если при постоянном радиальном градиенте температуры осевой градиент возрастает, то фронт кристаллизации становится выпуклым в расплав. Наоборот, если при постоянном осевом градиенте температуры радиальный градиент возрастает, то фронт кристаллизации приобретает прогиб в сторону кристалла [10].

**Создание “обратного конуса”.** Перед отрывом выращенного монокристалла полупроводника от расплава диаметр его плавно уменьшают, создавая обратный конус. Это необходимо для предотвращения теплового удара, вызывающего размножение дислокаций в конечной части монокристалла при отрыве полной площади его сечения от поверхности расплава в тигле. Плотность дислокаций в конечной части монокристалла может возрасти по этой причине на 1,5...2 порядка.

**Охлаждение выращенного монокристалла.** Точно так же с целью уменьшения термических напряжений в выращенном монокристалле его стараются охлаждать как можно медленнее. Для этого монокристалл после отрыва от расплава поднимают над ним на небольшое расстояние, после чего температуру нагревателя тигля медленно понижают. Такой прием способствует уменьшению плотности дислокаций в конечной части монокристалла примерно на полпорядка по отношению к начальной части. Резкое охлаждение, наоборот, может повысить плотность дислокаций в нижней половине монокристалла примерно на 1...2 порядка [10].

**Особенности метода жидкостной герметизации.** Выращивание монокристаллов разлагающихся полупроводниковых соединений (арсенида и фосфида галлия) методом Чохральского производят из-под слоя герметизирующей жидкости, над которой создают давление инертного газа. Величина его в 1,5...2,5 раза должна превышать равновесное давление пара летучего компонента в точке плавления соединения. Обычно она составляет 1,5...2,0 ат для арсенида и 60...80 ат для фосфида галлия.

В качестве герметизирующей жидкости или, как ее часто называют в металлургии, покровного флюса, используют расплав борного ангидрида  $B_2O_3$ , обладающего стеклообразными свойствами. Плотность его в расплавленном состоянии  $1,8 \text{ г/см}^3$ , температура начала размягчения – около  $450^\circ\text{C}$ . В расплавленном состоянии борный ангидрид очень стабилен и слабо реагирует с кварцем и с расплавами полупроводниковых соединений. Однако в твердом состоянии при комнатных температурах он очень гигроскопичен и жадно поглощает влагу из воздуха. Поэтому перед употреблением его подвергают длительной прокалке в глубоком вакууме.

В начальный момент процесса выращивания монокристалла полупроводникового соединения флюс полностью прозрачен. Однако вследствие поглощения летучих компонентов соединения (мышьяка или фосфора) он при температурах более  $1000^\circ\text{C}$  быстро становится непрозрачным. Особенно сильно этот эффект проявляется у плохо обезвоженного флюса. Полная потеря прозрачности флюсом сильно затрудняет процесс ручного управления ростом монокристалла, и единственным способом контроля состояния расплава является применение специальной автоматизированной системы.

Проведение процесса выращивания монокристалла в атмосфере компрессированного газа, обладающего большой теплопроводностью, а также наличие на поверхности расплава слоя флюса с теплоизолирующими свойствами существенно изменяют тепловые условия роста монокристалла по сравнению с обычными условиями.

Во-первых, резко возрастают осевые градиенты температуры в кристалле вблизи фронта кристаллизации. Так, если при выращивании монокристаллов кремния они составляют около  $50...70 \text{ град/см}$ , то при выращивании монокристаллов арсенида галлия осевые градиенты температуры могут достигать  $100 \text{ град/см}$  и более, в зависимости от способа нагрева. Это способствует возникновению в выращиваемых монокристаллах арсенида галлия настолько значительных напряжений, что при большом диаметре они могут растрескиваться даже в процессе выращивания.

Толщина слоя борного ангидрида на поверхности кристал-

лизуемого расплава полупроводниковых соединений существенно влияет на условия роста их монокристаллов. Увеличение толщины флюса усиливает тепловую изоляцию расплава. Это влечет за собой уменьшение осевых и радиальных градиентов температуры в расплаве, т. е. уменьшение размера переохлажденной области. В результате угол разраствания монокристалла уменьшается, и управлять диаметром растущего монокристалла становится сложно. При толщине слоя флюса менее 6 мм повышаются потери летучего компонента. Оптимальной толщиной флюса считается 10...15 мм.

## **1.2. Влияние тепловых условий и режимов выращивания на структуру монокристаллов и образование дислокаций**

Вследствие неравномерного распределения температуры по длине и поперечному сечению монокристалла охлаждение его также протекает неравномерно. В результате в нем возникают термические напряжения. Величина их, помимо радиального перепада температур (см. уравнение 1.1а), зависит от механических характеристик полупроводника и коэффициента термического расширения. В свою очередь, радиальный перепад температур возрастает с увеличением диаметра монокристалла.

В тот момент, когда термические напряжения в монокристалле, находящемся в той области температур, где его деформация протекает пластически (в общем случае от  $0,75 T_{пл}$  до  $1,0 T_{пл}$ ), превзойдут значение критического напряжения образования дислокаций, последние возникнут в монокристалле. Величина критического напряжения образования дислокаций для разных полупроводников различна и возрастает с понижением температуры. Так, при  $930^{\circ}\text{C}$  она составляет для кремния 220, германия 40 и арсенида галлия  $110 \text{ кгс/мм}^2$ , а при  $830^{\circ}\text{C}$  – для кремния 330, германия 88 и арсенида галлия  $170 \text{ кгс/мм}^2$  [5].

Анализ этих данных с учетом температуры перехода из пластического состояния в упругое показывает, почему кремний является единственным полупроводником, выращивание бездислокационных монокристаллов которого легко осуществляется до диаметров более 100 мм.

Таким образом, появление дислокаций в выращиваемом из расплава монокристалле полупроводника происходит под действием возникающих в монокристалле термических напряжений. При этом плотность дислокаций возрастает с увеличением термических напряжений. Так как термические напряжения по объему, а следовательно, и по сечению монокристалла распределяются неравномерно, то и дислокации по сечению монокристалла полупроводника в общем случае распределяются неравномерно.

На некотором удалении от фронта кристаллизации, в области температур, где деформация монокристалла протекает пластически, распределение температур по сечению  $T_3$  монокристалла будет иным, чем по сечениям  $T_1$  и  $T_2$  (рис. 1.3). Так как тепло от монокристалла отводится с его поверхности, то периферийные слои будут более холодными, чем центральные. Вследствие этого они будут быстрее сокращать свои линейные размеры и сжимать внутренние слои, в которых появятся сжимающие напряжения. Наоборот, внутренние слои будут препятствовать усадке наружных и в последних появятся растягивающие напряжения (рис. 1.4). Таким образом, в самом общем случае термические напряжения в выращиваемом монокристалле максимальны в центре и на периферии его сечения. Между двумя областями с различным знаком напряжений существует область, где напряжения в результате самокомпенсации отсутствуют.

Поскольку количество дислокаций возрастает с увеличением напряжений, то распределение дислокаций по сечению монокристалла неравномерно – на периферии и в центре плотность их максимальна (рис. 1.5 *а, б*). Так как распределение плотности дислокаций по сечению монокристалла отражает распределение термических напряжений в этом же сечении, оно существенно зависит от симметрии теплового поля. Нарушение ее может привести к искажению классического распределения плотности дислокаций и получению самых разнообразных форм распределения, вплоть до равномерного (рис. 1.5, *в*).

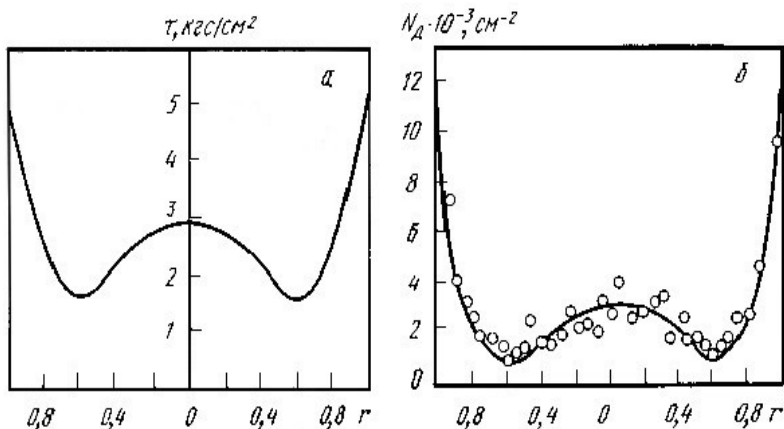


Рис. 1.4 – Эпюры касательных напряжений  $\tau$  (а) и распределение плотности дислокации  $N_D$  (б) по сечению монокристалла диаметром  $2r$ , выращенного методом Чохральского

Для получения монокристаллов с равномерным распределением плотности дислокаций используют метод внецентрового выращивания [7], при котором вследствие асимметрии теплового поля термические напряжения в растущем монокристалле имеют знакопеременный характер. В результате этого в условиях больших градиентов температуры и малых скоростей роста дислокации выползают из плоскостей скольжения и переходят в объем монокристалла. Это обеспечивает их равномерное, хотя и высокое (около  $10^4 \text{ см}^{-2}$ ), распределение по сечению монокристалла.

На распределение плотности дислокаций по сечению монокристалла оказывают влияние и другие факторы, например неоднородное распределение примесей в объеме монокристалла (периодическая неоднородность, ячеистые субструктуры и др.). Примеси, искажая кристаллическую решетку, приводят к возникновению в полупроводнике дополнительных дислокаций. Однако влияние примесей на количество и распределение дислокаций по сравнению с термическими напряжениями очень невелико [5].

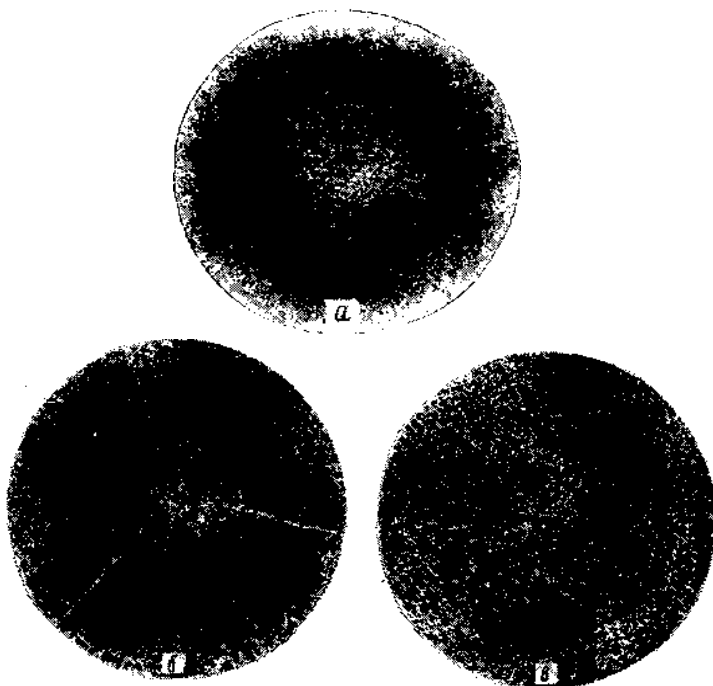


Рис. 1.5 – Распределение дефектов структуры по поперечному сечению монокристаллов кремния: *a* – классическое распределение дислокаций и плоскостей скольжения; *б* – то же, с малоугловыми границами; *в* – приблизительно равномерное распределение дислокаций.

**Влияние скоростных условий процесса выращивания монокристаллов на их дислокационную структуру.** Изменение скоростных условий процесса выращивания монокристалла (скорости подъема заправки, числа оборотов её и тигля) оказывает влияние не только на градиенты температуры в расплаве, но и на форму фронта кристаллизации. Последняя отражает величину радиальных градиентов температуры в кристалле вблизи фронта кристаллизации, определяющих будущую дислокационную структуру.

В общем случае влияние увеличения скорости выра-



щивания монокристалла на плотность дислокаций в нем находится в пределах одного порядка. Вначале, с увеличением скорости роста, осевые градиенты температуры в кристалле, вследствие увеличения выделения на фронте кристаллизации скрытой теплоты плавления, уменьшаются. Одновременно изменяется и форма фронта кристаллизации – от выпуклого, в общем случае, в расплав, он становится сначала плоским, а затем вогнутым в кристалл. Соответственно и плотность дислокаций сначала падает, достигая минимального для данных условий выращивания кристалла значения, а затем снова возрастает.

Изменение скоростей вращения затравки и тигля также влияет на форму фронта кристаллизации, изменяющуюся под действием потоков расплава в тигле. Это влияние может носить сложный характер, который трудно предположить. Тем не менее, в общем случае, увеличение скорости вращения затравки будет способствовать поступлению горячих потоков расплава от дна тигля к центру выпуклого в расплав фронта кристаллизации. В результате он будет спрямляться. Аналогичный эффект может быть достигнут при вогнутом в кристалл фронте кристаллизации путем увеличения оборотов тигля, приводящего к поступлению горячих потоков расплава от стенок тигля к периферии фронта кристаллизации.

В процессе выращивания монокристалла форма фронта кристаллизации по его длине непрерывно изменяется. В начальный момент, вследствие интенсивного отвода тепла от затравки через затравкодержатель и водоохлаждаемый шток, создаётся большой осевой градиент температуры, и фронт кристаллизации имеет выпуклость в расплав (рис. 1.6, участок 1).

После выхода монокристалла на диаметр при соответствующих тепловых условиях форма фронта кристаллизации становится почти плоской (рис. 1.6, участок 2). Однако по мере роста монокристалла потери тепла излучением с его поверхности (рис. 1.3,  $Q_{ИК}$ ) начинают превышать потери тепла теплопроводностью (рис. 1.3,  $Q_{ТК}$ ). В результате фронт кристаллизации становится вогнутым в кристалл (рис. 1.6, участок 3).

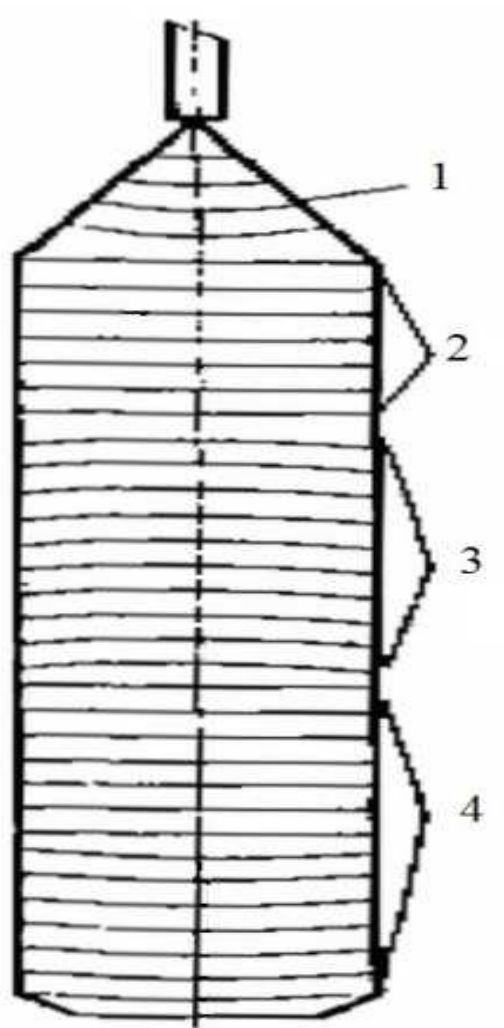


Рис. 1.6 – Характер изменения формы фронта кристаллизации по длине монокристалла, выращенного методом Чохральского

По мере роста монокристалла уровень расплава в тигле понижается, монокристалл опускается в глубь тигля и на его поверхность начинает поступать тепло, излучающееся от стенок тигля. Потери тепла излучением с поверхности монокристалла уменьшаются, и фронт кристаллизации сначала становится плоским, а затем снова выпуклым в расплав (рис. 1.6, участок 4).

Для получения монокристаллов с низкой плотностью дислокаций необходимо, чтобы фронт кристаллизации был, в общем случае, плоским или слегка вогнутым в кристалл. Последнее позволяет избежать возникновения малоугловых границ, присущих плоскому фронту кристаллизации. Одновременно уменьшается возможность возникновения на выпуклом фронте кристаллизации эффекта грани.

Однако благоприятная форма фронта кристаллизации не гарантирует получения монокристалла с минимальной плотностью дислокаций. Плотность дислокаций в значительной степени определяется диаметром растущего монокристалла и возрастает примерно пропорционально его увеличению. Это объясняется в основном затруднениями, возникающими вследствие удлинения пути, проходимого дислокациями от места их генерации до выхода на поверхность монокристалла.

Важное влияние на совершенство монокристаллов разлагающихся полупроводниковых соединений оказывает отклонение состава расплава от стехиометрического. При методе жидкостной герметизации, в ходе плавления исходной загрузки полупроводникового соединения, всегда имеет место потеря части летучего компонента вследствие прорыва его паров через слой флюса или растворения в нем.

Поэтому процесс плавления исходной загрузки следует проводить достаточно медленно, так как после полного ее расплавления температура расплава резко увеличивается. Это приводит к тому, что расплав полупроводниковых соединений при методе жидкостной герметизации перед выращиванием из него монокристалла, как правило, обогащен металлическим компонентом.

Если температура монокристалла, выходящего из-под слоя флюса, настолько велика, что флюс сливается с него, то поверхностный слой полупроводникового соединения начинает разла-

гаться, теряя летучий компонент. В результате вблизи поверхности монокристалла генерируются дислокации и тем интенсивнее, чем больше осевой перепад температур по длине монокристалла. Поэтому для снижения уровня напряжений и количества дислокаций в монокристаллах полупроводниковых соединений, выращиваемых методом жидкостной герметизации, необходимо создавать малые градиенты температуры в монокристалле в области флюса и над ним.

### **1.3. Математические методы исследования процессов теплопереноса и их роль в обеспечении качества монокристаллов**

Как было показано выше, процесс получения монокристаллов полупроводников методом выращивания из расплава является сложным сочетанием гидродинамических, тепловых процессов и фазовых превращений. Стремление повысить качество выпускаемой продукции приводит к ужесточению требований к точности воспроизведения оптимальных условий выращивания кристаллов. Поэтому актуальными являются методы моделирования всего комплекса физических процессов выращивания, позволяющие с помощью установленных критериальных закономерностей, оптимизировать выбор технологических параметров при существенном сокращении материальных затрат и обеспечении необходимого качества продукции. Это особенно актуально при разработке новых технологий и оборудования, так как принцип подобия в моделировании позволяет внедрять научно-обоснованные конструкции новых ростовых установок и способы управления процессами теплопереноса. Поэтому возникает необходимость в использовании комплекса математических моделей, которые взаимно дополняют друг друга и, таким образом, учитывают перечисленные факторы. Обычно при исследовании процессов выращивания используют сопряженные гидродинамические и тепловые численные модели.

Численное моделирование тепловых полей и процессов теплопереноса в ростовых установках проводится методами конечных разностей и конечных элементов [14 – 21]. В многочисленных работах, посвященных этому вопросу предлагаются

локальные и глобальные модели, основанные на уравнениях Навье-Стокса, уравнениях неразрывности и уравнениях Стефана [22 – 38]. В работах [39 – 47] приводятся результаты моделирования тепловых полей, явлений тепломассопереноса и образования дислокаций при выращивании GaAs по ЛЕС-технологии.

**Моделирование теплового поля в расплаве.** Для численного анализа процессов теплопереноса в расплаве необходимо экспериментально зафиксировать граничные условия в виде распределения температур на внутренней стенке тигля и вблизи поверхности расплава под слоем флюса.

Задача о распределении скоростей и температур во вращающемся расплаве чаще всего сводится к совместному решению системы уравнений Навье-Стокса и переноса энергии Фурье-Кирхгофа, записанной для цилиндрической системы координат. Рассчитываются двумерные течения для осесимметричной задачи, а также вращательная компонента вектора скорости. Исключая давление из уравнений движения, введем функцию тока  $\psi$ , тогда компоненты скоростей запишутся в виде [24]:

$$u = \frac{1}{r} \frac{\delta \psi}{\delta z}; \quad w = -\frac{1}{r} \frac{\delta \psi}{\delta r}, \quad (1.2)$$

а функция вихря в виде

$$\omega = \frac{\delta u}{\delta z} - \frac{\delta w}{\delta r}. \quad (1.3)$$

Тогда система уравнений запишется следующим образом [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \omega}{\delta \tau} + \frac{\delta}{\delta r}(u\omega) + \frac{\delta}{\delta z}(w\omega) - \frac{\delta}{\delta z}\left(\frac{v}{r}\right)^2 &= \nu \left[ \frac{\delta}{\delta r} \left( \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r}(r\omega) \right) + \frac{\delta \omega}{\delta z^2} - \beta \sigma \frac{\delta T}{\delta r} \right]; \\ \frac{\delta v}{\delta \tau} + u \frac{\delta v}{\delta r} + w \frac{\delta v}{\delta z} + \frac{uv}{r} &= \nu \left[ \frac{\delta}{\delta r} \left( \frac{1}{r}(rv) \right) + \frac{\delta^2 v}{\delta z^2} \right]; \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\frac{\delta}{\delta z} \left( \frac{1}{r} \frac{\delta \psi}{\delta z} \right) + \frac{\delta}{\delta r} \left( \frac{1}{r} \frac{\delta \psi}{\delta r} \right) = \omega;$$

$$\frac{\delta T}{\delta \tau} + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r}(ruT) + \frac{\delta}{\delta z}(wT) = \alpha \left[ \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left( r \frac{\delta T}{\delta r} \right) + \frac{\delta^2 T}{\delta z^2} \right],$$

где  $\psi$  – функция тока;  $\omega$  – вихревая функция;  $v$  – тангенциальная

составляющая скорости;  $u$  – горизонтальная составляющая скорости;  $w$  – вертикальная составляющая скорости;  $T$  – температура;  $r$  и  $z$  – координаты;  $\tau$  – время;  $\nu$  – коэффициент кинематической вязкости;  $\alpha$  – коэффициент температуропроводности.

Диссипативная функция в уравнении Фурье-Кирхгофа здесь опущена, так как она мало изменяет решения, требуя больших затрат машинного времени.

Задача дополняется граничными условиями:

на границе кристалл-расплав

$$\nu = r\Omega_c; \psi = 0; T = f(r); \omega = -\frac{\delta w}{\delta r}; \quad (1.5)$$

на поверхности расплава (герметизатора)

$$\frac{\delta \nu}{\delta z} = 0; \psi = 0; T = -\lambda \frac{\delta T}{\delta z}; \omega = 0; \quad (1.6)$$

на боковой стенке:

$$\nu = r\Omega_c; \psi = 0; T = f(z); \omega = \frac{\delta u}{\delta z}; \quad (1.7)$$

на дне тигля

$$\nu = r\Omega_c; \psi = 0; T = f(r); \omega = \frac{\delta u}{\delta z}; \quad (1.8)$$

на оси симметрии

$$\nu = 0; \psi = 0; \frac{\partial T}{\partial r} = 0; w = 0; \quad (1.9)$$

Трудности получения решения уравнений Навье-Стокса численными методами связаны и со сложностью физического явления, и с неудобными величинами теплофизических параметров, характеризующих расплавы полупроводниковых материалов.

С математической точки зрения коэффициент кинематической вязкости является малым параметром в уравнениях Навье-Стокса, а это необходимое условие возникновения пограничных слоев на твердых стенках исследуемой области. Таким образом, сетка разбиения исследуемой области должна быть достаточно мелкой, чтобы получить решение задачи вблизи твердых стенок. На практике измельчение сеток приводит к рез-

кому возрастанию затрат машинного времени, поэтому исследуемая область разбивается неравномерной прямоугольной сеткой.

При численном решении задач гидродинамики целесообразно строить разностные схемы так, чтобы в них выполнялись аналоги законов сохранения, заложенные в исходном дифференциальном уравнении [21]:

$$\frac{\partial^2 t}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial t}{\partial r} = 0. \quad (1.10)$$

Дальнейшее развитие теории привело к понятию полной консервативности разностных схем, в которых отражены дополнительные соотношения, выражающие баланс отдельных видов энергии. Рассмотрение этих вопросов потребовало изучения аппроксимации условий в переменных  $\psi$ ,  $\omega$ . Оказалось, что известная аппроксимация вихря в граничных узлах по формуле Тома позволяет строить неявные консервативные схемы. При этом сеточные операторы сохраняют важные свойства дифференциальных операторов исходной задачи, – схема является однородной. При малых значениях  $\nu$  аппроксимация членов переноса приводит к немонотонным схемам. Существуют различные способы монотонизации сеточных уравнений. В рассматриваемой задаче моделирования часто используется монотонизация по А.Д. Самарскому со вторым порядком точности [17].

В качестве метода решения исходной системы дифференциальных уравнения обычно выбирается метод продольно-поперечной прогонки. Половина временного ряда отводится на прогонку по радиусу, другая половина – прогонке вдоль оси  $z$  (для функций вихря, температуры, окружной составляющей скорости).

На рис. 1.7 приведены изолинии функций тока  $\psi$  для расчета, выполненного в рамках исследований, проводимых совместно кафедрой информационно-управляющих систем КрНУ им. М. Остроградского и лабораторией завода Чистых металлов (г. Светловодск). Целью исследований было установление вклада конвективных и кондуктивных составляющих в тепловые потоки в подкристалльной области, что имеет важное значение при разработке информационных технологий мониторинга темпера-

турных полей в реальном времени процесса выращивания. В связи с незначительными различиями в картинах течения есть основания утверждать, что неоднородность температурного поля в подкристалльной области обусловлена преимущественным вкладом кондуктивных составляющих в потоках тепла.

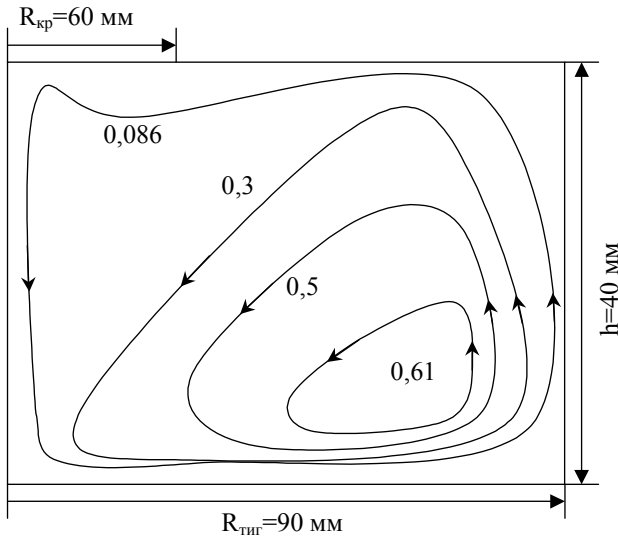


Рис. 1.7 – Изолинии функции тока.

**Моделирование теплового поля в слитке.** В локальных и глобальных тепловых моделях для расчета тепловых полей в слитке используют метод конечных разностей (МКР) или метод конечных элементов (МКЭ). При расчетах используются термодинамические параметры материалов, изменение размеров слитка по мере выращивания кристалла, изменение уровня расплава в тигле и другие параметры процесса. Для стационарного случая в цилиндрической системе координат уравнение теплопроводности имеет вид [21]:

$$\lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \left( \frac{\partial \lambda}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial \lambda}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0. \quad (1.11)$$

При численном расчете теплового поля на оси кристалла



граничным условием будет  $\delta T / \delta r = 0$ .

При граничных условиях на нижней границе  $T=T_{\text{пл}}$  при  $z=0$  и на боковой и верхней границах  $\left| \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\varepsilon \sigma}{\lambda} T^4 \right| = 0$ , где  $r$  – координата по радиусу слитка,  $0 \leq r \leq R_{\text{сл}}$ ,  $z$  – координата вдоль оси слитка,  $0 \leq z \leq z_{\text{max}}$ ,  $T$  – текущая температура,  $T_{\text{пл}}$  – температура плавления материала,  $\lambda$  – теплопроводность,  $\sigma$  – постоянная Стефана-Больцмана,  $\varepsilon$  – излучательная способность поверхности слитка, закон изменения которой по высоте слитка нужно задавать, поскольку в условиях экранировки эта величина является сложной функцией, зависящей от геометрических параметров теплового узла, в частности размеров и положения экрана вокруг слитка. Вершина затравки рассмотрена изолированной, поэтому граничным условием является:

$$\partial T / \partial Z = 0 \quad \text{on} \quad Z = H_T.$$

**Моделирование теплопередачи от выращенной части слитка.** На данный момент общепринято мнение, что плотность дислокаций зависит от формы термических полей в кристалле в течение выращивания, которые дают начало термическим напряжениям в остывающем кристалле. Высокое напряжение, которое соответствует высоким температурным градиентам, приводит к образованию ядра дислокаций, которые скользят и размножаются в более поздних стадиях выращивания кристалла. Таким образом, возникает необходимость контролировать тепловое поле окружения растущего кристалла для уменьшения скорости остывания и уменьшения термических напряжений с целью достижения наивысшего качества монокристаллического материала.

При выращивании арсенида галлия борный ангидрид ( $B_2O_3$ ) используется как герметизатор, чтобы предотвратить разложение расплава и нижней, наиболее нагретой, части кристалла. Это приводит к изменениям в скоростях остывания при выходе горячего твердого материала из герметизатора, что должно быть особенно существенным в области конуса. Вполне вероятно, что большинство дислокаций образуют ядро на этой стадии выращивания с распространением в более поздних стадиях. Многие проблемы, таким образом, касаются выращивания конической

части и начала цилиндрической части слитка.

В этой связи необходимо осветить роль герметизатора (борный ангидрид) в распределении тепловых потоков. По результатам, опубликованным в работах [41, 42] можно сделать выводы по поводу свойств теплопередачи через герметизатор. С одной стороны, можно рассматривать борный ангидрид как полностью прозрачный для излучения, и в данном случае его присутствие может быть проигнорировано, но экспериментальные результаты [48] указывают, что присутствует изменение в осевом градиенте температуры при появлении кристалла из герметизатора. Более реалистичным является рассмотрение герметизатора как частично прозрачной среды для излучения. В работе [48] показано, что в процессе выращивания нарастающее загрязнение герметизатора делает его все менее прозрачным. Внутри борного ангидрида теплопередача рассмотрена, как в основном теплообменная, на что указал Хикс в [49], где было показано, что конвективное движение в слое герметизатора очень слабое. Этот факт следует учесть в тепловых расчетах.

Теплопоток внутри твердого кристалла, как было показано выше, описывается уравнением теплопроводности (1.11). В течение процесса выращивания методом Чохральского слиток GaAs медленно поднимается из расплава, уровень которого внутри тигля снижается. Модель обычно сформирована в координатном пространстве, которое перемещается с уровнем расплава, относительно кристалла, вытягиваемого со скоростью  $v_p$ . Изменение со временем параметров вытягивания кристалла во многом зависит от изменения процессов теплопередачи в кристалле. Распределение температуры в любой стадии, таким образом, может быть получено с помощью решения стационарного уравнения теплопроводности в текущей конфигурации. Выполняя это отдельно на различных стадиях выращивания, создаются серии моментальных "снимков" температурных полей, в соответствии с которыми могут быть высчитаны термические напряжения.

На поверхности кристалла охлаждение принимает вид двух различных процессов, в зависимости от того, как расположена поверхность – над или под поверхностью герметизатора. Непосредственно над герметизатором происходит излучающий теплообмен с окружающей средой, состоящей из поверхности гер-

метизатора, стенок тигля, экрана и внутренней поверхности ротовой установки.

При высоких температурах (вблизи точки плавления) преобладают излучательные потери тепла. Однако, по мере остывания, когда температура поверхности станет ниже некоторого критического значения (около 900°C), в потерях с поверхности будет преобладать конвективная передача к окружающему газу. Уровень теплопередачи к газу будет значительно зависеть от силы конвекции, которая будет значительно большей для технологии с жидкостной герметизацией при высоком давлении, по сравнению с технологией с жидкостной герметизацией при низком давлении. Но если исследователя интересует диапазон температур выше 900°C, то игнорирование конвективной передачи оправдано [45].

В области контакта поверхности кристалла и герметизатора, используемое в работах [45, 46] граничное условие имеет вид:

$$\lambda_s \frac{\partial T}{\partial n} = -\alpha h(T - T_0), \quad (1.12)$$

где  $\alpha$  является безразмерным коэффициентом, меньшим единицы,  $h$  – коэффициент теплопередачи, значение которого (0.5 мВт мм<sup>2</sup> К<sup>-1</sup>) было получено с помощью уравнения Стефана для излучательных потерь в среду при  $T_0$ ,  $T_0$  означает температуру стенки тигля на уровне поверхности герметизатора.

Таким образом, как было показано выше, исследование процессов тепломассопереноса сводится к решению дифференциальных уравнений в частных производных. Несмотря на то, что принципы решения таких уравнений хорошо изучены, сам процесс решения представляет собой сложную вычислительную задачу, требующую большого количества вычислительных ресурсов даже в случае поиска приближенного решения. В большинстве случаев задача сводится к сверхбольшой системе линейных алгебраических уравнений, решение которой дает приближенное значение искомой функции в некотором наборе точек – узлов дискретизации. Распространенные численные методы решения таких систем являются итеративными и предполагают последовательную, а не параллельную обработку данных. Очевидно, что оптимальное использование вычислительных ресурсов возможно

только при максимальном распараллеливании процессов вычислений, что во многих случаях легко достигается при использовании нейронных сетей.

#### **1.4. Анализ концепций и проблем мониторинга сложных технологических систем и процессов**

Создание методов и информационных технологий мониторинга и управления различными сложными технологическими процессами, к каким относится процесс выращивания монокристаллов, является актуальной проблемой. Многие существующие и проектируемые сложные технические объекты являются, как правило, дистанционно управляемыми с помощью операторов и операторов-технологов. Информация для операторов о текущих состояниях и функционировании сложных технических систем (СТС) передается в виде значений параметров измерительной информации. Количество таких параметров для многих систем и процессов достаточно велико, что существенно усложняет их восприятие и интерпретацию состояний СТС в целом. Необходимость описания СТС в различных сферах человеческой деятельности, усложнение технических решений для СТС, требования к постоянному повышению квалификации экспертов предметной области и специалистов по эксплуатации СТС, а также многие другие важные аспекты повышают значимость создания интеллектуальных информационных технологий (ИИТ) и реализующих их программных комплексов (ПК), позволяющих проектировать автоматизированные системы (АС) мониторинга состояния и управления СТС в реальном времени.

СТС характеризуются перечнем специфических особенностей, которые ставят для разработчиков ИИТ ряд серьезных задач, таких, как:

- формализация неполных, нечетких, разнотипных и даже противоречивых исходных данных и знаний об объекте на этапе сбора информации и формирования базы знаний (БЗ);
- обработка больших потоков информации, формируемых значительным количеством контролируемых параметров;
- повышение достоверности и уменьшение избыточности информации на этапе ее обработки;

- потоковость вычислений как на этапе обработки, так и на этапе анализа информации;

- функционирование АС в режиме реального времени (РВ): обработка поступающей на ее вход информации (управление получением данных, прием-передача данных между функциональными элементами АС, синхронизация процесса анализа и управления), анализ значений параметров, формирование и выдача (при необходимости) управляющего воздействия на ОУ со скоростью не ниже скорости развития событий на объекте.

Отличительная черта СТС состоит еще и в том, что в процессе эксплуатации возможны различные изменения поведения контролируемых объектов и систем, вызванные возмущающими факторами стохастического характера. Это обуславливает необходимость на этапе применения АС осуществлять оперативное формирование прогнозов, при которых обнаружение и ликвидация сбоев и отказов в них будут происходить значительно раньше, чем станут проявляться возможные последствия неисправностей. Указанные аспекты СТС особенно важны для организационно-технических комплексов, особо критичных к управлению при возникновении штатных ситуаций в условиях дефицита времени. Таким образом, для обеспечения требуемой степени качества и оперативности управления СТС необходимо, во-первых, обеспечить алгоритмизацию процессов смысловой интерпретации всех возможных штатных и штатных состояний их функционирования и, во-вторых, обеспечить решение этой задачи в реальном времени с учетом свойств СТС.

Основным способом выявления (оценивания) технического состояния (ТС) ОУ служат сбор, обработка и анализ измерительной информации. Здесь под ТС понимается совокупность изменяющихся в процессе производства, испытаний, эксплуатации свойств (качеств) ОУ, характеризующих его функциональную пригодность в текущих условиях. Сбор измерительной информации есть процесс получения (приема) и распределения всех значений измеряемых параметров. Под обработкой измерительной информации понимается процесс получения оценок измеряемых параметров ТС на основе собранных данных, снабженных показателем степени доверия к этим оценкам.

Целью мониторинга состояния СОТС на основе анализа ИИ

является получение обобщенных оценок совокупности параметров ТС, значения которых в явном виде либо указывают степень работоспособности рассматриваемого ОУ или место и вид возникшей неисправности, либо являются оценками прогнозируемых явлений и процессов с заданной точностью и интервалом прогноза и т. п.

Необходимо отметить, что в настоящее время в подавляющем большинстве случаев процесс мониторинга состояний ОУ автоматизирован лишь частично. Как правило, в современных АС операторам представляется смысловая информация только о состояниях отдельных элементов ОУ. Интегральную оценку состояния ОУ в таких системах выполняют операторы. Для этого им требуется знать и уметь оперативно анализировать многочисленные контекстные условия процессов динамического взаимодействия элементов и подсистем ОУ, что практически невозможно реализовать в полном объеме, особенно в режиме РВ.

При наличии большой разнотипности как самих объектов анализа или объектов управления (в том числе их сменяемости), так и непосредственно обрабатываемой информации при проектировании новых версий специального программного обеспечения (СПО) мониторинга необходимо учитывать такие требования:

- малые сроки “постановки на информационное обслуживание” новых объектов автоматизации и, соответственно, небольшая стоимость этого процесса;
- невысокие требования к программистской квалификации сопровождающего это СПО персонала;
- унификация и модульность построения используемых в СПО программно-алгоритмических средств, что позволяет быстро комплектовать нужные версии в зависимости от конкретных условий и целей применения;
- устойчивая (надежная) работа СПО при возникновении различных нештатных (не предусмотренных специалистами по соответствующим объектам автоматизации ситуаций);
- режим обработки данных “в реальном времени”.

Для максимального удовлетворения всех перечисленных противоречивых требований, предъявляемых как к облику СПО, так и в целом к автоматизированным системам мониторинга

(АСМ) состояния СТС, необходимо отойти от традиционно используемых при проектировании таких систем технологий и архитектур и учесть следующие основные современные тенденции и перспективы развития информационных технологий (ИТ) [50, 51]:

1. Переход от классических вычислений к альтернативным способам организации вычислительного процесса.
2. Ориентация на разработку моделей вычислительного интеллекта.
3. Реализация естественного параллелизма вычислений.
4. Многоагентный подход к построению систем мониторинга и поддержки принятия решений.

Фундаментальный вклад в становление методологической основы разработки технологий автоматизированного анализа измерительной информации, прямо или косвенно предназначенных для решения задач мониторинга состояний СТС, внесли отечественные и зарубежные ученые [51 – 79], развившие базовые элементы таких научных направлений, как теория автоматов, теория искусственного интеллекта, теория моделирования, теория нечетких множеств, теория нейронных сетей, теория распознавания образов, теория статистических выводов и решений и др.

Все перечисленные направления, хотя и проработаны достаточно глубоко, но не в состоянии обеспечить единым методологическим аппаратом процессы проектирования, разработки, сопровождения систем мониторинга в оговоренных выше условиях. Такое положение дел имеет место обычно из-за того, что положения и выводы некоторых из названных направлений затрагивают слишком широкую сферу приложений и не учитывают существенную специфику определенной предметной области, что в целом приводит к принятию неоптимальных решений при выборе методов и технологий мониторинга СТС.

Так, например, известные подходы недостаточно эффективно или вообще не обеспечивают решение ряда основных проблем, стоящих перед теорией и практикой автоматизированного анализа измерительной информации. Ими являются:

- отсутствие единой концептуальной основы в построении информационных технологий и систем мониторинга, функцио-

нирующих в различных условиях применения и целевого назначения;

- принципиальная невозможность единого формального описания всех возможных видов технического состояния, явлений и процессов из-за применения разнообразного математического аппарата для различных целей анализа;
- наличие большого количества форм представления данных и, соответственно, типов моделей представления знаний об объекте мониторинга, обусловленное существованием специализированных подходов;
- отсутствие теоретического и экспериментального обоснования структуры и состава информационных технологий, способных обеспечить эффективное решение задач мониторинга СТС;

Одна из главных причин существующих проблем имеет методологический характер и состоит в том, что при разработке данных АС зачастую игнорируются требования системного подхода к проектированию сложных организационно-технических комплексов. Это, в частности, проявляется в осуществлении автоматизации лишь отдельных этапов процесса сбора и обработки информации или в решении на ЭВМ некоторых расчетных задач без рассмотрения проблемы в целом. Другими словами, не осуществляется комплексная разработка технологий мониторинга СТС.

Таким образом, проведенный анализ показал, что проблемы создания и развития автоматизированных систем мониторинга – это, прежде всего, модельно-алгоритмические и информационные проблемы, требующие для своего решения системного подхода и междисциплинарных исследований. Это означает, что создание качественного СПО автоматизации процессов мониторинга и управления состояниями СТС необходимо начинать с изучения всех особенностей соответствующей предметной области.

В частности, системный анализ процессов создания, внедрения и сопровождения АСУ процессов выращивания монокристаллов позволил сформулировать следующие основные проблемы, приводящие к снижению эффективности системы автоматизированного управления данным процессом:

- оценивание текущего состояния процесса и принятие реше-



ния по его коррекции проводятся практически вручную, без использования автоматизированных систем поддержки принятия оперативных решений, что приводит к низкой оперативности получения информации о состоянии процесса, особенно при возникновении критических и нештатных ситуаций (НС). Все это может привести (и приводит) к принятию ошибочных или несвоевременных решений;

- отсутствуют единые базы данных и знаний обо всех этапах производственного процесса, что ограничивает оперативный доступ к информации о причинах НС, эффективности проведенных доработок, направленных на устранение этих причин;
- отсутствует методология создания систем мониторинга процессов, физические параметры которых невозможно измерить прямыми методами.

В целом проведенный анализ показывает очевидную необходимость использования современных принципов, базирующихся на существующих и перспективных интеллектуальных информационных технологиях для автоматизированного сбора, интеграции и комплексного анализа всех видов информации, циркулирующей в контуре как отдельных АСУ ТП, так и АСУ предприятия в целом.

### **1.5. Анализ существующих методов и средств автоматизированного управления процессом выращивания монокристаллов**

Современные системы управления ростовыми установками должны обеспечивать воспроизводимость результатов технологических процессов при достаточно высоких значениях показателей качества выращенных кристаллов, которые определяются техническими условиями и требованиями заказчика. Это может быть достигнуто только путем использования в контурах управления математических моделей с настраиваемыми параметрами, систем оперативной идентификации этих моделей и систем оптимизации режимов. При таком подходе влияние на процесс “человеческого фактора” сводится к минимуму.

Вопросу создания методов и моделей для систем управления процессом выращивания уделялось достаточно большое

внимание с самого начала промышленного производства монокристаллов полупроводников. Достаточно подробный анализ развития автоматизации управления процессом выращивания монокристаллов по методу Чохральского представлен в работе [80].

Первые системы динамических моделей, описывающих процесс выращивания монокристаллов, были получены на основе классического подхода к решению задачи идентификации объекта управления [81 – 84]. Модель процесса выращивания в пространстве состояний была предложена и развита Г.А. Сатункиным [85].

В работах [86 – 89] развит подход к моделированию передаточных функций, необходимых для регулирования диаметра растущего кристалла, на основе использования класса комбинированных моделей “передаточная функция – шум”. Описание процедуры синтеза схемы регулирования с применением такой модели представлено в [88].

Общие и частные подходы к проектированию автоматизированных систем управления процессом выращивания слитков по методу Чохральского достаточно подробно изложены в работах [88 – 100], а принципы построения системы управления технологическим процессом выращивания с поддержанием заданных диаметра и температуры расплава изложены в [97, 98]. Примером реализации этих подходов и принципов может служить автоматизированная система, описанная в работе [101]. В этой двухуровневой системе реализована настройка всех локальных контуров регулирования параметров процесса от центральной ЭВМ. При этом обеспечена возможность с помощью одной ЭВМ управлять работой нескольких установок; информационная база системы основана на использовании промышленных СУБД; обеспечена информационная связь с другими технологическими участками производства; заложена возможность идентификации управляемых процессов и адаптации параметров используемых моделей.

Непосредственно на одной ростовой установке для выращивания GaAs система управления контролирует и отображает следующие параметры технологического процесса:

- текущее значение температуры основного нагревателя;

- текущее значение напряжения, тока, мощности основного нагревателя и сопротивления нагревателя;
- текущее значение тока, напряжения и мощности фонового нагревателя;
- текущее значение скорости перемещения штока затравки;
- текущее значение скорости перемещения штока тигля;
- текущее значение частоты вращения штока затравки;
- текущее значение частоты вращения штока тигля;
- положение тигля;
- длину слитка;
- текущее значение диаметра слитка;
- среднее значение отклонения диаметра слитка от заданного;
- текущее значение температуры охлаждающей воды на входе и выходе установки и наличие ее на каждом контуре;
- текущее значение давления инертного газа в камере;
- токи нагрузки электродвигателей приводов тигля и затравки;
- длительность проведения процесса с момента подачи напряжения на нагреватель.

**Контроль диаметра слитка.** Качество и выход годной продукции при производстве монокристаллов напрямую зависят от точности регулирования диаметра слитка в процессе его выращивания и, как следствие, от точности контроля этого параметра.

Производители электронной техники предъявляют жесткие требования к допускам на отклонение диаметра цилиндрической части слитка от требуемого: отклонение диаметра цилиндра не должно превышать  $\pm 0.5$  мм. В промышленных условиях метод Чохральского не позволяет получать слитки с вышеуказанным отклонением диаметра из-за нестабильности условий выращивания, вызываемой различными факторами (флуктуациями температурных зон в расплаве, вибрацией установки, прецессией слитка и др.). Кроме того, кристаллографическая ориентация слитка определяет форму слитка в поперечном сечении, которая для ориентации  $\{111\}$  представляет собой неправильный шестиугольник, близкий к эллипсу. Это приводит к тому, что слитки выращиваются с припуском по диаметру, который достигает  $5 \div 7$  мм, а затем производится операция калибровки, заключающаяся в шлифовке слитка до требуемого диаметра. Это

влечет за собой значительные финансовые потери. Кроме потерь материала при калибровке точность регулирования диаметра слитка в процессе его выращивания, которая в свою очередь определяется точностью его контроля, влияет на такие основные химико-физические параметры слитка, как структурное совершенство и распределение примесей по длине слитка [113, 114].

В промышленных условиях для контроля диаметра растущего монокристалла основное применение нашли методы взвешивания кристалла или тигля с расплавом [96-100], контроля уровня расплава [92-106], оптические и телевизионные [88], а также рентгеноскопический [92] методы контроля диаметра слитка.

Указанные выше параметры лишь косвенно влияют на качество выращиваемого слитка. Факторами, прямо влияющими на возникновение структурных дефектов, являются, прежде всего, температурные напряжения в выращенном слитке, несимметричность теплового поля ростовой камеры, изменение формы фронта кристаллизации, происходящее из-за неконтролируемых колебаний температуры расплава. Поэтому с точки зрения технологов крайне желательно контролировать температурное поле в расплаве на всех стадиях выращивания. В частности, для обеспечения требуемого уровня структурного совершенства монокристалла необходим контроль осевых и радиальных температурных градиентов в слитке и в расплаве, особенно в зоне фронта кристаллизации. Существующие методы и системы контроля процесса выращивания не позволяют осуществить эти функции. Необходимо осуществлять косвенные измерения параметров процесса выращивания, таких как температурное поле расплава в зоне фронта кристаллизации, температурное поле слитка, осевые и радиальные температурные градиенты в слитке и интерпретировать эти показатели в контексте задачи прогноза качества выращиваемого монокристалла. Это и есть основная задача мониторинга процесса выращивания. Для решения этой задачи необходимо использовать вычислительные методы и современные интеллектуальные информационные технологии.

## **1.6. Анализ подходов к реализации функций мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов**

Стремление повысить качество выпускаемой продукции приводит к ужесточению требований к точности воспроизведения оптимальных условий выращивания монокристаллов. Это, в свою очередь, требует непрерывного контроля температурного поля в зоне кристаллизации и в слитке.

Мониторинг температурного поля слитка и расплава в процессе выращивания является специфической задачей, при решении которой требуется с одной стороны высокая точность результатов расчета ( $\pm 4^\circ\text{C}$  при абсолютных значениях температур от 500 до 1300 $^\circ\text{C}$ ), а с другой стороны – достаточно высокая скорость расчета для обеспечения вывода результатов мониторинга с максимальным периодом 4...5 мин. С другой стороны, для реализации функциональных задач мониторинга желательно использовать стандартные промышленные компьютеры. Эти противоречивые требования заставляют отказаться от широко применяемого в научных исследованиях метода конечных элементов по следующим причинам.

Мониторинг температурного поля расплава предполагает, что применяемый метод расчета учитывает влияние стохастических пульсаций температуры расплава, вызванных конвективными потоками теплоты. Для этого теоретически существуют два пути:

1) Моделирование в реальном времени вязкого течения расплава с одновременным расчетом температурного поля при помощи совместного решения уравнений Навье–Стокса, уравнения теплопроводности и уравнения неразрывности.

2) Прямое вычисление пульсаций температуры при помощи обученной нейронной сети.

В обоих случаях встает вопрос о формировании граничных условий и учете таких факторов, как непрерывное изменение уровня расплава, мгновенное значение реальной температуры в контрольной точке расплава, соотношение радиусов слитка и тигля, и др.

В первом случае для моделирования приходится решать трехмерную задачу. При моделировании вязких течений несжимаемой жидкости возникает задача дискретизации системы уравнений Навье–Стокса. Обычно для этого используют метод конечных элементов (МКЭ) или метод конечных объемов (МКО). Оба метода используют неструктурированные сетки (триангуляция в случае 2D, разбиение на тетраэдры в случае 3D). Построение сетки, удовлетворяющей ряду условий (отсутствие малых углов, “вырождающихся” треугольников, смежных треугольников со значительно различающимися размерами), в заданной расчетной области представляет собой самостоятельную проблему, которая решается в каждом отдельном случае в зависимости от сложности конфигурации исследуемого объекта и характера задачи (статическая или динамическая). Основным недостатком МКЭ и МКО является то, что для каждого временного шага сетка, на которой строится решение, сохраняет свою узловую связность, что в свою очередь, может привести к её вырожденности в задачах с подвижными границами (а в решаемой задаче границы подвижные). Для преодоления указанной трудности требуется автоматическая перестройка сетки на каждом временном шаге. Поскольку корректное разбиение пространства на треугольные конечные элементы может производиться различными способами, неединственность триангуляции приводит к резкому изменению структуры сетки в соседних точках и к резкому изменению и неоднозначности результатов интерполяции. Кроме того, быстрое перестроение сетки сложной конфигурации и соответствующая коррекция граничных условий представляет собой отдельную нетривиальную вычислительную задачу.

Во втором случае вычислительная задача, решаемая в реальном времени, существенно упрощается. Сеть должна отражать конфигурацию моделируемого слоя расплава, воспринимать граничные условия, быть рекуррентной для воспроизведения динамики пульсаций температуры расплава.

Таким образом, решение задачи возможно с использованием комбинации метода конечных разностей (МКР) и нейронной сети, заранее обученной на примерах, полученных из экспериментальных данных и численных расчетов при помощи МКЭ.

Итак, можно сделать вывод, мониторинг температурных

полей расплава и слитка возможно только косвенными методами, с привлечением специфических математических моделей и методов, позволяющих идентифицировать температурное поле расплава в реальном времени по результатам прямых измерений температуры в отдельных точках теплового узла, скорости вращения затравки и тигля и некоторым другим параметрам. При этом система мониторинга должна решать такие плохо формализуемые функциональные задачи, как распознавание образов, оценка состояния объекта мониторинга, извлечение знаний, интерпретация знаний, самообучение, формирование рекомендаций оператору.

Очевидно, что, используя только одну информационную технологию, например, расчет температурного поля численным методом, систему принятия решений на базе нечеткой логики или искусственные нейронные сети, крайне сложно эффективно решить в одной системе все эти задачи.

Исходя из этого, при разработке системы мониторинга качества процесса выращивания монокристаллов целесообразно синтезировать многокомпонентную структуру (МС), в которой результаты косвенного измерения температуры в подкристалльной области и в слитке, а также их интерпретация формируются комплексом моделей, каждая из которых вносит свой вклад в решение задач мониторинга и поддержки принятия управленческих решений.

Основной концепцией МС является так называемый виртуальный мониторинг температуры в точках, недоступных для прямого измерения (виртуальные датчики). Принцип действия виртуальных датчиков основан на реконструкции параметров физических процессов с учётом данных, получаемых от существующих физических датчиков. С помощью виртуальных датчиков можно получить значения температуры слитка и расплава в отдельных точках. Затем, с помощью выбранных методов аппроксимации, можно построить целостную картину температурного поля.

В МС решение любой задачи и используемые для этого алгоритмы могут формироваться эволюционным путем за счет самообучения отдельных моделей. Это позволяет решать задачи самой высокой сложности, не поддающиеся решению

другими методами или требующие для своего решения слишком больших вычислительных ресурсов. В контексте решаемой в данной работе проблемы повышения качества выращиваемых монокристаллов МС может использоваться как дополнение к существующей системе автоматического управления или в составе специализированной СППР мастера-технолога.

**Система поддержки принятия решений по коррекции хода процесса выращивания.** Современный этап создания специализированных систем поддержки принятия решений (СППР) для диагностики и мониторинга параметров технологических процессов основан на методах, использующих принципы вычислительного интеллекта. Интеллектуальные СППР характеризуются способностью к накоплению опыта и адаптации к изменениям в особенностях решаемой задачи. Они не только позволяют менее квалифицированному персоналу проводить диагностирование с приемлемой надежностью, но и помогают опытным специалистам детально анализировать ситуацию и повышать эффективность принимаемых решений. Всё сказанное в полной мере относится к применению специализированной СППР в автоматизированных системах контроля и управления процессом выращивания монокристаллов по методу Чохральского.

Одна из важных задач, связанная с процессом выращивания монокристаллов и существенно влияющая на эффективность всего процесса производства – это задача принятия оптимального решения при возникновении критических и нестандартных ситуаций. Под нестандартной ситуацией подразумевается ситуация, когда по тем или иным (как правило, неопределенным) причинам происходит срыв нормального протекания процесса (например, прерывание бездислокационного роста, недопустимое отклонение диаметра растущего кристалла от заданного и т.п.), который обнаруживается системами слежения и оператором. В этом случае возникает необходимость в принятии решения о дальнейших действиях, вариантами которых могут быть: коррекция теплового режима, сплавление выращенного монокристалла и прекращение процесса; формирование нижнего конуса, выведение слитка в шлюзовую камеру; продолжение вытягивания слитка, зная, что вытянутая после срыва нормального роста часть пойдёт на пе-



реплавку, а не в готовую продукцию (т. н. “выборка расплава”).

Выбор того или иного варианта действий зависит от следующих факторов:

- степень критичности ситуации;
- какая доля массы расплава была закристаллизована до возникновения нештатной ситуации;
- продолжительности пребывания загрузки в расплавленном состоянии;
- степень летучести легирующей примеси;
- степени критичности состояния сроков выполнения заказа по данной марке материала;
- цены данной марки материала и текущая стоимость используемых ресурсов;
- длительность процесса выращивания до возникновения нештатной ситуации;

Естественно, что такая многофакторность ситуации приводит к тому, что в настоящее время принимаемые решения не всегда совпадают с оптимальными (в смысле максимизации прибыли). Поэтому возникает необходимость в построении системы поддержки принятия оперативных решений по выходу из нештатных ситуаций.

Однако, в большинстве случаев нештатной ситуации предшествует критическая ситуация и её обнаружение помогает предотвратить появление нештатной ситуации. Обнаружение критической ситуации – задача системы мониторинга.

Системы мониторинга и поддержки принятия решений по ситуациям в сложной технологической системе ориентированы на обработку информации, обладающей такими свойствами, как:

- разнородность информации: информация может иметь различный формат: числовые данные, лингвистические описания и т. д.;
- фрагментарность: информация чаще всего относится к какому-либо фрагменту проблемы, причем разные фрагменты могут быть по-разному “покрыты” информацией;
- разноразмерность: информация может относиться ко всей проблеме в целом, к некоторой ее части, к конкретному элементу проблемы;
- различная степень надежности: информация может содержать

конкретные данные различной степени надежности, косвенные данные, результаты выводов на основе надежной информации или косвенные выводы;

- возможная противоречивость: данные из различных источников могут совпадать, слегка различаться или вообще противоречить друг другу.
- изменяемость во времени: проблема/процесс развивается во времени, поэтому и информация в разные моменты времени об одном и том же элементе проблемы может и должна различаться;

Кроме того, поскольку рассматривается система, функционирующая в реальном времени протекания процесса выращивания, то к ней предъявляются следующие требования:

- использование временных зависимостей в базе знаний и учет временного фактора при поиске решения;
- поиск компромисса между точностью получаемого решения и затратами вычислительных ресурсов на его получение;
- получение достоверного результата при возможной неполноте исходных данных;
- выбор наиболее существенных событий, имеющих место в динамике технологического процесса;
- рациональная расстановка приоритетов решаемых задач.

### **1.7 Задача оптимизации условий остывания слитка в ростовой камере**

Как было указано выше, в большинстве практических случаев выращивание монокристаллов арсенида галлия (GaAs) и других полупроводников методом Чохральского сопровождается возникновением внутренних макронапряжений, которые не только определяют формирование дислокационной структуры в процессе роста, но и в значительной мере влияют на механические и физические свойства выращенных кристаллов. Наибольший вклад в возникновение напряжений при росте кристаллов вносят неоднородное поле температурных деформаций, обуславливающее термоупругие напряжения [107–121].

Тепловые узлы существующих в настоящее время ростовых установок по методу Чохральского включают экраны, которые должны обеспечить оптимальный тепловой режим для осты-

вающего слитка в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации и, соответственно, минимизацию неравномерности температурных градиентов. Однако, несмотря на большое количество исследований, в настоящее время не найдено оптимальных конфигураций экрана для различных сочетаний геометрических параметров теплового узла.

Традиционно для решения задачи выбора формы, размеров и расположения экрана используется метод вычислительных экспериментов [121–126]. На основе локальных или глобальных тепловых моделей строится численное решение задачи тепло-массопереноса. При этом исследователь задает конфигурацию и геометрические параметры теплового узла и с помощью какого-либо стандартного программного пакета строит сетку конечных элементов. Далее в программу вводятся граничные условия. Получив решение в числовом и графическом виде, разработчик пытается установить эмпирическую связь между размерами и расположением экранов и температурными полями и градиентами. Чтобы установить такую связь, приходится многократно перестраивать конфигурацию теплового узла, заново вводить геометрические параметры, заново строить сетку конечных элементов. Сложность тепловой конечно-элементной модели, и отсутствие строгой постановки задачи заставляет разработчика действовать на основании опыта и интуиции.

Для автоматизированного расчета оптимальных геометрических параметров теплового узла необходим другой подход, который заключается в установлении закономерностей влияния геометрии теплового экрана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в слитке. Для установления таких закономерностей необходимо сформировать математическую модель, отражающую связь между геометрическими параметрами теплового экрана и параметрами тепловых потоков в тепловом узле, а также разработать модель и метод оптимизации конфигурации теплового экрана, форма и положение которого оказывают критическое влияние на режим охлаждения слитка в процессе выращивания.

Таким образом, повышение требований к структурному совершенству монокристаллов ведёт к необходимости усовершенствования технологического процесса получения последних. При

отсутствии принципиально новых методов получения монокристаллов технологический процесс может быть усовершенствован как за счёт применения модернизированного оборудования, так и за счёт применения новых информационных технологий, обеспечивающих мониторинг, диагностику и корректировку режима выращивания.

В этой ситуации проблема повышения эффективности производства монокристаллических слитков в значительной мере может быть трансформирована в проблему создания и внедрения автоматизированной системы управления качеством процесса выращивания, основной функцией которой является мониторинг и оптимизация данного процесса.

## **РАЗДЕЛ 2**

# **РАЗРАБОТКА КОНЦЕПТУАЛЬНЫХ ОСНОВ ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ**

Назначение ИАС УКПВ – служить организующим началом всего комплекса мероприятий, обеспечивающих производство продукции с заданными свойствами.

Цель функционирования системы – установление и стабилизация оптимального количественного уровня всех факторов, влияющих на качество конечного продукта в процессе выращивания монокристаллов.

### **2.1. Концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов**

Целями создания системы мониторинга являются последовательное снижение до минимального уровня плотности дислокаций в выращиваемых монокристаллах и, соответственно, количества бракованной продукции.

Задачей системы мониторинга является информационная поддержка функционирования подсистемы “Советчик”, которая входит в состав ИАС УКПВ производства монокристаллов.

Объектом мониторинга является процесс выращивания монокристаллов полупроводников. Подсистема мониторинга параметров процесса выращивания монокристаллов предназначена для информационной поддержки функционирования информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников методом Чохральского и реализации функций по своевременному прогнозированию и выявлению критических и предупреждению нештатных ситуаций в процессе выращивания.

Особенностью задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке является недоступность этих зон для прямых многоточечных измерений. Необходимо реконструировать температурное поле расчетным путем с применением численных методов и нейросетевых технологий. Данные прямых измерений

параметров процесса выращивания поступают в систему мониторинга из АСУ ТП ростовой установки. После первичной обработки и агрегирования эти данные используются для вычисления параметров температурного поля расплава и слитка. Эти параметры являются основным объектом мониторинга, так как непосредственно влияют на качество монокристалла. Подсистема мониторинга позволяет отображать температурное поле на мониторе мастера-технолога в табличном или графическом виде.

Система мониторинга должна обеспечивать выполнение следующих функций:

- косвенное измерение температуры фонового нагревателя;
- учет текущего уровня расплава в тигле;
- воссоздание температурного поля (абсолютных значений в °С и градиентов температуры по радиусу и по вертикальной оси) в подкристалльной области и в слитке и вывод результатов измерений и вычислений на монитор в табличном виде;
- информационная поддержка функционирования подсистемы “Советчика” в целях коррекции хода процесса выращивания и устранения критических ситуаций;
- периодическое уточнение параметров моделей и алгоритмов прогнозирования;
- ведение базы данных мониторинга и ее синхронизация с базой данных АСУ ТП.

При разработке подсистемы мониторинга сложного технологического процесса, каким является процесс выращивания монокристаллов, необходимо руководствоваться следующими основными принципами:

1. Организационное, информационное и функциональное единство системы мониторинга, основу которого составляют:

- единая система классификации производственных ситуаций, показателей и критериев оценки состояния процесса выращивания монокристаллов;
- базовые (типовые) протоколы, алгоритмы (программы) сбора, обработки и обмена информацией, подготовки и автоматизированной поддержки принятия и реализации управленческих решений на основе данных мониторинга;
- обеспечение целостности и непротиворечивости инфор-

мации в системе.

3. Применение методов и моделей вычислительного интеллекта для получения данных косвенных измерений, для анализа, прогнозирования и моделирования процессов в объекте мониторинга.

4. Унификация программных, информационных и технических средств, обеспечение совместимости элементов системы мониторинга, возможности ее модульного наращивания и модернизации;

5. Система должна быть реализована в виде совокупности совместно функционирующих модулей (компонентов), взаимодействие между которыми должно осуществляться через единую информационную среду.

6. Система должна быть разработана как совокупность независимых, но логически взаимосвязанных программных модулей и элементов для обеспечения возможности структурного и функционального развития системы.

## **2.2. Разработка модели структуры информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания**

В общем виде модель структуры ИАС УКПВ можно представить кортежем:

$$M_{ис} = \langle F, OK_{ис} \rangle,$$

где  $F$  – комплексы функциональных задач,  $OK_{ис}$  – обеспечивающие комплексы.

Применительно к рассматриваемой проблеме создания ИАС УКПВ детализируем содержание отдельных комплексов. Тогда модель структуры будет иметь следующий вид:

$$M_{ис} = \langle F(SM, SAD, SO), IK, MK(MQ, MM), AK, PK, TK, OpK \rangle, \quad (2.1)$$

где  $F$  – функциональные задачи подсистем  $SM$ ,  $SAD$  и  $SO$ ;

$SM$  – функциональная подсистема комплекса задач мониторинга температурных параметров процесса выращивания в реальном времени, включая виртуальный мониторинг температурного поля;

$SAD$  – функциональная подсистема комплекса задач поддержки принятия оперативных решений по изменению режима процесса выращивания – данная подсистема обеспечивает также связь

ИАС УКПВ с подсистемой ТЭП основной ИУС предприятия и с системой АСУ ТП выращивания монокристаллов;

*SO* – функциональная подсистема комплекса задач оптимизации геометрических параметров теплового экрана;

*ИК* – информационный комплекс – базы данных значимых технологических параметров и база знаний о ситуациях, возникающих при корректировке параметров и хода процесса выращивания;

*МК* – комплекс моделей (представлен наборами *MQ* и *MM*);

*MQ* – модель качества продукта в виде совокупности показателей, характеризующих физические свойства монокристаллов; *MM* – многокомпонентная модель – комплекс математических моделей, описывающих физические процессы выращивания. Данные модели необходимы для решения задачи мониторинга процесса выращивания;

*АК* – комплекс алгоритмов решения задач мониторинга и коррекции процесса выращивания в соответствии с локальными критериями качества разных сторон технологического процесса и глобальным критерием качества, а также прогноза качества монокристалла;

*ПК* – комплекс инструментальных программных средств, реализующих функциональные задачи ИАС УКПВ;

*ТК* – комплекс инструментальных средств измерения и контроля информативно-значимых параметров процесса выращивания;

*ОРК* – организационный комплекс ИАС УКПВ, то есть организационные принципы и документы регламентирующие контроль технологического процесса и уровня качества продукции.

Структурная схема ИАС УКПВ показана на рис. 2.1.

*Краткая характеристика комплексов функциональных задач АСУ КПВ.* Комплексы функциональных задач АСУ КПВ определяются для каждой подсистемы.

1. *Комплекс задач подсистемы мониторинга* температурных параметров процесса выращивания предназначен для обеспечения наблюдаемости температурных параметров процесса путем косвенного многоточечного измерения температуры в слитке и в подкристалльной области и выдачи результатов измерения на монитор мастера-технолога в табличном и графическом виде. В комплекс входят следующие задачи:



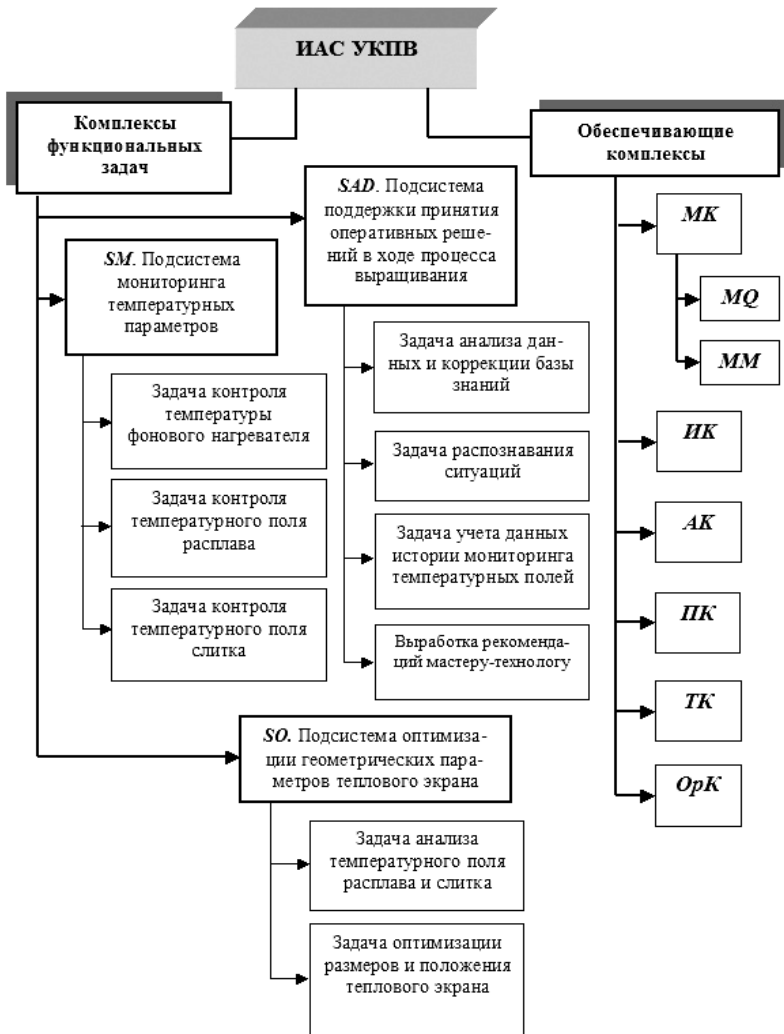


Рис. 2.1 – Структурная схема ИАС УКПВ

- контроль температуры фонового нагревателя;
- контроль процесса кристаллизации;
- контроль температурного поля расплава и слитка.

Комплекс задач решается непосредственно на ростовой ус-

тановке. Продолжительность решения задач обусловлена продолжительностью процесса выращивания и составляет от 4 до 10 часов. Периодичность решения задач определяется периодичностью запуска процессов выращивания на данной установке. Автоматизированное решение задач может быть прекращено по желанию мастера при обнаружении нештатной ситуации.

В процессе решения данного комплекса задач подсистема мониторинга связана информационными потоками с комплексом задач подсистемы поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания (*SAD*).

Информация о температурных полях и температурных градиентах в слитке и в подкристалльной области обрабатывается в *SAD*, которая генерирует в случае необходимости сообщения и рекомендации для мастера-технолога.

Входной информационный поток комплекса задач содержит:

1. Исходные данные для тепловых расчетов, в том числе заданный диаметр слитка, масса загрузки, диаметр тигля, скорости вращения затравки и тигля, значения теплотехнических характеристик материалов и т.п.

2. Первичные данные, полученные от физических датчиков, в том числе температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем, температура расплава под слоем герметизатора, текущая масса слитка, скорость вертикального перемещения затравки и штока тигля и др.

Выходной информационный поток комплекса задач содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной области и в слитке.

2. *Комплекс задач подсистемы поддержки принятия оперативных решений (SAD)* в ходе процесса выращивания предназначен для обеспечения мастера-технолога советами и рекомендациями по ведению процесса выращивания на разных стадиях. В комплекс входят следующие задачи:

- анализ данных мониторинга и истории процесса и коррекция базы знаний;
- учет данных истории мониторинга температурных полей;
- получение краткосрочного прогноза значения диаметра

слитка;

- выработка сообщений и рекомендаций мастеру-технологу.

Комплекс задач решается непосредственно на рабочем месте мастера-технолога. Периодичность и продолжительность решения задач и условия, при которых прекращается решение комплекса задач полностью совпадают с условиями, сформулированными для комплекса задач №1.

В процессе решения второго комплекса задач подсистема поддержки принятия оперативных решений является получателем данных о выходном информационном потоке подсистемы мониторинга температурных полей. Информация о температурных полях и температурных градиентах в слитке и в подкристальной области обрабатывается в *SAD*, которая генерирует в случае необходимости сообщения и советы для мастера-технолога. Кроме того, подсистема *SAD* получает необходимые данные от подсистем АСУ ТП процесса выращивания, в частности, значения уставок и текущие значения скорости вытягивания затравки, температуры основного нагревателя и т.п..

Входной информационный поток комплекса задач содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристальной области и в слитке, значения скоростей вращения тигля и затравки.

Выходной информационный поток *SAD* содержит сообщения и рекомендации для мастера-технолога.

3. *Комплекс задач подсистемы оптимизации* геометрических параметров теплового экрана (*SO*) предназначен для определения диаметра, высоты и расположения теплового экрана относительно слитка в ходе технологической подготовки производства монокристаллов и, тем самым, оптимизации тепловых условий в зоне остывания слитка. В комплекс входят:

- анализ температурного поля расплава и слитка;
- оптимизация размеров и положения теплового экрана.

Комплекс задач решается в отделе технологической подготовки производства на рабочей станции инженера-технолога. Периодичность решения задач определяется производственным планом по выпуску монокристаллов различного диаметра. Продолжительность решения задач в зависимости от мощности ра-

бочей станции составляет 1...5 мин. Решение комплекса задач возможно только автоматизированным способом.

Связь данного комплекса задач с другими комплексами косвенная, решение данного комплекса задач не зависит от результатов решения задач описанных выше комплексов, но оно непосредственно влияет на качество выпускаемой продукции.

Входной информационный поток комплекса задач формируется из значений геометрических параметров теплового узла и слитка, значений теплофизических параметров материалов, табличных значений распределения температуры на стенках тигля, заданных констант – значений целевой функции минимизации среднеквадратичных значений температурных градиентов вдоль оси слитка.

Выходной информационный поток комплекса задач содержит рассчитанные значения размеров теплового экрана и координаты его положения относительно слитка и расплава.

ИАС УКПВ имеет информационное, математическое, программное, техническое и организационное обеспечение.

В информационное обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплект нормативных документов, регламентирующих параметры качества монокристаллов.
2. База данных об информативно-значимых технологических параметрах, достаточно полно отражающих существо процессов технологии в их связи с уровнем качества получаемой продукции.
3. База знаний, позволяющая осуществлять поддержку принятия оперативных решений по корректировке параметров и хода процесса выращивания.

В математическое обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплекс моделей – источников данных о текущем состоянии процесса выращивания.
2. Комплекс методов и моделей оптимизации геометрических параметров экрана теплового узла.
3. Комплекс моделей и процедур преобразования первичных параметров процесса выращивания в признаки распознаваемых ситуаций.
4. Модели и алгоритмы распознавания ситуаций и выработки рекомендаций мастеру-технологу.

Программное обеспечение ИАС УКПВ представляет собой

комплекс программных средств, реализующий решение задач, перечисленных выше, в том числе мониторинг процесса выращивания; поддержка принятия оперативных решений в ходе процесса и оптимизация геометрических параметров теплового экрана.

В техническое обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплекс инструментальных средств измерения и контроля информативно-значимых параметров процесса выращивания и показателей качества монокристалла.

2. Технические средства автоматизированного управления процессом выращивания для получения продукции заданного качества.

Организационное обеспечение ИАС УКПВ представляет собой организационные принципы осуществления производственного контроля процессов технологии и оценки уровня качества продукции.

Для эффективного решения задачи мониторинга температурных полей в слитке и расплаве разработан комплекс моделей – источников данных. Модели объединены в многокомпонентную структуру, которая представлена в п.2.3.

### **2.3. Обобщенная структура взаимосвязей в комплексе моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов**

Для решения задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке требуется разработать комплекс моделей – источников данных, которые осуществляют преобразование первичных параметров, полученных из АСУ ТП, в параметры температурных полей. Для описания связей моделей в таком комплексе разработана многосвязная модельная структура, способная отражать взаимосвязь физических явлений и внешних воздействий. Этот подход позволяет дополнять и уточнять модельное описание контролируемого процесса без качественного изменения структуры комплекса, применять различные математические и феноменологические модели для описания различных явлений, использовать различные уровни детализации для исследования внутренних процессов и свойств с гарантированным сохранением общей целостности. Такая декомпозиция позволяет сделать

структуру гибкой и прозрачной.

Структурная матрица взаимосвязи исходных данных, моделей и вторичных параметров показана в табл. 2.1. Зарегистрированные системой мониторинга входные сигналы  $X_i$ ,  $i = \overline{1, m}$  – суть данные, характеризующие конкретную ситуацию на объекте управления. Система мониторинга должна не только непрерывно отслеживать изменения текущей ситуации, но и достоверно, с расчетом на опережение, предсказывать дальнейший ход и результат контролируемого процесса.

Выходы системы  $F_j$ ,  $j = \overline{1, n}$  – конечное множество вторичных данных, полученных при текущих значениях входных сигналов  $X_i$ . Связи между данными  $X_i$  и выходами  $F_j$  осуществляют преобразующие модели  $M_i$ . Необходимое конкретное содержание выхода  $F_j$  обеспечивается не только конечным числом  $s_j$  (количеством активных элементов в столбце  $j$ ), но и подмножествами выходных сигналов моделей  $Y_{ij}$ , участвующих в формировании выхода  $F_j$ .

Модель  $M_i$ , описывающую связь вектора входных параметров  $X_i$  и выходной величины  $F_j$ , представим отображением:

$$M_i: X_i \rightarrow F_j. \quad (2.2)$$

В общем случае каждая модель  $M_i$  может быть представлена матрицей показанной в табл. 2.2. Здесь  $x_j^i$  – элемент вектора  $X_i$ ;  $Y_k^i$  –  $k$ -е подмножество выходов модели  $M_i$ ;  $I_{lk}$  – информационное (смысловое) содержание, отражающее связь параметра  $x_j^i$  – с композицией выходов  $Y_k$  модели  $M_i$ .

В каждом столбце матрицы имеется  $g_k$  активных элементов ( $g_k \leq r$ ). Отдельные модели также связаны между собой, так же, как связаны физические процессы, которые они воспроизводят.

Таким образом, в контексте проблемы улучшения наблюдаемости процесса выращивания монокристаллов многокомпонентная модельная структура используется как концептуальная основа подсистемы мониторинга процесса выращивания.

Система мониторинга температурных полей является поставщиком данных для специализированной подсистемы “Советчик”, которая решает задачи распознавания ситуаций и выдачи сообщений и рекомендаций в ходе процесса выращивания.

Таблица 2.1 – Структурная матрица взаимосвязи исходных данных, моделей и вторичных параметров.

Данные	Модели	Выходы					
		$F_1$	$F_2$	---	$F_j$	---	$F_n$
$X_1$	$M_1$	$Y_{11}$	$Y_{12}$	---	$Y_{1j}$	---	$Y_{1n}$
$X_2$	$M_2$	$Y_{21}$	$Y_{22}$	---	$Y_{2j}$	---	$Y_{2n}$
---	---	---	---	---	---	---	---
$X_i$	$M_i$	$Y_{i1}$	$Y_{i2}$	---	$Y_{ij}$	---	$Y_{in}$
---	---	---	---	---	---	---	---
$X_m$	$M_m$	$Y_{m1}$	$Y_{m2}$	---	$Y_{mj}$	---	$Y_{mn}$

Формальную модель предложенной многокомпонентной структуры можно представить в виде:

$$MS = \langle K, E, R, F \rangle, \quad (2.3)$$

где  $K$  – множество компонентов;  $E$  – множество факторов внешней среды, в которой функционирует комплекс моделей;  $R$  – множество отношений между компонентами;  $F$  – множество задач, решаемых при помощи комплекса моделей.

Таблица 2.2 – Структурная матрица модели  $M_i$ .

Данные	Выходы модели $M_i$					
	$Y_1^i$	$Y_2^i$	---	$Y_k^i$	---	$Y_p^i$
$x_1^i$	$I_{11}$	$I_{12}$	---	$I_{1k}$	---	$I_{1p}$
$x_2^i$	$I_{21}$	$I_{22}$	---	$I_{2k}$	---	$I_{2p}$
---	---	---	---	---	---	---
$x_l^i$	$I_{l1}$	$I_{l2}$	---	$I_{lk}$	---	$I_{lp}$
---	---	---	---	---	---	---
$x_r^i$	$I_{r1}$	$I_{r2}$	---	$I_{rk}$	---	$I_{rp}$

#### 2.4. Разработка модели подсистемы поддержки принятия оперативных решений

Подсистема поддержки принятия оперативных решений (ППОР) “Советчик” реализует комплекс задач поддержки при-

нятия оперативных решений в ходе процесса выращивания для обеспечения мастера-технолога рекомендациями по ведению процесса выращивания на разных стадиях. В комплекс задач входят следующие:

- обработка информации о температурных полях в расплаве и слитке и распознавание текущей ситуации с точки зрения её критичности;
- получение краткосрочного прогноза значения диаметра слитка;
- формирование истории мониторинга температурных полей;
- выработка сообщений и рекомендаций мастеру-технологу;
- дообучение системы на примерах, уточнение правил для выработки сообщений и рекомендаций.

В процессе реализации данного комплекса задач подсистема ППОР является получателем выходного информационного потока от подсистемы мониторинга температурных полей, от АСУ ТП процесса выращивания и от подсистемы ТЭП АСУ предприятия. Входной информационный поток комплекса задач содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной области и в слитке, значения скоростей вращения тигля и затравки, а также необходимые для принятия решений значения технико-экономических параметров производства. Выходной информационный поток представляет собой набор сообщений и рекомендаций для мастера-технолога по выходу из критических и нештатных ситуаций. Принципы функционирования подсистемы ППОР должны обеспечивать:

- сопряжение подсистемы с АСУ ТП;
- рациональный выбор моделей представления и обработки знаний о процессе выращивания с учетом как физических, так и технико-экономических параметров и их взаимосвязей;
- возможность пополнения базы знаний, обучения и дообучения системы;
- универсальность подсистемы ППОР в рамках рассматриваемых технологических процессов.

Требуется разработать структуру подсистемы и её модель, а также концепцию распознавания ситуаций в ходе процесса выращивания. Прежде всего сформулируем задачу принятия ре-



шений с учётом специфики предметной области.

Задачу принятия решений по коррекции хода процесса выращивания необходимо рассматривать как задачу коррекции бизнес-процесса. Это связано с тем, что при выращивании монокристалла могут возникать критические и нештатные ситуации, при анализе и устранении которых приходится учитывать технико-экономические показатели, такие, как время, прошедшее с начала процесса, энергетические затраты, средний коэффициент выхода в готовую продукцию, средний коэффициент безвозвратных потерь материала, средняя цена готовой продукции и др. Эти параметры должны учитываться при поиске решений по коррекции хода производственного процесса.

Вербально задача формулируется следующим образом: задается некоторое подмножество начальных состояний, подмножество конечных состояний и множество правил преобразования состояний. Требуется найти такую последовательность правил, которая позволяет управляемому объекту перейти из текущего состояния в желаемое или допустимое. Если искомая последовательность должна удовлетворять требованиям оптимальности, то имеем задачу поиска оптимального решения, если требованиям допустимости – то задачу поиска удовлетворительного решения [2].

Задача принятия решений определяется моделью

$$Z = \langle DM, S, S_d, S_0, S_k, P, Q \rangle, \quad (2.4)$$

где  $DM$  – модель проблемной ситуации в предметной области;  $S$  – множество текущих состояний (ситуаций);  $S_d \in S$  – подмножество возможных (допустимых) состояний;  $S_0 \in S$  – подмножество начальных состояний;  $S_k \in S$  – подмножество конечных, или целевых состояний;  $P: S \rightarrow S$  – конечное множество правил преобразований. Каждое правило  $P_i \in P$  является функцией, реализующей отображение  $P_i: S_i \rightarrow S$ , где  $S_i$  – область определения  $P_i$ ;  $Q$  – множество критериев качества решения.

Структура подсистемы ППОР показана на рис. 2.2.

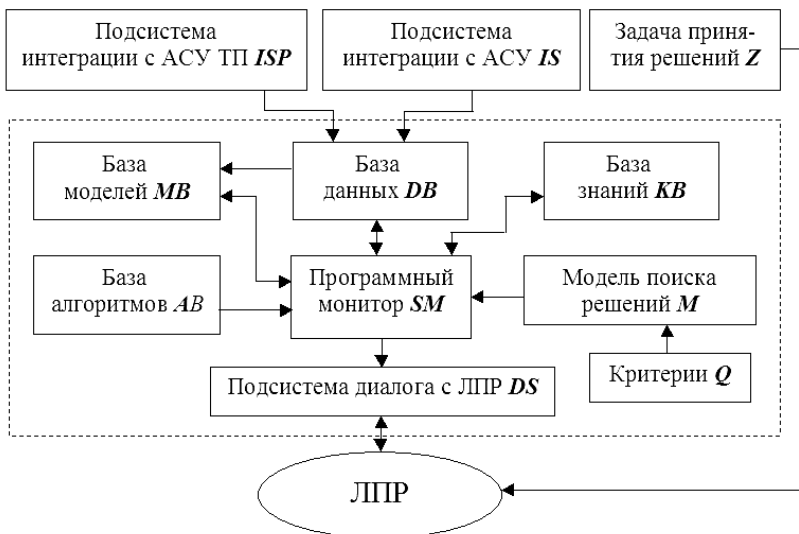


Рис. 2.2 – Структура подсистемы поддержки принятия оперативных решений

Подсистема содержит все необходимые функциональные узлы, включая базу данных, базу знаний, базу моделей, базу алгоритмов, модель поиска решений и программный монитор, реализующий информационную технологию поддержки принятия оперативных решений. Отличительной чертой функциональной структуры является назначение и состав базы математических моделей, которые позволяют воспроизводить физические процессы в тепловом узле, осуществлять мониторинг процесса выращивания и, в конечном счете, реализовать информационную технологию управления качеством процесса выращивания.

Формально структуру системы поддержки принятия решений  $SAD$  представим в виде модели:

$$SAD = \langle MS(DM), KB, MB, DB, SM, AB, ISP, IS, DS \rangle, \quad (2.5)$$

где  $MS$  – модель поиска решений;  $DM$  – модель проблемной ситуации в предметной области;  $KB$  – база знаний;  $MB$  – база моделей;  $DB$  – база данных;  $SM$  – программный монитор;  $AB$  – база алгоритмов;  $ISP$  – подсистема интеграции с АСУ ТП;  $IS$  – подсистема интеграции с подсистемой ТЭП АСУ предприятия;  $DS$  –

подсистема диалога с ЛПР.

Основополагающими элементами интеллектуальных СППР являются модели представления проблемных ситуаций, модели поиска решений, а также средства организации диалогового взаимодействия с пользователем (экспертом, ЛПР) и средства связи с другими информационными системами. Проблемная ситуация может описываться посредством некоторого выделенного множества признаков или посредством некоторой структуры, позволяющей отражать различные связи (отношения) между элементами проблемной области. В качестве таких структур можно использовать любые известные модели знаний. Чаще всего используются системы продукций, семантические сети или фреймы.

Модель поиска решений определяет допустимые преобразования ситуаций и набор стратегий применения этих преобразований. Для применения ПСППОР в режиме “советчика”, модели представления проблемной ситуации и поиска решения должны периодически корректироваться по результатам предыдущих процессов выращивания монокристаллов.

Модель поиска решений, предназначенную для решения задачи коррекции хода процесса выращивания, формально определим набором

$$MS = \langle DM, P_n, ST_n, P_{ген}, ST_{ген}, F_{ST}, F_p, F_s, F_m \rangle, \quad (2.6)$$

где  $DM$  – дескриптивная модель, описывающая проблемную ситуацию на языке высказываний нечеткой логики;  $P_{ген}$ ,  $ST_{ген}$  – множества, используемые для генерации (пополнения) множеств  $P_n$  и  $ST_n$ ;  $F_{ST}$  – правила выбора стратегий поиска  $ST_n$  и  $ST_{ген}$ ;  $F_p$ , и  $F_s$  – правила пополнения множеств  $P_n$  и  $ST_n$  в процессе поиска решения,  $F_m$  – правила модификации модели (расширения алфавита, модификации множеств  $P_{ген}$  и  $ST_{ген}$ , правил выбора и пополнения и т.д.). Множества  $P_{ген}$ , и  $ST_{ген}$  могут быть заданы неявно, например, посредством некоторой системы ограничений.

Модель базы знаний  $KB$  имеет следующий вид:

$$KB = \langle WNM, RT \rangle, \quad (2.7)$$

где  $WNM$  – весовые коэффициенты нейронных сетей системы мониторинга, сохраняемые расчета температур на разных стадиях процесса выращивания;  $RT$  – таблица правил для интерпретации данных системы мониторинга и определения риска нарушения оптимальных условий выращивания с точки зрения выбранных

критериев.

База моделей *MB* содержит:

- набор моделей для решения функциональных задач мониторинга и анализа температурных полей расплава и слитка, определения температуры фонового нагревателя и моделирования процесса кристаллизации, краткосрочного прогноза значения диаметра слитка. Эти модели необходимы для извлечения первичных данных, необходимых для принятия решения;
- набор моделей взаимосвязи первичных данных (исходного набора признаков) и критериев оценки ситуации. В качестве критерия выступает мера близости нечеткой оценки текущей ситуации и нечеткого описания шаблонной критической (нештатной) ситуации;
- База данных *DB* содержит данные следующих классов:
  - исходные данные для тепловых расчетов, в том числе заданный диаметр слитка, масса загрузки, диаметр тигля, скорости вращения затравки и тигля, значения теплотехнических характеристик материалов и т.п.;
  - первичные данные, полученные от физических датчиков, в том числе температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем, температура расплава под слоем герметизатора, текущая масса слитка, скорость вертикального перемещения затравки и штока тигля, значения скоростей вращения тигля и затравки др.;
  - массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка;
  - массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной области и в слитке;
  - данные мониторинга температурных полей в течение процесса;
  - данные в виде формулировок рекомендаций для мастера-технолога, выданных в течение процесса.

Системный монитор *SM* – основной программный модуль подсистемы ППОР, осуществляющий диспетчеризацию процесса анализа ситуации и генерации рекомендаций, запуск и остановку всех функциональных модулей подсистемы.

База алгоритмов представлена набором:

$$AB = \langle AK, АГП, АО, АД, АГВП, АФИ, АВС \rangle, \quad (2.8)$$

где  $AK$  – алгоритмы кластеризации пространства признаков ситуаций;  $АГП$  – алгоритмы генерации примеров;  $AO$  – алгоритмы обучения нейронных сетей на примерах;  $AD$  – алгоритмы диагностики состояния процесса выращивания;  $АГВП$  – алгоритмы модификации правил для выработки сообщений и рекомендаций;  $АФИ$  – алгоритмы формирования истории мониторинга температурных полей и истории генерации рекомендаций;  $ABP$  – алгоритмы выработки рекомендаций мастеру-технологу. Эти алгоритмы реализованы в программном обеспечении подсистемы ППОР в виде функциональных модулей, работающих под управлением программы-монитора.

Подсистема интеграции с АСУ ТП –  $ISP$  описывается моделью:

$$ISP = \langle XM, XS \rangle, \quad (2.9)$$

где  $XM$  – множество входов подсистемы, отображающих данные мониторинга температурных полей в процессе выращивания;  $XS$  – множество входов подсистемы, отображающих данные, получаемые от существующей АСУ ТП.

Множество  $XM$  определяется набором:

$$XM = \{T_L, T_S, FF, GR, GZ\}, \quad (2.10)$$

где  $T_L$  – массив распределения температур в расплаве;  $T_S$  – массив распределения температур в кристалле;  $FF$  – направление прогиба фронта кристаллизации;  $GR$  – массив температурных градиентов по радиусу слитка;  $GZ$  – массив температурных градиентов по оси слитка;

Множество  $XS$  определяется вектором:

$$XS = \{T_{OH}, T_{ФН}, V_{Ш}, m_C, L_M, DD_C, L_C\}, \quad (2.11)$$

где  $T_{OH}$  – температура основного нагревателя;  $T_{ФН}$  – температура фонового нагревателя;  $V_{Ш}$  – скорость перемещения штока тигля;  $m_C$  – текущая масса слитка;  $L_M$  – уровень расплава в тигле, %;  $DD_C$  – текущее отклонение диаметра слитка;  $L_C$  – текущая длина слитка, %.

Подсистема интеграции с подсистемой ТЭП АСУ предприятия –  $IS$  описывается набором

$$IS = \langle XE, MR \rangle, \quad (2.12)$$

где  $XE$  – множество входов подсистемы, отображающих технико-экономические показатели процесса выращивания;  $MR$  – множество запросов СППР, на получение текущих значений

экономических показателей.

Подсистему диалога с ЛПП –  $DS$  – можно представить набором:

$$DS = \langle L(RD, SR(D_S, D_P)), MS, A, P_A \rangle, \quad (2.13)$$

где  $L$  – язык диалога;  $RD$  – правила формирования сообщений;  $SR$  – множество стандартных сообщений;  $D_S$  – множество заключений, определяющих текущее состояние процесса выращивания;  $D_P$  – множество рекомендаций по коррекции температурного режима выращивания;  $MS$  – стандартное сообщение, имеющее вид:

$$MS = \langle TM, T, R, PM, ) \rangle, \quad (2.14)$$

где  $TM$  – время сообщения, соотношенное с временем процесса выращивания;  $T$  – ключевая тема сообщения;  $R$  – ссылка на предыдущее сообщение  $PM$ ;  $A$  – ответ пользователя;  $P_A$  – процедура выдачи советов.

Таким образом, формализовано описание задачи принятия решений и структуры подсистемы поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания.

## **2.5. Разработка модели структуры подсистемы оптимизации геометрических параметров теплового экрана**

В выращенных монокристаллах GaAs наблюдается образование и размножение дислокаций различного типа. Иногда они группируются в скопления, сильно ухудшающие структуру слитков. Для многих областей применения монокристаллов наличие дислокаций, особенно их скоплений, нежелательно. Исследованиями установлена прямая связь между величинами температурных градиентов, температурными напряжениями и количеством дислокаций. Термические напряжения можно уменьшить подбором параметров теплового узла и условий выращивания, обеспечивающими уменьшение градиентов температуры в слитке в процессе выращивания и охлаждения. Исследования показывают, что особенности экранировки существенно влияют на качество получаемого монокристалла. Именно поэтому важно на стадии технической подготовки производства (ТПП) монокристаллов с заданными геометрическими и электрофизическими параметрами оп-

тимизировать размеры и положение теплового экрана, окружающего остывающий слиток в процессе выращивания.

Модель подсистемы оптимизации геометрических параметров теплового экрана запишем в виде:

$$SO = \langle IT_{OTЭ}(T_{ATП}(M_{PT}, M_{PG}, P_{Э}, A_{PT}), TO(M_O, A_O)) \rangle > \quad (2.15)$$

где  $IT_{OTЭ}$  – информационная технология оптимизации параметров теплового экрана;  $T_{ATП}$  – задача анализа тепловых полей;  $M_{PT}$  – модель расчета температурного поля;  $M_{PG}$  – модель расчета граничных условий;  $P_{Э}$  – множество параметров теплового экрана и теплового узла;  $A_{PT}$  – алгоритм расчета температурного поля;  $TO$  – задача оптимизации параметров теплового экрана;  $MO$  – модель задачи оптимизации;  $AO$  – алгоритм оптимизации.

Решение задачи разработки методов, моделей и информационной технологии оптимизации тепловых условий при остывании слитка приведено в разделе 4.

## **2.6. Метод построения информационной технологии диагностики состояния сложного технологического процесса**

Как было указано в разделе 1, в настоящее время отсутствует единый системный подход в разработке систем мониторинга и диагностики сложных ТП. Это можно объяснить следующими причинами:

- принципиальная невозможность единого формального описания всех возможных видов технического состояния, явлений и процессов из-за применения разнообразного математического аппарата для различных целей анализа;
- наличие большого количества форм представления данных и, соответственно, типов моделей представления знаний об объекте мониторинга, обусловленное существованием специализированных подходов;
- отсутствие теоретического и экспериментального обоснования структуры и состава информационных технологий, способных обеспечить эффективное решение задач мониторинга СТС.

Исходя из вышеизложенного проблема создания на концептуальном уровне метода разработки информационных технологий мониторинга, диагностики и поддержки принятия опе-

ративных решений по коррекции сложных ТП является актуальной.

Прикладная информационная технология всегда отражает информационную систему, которая имеет свою организационную и функциональную структуру, математические, технические и информационные средства, поэтому необходимо определять состав ИТ, исходя из комплекса функциональных задач ИУС.

Согласно стандартному определению информационная технология есть совокупность методов, приёмов и программно-технологических средств, объединенных в технологическую цепочку для обеспечения сбора, хранения, обработки и вывода информации [127]. Любая технология подразумевает также наличие моделей и алгоритмов. Алгоритмы реализуются как информационные процессы, многообразие которых определяется как спецификой предметных областей, так и соответствующими методами и моделями.

Поставим задачу построения ИТ как задачу создания комплекса взаимосвязанных информационных процессов, использующих определенные методы и модели и направленных на решение задачи диагностики сложного ТП. Согласно определению, метод – это обобщённый способ решения задач определённого класса. Для решения указанной задачи необходим метод, позволяющий синтезировать рациональный состав информационных технологий подобного назначения.

*Метод построения ИТ диагностики сложного ТП. Этапы метода заключаются в следующем.*

Этап 1. Формирование состава ИТ (построение модели ИТ).

Разрабатывая информационную технологию необходимо определить её статическую часть – структуру данных (*DS*) и комплекс математических методов и моделей (*СММ*), а также описать динамическую составляющую информационной технологии – информационные процессы (*IP*) и их взаимодействие между собой (*IPI*). Исходя из этого информационная технология должна представляться набором:

$$IT = \langle DS, CMM, IP, IPI \rangle. \quad (2.16)$$

Каждый информационный процесс представляется блоком, имеющим информационные входы, управляющие входы, выходы и используемые ресурсы (рис. 2.3). В качестве ресурсов высту-



пают методы, модели и данные/знания, привлекаемые по мере необходимости для реализации процесса.

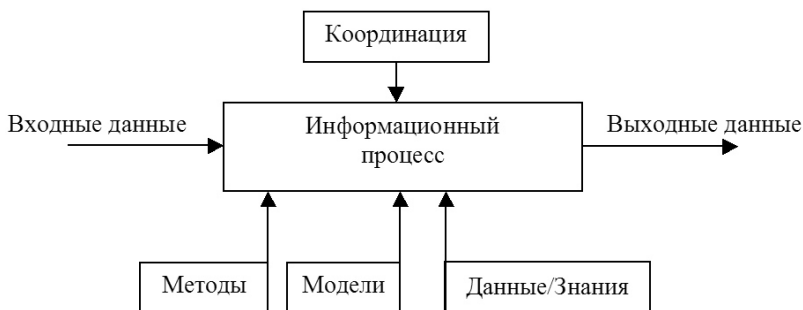


Рис. 2.3 – Информационный процесс

Этап 2. Формирование структуры системы диагностики (СППР).

Формальное описание структуры системы поддержки принятия решений представлено выражением (2.5)

Этап 3. Формирование состава базы данных и базы знаний.

Структура данных  $DS$  определяет информационный комплекс – базу данных значимых технологических параметров и базу знаний по распознаванию ситуаций, возникающих в ходе технологического процесса.

База данных должна содержать данные следующих классов:

- исходные данные по физическим параметрам объекта мониторинга;
- первичные данные, полученные от физических датчиков в ходе технологического процесса;
- вторичные данные – результаты косвенных измерений;
- значения признаков ситуаций;
- массивы параметров функций принадлежности и другие параметры систем нечеткого логического вывода.

База знаний содержит:

- решающие правила распознавания ситуаций;
- массивы параметров нейронных сетей, если таковые используются для распознавания ситуаций или моделирования про-

цессов;

- формулировки рекомендаций по коррекции ТП в случае возникновения такой необходимости;
- метаправила коррекции содержимого базы знаний.

Этап 4. Формирование состава комплекса математических методов и моделей.

Комплекс математических методов и моделей *СММ* должен содержать:

- модель проблемной ситуации в предметной области (*МПС*);
- модель структуры СППР.
- модель качества конечного продукта в виде совокупности показателей, характеризующих физические свойства конечного продукта (*МQ*);
- набор математических методов и моделей для расчета значений параметров процесса, которые невозможно измерить прямыми методами (*МММ*);
- набор методов и моделей для решения задач мониторинга технологического процесса, включая распознавание ситуации (*ММ*);
- модели поиска решений для коррекции хода технологического процесса (*МSS*);
- модели преобразования первичных данных в значения признаков ситуации (*МTPD*);

Этап 5. Формирование структуры комплекса информационных процессов.

Комплекс информационных процессов представим набором:  $IP = \langle IPC, IPDPP, IPM, IPDC, IPDS, IPDR, IPRM, IPFH \rangle$ , (2.17) где *IPC* – информационный процесс координации; *IPDPP* – информационные процессы предварительной обработки данных; *IPM* – информационные процессы косвенных измерений параметров технологического процесса; *IPDC* – информационные процессы преобразования данных в признаки ситуаций; *IPDS* – информационные процессы диагностики ситуаций; *IPDR* – информационные процессы выработки рекомендаций оператору; *IPRM* – информационные процессы модификации правил распознавания; *IPFH* – информационные процессы формирования истории мониторинга.

Этап 6. Разработка схемы информационной технологии.

Как было указано выше, каждый процесс обработки информации использует определенный метод, одну или несколько моделей, один или несколько алгоритмов. Не рассматривая модельный и алгоритмический уровень процессов (этот уровень полностью зависит от конкретной задачи), рассмотрим взаимодействие процессов как иерархическую структуру, в которой центральным управляющим звеном является процесс координации *IPC* (рис. 2.4).

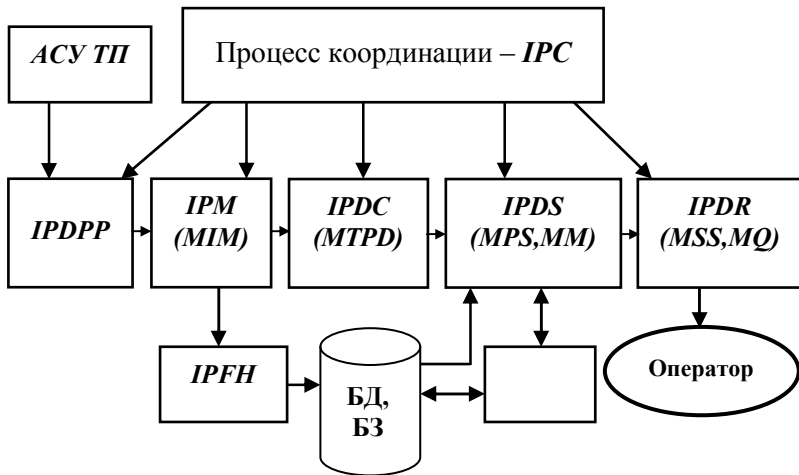


Рис. 2.4 – Общая схема информационной технологии диагностики сложного технологического процесса

Основные информационные процессы решения задачи мониторинга представляют собой технологическую цепочку в соответствии с этапами решения задачи диагностики. Дополнительные и вспомогательные процессы, также управляемые координатором, направлены на решение задач коррекции баз данных и знаний, организации диалога с пользователем и т.п. Для каждого информационного процесса обработки указаны виды моделей, которые используются в данном процессе.

Таким образом, сформулированы этапы метода построения информационной технологии диагностики состояния сложного технологического процесса.

### РАЗДЕЛ 3

## МЕТОДЫ, МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ МОНИТОРИНГА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ПРОЦЕССЕ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

В разделе 2 разработана концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов. Сущность концепции – реконструкция температурного поля в расплаве и слитке расчетным путем с применением численных методов и нейросетевых технологий.

Особенностью задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке является недоступность этих зон для прямых многоточечных измерений. Для решения поставленной задачи разработан ряд моделей – источников данных, способных воспроизводить процессы тепломассопереноса. В комплекс указанных моделей входят: нейросетевая модель решения задачи расчета температурного поля в расплаве; нейросетевая модель решения задачи расчета температурного поля в слитке; модель расчета температуры фонового нагревателя. К вспомогательным моделям относится нечеткий клеточный автомат, моделирующий процесс кристаллизации и используемый для уточнения значений коэффициента теплопроводности в зоне фронта кристаллизации в период наладки системы мониторинга.

Входами перечисленных моделей являются данные прямых измерений температуры в отдельных точках, а выходами – параметры температурных полей в слитке и подкристалльной области расплава, параметры роста монокристалла.

### **3.1. Нейросетевая модель расчета температурного поля в расплаве**

Целью данного подраздела является разработка модели расчета температуры в подкристалльной области, позволяющих в реальном времени реконструировать картину температурного поля с учетом влияния динамики движения расплава и других факторов.

Основными физическими явлениями, определяющими конфигурацию температурного поля в расплаве, являются кондуктивная теплопроводность, вынужденная конвекция, вызванная вращением тигля и затравки и свободная конвекция, обусловленная разностью температур у стенок тигля и вблизи поверхности расплава [122].

Непостоянство значений температур создает в расплаве неоднородное поле плотностей. Взаимодействие гравитационных сил с полем плотностей расплава приводит к свободной конвекции. Вынужденная конвекция возникает под действием центробежных и кориолисовых сил, величина которых обусловлена скоростью вращения кристалла  $\omega_k$  и тигля  $\omega_t$  [122].

Как было сказано выше, в стандартной постановке задачи математическая модель движения расплава в тигле и распределения примеси представляется нестационарными уравнениями Навье-Стокса, которые решаются совместно с уравнениями переноса тепла и примесей [124].

В таких математических моделях, как правило, предполагается осевая симметрия и учитывается вращение кристалла и тигля, а также тепловая и концентрационная конвекция. При исследовании технологических режимов выращивания кристаллов распределение температур на стенках тигля, поверхности расплава и в подкристалльной области задаётся в соответствии с экспериментальными данными в виде граничных условий [124].

Основные этапы решения задачи методом конечных элементов включают генерацию сетки конечных элементов для заданной сложной области, аппроксимацию компонент скорости и давления соответственно квадратичным и линейным базисным функциям, вариационную формулировку уравнений МКЭ по методу Галеркина и их решение фронтальным методом [15].

Недостатками МКЭ, ограничивающими его применение непосредственно в условиях производства монокристаллических слитков, являются: сложность реконфигурации расчетной сетки по мере роста слитка и уменьшения уровня расплава, сложность задания граничных условий, что накладывает определённые ограничения с точки зрения квалификации персонала, обслуживающего установку, а также значительные вычислительные затраты. Поэтому, наиболее приемлемым численным методом для

расчета температурного поля на 2D сетке мы считаем метод конечных разностей. Повышения адекватности результатов расчета температурного поля с учетом конвекции и других факторов можно достичь, используя дополнительные математические модели.

Таким образом, при решении задачи определения температурного поля в расплаве непосредственно в процессе выращивания следует рассмотреть вклад в теплоперенос различных явлений, а именно – теплопроводности, естественной и вынужденной конвекции в расплаве.

Изучению влияния свободной и вынужденной конвекции на температурное поле в расплаве кремния для кристаллов диаметром 100...300 мм посвящены работы Простомолотова, Калаева и других авторов [34–38]. В указанных работах методами численного моделирования проведено фундаментальное исследование температурных полей при различных сочетаниях скоростей вращения кристалла и тигля. В частности, изучена структура трехмерного течения расплава, осредненные по времени поля скорости, кинетическая энергия турбулентности крупных вихревых структур, а также характеристики турбулентного теплопереноса для различных ростовых режимов. Исследования выполнены для расплава кремния при выращивании слитков диаметром до 300 мм и начальной глубине расплава до 500 мм. Было обнаружено, что при малых и умеренных скоростях вращения естественная конвекция носит зонный характер, т.е. особенности течения в подкристалльной области сильно отличаются от особенностей течения на периферии расплава. При наибольших скоростях вращения тигля интенсивное конвективное движение локализуется под кристаллом, а на периферии расплава активизируется новый источник гидродинамических пульсаций – так называемая бароклинная неустойчивость, что приводит к слабому росту кинетической энергии турбулентности [38].

Разработанная в работе [38] методика позволяет запомнить и хранить температурные поля для различных стадий процесса выращивания. Температурные распределения вдоль оси и кромки кристалла представлены в виде полиномов 6–8-ой степени. Полиномы используются для расчета дефектообразования. Следует отметить, что полиномы 6–8 степеней, как правило, очень чув-

ствительны к небольшим случайным изменениям входных величин. Это является недостатком предложенного подхода. Кроме того, указанные работы не предполагают решение задач виртуального мониторинга температурного поля в реальном времени.

Известно, что распространение локализованных градиентов температуры и скорости через слой жидкости определяется уравнением тепловой диффузии. Для распределения температуры коэффициентом диффузии является температуропроводность:  $\chi = \lambda / \rho C$ , где  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность жидкости,  $C$  – удельная теплоемкость жидкости [122].

Коэффициентом диффузии для распространения количества движения (вихря, градиента скорости) является кинематическая вязкость:  $\nu = \eta / \rho$ , где  $\eta$  – коэффициент динамической вязкости. Эти коэффициенты диффузии позволяют определить порядок величин характеристического времени релаксации градиентов в слое глубины  $d$ :

$$\tau_t = d^2 / \chi, \quad \tau_v = d^2 / \nu.$$

Отношение этих двух времен является числом Прандтля, которое “контролирует” развитие во времени этих двух типов градиентов [122]:

$$Pr = \tau_t / \tau_v = \nu / \chi.$$

Отсюда видно, что при малых числах Прандтля (а для расплавов полупроводников оно составляет порядка 0,01) градиент температуры распространяется гораздо быстрее, чем градиент скорости. Именно поэтому в работе [8] отмечено, что теплопроводность расплава играет ведущую роль в формировании температурного поля расплава. Кроме того, в монографии [122] указывается на тот факт, что расплавленные металлы и полупроводники обладают малыми числами Пекле, а это, несмотря на многообразие форм движения в жидкости, приводит к тому, что перенос тепла теплопроводностью играет решающую роль. В частности, такое положение создается при числах Тейлора, превышающих некоторое критическое значение  $Ta_{кр} = 0,68 \cdot Ra^{1,28}$ , где  $Ra$  – число Релея, характеризующее конвекцию в расплаве. В работах, посвященных экспериментальному исследованию температурного поля в расплаве кремния, приведены оценки числа Релея [27, 30, 31]. В соответствии с этими данными  $Ra$  изменяется в

диапазоне  $6,72 \cdot 10^{-4} \dots 0,185 \cdot 10^{-4}$ . Для чисел Тейлора соответственно получим  $Ta = 0,893 \cdot 10^7$  при  $Ta_{кр} 0,1027 \cdot 10^7$ ,  $Ta = 0,75 \cdot 10^5$  при  $Ta_{кр} = 0,1034 \cdot 10^5$ .

Приведенные значения чисел  $Ra$ ,  $Ta$  и  $Ta_{кр}$  свидетельствуют о том, что перенос тепла в расплаве при выращивании монокристаллов методом Чохральского при реальных значениях скоростей вращения тигля и затравки осуществляется в основном теплопроводностью, а в меньшей степени – за счет конвекции. В таком случае расчет температурного поля расплава можно проводить, при помощи нейронной сети рекуррентного типа, способной воспроизводить пульсации температуры из-за вынужденной и естественной конвекции.

В настоящее время нейроматематика доказала свою эффективность во многих задачах, в которых трудно или невозможно построить адекватную аналитическую модель [128]. В последнее десятилетие появился интерес к применениям нейронных сетей к задачам математической физики [129 – 136]. Это вызвано разнообразием практических приложений и трудностями рассмотрения многих из них (нелинейность моделей, сложность геометрии, большой объем и зашумленность данных и др.). Появилась возможность обработки в рамках одной модели данных различной природы – для нейронной сети важна лишь их коррелированность.

Практика применения нейронных сетей (НС) и вычислительных моделей на их основе показывает, что данный подход эффективен при решении широкого круга задач, аналитическое решение для которых получить затруднительно либо невозможно. В работе [135] разработана концепция создания на основе нейросетевой методологии единого подхода к построению устойчивых уточняемых моделей систем с распределенными параметрами и конструирование соответствующих нейросетевых алгоритмов, использующих достоинства нейросетевых аппроксимаций. Это позволяет решить задачу построения робастной математической модели по разнородным данным, включающим как результаты решения уравнений, так и экспериментальные наблюдения.

Например, в процессе выращивания монокристалла функцией нейросетевой модели является решение прямой задачи



расчета теплового градиента по заданным граничным значениям температуры, которые могут быть измерены в процессе выращивания. Таким образом, нейросетевая модель играет роль виртуального датчика, вычисляющего значения технологических параметров в критичной зоне процесса.

Задачу разработки модели расчета температурного поля расплава будем решать методом нейросетевой аппроксимации. Это позволяет получить адекватные целям мониторинга результаты расчета температуры расплава в реальном времени процесса выращивания. Модель должна обладать следующими свойствами:

- позволять найти решение не только для отдельных точек, но получить достаточно полную картину температурного поля в зоне фронта кристаллизации, которая будет интерпретирована в СППР для корректировки режима выращивания;
- учесть влияние таких факторов, как температура фонового нагревателя, скорости вращения тигля и затравки, скорость вытягивания, текущий уровень расплава в тигле.

Поставленная задача может быть решена путём разработки и применения многоблочной рекуррентной нейросетевой модели.

Согласно проведенным предварительным исследованиям к факторам, влияющим на изменения эффективной температуропроводности в расплаве относятся: уровень расплава в тигле, скорость вытягивания, скорость вращения кристалла, скорость вращения тигля, а также отношение радиуса и длины выращиваемого слитка.

Достоинства нейронных сетей делают их удобным инструментом для моделирования сложных многопараметрических нелинейных физических процессов. Однако получение с помощью НС достаточно густой сетки решений наталкивается на значительные трудности, связанные с тем, что увеличение количества нейронов выходного слоя во первых, уменьшает точность вычислений, а во вторых увеличивает время обучения и переобучения НС. Поэтому в данной работе предлагается использовать обученную нейронную сеть для получения решений в нескольких контрольных точках, после чего проводить линейную аппроксимацию для получения полей распределения температур. При этом выходы нейронной сети могут интерпретироваться как точки коллокации, то есть точки с известной температурой в расчетной

сетке.

При практической реализации предлагаемого метода необходимо решить задачу выбора пространственной структуры нейронной сети для расчёта значений температуры в заданных точках. Требуется выбрать точки, наилучшим образом отражающие температурный режим в интересующей нас области расплава. Часть этих точек являются входами НС, а часть – выходами. Перечислим эти точки:

1. Контрольная точка в расплаве под слоем герметизатора – точка, в которой производится измерение температуры при помощи термопары (один из входов НС). Мгновенное значение температуры в данной точке непрерывно изменяется в ходе вытягивания под действием конвективных составляющих теплопереноса, что позволяет нейронной сети реагировать на динамику изменения температуры расплава в реальном времени.

2. Точка, принадлежащая фоновому нагревателю, температура которого вычисляется при помощи специально разработанной математической модели (один из входов НС).

3. Точки на оси симметрии системы тигель-расплав (выходы НС).

4. Точки в расплаве на радиусе тигля, совпадающие с расчетной сеткой аппроксимации (входы и выходы отдельных блоков НС).

Определение контрольных точек позволяет перейти к выбору структуры нейронной сети. Практические исследования в области нейросетевого моделирования показали, что нелинейные задачи, к числу которых принадлежит и данная, обычно достаточно хорошо аппроксимируются нейросетями с одним скрытым слоем [136]. Предлагаемая нейронная сеть имеет блочную структуру [137]. Состав одного блока показан на рис. 3.1.

Блок состоит из четырех сумматоров. Для первого и второго сумматоров  $i$  – индекс по радиусу (индексация идет от периферии к центру оси симметрии),  $j$  – индекс по оси  $z$  (индексация идет снизу вверх),  $k$  – индекс по времени.

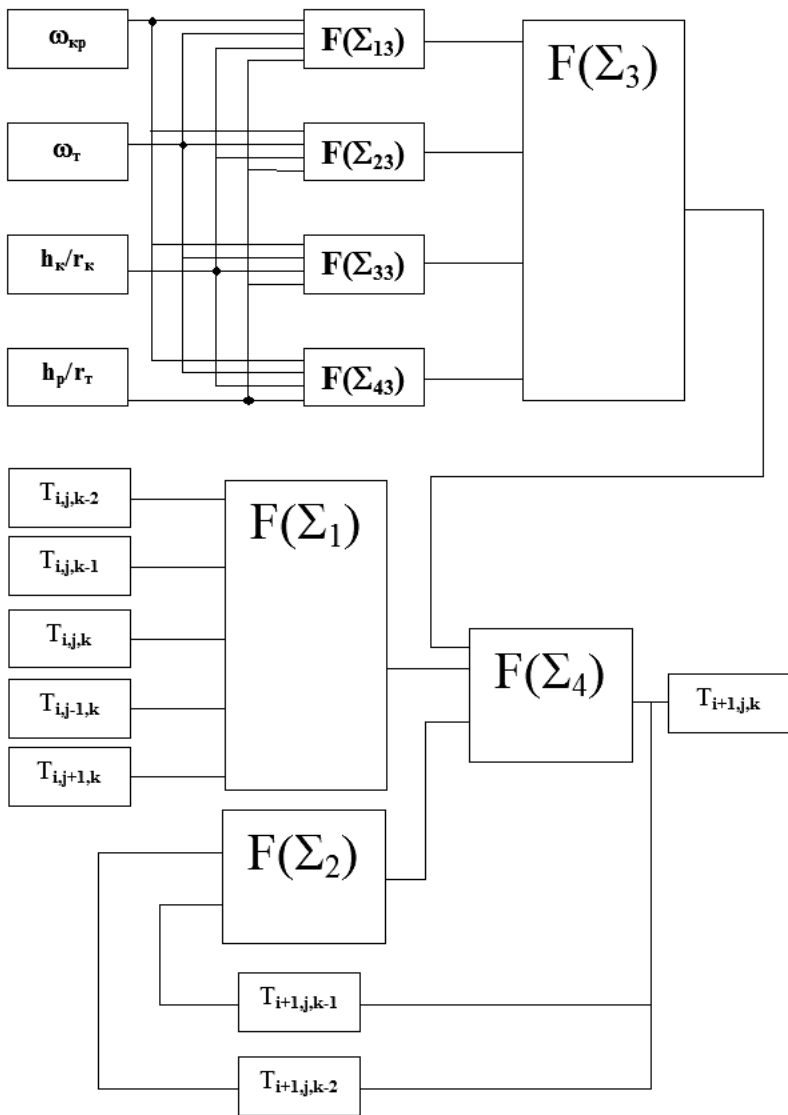


Рис.3.1 – Структура одного блока нейронной сети

Первый сумматор суммирует текущее и два предыдущих значения температуры расплава слоя  $j$  радиуса  $i$  и текущие значения с нижнего прилежащего слоя  $j-1$  и с верхнего прилежащего слоя  $j+1$  того же радиуса.

Второй сумматор суммирует два предыдущих значения температуры слоя  $j$  радиуса  $i+1$ , осуществляя рекуррентную часть вычислений. Таким образом, первые два сумматора осуществляют временную и пространственную увязку входных значений температуры.

Третий сумматор предназначен для учета влияния физических параметров техпроцесса на значение температуры расплава. Входами сумматора являются скорость вращения тигля и кристалла, отношение длины слитка к его радиусу, определяющее характер теплоотвода через кристалл, а также отношение уровня расплава в тигле к его радиусу, определяющее теплоток от нагревателя к системе и характер гидродинамики расплава.

Четвертый сумматор суммирует выходы первых трех сумматоров и вычисляет значение температуры в точке  $T_{i+1,j,k}$ .

Для получения целостной картины распределения температур в расплаве несколько вышеописанных блоков расположены в осевом и радиальном направлениях. Количество “слоев” сети в осевом направлении ограничено таким образом, чтобы конфигурацию сети не нужно было изменять при понижении уровня расплава до 25%.

Обучение сети проводилось на примерах, полученных в результате численного расчета сопряженной задачи тепломассопереноса методом конечных разностей по схеме, аналогичной приведенной в работе [17]. При этом граничные условия и геометрия теплового узла соответствовали реальным данным, полученным в ходе предварительных экспериментов на установке “Арсенид-1”.

Размер обучающей выборки составлял 250 примеров – “снимков” температурного поля расплава при различных значениях скоростей вращения тигля и затравки, длины выращенного слитка и уровня расплава. Корректировка весовых коэффициентов производилась стандартным методом Backpropagation. Обучение на каждом примере велось до получения значения ошибки меньшего либо равного заданному, но не более 5-ти итераций, после

чего обучение продолжалось на следующем примере. После прохождения обучения на всех примерах, вычислялась интегральная ошибка, как сумма квадратов ошибок по всей обучающей выборке. При значении контрольной ошибки большей заданного значения обучение повторялось по той же схеме до тех пор, пока не было получено приемлемое значение суммарной квадратичной ошибки. Тестовый набор содержал 200 примеров, которые не предъявлялись сети во время обучения.

Метод вычисления параметров температурного поля с применением разработанной модели включает следующие этапы:

1. Вычисление граничных условий на границе расчетной сетки, а именно:

- аппроксимация распределения температуры на стенке тигля;
- вычисление температуры фонового нагревателя при помощи специальной математической модели (см. подраздел 3.4) с учетом потребляемой нагревателем мощности, скорости подъема заправки, температуры основного нагревателя и уровня расплава в тигле;
- табличное задание распределения температуры на поверхности герметизатора с учетом стадии роста монокристалла;

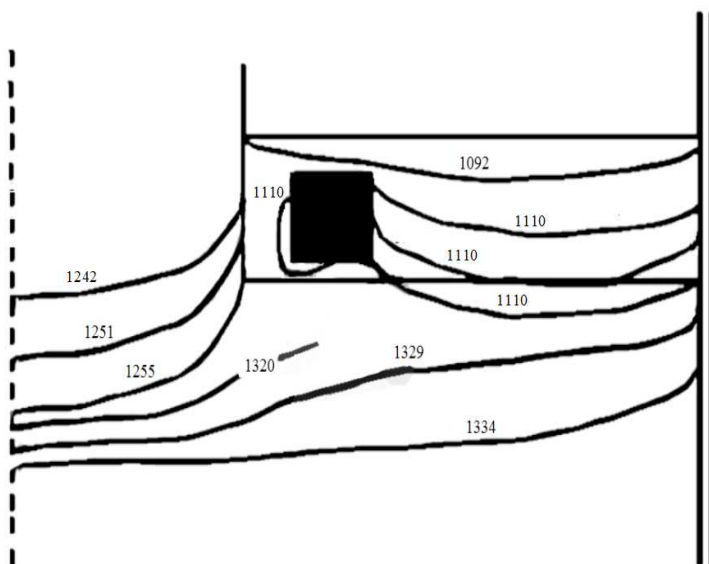
2. Вычисление значений температуры в контрольных точках расплава с помощью предложенной нейросетевой модели и сохранение результатов расчета, как “точек с известной температурой” в расчетной сетке наряду с температурой в контрольной точке расплава, полученной при помощи измерения термопарой.

3. Вычисление значений температуры расплава с промежуточных узлов расчетной сетки путем усреднения (линейной аппроксимации) с использованием значений температур в контрольных точках, полученных на предыдущем шаге и сохранение результатов в памяти компьютера.

4. Вычисление осевых и радиальных градиентов температуры в зоне фронта кристаллизации и вывод результатов в табличном виде на монитор компьютера мастера-технолога.

На рис. 3.2 показано полученное в ходе испытаний предложенного метода и модели отображение изотерм в расплаве. Картина распределения температур хорошо согласуется с результатами измерений и расчетов, опубликованными в работах [22, 23].

Разработанная нейросетевая модель, позволяет учесть конвективные тепловые потоки, скорость вытягивания, стадию процесса вытягивания и тем самым повысить точность результатов численного расчета температурного поля в процессе выращивания. Модель создаёт основу для построения информационной технологии виртуального мониторинга температурного поля в расплаве и слитке, что позволяет оптимизировать температурный режим и повысить структурное совершенство монокристаллов GaAs.



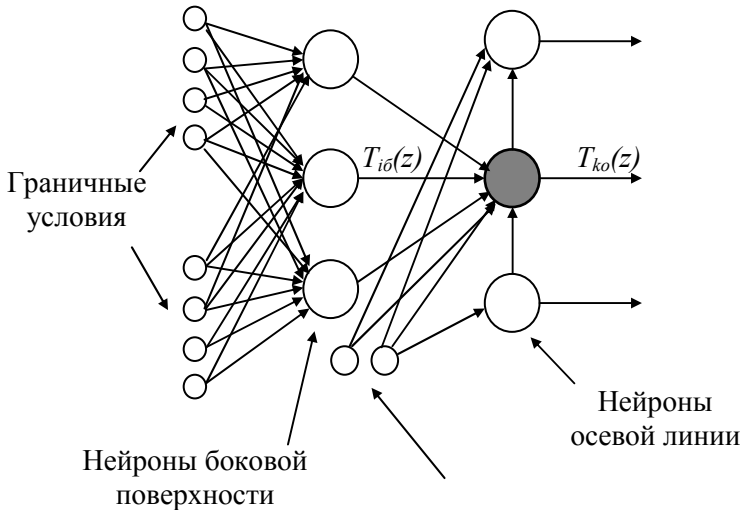
### 3.2. Нейросетевая модель для расчета температурного поля в слитке

Как альтернатива численного расчета методом конечных разностей была разработана нейросетевая модель для расчета

температурного поля в слитке.

Решение многих физических задач может быть сведено к решению дифференциальных уравнений в частных производных. К распространенным задачам такого класса относится моделирование процессов теплопроводности, диффузии, конвекции, нестационарных полей различной природы, представляемые параболическими уравнениями, и стационарных полей (например, температурных или электромагнитных), представляемых эллиптическими уравнениями в частных производных [14]. В данном подразделе ставится задача аппроксимации решения дифференциальных уравнений теплопередачи блочной неполносвязной нейронной сетью прямого распространения, архитектура которой отражает конфигурацию слитка и элементов теплового узла.

Для первоначальных экспериментов была выбрана структура сети, фрагмент которой показан на рис. 3.3.



Сеть содержит набор рецепторов, разбитый на блоки. Каждый блок рецепторов воспринимает граничные условия задачи в виде вектора значений температуры на определённой поверхности элемента теплового узла. Первый слой нейронов вычисляет значения температур  $T_{i\alpha}(z)$  на боковой поверхности слитка по осевой координате  $z$ . Этот слой связан с рецепторами по принципу “все со всеми”. Вторым слоем нейронов вычисляет значения температур  $T_{k\alpha}(z)$  на оси слитка. Для наглядности на рисунке темным цветом выделен центральный нейрон одного блока. Данный нейрон воспринимает следующие сигналы: сигналы трех ближайших нейронов “бокового” слоя; сигнал от нейрона “нижнего” блока; сигнал от рецептора, измеряющего температуру в точке  $z = 0$ .

В качестве активационной функции скрытого слоя использовали смещённую сигмоидальную функцию:

$$Y = \frac{2}{1 + e^{-S}} - 1.0 \quad (3.1)$$

Обучение сети осуществлялось методом обратного распространения ошибки. Обучающие данные и тестовая выборка представляют собой результаты экспериментальных измерений, а также результаты численного решения задачи теплопереноса методом конечных элементов с вариациями значений граничных условий. Для увеличения количества обучающих примеров использовалось аддитивное наложение случайной составляющей с нормальным распределением на примеры, полученные указанными выше способами.

Эксперимент проводился по следующей методике:

1. Формирование обучающей и контрольной выборки.
2. Выбор числовых параметров алгоритма обучения и параметров настройки нейронной сети.
3. Запуск одной итерации обучения по всей обучающей выборке.
4. Запуск программы на тестирование и фиксация среднеквадратичной ошибки, вычисляемой по формуле:

$$E = \frac{1}{M} \sum_{i \in M} \sum_{j \in J} d_{ij}^2, \quad (3.2)$$

где  $J$  – количество нейронов выходного слоя,  $d_j$  – ошибка одного

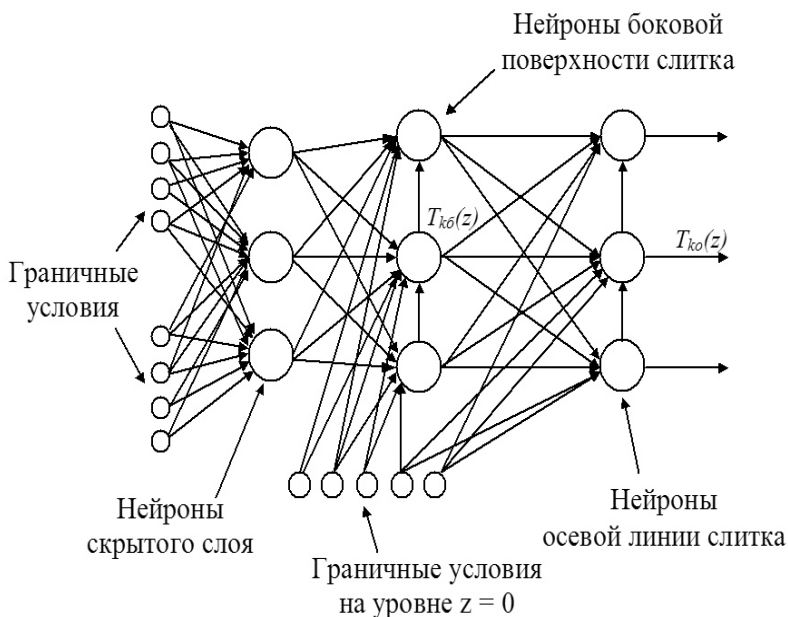


из нейронов выходного слоя,  $M$  – количество примеров в обучающей выборке.

5. Повторение пунктов 3 и 4 пока полная ошибка сети на обучающей выборке не достигнет значения, близкого к заданной константе.

Результаты обучения данной нейронной сети показали, что такая модель неспособна правильно отображать распределение температуры на боковой поверхности слитка. Другими словами, в модели нет требуемого однозначного соответствия между температурой боковой поверхности слитка и температурой на осевой линии слитка, а это означает, что данная модель непригодна для моделирования температурного поля в объеме слитка.

После экспериментов с различными конфигурациями нейронной сети была разработана структура, фрагмент которой показан на рис. 3.4 [139].



Р

ис. 3.4 – Предлагаемый вариант структуры нейронной сети.

Для передаточной функции нейронов боковой поверхно-

сти слитка (в дальнейшем - слой 1) и нейронов осевой линии слитка (в дальнейшем - слой 2) было выбрано приближенное аналитическое решение дифференциального уравнения теплопроводности в цилиндрических координатах, приведенное в работе [22]:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = 0 \quad , \quad (3.3)$$

где  $T$  – температура;  $r$  и  $z$  – радиальная и осевая координаты слитка соответственно.

В предположении, что излучение с поверхности кристалла прямо пропорционально температуре, уравнение (3.15) имеет аналитическое решение вида [22]:

$$T(z, r) \approx T_0 \cdot \left[ 1 - \frac{R\alpha}{2\lambda(T)} \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \exp \left[ -\frac{z}{R} \sqrt{\frac{2R\alpha}{\lambda(T)}} \right]. \quad (3.4)$$

Здесь  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $R$  – заданный радиус слитка,  $T_0$  – граничное условие по температуре.

Из (3.4) следует, что температура в слитке изменяется по параболическому закону в радиальном направлении и падает экспоненциально в осевом направлении, что качественно согласуется с результатами, полученными при численном моделировании тепловых процессов в слитке авторами работы [40].

На рисунке 3.5 показана нормированная кривая температурного профиля вдоль оси  $z$  слитка при заданных значениях  $R$ ,  $t$ ,  $\lambda$ ,  $\alpha$ , построенная по выражению (3.4).

Таким образом, передаточные функции отдельных нейронов слоя 1 и слоя 2 являются линейными с коэффициентом, значение которого зависит от координаты  $z$ , коэффициента теплопроводности  $\lambda$ , радиуса слитка  $R$  и коэффициента теплоотдачи  $\alpha$ . Эксперименты показали, что это ускоряет процесс обучения и увеличивает обобщающую способность сети. Другими словами, каждый нейрон слоя 1 и слоя 2 вычисляет нормированную температуру с учетом значения собственной координаты  $z$ . Радиальная координата слитка для нейронов слоя 1  $r=R$ , для нейронов слоя 2  $r=0$ .

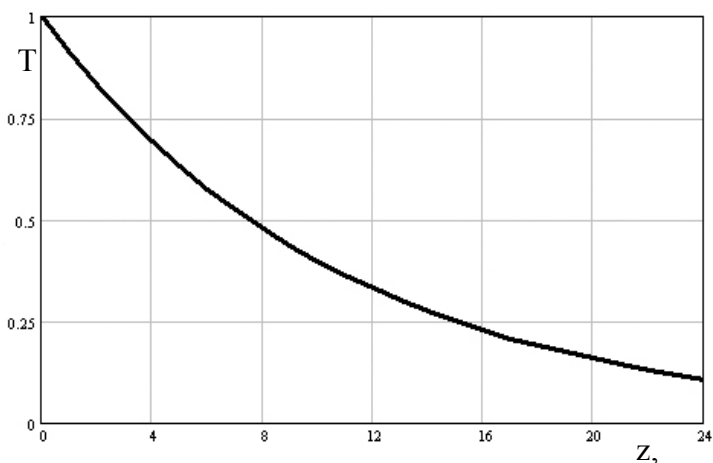


Рис. 3.5 – Нормированная кривая температурного профиля вдоль координаты  $z$  слитка.

Для каждого нейрона могут быть также определены индивидуальные значения параметра теплоотдачи  $\alpha$  в зависимости от пространственных координат, то есть указанный параметр является дополнительным элементом настройки передаточной функции. Обучение сети происходит в два этапа. На первом этапе обучается слой 1. На втором этапе обучается слой 2. На рис. 3.6 показана динамика обучения нейронной сети – уменьшение полной ошибки с увеличением количества итераций обучения.

Результаты обучения и тестирования сети в виде рассчитанного графика температурного профиля по координате  $z$  слитка представлены на рис. 3.7.

На том же рисунке показано боковое распределение температуры, полученное численным методом (кривая 3). Сравнение показывает, что нейронная сеть данной конфигурации способна вполне адекватно воспроизводить температурное поле слитка и может использоваться как источник данных в системе мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов.

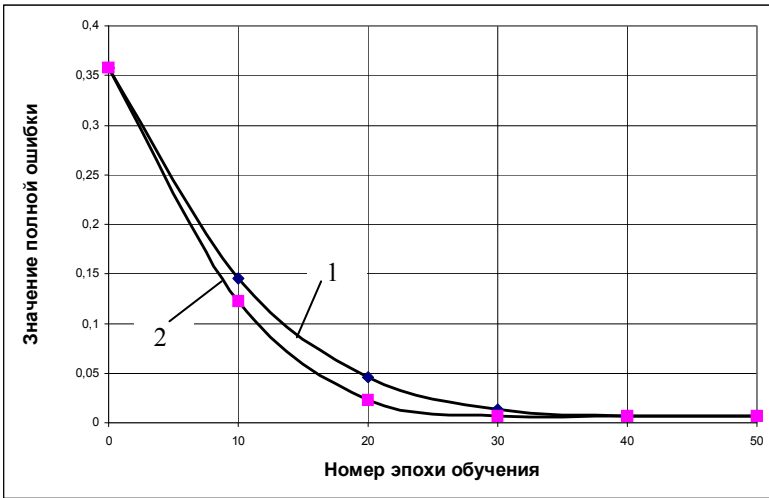


Рис. 3.6 – Динамика уменьшения полной ошибки сети: 1 – слой 1 (боковая поверхность слитка), 2 – слой 2 (ось симметрии слитка).

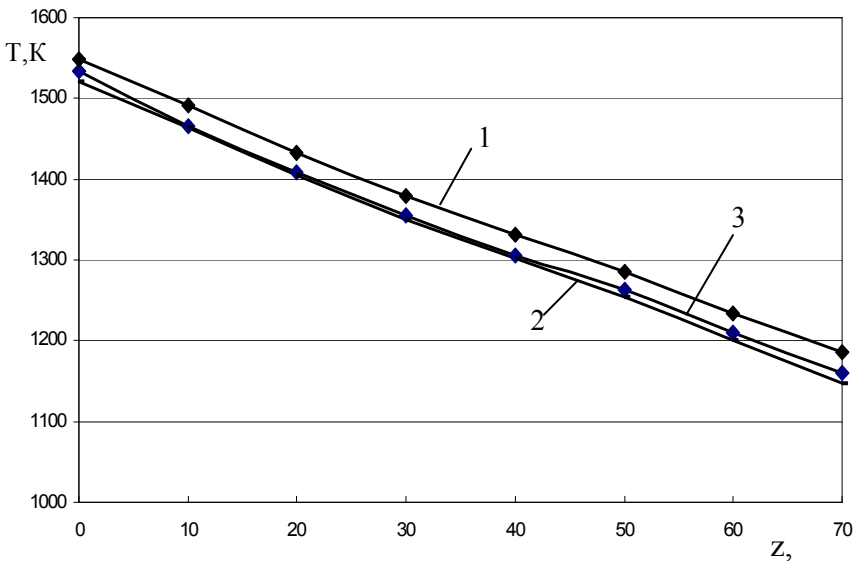


Рис. 3.7 – Результаты расчета температурного профиля: 1 – по оси z слитка, нейросетевая модель; 2 – боковая поверхность, нейросетевая модель; 3 – боковая поверхность, численная модель.

### **3.3. Метод моделирования процесса кристаллизации на базе нечеткого клеточного автомата**

В период отладки подсистемы мониторинга температурных полей в качестве имитационной модели процесса кристаллизации использовалась специально разработанная модель на базе клеточного автомата. Это дало возможность многократно воспроизводить этапы процесса выращивания в условиях компьютерного эксперимента при различных температурных режимах. Ниже описывается метод моделирования и модель на базе нечеткого клеточного автомата [141].

Клеточные автоматы (КА) получают всё большее распространение при моделировании систем и процессов в различных областях естествознания [142]. Не без оснований считается, что именно КА могут сыграть чрезвычайно важную роль в качестве как концептуальных, так и прикладных моделей пространственно распределенных динамических систем. КА активно используются для описания сложных развивающихся систем, в частности для описания формирования микроструктуры материала при кристаллизации. В работе [144] дается достаточно полный обзор существующих моделей процесса кристаллизации и рассматриваются перспективы их использования и развития. В обзоре большое место уделяется стохастическим методам моделирования, в том числе имитационным подходам, использующим технику клеточных автоматов.

“Классический” клеточный автомат – дискретная динамическая система, представляющая собой совокупность одинаковых клеток, одинаково соединенных между собой [142]. Все клетки образуют так называемую решетку клеточного автомата. Эти решетки могут быть разных типов и отличаться как по размерности, так и по форме клеток. Каждая клетка – это конечный автомат, состояние которого определяется состояниями соседних клеток и, возможно, её собственным. В известных клеточных автоматах, как в моделях вычислений, не рассматриваются входные и выходные воздействия. В общем случае классические клеточные автоматы обладают следующими свойствами:

- изменения значений всех клеток происходят одновременно после вычисления нового состояния каждой клетки решетки;

- решетка однородна - невозможно различить какие-либо две области решетки по ландшафту;
- взаимодействия локальны, то есть, лишь клетки окрестности (как правило, соседние) способны повлиять на данную клетку;
- множество состояний клетки конечно;
- правила взаимодействия клеток не изменяются во времени.

Уже из перечисленных выше свойств “стандартного” КА видны его недостатки относительно возможностей моделирования специфических процессов кристаллизации, имеющих место в технологическом процессе выращивания монокристаллов по методу Чохральского. Прежде всего, это противоречие между свойством однородности решетки КА и неоднородностью свойств различных зон в области кристаллизации.

Другое противоречие состоит в том, что попытка моделировать динамику процесса кристаллизации на микроуровне приводит к задаче невообразимой размерности. Следовательно, клетка (в дальнейшем – ячейка) автомата должна моделировать свойства некоторого объёма конечных размеров. Но если интерпретировать состояние объёма как интегральную оценку степени перехода из жидкой фазы в твердую, то число возможных состояний ячейки КА не может быть конечным.

В классической постановке задачи моделирования процесса роста монокристалла используется уравнение Стефана, имеющее как аналитические, так и численные решения [144]. Температурное поле в жидкой и твёрдой фазах описывается уравнениями теплопроводности с соответствующими теплофизическими характеристиками; кристаллизация происходит на границе раздела фаз, причём априори предполагается существование однозначной достаточно гладкой границы раздела фаз.

При численном решении задачи Стефана применяются две группы методов. Первая группа использует обобщенную или энтальпийную, запись скрытой теплоты кристаллизации (плавления) в самом уравнении [144]. Это приводит к необходимости той или иной аппроксимации нелинейных членов в уравнении или, иными словами, к “размазыванию” скрытой теплоты [144]. Эти методы хорошо приспособлены к нахождению обобщенного решения задачи Стефана, в частности, для двухфазной зоны (для переходного слоя). Вторая группа методов исходит из классической постановки

задачи Стефана и приводит к необходимости выделения четкого фронта кристаллизации тем или иным способом [144].

В работах [145 – 151] приведены различные способы аппроксимации нелинейных членов уравнения в обобщенной постановке задачи Стефана. Авторы приходят к выводу, что “размазывание” скрытой теплоты в интервале ( $T_{пл} - \Delta T$ ) физически равносильно допущению частичной кристаллизации в рассматриваемом объеме расплава, причем доля твердой фазы пропорциональна переохлаждению. Это говорит о том, что степень кристаллизации в рассматриваемом объеме можно рассматривать как нечеткое множество с функцией принадлежности, определённой на отрезке  $[0,1]$ . Данное утверждение не противоречит “обобщенной постановке задачи” моделирования процесса кристаллизации в терминологии фундаментальной работы [144].

Более простой подход состоит в использовании геометрико-вероятностной модели кристаллизации [149], позволяющей получить явное выражение объемной доли закристаллизовавшегося вещества в зависимости от времени при известных скорости зародышеобразования и скорости роста кристаллов. Этот, в общем случае приближенный подход, удобен, когда необходимо решать сопряженную задачу теплообмена и кинетики объёмной кристаллизации в расплаве. Такой подход можно реализовать на основе нечёткого клеточного автомата. Ниже приводится описание этапов метода моделирования.

1. Установление механизмов влияния различных факторов на процесс роста. Известно, что структура закристаллизовавшегося материала в значительной степени зависит от структуры двухфазной зоны. Для того, чтобы задача описывала какие-то элементы структуры двухфазной среды, при её постановке необходимо учитывать кинетику объёмной кристаллизации. Такая постановка задачи должна включать данные о динамике роста кристалла в зависимости от переохлаждения в двухфазной среде.

2. Анализ теплового баланса в области фронта кристаллизации. При формировании монокристалла наибольший интерес представляет область теплового поля, непосредственно примыкающая к растущему слитку. Изменение градиента температуры в этой области изменяет соотношение между диаметром выращиваемого слитка, скоростью роста и формой фронта кристаллиза-

ции. Общее уравнение теплового баланса с учётом осевой симметрии слитка и расплава записывается в виде [152]:

$$Q_L + Q_q + Q_{\text{пад}} = Q_S + Q_p, \quad (3.5)$$

где  $Q_L$  – тепловой поток, поступающий в слиток через фронт кристаллизации;  $Q_q$  – тепловой поток, обусловленный скрытой теплотой плавления;  $Q_{\text{пад}}$  – тепловой поток, падающий на слиток от нагревателя и расплава;  $Q_S$  – тепловой поток от фронта кристаллизации;  $Q_p$  – тепловой поток от фронта за счет излучения с поверхности. В разрабатываемой локальной модели тепловой баланс учитывается косвенно при обучении нейронной сети.

3. Анализ тепловых условий роста кристалла. Как известно, идея метода Чохральского заключается в росте кристалла за счет перехода атомов из жидкой фазы вещества в твердую на границе раздела двух фаз. Эту границу в настоящее время принято считать размытой [144].

Скорость изменения суммарного объёма твёрдой фазы определяется скоростью роста отдельных зародышей кристаллов с учётом лимитирующего влияния теплоотвода и диффузии. Для того, чтобы происходила кристаллизация, температура в переходной зоне кристалл-расплав должна быть ниже равновесной температуры плавления  $T_{\text{пл}}$  на некоторую малую величину  $\Delta T$ , называемую переохлаждением. Последняя определяет скорость кристаллизации: чем больше  $\Delta T$ , тем выше скорость кристаллизации. Необходимость снижения температуры на границе раздела кристалл-расплав является следствием того, что “равновесная температура плавления” характеризует равновесие между жидкой и твердой фазами, которое определяется равенством свободных энергий этих фаз. Кристаллизация происходит тогда, когда свободная энергия жидкой фазы выше, чем твердой. Последнее условие удовлетворяется в том случае, если температура расплава, находящегося в контакте с растущим кристаллом, ниже температуры плавления.

Скорость роста кристалла определяется числом мест на его поверхности для присоединения атомов, поступающих из жидкой фазы, и особенностями переноса на границе раздела. Условия теплопереноса на границе раздела фаз с использованием макропараметров можно записать в виде уравнения [144]:



$$L \frac{dm}{dt} + \lambda_1 \left( \frac{dT}{dz} \right)_1 B_1 = \lambda_2 \left( \frac{dT}{dz} \right)_2 B_2, \quad (3.6)$$

где  $L$  – удельная теплота кристаллизации,  $\lambda_1, \lambda_2$  – коэффициенты теплопроводности расплава и слитка,  $B_1, B_2$  – коэффициенты, характеризующие особенности процесса и материала,  $\frac{dm}{dt}$  – скорость перехода вещества в новое состояние,  $\left( \frac{dT}{dz} \right)_1, \left( \frac{dT}{dz} \right)_2$  – градиенты температуры в переходном слое и в твердой фазе.

В работе [144] исследовалась зависимость частоты зародышеобразования  $J(\Delta T)$  от степени переохлаждения расплава и предлагается аппроксимировать зависимость  $J(\Delta T)$  выражением:

$$J(\Delta T) = A \exp\left(-\frac{B}{\Delta T^2}\right), \quad (3.7)$$

где значения кинетических констант  $A$  и  $B$  варьируются в широких пределах для различных условий выращивания и видов материалов. Так, значения коэффициента  $A$  варьируются от  $1 \cdot 10^{-1}$  до  $1 \cdot 10^{10}$ . Вместе с тем, проведение физических экспериментов, позволяющих определить реальную скорость образования зародышей в зависимости от переохлаждения весьма затруднительно [144].

Сказанное выше дает основания предположить, что в рамках рассматриваемой в данной работе макромодели рост доли твердой фазы следует соотносить с одним параметром – скоростью кристаллизации, которая в свою очередь зависит от величины переохлаждения.

В настоящей работе кинетика кристаллизации рассматривается в рамках модели послыойного роста, т. е. предполагается, что рост новой фазы происходит за счет наращивания последовательных слоев. Формирование каждого слоя идет путем двумерного роста зародышей, причем зародыши нового  $i$ -го слоя могут возникать лишь на закристаллизовавшихся участках предыдущего  $(i-1)$ -го слоя. Результатом работы предлагаемой модели является послыойное формирование твердой фазы монокристалла и исключение затвердевшего слоя из феноменологической модели кристаллизации.

4. Анализ соотношения скорость роста кристалла и скорости вытягивания затравки. Следует учитывать зависимость между скоростью вытягивания слитка и скоростью продвижения границы фаз (скоростью роста кристалла). В работе [152] связь между скоростью роста кристалла и тепловыми условиями устанавливается в виде:

$$v_p L \rho_s = \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} - \alpha (T_L - T_{пл}), \quad (3.8)$$

где  $T_{пл}$  – температура плавления;  $T_L$  – температура жидкой фазы в рассматриваемой области;  $\lambda_s$  – коэффициент теплопроводности материала в твердом состоянии,  $\rho_s$  – плотность монокристалла,  $L$  – скрытая теплота кристаллизации;  $\alpha$  – коэффициент теплопередачи межфазной зоны, определяемый как отношение коэффициента теплопроводности  $\lambda_f$  межфазной зоны к заданной толщине зоны  $\Delta z$ . Отдельно следует упомянуть, что величина  $\alpha$  прямо пропорциональна  $\sqrt{\omega_s}$ , где  $\omega_s$  – скорость вращения слитка [137].

Максимальная скорость вытягивания кристалла не должна превышать мгновенную скорость кристаллизации. При условии отсутствия изменения градиента температуры в переходном слое эта скорость с учетом выражения (3.8) задается уравнением:

$$V_{max} = \frac{\lambda_s}{L \rho} \cdot \frac{dT}{dz}, \quad (3.9)$$

где  $\rho$  – плотность кристалла в твердом состоянии,  $\lambda_s$  – теплопроводность у фронта кристаллизации.

5. Формулирование правил взаимного влияния ячеек клеточного автомата. Под состоянием ячейки будем понимать степень перехода ячейки из жидкой фазы в твердую. В силу осевой симметричности объекта моделирования для локализации ячеек и определения значений координатных функций выбрана цилиндрическая система координат, в которой модель оперирует радиусом монокристалла  $R_k$ , дискретным отсчетом радиальной координаты  $r_i$  с шагом  $\Delta r$ , шагом изменения угла  $\Delta \alpha$  и дискретным отсчетом  $z_j$  по координате  $z$  с шагом  $\Delta z$ . Граничные условия задаются в виде функции, зависящей от дискретного отсчета кольцевого участка  $\Delta r$ . На каждом шаге  $\Delta r$  возможно задавать скорость вращения расплава и при необходимости учета влияния

примесей менять их концентрацию.

Схема автомата показана на рис. 3.8.

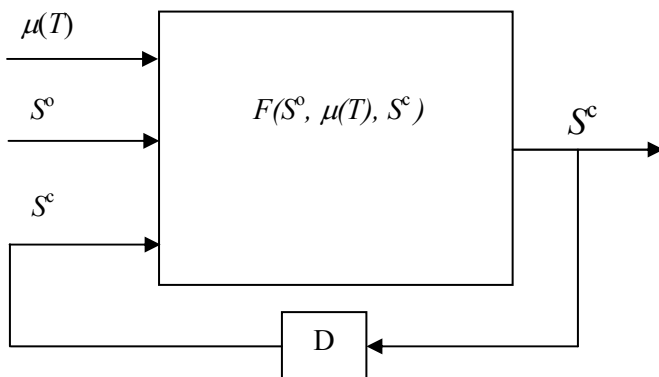


Рис. 3.8 – Схема нечеткого автомата.

Входной алфавит автомата включает:

а). Нечеткие значения степени переохлаждения  $\Delta T$ , приведенные (нормированные) к диапазону  $[0,1]$ . За опорное значение принимается температура плавления  $T_{пл}$ . Поскольку температура ячейки может быть и выше и ниже температуры плавления, эксперт назначает верхнюю и нижнюю границы температурного диапазона в зоне кристаллизации для данного технологического процесса –  $T_{max}$  и  $T_{min}$ . Нормирование происходит по соотношению

$$T_j^H = \frac{T_j - T_j^{min}}{T_j^{max} - T_j^{min}}, \quad (3.10)$$

где  $T_j^H$  – нормированное значение температуры;  $T_j$  – реальное значение температуры. Лингвистическая переменная “Переохлаждение” имеет один одноимённый терм с функцией принадлежности вида:

$$\mu(T) = \begin{cases} 0 & \text{if } T_{\text{яч}}^{\text{H}} > T_{\text{пл}}^{\text{H}} \\ 1 - \frac{0.5 \cdot T_{\text{яч}}^{\text{H}}}{T_{\text{пл}}^{\text{H}}} & \text{if } T_{\text{яч}}^{\text{H}} \leq T_{\text{пл}}^{\text{H}} \end{cases} ; \quad (3.11)$$

б). Собственное состояние (степень кристаллизации) ячейки  $S^c$ . Лингвистическая переменная “Состояние” также имеет один терм – “Степень затвердевания” с линейной функцией принадлежности, возрастающей от 0 до 1.

в). Интегральная оценка состояния соседних ячеек  $S^o$ , вычисляемая как среднее значение их собственных состояний. Соседними считаются: ячейка, расположенная сверху (предыдущий слой) и четыре ячейки, примыкающие к рассматриваемой в своем слое.

Элемент D осуществляет задержку на один такт расчета, то есть является памятью автомата.

На основании сказанного выше модель процесса кристаллизации можно представить как четверку вида:

$$A = \{X, S, S_0, F\}, \quad (3.9)$$

где  $X$  – конечное множество входов;  $S$  – бесконечное множество состояний;  $S_0$  – начальное состояние;  $F = \varphi(S, X)$  – функция переходов.

Сформулируем правила вычисления степени перехода ячейки в твердую фазу. Состояние ячейки в каждый момент времени будет определяться композицией вектора перечисленных входных сигналов, включая задержанное на один такт значение собственного состояния, а именно - вероятность перейти из “жидкого” состояния в “твёрдое” будет увеличиваться: по мере увеличения числа соседей, находящихся в твёрдом состоянии, по мере увеличения переменной “Скорость роста” и по мере увеличения значения функции  $f(T)$ . Очевидно, что если все соседи клетки находятся в “твёрдом” состоянии, то вероятность для данной клетки перейти в “жидкое” состояние равна нулю и наоборот, если все соседи клетки находятся в “жидком” состоянии, то вероятность клетки перейти в “твёрдое” состояние мала.

Переход автомата из одного состояния в другое описывается функцией переходов. Для описания переходов из каждого со-

стояния во все другие состояния используется t-конорма Лукасевича [136], модифицированная за счет введения весовых коэффициентов:

$$F(S_0, \mu(T), S_c) = \min(a_1 S^0 + a_2 \mu(T) + a_3 S^c, I), \quad (3.10)$$

где коэффициенты  $a_1, a_2, a_3$ , являются параметрами настройки для учета неоднородности свойств ячеек.

6. Разработка алгоритма работы автомата. Моделирование процесса кристаллизации начинается от слоя, примыкающего к ФК, и продолжается послойно от слитка в расплав. Для расчета новых состояний одного слоя используется “зеркальный” массив. При расчете первого слоя считается, что расположенный над ним слой полностью затвердел, то есть, состояния ячеек верхнего (нулевого) слоя равны 1. Приведем шаги алгоритма:

Шаг 1. Инициализация автомата. Инициализация заключается в фиксации начальных значений индексов слоя  $k=1$  (координата  $z$ ), индекса угла  $i=1$  (угол  $\alpha$ ), индекса отсчета по радиусу  $j=1$ . Для ячейки с индексами  $i=1, j=1$  устанавливается текущее собственное среднестатистическое состояние  $S_{11}^c = 0.5$ . Начальные состояния для ячеек, примыкающих к ячейке [1.1], также устанавливаются равными 0.5.

Шаг 2. Расчет новых состояний для ячеек с фиксированным значением индекса  $i$  и  $j=1..m$ , где  $m$  – число ячеек вдоль радиуса слитка.

Шаг 3. Инкремент индекса  $i$ . Если  $i \neq n+1$ , где  $n$  – число дискретных значений угла  $\alpha$ , то переход к п.2. Иначе – переход к п.4.

Шаг 4. Для обработанного слоя вычисляется значение критерия перехода в твердую фазу для всех  $N$  ячеек:

$$Q_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_\alpha} \sum_{j=1}^{N_R} S_{ij} \quad (3.11)$$

Шаг 5. Если выполняется условие  $Q_k \geq Q_{\max}$ , то слой считается затвердевшим, ему присваивается индекс  $k=0$  и слой исключается из списка обрабатываемых. Происходит переход к п.1.

Шаг 6. Если выполняется условие  $Q_k \leq Q_{\min}$ , то полный цикл наращивания слоёв завершается (прекращается инкремент индекса  $k$ ) и также происходит переход к п.1.

Шаг 7. Конец.

Для сокращения объёма вычислений и с учетом того, что расчет температуры ведется в 2D-сетке, горизонтальная развертка сетки нечеткого автомата происходит в диапазоне  $\pm 5\alpha$  с последующим усреднением степени затвердевания.

7. Настройка автомата. Правильно настроенный нечеткий клеточный автомат должен воспроизводить рост кристалла таким образом, чтобы форма фронта кристаллизации сохранялась такой, какая она воспроизводится по численному расчету температурного поля. Для настройки автомата используется следующий метод.

7.1. Устанавливается физический размер ячейки. В экспериментах высота слоя составляла 0,5 мм; размер вдоль радиуса – 1 мм; угловой размер –  $3,6^\circ$ . Таким образом, каждый слой при 3D-моделировании может содержать до  $10^5$  ячеек при заданном диаметре слитка до 200 мм. Количество слоёв колебалось от 10 до 35.

7.2. Для обучения генерируется обучающая выборка. Примеры для выборки формируются следующим образом. Для каждого слоя задан радиус в мм. Значение радиуса отражает форму ФК, полученную по численному расчету и заданному значению переохлаждения  $\Delta T$ . По каждому слою случайным образом отбирается по 5 значений угловых координат  $\alpha$ . Для каждой угловой координаты автомат рассчитывает 50 значений состояний ячеек вдоль радиуса. Таким образом, в каждом примере автомат совершает 50 вычислений состояния и эффективный радиус  $R_{ki}$ , в пределах которого состояние отвердения  $S_{ki}^c \geq Q_{\max}$ .

3. Вектор настраиваемых параметров содержит три весовых коэффициента  $a_1, a_2, a_3$ , по числу входов автомата. Во время обучения значения коэффициентов варьируются в пределах  $0,1 \dots 1,0$ .

4. Критерием оптимальной настройки служит функция полной ошибки автомата на всех примерах обучающей выборки:

$$E = \frac{1}{N_o} \sum_{k=1}^{N_z^o} \sum_{i=1}^{N_R^o} (R_k^o - R_{ki})^2 \rightarrow \min, \quad (3.12)$$

где  $N_z^o$  – заданное число слоёв;  $N_R^o$  – заданное число примеров в слое;  $R_k^o$  – заданный радиус слоя;  $N_o$  – общее число примеров в обучающей выборке.

5. Для обучения используется адаптивный алгоритм случай-

ного поиска.

На первом этапе алгоритма создается популяция векторов весовых коэффициентов, содержащая 30 особей. Размер популяции выбирается небольшим, учитывая объём вычислений по каждому примеру.

На втором этапе каждая особь выполняет весь объём вычислений по обучающей выборке и вычисляется значение критерия (3.12). Далее особи ранжируются в порядке возрастания критерия.

На третьем этапе три лучших особи исследуются путем сужения диапазона случайных значений весовых коэффициентов в малой окрестности координат особи. Остальные особи заменяются новыми.

Алгоритм останавливается по достижении заданного количества итераций. На рис. 3.9 показаны результаты моделирования геометрии фронта кристаллизации при помощи нейронной сети и нечеткого автомата.

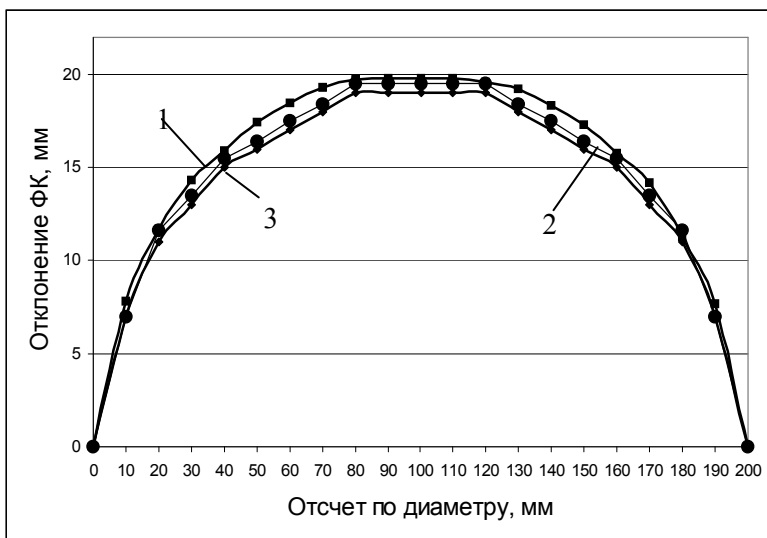


Рис. 3.9 – Сравнение геометрии фронта кристаллизации:  
1 – численный расчет по МКЭ; 2 – расчет по МКР;  
3 – нечеткий клеточный автомат.

Кривая 1 показывает геометрию ФК, полученную в работе

[152] при тех же граничных условиях. Кривая 2 показывает геометрию ФК, полученную по численному расчету методом конечных разностей. Кривая 3 показывает геометрию ФК, полученную в результате работы обученного нечеткого автомата. Видно, что форма ФК имеет аналогичную геометрию, несмотря на другой подход к моделированию. Систематическая погрешность, кривой 3 относительно кривой 2 легко устраняется выбором значения константы  $Q_{\max}$ .

Результаты моделирования говорят об адекватности нечеткого автомата как инструмента макро моделирования процесса роста монокристалла. При наличии указанного автомата расчет температурного поля выполняется итерационно, с коррекцией коэффициента теплопроводности в зависимости от состояния ячеек автомата.

Таким образом, предложен усовершенствованный метод моделирования процесса кристаллизации за счет применения нечёткого обучаемого клеточного автомата, что дает возможность упростить и ускорить процесс моделирования по сравнению с известными методами.

Впервые предложен метод настройки параметров нечёткого клеточного автомата, позволяющий достичь приемлемой адекватности в отображении динамики моделируемых процессов в различных зонах физической среды.

### **3.4. Модель расчета температуры фонового нагревателя**

Одним из важных параметров процесса выращивания по ЛЕС–технологии является температура фонового нагревателя (ФН), которая во многом определяет температурные градиенты в зоне кристаллизации. Кроме того, постоянный контроль температуры фонового нагревателя представляет отдельную проблему, связанную с необходимостью оптимизации значения его температуры на разных этапах процесса выращивания.

Прямое измерение температуры ФН сопряжено с техническими и технологическими трудностями, указанными в предыдущих разделах работы. В существующих серийных ростовых установках мастер-технолог вынужден оценивать температуру ФН, ориентируясь на значение потребляемой



мощности и свой опыт. Однако на температуру ФН помимо потребляемой мощности влияют и другие факторы, определяющие тепловые потоки вокруг ФН.

Поскольку условия теплоотдачи от ФН в окружающую среду в процессе выращивания меняются из-за изменения расположения деталей теплового узла, непосредственное вычисление температуры ФН по потребляемой мощности при помощи простой линейной аппроксимации не дает адекватного результата. Методика косвенного измерения температуры ФН и соответствующая математическая модель должны учитывать эти особенности. Наиболее подходящим методом построения адекватной математической модели косвенного измерения температуры ФН следует признать регрессионный метод.

Таким образом, для разработки адекватной математической модели косвенного измерения температуры фонового нагревателя и методики измерения необходимо решить следующие задачи:

1. Выделить факторы, по мнению экспертов влияющие на температуру ФН.
2. Сформировать стратегию и план эксперимента и провести все необходимые опыты.
3. Проверить результаты на воспроизводимость.
4. Определить коэффициенты регрессионного уравнения.
5. Оценить значимость коэффициентов.
6. Проверить адекватность модели.
7. Сформировать методику косвенных измерений температуры ФН.

Прежде всего, определим факторы, влияющие на изменение температуры ФН, и обсудим на качественном уровне влияние и взаимосвязь этих факторов. Эта предварительная работа заметно упрощает дальнейшие действия исследователя.

Главным фактором, несомненно, является потребляемая ФН электрическая мощность, значение которой вычисляется по известному напряжению питания и потребляемому постоянному току.

К другим рассматриваемым факторам относятся температура основного нагревателя (ОН), теплопроводность герметизатора, конвекция в расплаве и в среде над слоем герметизатора,

скорости вращения затравки и тигля, уровень расплава в тигле, скорость вытягивания затравки [153]<sup>1</sup>.

Считаем электрическую мощность ФН независимым фактором, так как потребляемый нагревателем ток и напряжение питания поддерживаются на заданном уровне вне зависимости от других рассматриваемых факторов.

Температура ОН косвенно влияет на температуру ФН, создавая основное тепловое поле. Чем выше температура ОН, тем выше (при прочих равных условиях) температура в зоне расположения ФН, меньше теплоотдача самого ФН и выше его температура. Считаем температуру ОН фактором, который не зависит других, перечисленных выше факторов.

Для расчета температуры ФН нужно также определить факторы, влияющие на теплоотдачу с поверхности герметизатора в окружающую среду. К этим факторам относятся:

- теплопроводность герметизатора (примем её постоянной, так как диапазон температур, в которых производится эксперимент, небольшой);
- теплообмен поверхности герметизатора с окружающей средой за счет излучения;
- конвективный теплообмен поверхности герметизатора с окружающей средой.

Тепловой поток с единицы поверхности герметизатора можно представить в виде трех слагаемых:

$$q_{ngi} = \sigma \varepsilon_i T_i^4 + p_i H_i + \alpha (T_i - T_{cp}) \quad (3.13)$$

где  $\sigma$  – постоянная Больцмана,  $\varepsilon_i$  – коэффициент излучения с единичной  $i$ -й поверхности герметизатора,  $T_i$  – температура единичной  $i$ -й поверхности герметизатора,  $p_i$  – отражательная способность единичной поверхности,  $H_i$  – внешний теплоток на единичную поверхность от поверхностей теплового узла и слитка,  $\alpha$  – коэффициент конвективной теплоотдачи,  $T_{cp}$  – температура среды над герметизатором.

---

<sup>1</sup> В разработке модели принимала участие аспирант Краснопольская Ю.А.

Рассмотрим на качественном уровне изменения составляющих этого теплового потока в течение процесса выращивания. Измерения показали, что распределение температуры по высоте стенки тигля практически линейно и её максимум наблюдается в области верхней рабочей области, примыкающей к поверхности расплава в начале процесса выращивания. Перегрев по сравнению с температурой кристаллизации составляет  $\approx 45^\circ\text{C}$ . Для сохранения неизменными тепловых условий на уровне фронта кристаллизации в течении всего процесса вытягивания тигель, по мере опускания уровня расплава, перемещается вверх. Фоновый нагреватель при этом перемещается вглубь тигля, чтобы расстояние между его нижней кромкой и уровнем расплава оставалось неизменным. Однако при этом изменяются условия лучистого теплообмена поверхности герметизатора со стенкой тигля, так как площади слитка и внутренней поверхности тигля, участвующие в теплообмене излучением, увеличиваются. Это приводит к изменению второго слагаемого в выражении (3.18), то есть, к изменению условий теплоотдачи с поверхности герметизатора.

По мере заглубления ФН и герметизатора в тигель величина  $T_{\text{ср}}$  растёт. Таким образом, конвективный тепловой поток уменьшается, что служит еще одним подтверждением того, что фактор “уровень расплава” является качественно значимым и его влияние следует оценить количественно.

Рассмотрим тепловой эффект, возникающий при увеличении скорости подъема затравки. Увеличение этой скорости приводит к мгновенному возрастанию объемной скорости кристаллизации. Выделяющаяся на фронте кристаллизации скрытая теплота плавления не будет успевать “уходить теплопроводностью” через кристалл. Поэтому она в основном будет рассеиваться в примыкающем столбике расплава, температура в нем повысится, а это повлечет за собой уменьшение теплоотдачи ФН и повышение его температуры.

Вращение затравки и тигля создаёт вынужденную конвекцию в слое герметизатора и дополнительный отток тепла от ФН. Поскольку ФН имеет кольцевую форму, то заметный отток теплоты могут создать только радиальные токи в слое герметизатора. Если учесть, что толщина этого слоя составляет не более 20 мм, а

плотность герметизатора мала по сравнению с плотностью расплава, то становится ясно, что радиальные токи незначительны. Тем не менее, влияние скорости вращения затравки и тигля с нашей точки зрения было необходимо исследовать, чтобы априори не ухудшить адекватности модели. Естественная конвекция в слое герметизатора мала из-за его малой глубины и ею можно пренебречь. Следует также учесть, что коэффициент теплопроводности герметизатора (0,02 Вт/смК) в семь раз ниже теплопроводности расплава GaAs (0,14 Вт/смК), что уменьшает кондуктивную тепловую связь между ФН и примыкающим к герметизатору слоем расплава.

Таким образом, можно составить перечень варьируемых факторов, которые следует учесть в модели вычисления температуры ФН:  $X1$  – потребляемая мощность ФН;  $X2$  – температура ОН;  $X3$  – скорость вытягивания;  $X4$  – скорость вращения затравки;  $X5$  – скорость вращения тигля;  $X6$  – уровень расплава.

Статистический анализ исходной модели показал, что переменными  $X4$  и  $X5$  можно пренебречь, так как  $P$ -значение ( $P$ -value – граничный уровень значимости) для  $X4$  и  $X5$  больше или равно 0,10 (0,4634 и 0,5273 соответственно). Другими словами, эти факторы не являются статистически значимыми на 90% или более доверительном уровне и их влияние не является закономерным.

Дальнейшие исследования велись с переменными  $X1$ ,  $X2$ ,  $X3$ ,  $X6$ . Регрессионный анализ выявил структуру линейной модели следующего вида (значения коэффициентов модели округлены):  
$$Y = 765,14 + 0,1436 * X1 + 0,0512 * X2 + 48,913 * X3 - 0,0799 * X6 \quad (3.14)$$

Подробное описание экспериментов по построению регрессионной модели и проверки её адекватности приведены в разделе 5.

Алгоритм расчета температуры ФН состоит из следующих шагов:

ШАГ 1. Фиксация значений следующих параметров:

– температура основного нагревателя, °С;

– скорость вытягивания, мм/мин;

– уровень расплава, вычисляемый в реальном времени по формуле:

$$h_p = \left( \frac{m_3 - m_c}{\rho_p \pi R_m^2} + h_c \right) \cdot 100\% , \quad (3.15)$$

где  $m_3$  – масса загрузки;  $m_c$  – измеренная в реальном времени масса выращенного на данный момент слитка;  $\rho_p$  – плотность расплава;  $R_m$  – радиус тигля;  $h_c$  – высота слоя герметизатора.

– потребляемая мощность ФН, кВт.

ШАГ 2. Расчет температуры ФН по формуле (3.19)

где  $x_1$  – потребляемая мощность ФН;  $x_2$  – температура ОН;  $x_3$  – скорость вытягивания;  $x_4$  – уровень расплава.

ШАГ 3. Фиксация расчетного значения температуры ФН в качестве данных косвенного измерения в системе мониторинга.

ШАГ 4. Конец.

Контроль температуры фонового нагревателя позволяет ввести дополнительный контур автоматического регулирования в автоматизированную систему управления процессом выращивания монокристаллов GaAs по ЛЕС-технологии.

Разработанная модель является составной частью подсистемы мониторинга процесса выращивания монокристаллов.

### **3.5. Информационная технология мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов**

Состав информационной технологии определен исходя из требований мониторинга одного из наиболее сложных процессов выращивания, а именно выращивания монокристаллов арсенида галлия из под слоя герметизатора. Разработанная информационная технология мониторинга температурного поля в процессе выращивания монокристаллов арсенида галлия включает в себя:

1. Комплекс математических моделей и методов, в том числе:
  - модель аппроксимации закона распределения температуры на стенке тигля (M1);
  - модель аппроксимации закона распределения температуры на поверхности герметизатора (M2);
  - нейросетевая модель, вычисляющая температуру в слитке (M3);

- нейросетевая модель, вычисляющая температуру в расплаве (М4);
- модель процесса кристаллизации (М5);
- модель расчета температуры фонового нагревателя (М6);
- метод расчета температурного поля расплава (МРТП);
- метод моделирования процесса кристаллизации (ММПК).

2. Комплекс технических и программных средств, в том числе:

- датчики температуры, датчики скоростей вращения и вытягивания;
- датчик массы выращенного слитка;
- периферийные устройства для ввода неизменных для данного процесса значений параметров;
  - ЭВМ, осуществляющая обработку данных, получаемых от системы физических датчиков в соответствии с разработанными моделями и алгоритмами, а также вывод и хранение данных (результатов мониторинга) для использования их в информационно-аналитической системе управления качеством процесса выращивания монокристаллов.

*Структура данных.* Ниже представлен перечень исходных, первичных, вторичных, промежуточных и конечных данных, необходимых для обеспечения функционирования подсистемы виртуального мониторинга температурных полей, а также данных, интерпретируемых как знания.

1. Исходные данные: масса загрузки, кг; масса герметизатора, кг; масса заправки, кг; заданный диаметр слитка, см; радиус заправки, см; длина заправки, см; скорость вращения заправки, об/мин; скорость вращения тигля, об/мин; диаметр тигля, см; высота тигля, см; внутренний диаметр экрана, см; высота экрана, см; высота слоя герметизатора, см; плотность GaAs (кристалл), г/см<sup>3</sup>; плотность GaAs, (расплав) г/см<sup>3</sup>; плотность В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>, г/см<sup>3</sup>; теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК; теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК; теплопроводность В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>, Вт/смК; излучательная способность, GaAs (кристалл); излучательная способность В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>; температура плавления GaAs, °С; кристаллографическое направление плоскости роста монокристалла.

2. Первичные данные: температура основного нагревателя, °С; мощность фонового нагревателя, Вт; скорость перемещения штока затравки, мм/мин; скорость перемещения штока тигля, мм/мин; температура расплава под слоем герметизатора, °С; текущая масса слитка, кг; мощность теплового экрана (при наличии активного экрана), Вт.

3. Вторичные данные: температура фонового нагревателя, °С; уровень расплава в тигле, %; массив значений температуры на поверхности герметизатора, °С; массив значений температуры на поверхности тигля, °С; текущий диаметр слитка, см; текущая длина слитка, см.

4. Промежуточные данные: теплопроводность GaAs в зоне ФК, Вт/смК; степень затвердевания дискретных областей в зоне фронта кристаллизации (ячеек клеточного автомата); температура в заданных точках расплава, °С; температура в заданных точках кристалла, °С; эффективный коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка; номер стадии процесса выращивания.

5. Конечные данные: массив распределения температур в расплаве, °С; массив распределения температур в кристалле, °С; форма фронта кристаллизации (график); температурные градиенты в зоне фронта кристаллизации; температурные градиенты в слитке.

6. Данные для базы знаний: массивы весовых коэффициентов нейронной сети, вычисляющей температуру в расплаве; массивы весовых коэффициентов нейронной сети, вычисляющей температуру в слитке; таблица правил переключения структуры нейронной сети, вычисляющей температуру в расплаве; таблица правил переключения структуры нейронной сети, вычисляющей температуру в слитке; таблица правил для определения нарушения оптимальных условий выращивания.

Мониторинг температурных полей при помощи набора моделей, входящих в состав подсистемы мониторинга, производится по следующему алгоритму:

ШАГ 1. Настройка подсистемы виртуального мониторинга при проведении типового процесса выращивания. При этом база данных подсистемы обновляется скорректированными значениями параметров моделей.

ШАГ 2. Запуск основного цикла мониторинга с отсчетом дискретного времени с заданным интервалом  $\Delta t$ .

На каждом временном интервале циклически выполняются:

ШАГ 2.1. Фиксация значений прямо измеряемых и вычисляемых величин (температуры основного и мощности фонового нагревателей, температуры теплового экрана, температуры в точке под поверхностью расплава, скорости вращения тигля и затравки, массы выращенного слитка, диаметра слитка, уровня расплава).

ШАГ 2.2. Расчет температуры фонового нагревателя (M6).

ШАГ 2.3. Расчет граничных условий для численных расчетов температуры на основании прямо измеряемых величин (M1, M2).

ШАГ 2.4. Нейросетевой расчет значений температуры расплава в заданных точках с учетом влияния конвекции в расплаве, скорости вращения тигля и других параметров (M4, МРТП).

ШАГ 2.5. Моделирование процесса кристаллизации. Коррекция коэффициентов теплопроводности расплава в зоне фронта кристаллизации с учётом наличия двухфазной зоны (M5, ММПК).

ШАГ 2.6. Нейросетевой расчёт температуры в заданных точках слитка (M3) с учетом граничных условий, в качестве которых выступают уравнения тепловых потоков излучения с поверхностей слитка, тигля, экрана и герметизатора. При этом учитываются результаты расчетов шагов 2.2–2.5.

ШАГ 2.7. Сохранение измеренных и рассчитанных параметров в базе данных.

ШАГ 2.8. Формирование и вывод результатов мониторинга в табличном формате.

ШАГ 2.9. Фиксация времени протекания процесса, текущей длины и диаметра слитка, уровня расплава и при необходимости перестройка структуры нейросетевых моделей.

ШАГ 2.10. Конец тела основного цикла.

ШАГ 3. Пополнение базы данных подсистемы ППОР сведениями о срывах оптимальных условий выращивания для последующего анализа.

ШАГ 4. Конец.

На рис. 3.10 приведена общая схема информационной технологии мониторинга температурного поля системы кристалл-расплав в процессе производства монокристаллов арсенида



галлия. Рассмотрим процессы сбора, обработки и передачи информации, показанные на рис. 3.10.

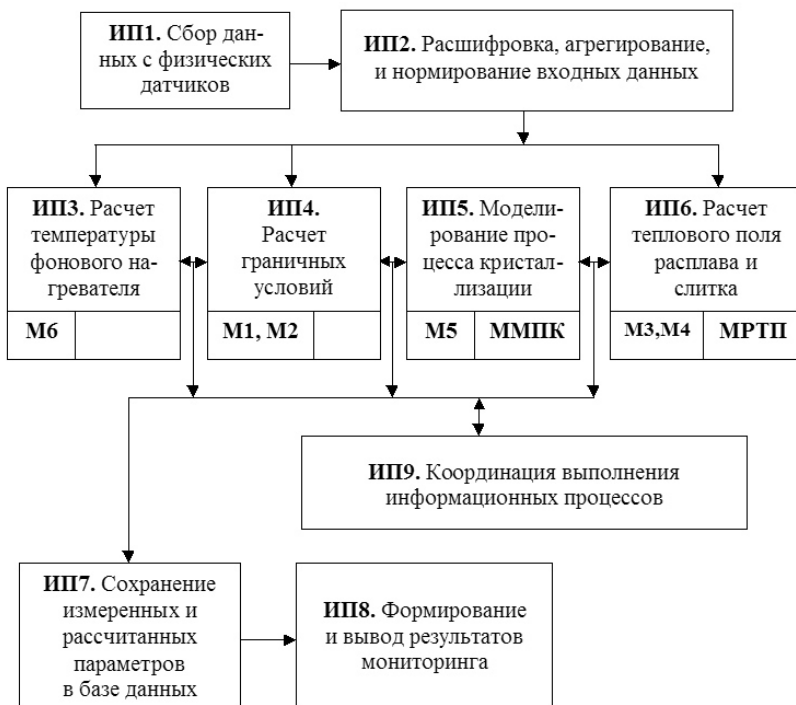


Рис. 3.10 – Общая схема информационной технологии мониторинга температурных полей

**ИП1.** Сбор данных с физических датчиков. Данный информационный процесс осуществляется программно-аппаратным комплексом существующей АСУ ТП ростовой установки. С физических датчиков и преобразователей, а также с пульта управления поступают значения исходных данных и измеренных значений параметров процесса, таких как скорость вращения тигля, скорость вращения затравки, скорость подъема затравки, масса загрузки, масса выращенной части слитка, температура расплава в контрольной точке, температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем.

**ИП2.** Полученные от программ-драйверов числовые значения в соответствующих форматах передаются в оперативную память ЭВМ и сохраняются в отдельных массивах базы данных с соответствующим значением дискретного времени  $t_i$ .

**ИП3.** Обработка исходных данных для получения температуры фонового нагревателя. Вычислительная процедура, основанная на математической модели М6, осуществляет следующие операции:

3.1 Прием данных о температуре основного нагревателя, °С (измеряется в реальном времени прямым методом);

3.2 Прием данных о скорости вытягивания (значение задается оператором);

3.3 Прием данных для расчета уровня расплава (масса загрузки; измеренная масса выращенного на данный момент слитка; плотность расплава; радиус тигля; высота слоя герметизатора) и вычисление уровня расплава.

3.4 Прием данных о потребляемой мощности ФН, Вт.

3.5 Расчет текущего значения температуры ФН по модели М6.

**ИП4.** Обработка исходных данных для определения граничных условий. Процедура расчета граничных условий осуществляет следующие действия:

4.1 Прием данных о температуре ФН от процесса ИП3.

4.2 Прием данных о температуре расплава от термопары, погруженной в расплав.

4.3 Прием данных о температуре основного нагревателя от термопары.

4.4 Вычисление распределения температуры на стенке тигля (М2), на поверхности герметизатора (М2) и экрана (табличная аппроксимация). Коэффициенты моделей и табличные значения распределения температур корректируются для каждой ростовой установки и хранятся в базе данных подсистемы мониторинга.

**ИП5.** Определение степени затвердевания расплава в подкристалльной области путем моделирования процесса кристаллизации. Процесс выполняется в период наладочных работ.

5.1. При опускании затравки поверхность раздела фаз считается гладкой, соответствующей геометрическим размерам затравки. При этом ячейки клеточного автомата имеют значения

степени затвердевания равные нулю для жидкой фазы и единице – для твёрдой.

5.2. После вычисления значений температуры на всей расчётной сетке, пересчитываются значения степеней затвердевания ячеек клеточного автомата. Пересчёт значений осуществляется исходя из предыдущего состояния ячейки, значений переохлаждения в её окрестности и интегральной оценки состояния соседних ячеек. Ячейки клеточного автомата пространственно совпадают с сеткой расчёта температурного поля, однако имеют больший размер. Температура ячейки определяется как среднее арифметическое температур соответствующих точек расчётной сетки.

5.3. После пересчёта значений степеней затвердевания ячеек производится пересчёт значений коэффициента теплопроводности арсенида галлия в зоне фронта кристаллизации. Значения коэффициента теплопроводности получают исходя из выражения:

$$\mu_i = \mu \cdot \lambda_{ТВ} + (1 - \mu) \cdot \lambda_{Ж},$$

где  $\mu$  – степень затвердевания ячейки нечёткого клеточного автомата;  $\lambda_{ТВ}$  и  $\lambda_{Ж}$  – известные значения коэффициентов теплопроводности твёрдой и жидкой фазы. Пересчёт значений степени затвердевания производится, начиная с верхнего твёрдого слоя, вниз, к расплаву.

5.4. Производится пересчёт температурного поля расплава методом конечных разностей с применением полученных на предыдущей итерации значений коэффициентов теплопроводности ячеек в подкристалльной области.

5.5. Вычисляется разность значений температур, полученных по МКР, на предыдущей и текущей итерациях:

$$\Delta T_i^t = T_i^t - T_i^{t-1}.$$

При незначительном абсолютном значении максимальной разности температур  $|\Delta T_i^t| \leq \varepsilon$  процесс пересчёта заканчивается, в противном случае продолжается до тех пор, пока значения температур от итерации к итерации не перестанут существенно изменяться.

Полученные значения температур используются в качестве “нижних” граничных условий при расчёте температурного поля слитка с помощью нейросетевой модели, позволяющей определить значения температур на поверхности и оси симметрии слитка в контрольных точках.

**ИП6.** Данный информационный процесс является иерархическим. Он содержит два вспомогательных процесса **ИП6.1**, **ИП6.2**. Вначале выполняются процессы нижнего уровня – **ИП6.1** и **ИП6.2**. Используется метод расчета температурного поля расплава, описанный в п.п. 3.1 (**МРТП**).

**ИП6.1** Расчет значений температуры расплава в заданных точках с учетом влияния конвекции в расплаве. Эту задачу решает специальная нейронная сеть (модель М4). Рассмотрим данную процедуру подробнее.

Структура элементарного блока нейросетевой модели, предназначенной для определения температурного поля расплава и её пространственная конфигурация описаны в работе [137]. Пространственное расположение элементарных ячеек нейронной сети совпадает с узлами расчётной сетки МКР, но их количество ограничено. Вычисление температуры с помощью нейросетевой модели производится в направлении от поверхности расплава по направлению ко дну тигля. В радиальном направлении расчёт в верхнем слое сети производится от контрольной точки (точки под поверхностью расплава, температура в которой измеряется при помощи термопары в течении всего процесса выращивания) к оси симметрии системы; в последующих слоях – от боковой поверхности тигля по направлению к оси симметрии системы. Таким образом, расчёт начинается с нахождения температуры в точке у поверхности расплава, соответствующей верхнему слою модели, и заканчивается нахождением температуры на оси симметрии системы в точке, соответствующей нижнему слою модели. В предположении осесимметричности системы значения температуры определяется только для радиуса, вторая же половина отображается на мониторе лишь для удобства восприятия оператором, и строится зеркальным отображением относительно оси симметрии системы.

Блоки нейронной сети, находящиеся вблизи кварцевого контейнера с термопарой получают в качестве входных данных

измеренную ею температуру.

Так как в течение процесса выращивания уровень расплава в тигле постепенно уменьшается, возникает необходимость в последовательном отключении верхних слоёв модели. Отключение происходит при прохождении слоем сети границы раздела расплав-герметизатор. Отключение осуществляется заменой передаточной функции выходных нейронов нулевым значением. Нулевое значение выхода нейрона служит для других процедур сигналом игнорирования.

Поскольку температура расплава в контрольной точке подаётся на вход блоков только верхнего слоя сети, то при отключении верхнего слоя в соответствующих блоках следующего слоя, находящегося под отключенным, этот вход автоматически активизируется. Активизация входа происходит путём замены нулевой передаточной функции соответствующего нейрона на линейную функцию.

**ИП6.2.** Расчёт температуры в заданных точках слитка при помощи нейронной сети (МЗ) [139]. Данная модель используется для расчета температурного поля в слитке на различных стадиях процесса выращивания. Для этого в базе данных подсистемы хранятся массивы весовых коэффициентов для различных стадий процесса выращивания.

Для определения температуры в опорных точках слитка с помощью нейросетевой модели, необходимо задать граничные условия на поверхностях теплового узла, участвующих в лучевом теплообмене с поверхностью кристалла. К ним относятся поверхности экрана, тигля и герметизатора.

На вход нейронной сети подаются распределения температур экрана, зеркала герметизатора, боковой поверхности тигля, температура на фронте кристаллизации, рассчитанная на предыдущей итерации или заданная оператором, а также радиус слитка и значения дискретного отсчета осевой координаты  $z$ . Коэффициент теплоотдачи от поверхности слитка считается постоянным на протяжении всего режима выращивания. Входные значения подаются на скрытый слой нейронной сети с сигмоидальной передаточной функцией. В результате послойных вычислений получаем распределение температур на поверхности и оси симметрии слитка.

Значения температуры на оси слитка, полученные с помощью нейронной сети, рассматриваются как точки с известной температурой при расчёте температуры в остальных точках сетки (информационный процесс ИП6).

**ИП6.** Вычисление параметров температурного поля расплава и слитка методом конечных разностей с использованием значений температуры в контрольных точках от процесса ИП6.2 и сохранение результатов в памяти компьютера при достижении установившихся значений на временной сетке. Вычисление значений температуры проводится в направлении от дна тигля к поверхности герметизатора. Граничные условия для области, примыкающей к тиглю и для поверхности герметизатора, представляют собой граничные условия первого рода.

Поверочный расчёт при отладке системы мониторинга производится по так называемой неявной схеме методом переменных направлений. Регулярный расчет производится путем линейной аппроксимации промежуточных значений по значениям в “контрольных точках” – выходах НС. Это позволяет значительно сократить объем вычислений и получить разумные результаты при счете на грубых сетках и с большим шагом по времени.

Замыкает решение тепловой задачи расчет тепловых потоков излучения и конвекции между поверхностями слитка, экрана, тигля и герметизатора, выполняемый по выражениям, полученным в работах [154–157].

Таким образом, информационные процессы ИП4, ИП5, ИП6 позволяют получить результаты расчета температурных полей расплава и слитка с достаточной степенью достоверности, не прибегая при этом к значительным вычислительным затратам.

**ИП7.** Сохранение измеренных и рассчитанных параметров в базе данных. Данный процесс реализуется стандартными средствами языка программирования.

**ИП8.** Формирование и вывод результатов мониторинга в табличном формате. Данный процесс также реализуется стандартными средствами языка программирования.

**ИП9.** Координация выполнения информационных процессов. Для координации выполнения описанных выше информационных процессов используется программа-монитор, которая реализует описанный выше алгоритм мониторинга.

В процессе функционирования системы мониторинга по мере выращивания слитка и уменьшения уровня расплава в тигле необходимо изменять структуру нейронных сетей, вычисляющих температуру в заданных точках расплава и слитка. Переключение структуры нейронных сетей производится по таблице истинности, содержащей булевы правила. Эти правила задаются разработчиком и не изменяются в процессе работы системы на данной ростовой установке и данном типоразмере монокристаллов.

Результаты мониторинга (признаки критических и нештатных ситуаций) поступают на вход подсистемы “Советчик” – специализированной СППР, которая интерпретирует полученные данные в форме сообщений о текущем состоянии процесса выращивания. Помимо данных о тепловых условиях СППР получает информацию и о других параметрах процесса – стадия выращивания, уровень расплава в тигле, длина выращенной части слитка и др. В СППР используется нечеткая модель логического вывода [180–187]. В базе знаний СППР хранятся правила, учитывающие весь набор переменных состояния процесса. Нечеткий логический вывод позволяет выдать сообщение о текущем состоянии процесса и рекомендацию по выходу из критической или нештатной ситуации.

Если оператор обнаруживает нетипичную критическую (или нештатную) ситуацию, происходит дообучение системы. Дообучение осуществляется следующим образом.

В течение всего процесса выращивания данные обо всех измеряемых и контролируемых параметрах процесса сохраняются в отдельной области памяти. После окончания процесса выращивания вся информация о ходе протекания процесса архивируется. По мере поступления данных о качестве выращенного слитка архив снабжается дополнительным файлом, в котором сохраняется оценка результатов выращивания.

По мере накопления архивной информации (по прошествии 20...40 процессов выращивания) оператор даёт команду для обработки накопленных данных. При этом пополняется и корректируется база знаний о благоприятном и неблагоприятном протекании процесса. Выделяются векторы значений параметров техпроцесса, предшествовавшие возникновению нештатных ситуаций (срыву нормального роста), что позволяет заранее пре-

дупредить оператора о возможности возникновения нежелательной ситуации.

После внедрения системы мониторинга и накопления данных были предложены мероприятия по усовершенствованию технологического процесса выращивания слитков ПИН GaAs, направленные на уменьшение температурных напряжений в слитках. В частности, предложен оптимальный тепловой режим для фонового нагревателя, погруженного в жидкий герметизатор при выращивании слитков ПИН GaAs. Проведенные исследования показали эффективность предложенных мероприятий, а именно – снижение средней плотности дислокаций в партиях слитков до значений  $(2,3...2,66) \cdot 10^{-4} \text{ см}^2$ .



## РАЗДЕЛ 4

### МЕТОДЫ, МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ ЗА СЧЕТ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТЕПЛОВЫХ ЭКРАНОВ РОСТОВОЙ УСТАНОВКИ

Одной из проблем, возникающих при обеспечении надлежащего качества монокристаллов, является оптимизация тепловых условий остывания выращенной части слитка в процессе выращивания. Это связано с тем, что при остывании слитка могут возникнуть термические напряжения, обусловленные большими и/или неравномерными градиентами температуры в слитке. Термические напряжения, возникающие в процессе охлаждения слитка, частично снимаются при появлении дислокаций. В свою очередь дислокации вызывают напряжения в выращенном кристалле после его охлаждения. Термические напряжения можно уменьшить подбором параметров теплового узла и условий выращивания, обеспечивающих уменьшение градиентов температуры в слитке в процессе выращивания и охлаждения. Исследования показывают, что особенности экранировки существенно влияют на характер роста (дислокационный, малодислокационный или бездислокационный) и структуру выращиваемого кристалла [117].

Поскольку физические эксперименты на серийных ростовых установках затруднены, а разработка и изготовление экспериментальной установки требует проведения предварительных исследований, актуальной является разработка методов, моделей и информационной технологии оптимизации параметров тепловых экранов, окружающих выращенную часть слитка. Это должно ускорить процесс технологической подготовки производства монокристаллов произвольного диаметра, а, главное – обеспечить оптимальные тепловые условия остывания слитка в процессе выращивания.

Для решения поставленной задачи необходимо, прежде всего, построить математическую модель, которая аналитически связывает геометрические параметры теплового узла с уравнениями тепловых потоков излучения, циркулирующих между

слитком и элементами теплового узла. Такой подход позволяет приблизиться к решению важной задачи – созданию механизма быстрой адаптации ростовой установки к выращиванию монокристаллов GaAs заданного размера с уровнем плотности дислокаций  $<10^{-4}$  см<sup>-2</sup>.

#### **4.1. Математическая модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения**

Для автоматизированного расчета оптимальных параметров теплового узла необходимо установить закономерностей влияния геометрии теплового экрана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в слитке. Для установления таких закономерностей требуется найти аналитические зависимости между геометрическими параметрами тепловых экранов и параметрами тепловых потоков в тепловом узле.

Искомая математическая модель должна связывать координаты относительного взаимного расположения поверхностей слитка, экрана, тигля и флюса (герметизатора) с угловыми коэффициентами, определяющими потоки теплового излучения и отражения от слитка и других упомянутых элементов теплового узла.

Из теории теплопередачи известно, что элементарный угловой коэффициент, определяющий долю теплового потока от элементарной площадки  $dF_1$  к элементарной площадке  $dF_2$  равен [126]:

$$\varphi_{dF_1-dF_2} = \frac{\cos\psi_1 \cos\psi_2}{\pi r^2} dF_2, \quad (4.1)$$

где  $\psi_1, \psi_2$  – углы между нормальными к элементарным площадкам  $dF_1$  и  $dF_2$  и линией, соединяющей центры площадок,  $r$  – расстояние между центрами площадок.

На основании (4.1), переходя к конечным величинам, запишем локальный угловой коэффициент, определяющий долю теплового потока, идущего от элементарной площадки  $\Delta F_1$  к поверхности с площадью  $F_2$ :

$$\varphi_{\Delta F_1 - F_2} = \sum_{j=1}^{L_2} \frac{\cos \psi_1 \cos \psi_j}{\pi r^2} \Delta F_j, \quad j=\overline{1, L}, \quad (4.2)$$

где  $L_2$  - число элементарных площадок на поверхности  $F_2$ .

Для рассматриваемого случая теплового взаимодействия цилиндрического слитка и цилиндрического экрана имеем элементарную цилиндрическую площадку на поверхности слитка и элементарную цилиндрическую площадку на внутренней поверхности экрана. Примем высоту данных элементарных площадок одинаковой и обозначим её –  $h$ .

Выразим величину локального углового коэффициента между элементарной площадкой слитка и экраном, опираясь на геометрические соображения. На рис. 4.1 схематически показан разрез фрагмента теплового узла, включающего слиток и экран. Радиус экрана в данном варианте модели есть постоянная величина.

Осевая координата  $i$ -той элементарной площадки слитка обозначена  $z_{ci}$ . Нулевым уровнем координаты  $z_c$  является поверхность расплава или герметизатора (флюса). Осевая координата  $j$ -той элементарной площадки экрана обозначена  $z_{эj}$ . Нулевым уровнем этой координаты является нижняя кромка экрана, приподнятая над флюсом на высоту  $H_э$ . Таким образом, в системе отсчета, привязанной к слитку, можно учесть вместе с координатой  $z_{эj}$  высоту расположения экрана  $H_э$ .

Анализируя рис. 4.1, можно отметить, что  $\psi_i = \psi_j$ , откуда  $\cos \psi_i = \cos \psi_j$ , а кратчайшее расстояние между поверхностью слитка и поверхностью экрана  $R = r_э - r_c$ .

Следовательно, длина луча, соединяющего элементарные площадки слитка и экрана, может быть рассчитана, как

$$s_{ij} = \sqrt{(r_э - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}. \quad (4.3)$$

Тогда косинусы углов падения-отражения луча можно выразить через величины  $r_c, r_э, H_э$ :

$$\cos \psi_i = \cos \psi_j = \frac{r_э - r_c}{\sqrt{(r_э - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}}. \quad (4.4)$$

Отсюда

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = \frac{\Delta F_j}{\pi} \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[ (r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.5)$$

Учитывая, что площадь элементарной поверхности экрана равна  $\Delta F_3 = 2\pi r_3 h$ , запишем:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = 2r_3 h \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[ (r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.6)$$

Используя аналогичные рассуждения, запишем выражение для локального углового коэффициента между элементарной площадкой экрана и поверхностью слитка:

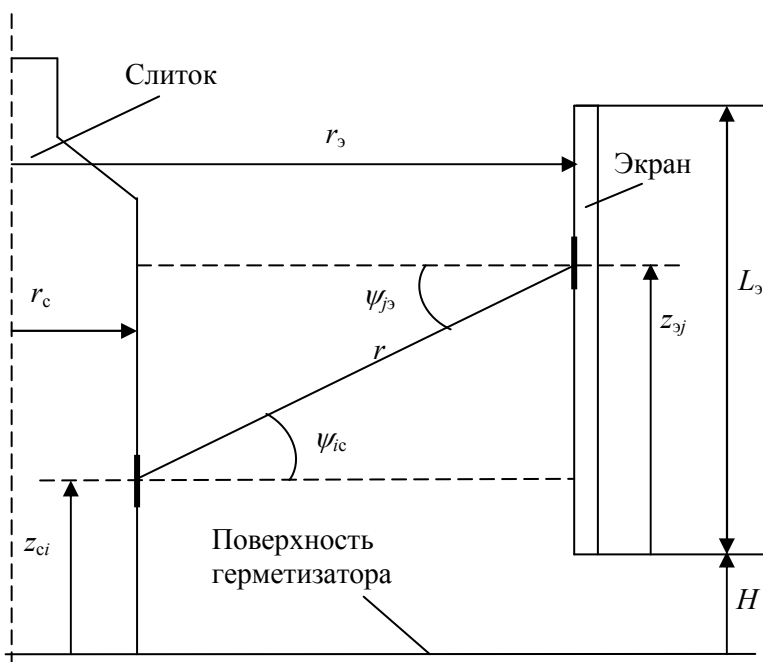


Рис. 4.1 – Геометрические параметры поверхностей:  $z_{ci}$  - дискретная осевая координата слитка;  $z_{3j}$  - дискретная осевая координата экрана;  $H_3$  - высота расположения экрана над расплавом в дискретных единицах;  $L_3$  - длина экрана в дискретных единицах.

$$\varphi_{\Delta F_j - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_s - r_c)^2}{\left[ (r_s - r_c)^2 + (z_{sj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad i = \overline{1, L_c}, \quad (4.7)$$

где  $L_c$  – количество элементарных площадок на поверхности слитка.

Для пары поверхностей “слиток-тигель” можно записать аналогичные выражения:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_T} = 2r_T h \sum_{j=1}^{L_T} \frac{(r_T - r_c)^2}{\left[ (r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.8)$$

$$j = \overline{1, L_T},$$

$$\varphi_{\Delta F_{jT} - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_T - r_c)^2}{\left[ (r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.9)$$

$$i = \overline{1, L_c}.$$

где  $r_T$  – радиус тигля,  $L_T$  – количество элементарных площадок на поверхности тигля.

Однако, здесь необходимо учесть тот факт, что экран в нижних положениях частично затеняет излучение тигля и при вычислении угловых коэффициентов следует проверять условия:

1) Угол падения луча из точки  $z_{jT}$  должен быть меньше, чем угол падения луча из точки  $z_{j_s} = H_s$ , если  $z_{jT} > H_s$ .

2) Угол падения луча из точки  $z_{jT}$  должен быть больше, чем угол падения луча из точки  $z_{j_s} = H_s$ , если  $z_{jT} < H_s$ .

Обозначив предикат условия прохождения луча от точки на поверхности тигля к точке на поверхности слитка  $P_{tc}$ , запишем условия 1) и 2) в виде:

$$P_{\text{тс}} = \left( \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + z_{j\Gamma}^2}} < \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + H_3^2}} \right) \cap \quad (4.10)$$

$$\cap (z_{j\Gamma} > H_3) \cup$$

$$\cup \left( \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + z_{j\Gamma}^2}} > \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + H_3^2}} \right) \cap$$

$$\cap (z_{j\Gamma} < H_3) .$$

Рассмотрим пару поверхностей “слиток-герметизатор”. Рис. 4.2 поясняет связь между углами  $\psi_{ic}$ ,  $\psi_{j\phi}$  и координатами рабочих точек на поверхностях.

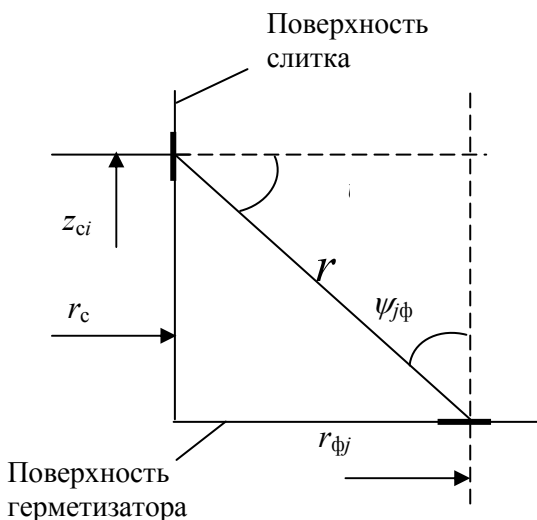


Рис. 4.2 – Геометрические параметры пары поверхностей “слиток–герметизатор”.

Выражения для косинусов данных углов имеют следующий вид:

$$\text{Cos } \psi_{ci} = \frac{r_{\phi j} - r_c}{\sqrt{(r_{\phi j} - r_c)^2 + z_{ci}^2}} \quad (4.11)$$

$$\text{Cos } \psi_{\phi j} = \frac{z_i}{\sqrt{(r_{\phi j} - r_c)^2 + z_{ci}^2}} \quad (4.12)$$

Тогда выражения для локальных угловых коэффициентов можно записать следующим образом:

От элементарной поверхности слитка к поверхности герметизатора:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_{\phi}} = 2d \sum_{j=1}^{L_{\phi}} \frac{\Delta F_{\phi j} z_i (r_{\phi j} - r_c)}{z_i^2 + (r_{\phi j} - r_c)^2}, \quad j = \overline{1, L_{\phi}}, \quad (4.13)$$

От элементарной поверхности герметизатора к поверхности слитка:

$$\varphi_{\Delta F_{\phi} - F_c} = 2r_c h \sum_{j=1}^{L_{\phi}} \frac{z_{ci} (r_{\phi j} - r_c)}{z_{ci}^2 + (r_{\phi j} - r_c)^2}, \quad j = \overline{1, L_c}, \quad (4.14)$$

где  $\Delta F_{\phi j} = 2\pi r_{\phi j} d$  – площадь элементарной кольцевой площадки на поверхности флюса,  $d$  – принятая ширина площадки.

Здесь также необходимо учесть частичное затенение излучения флюса экраном и при вычислении угловых коэффициентов следует проверять условие: угол падения луча из точки  $z_{\phi j}$  должен быть больше, чем угол падения луча из точки  $z_3 = H_3$ , то есть

$$P_{\phi c} = \text{arctg} \frac{z_{ic}}{r_{\phi j} - r_c} > \text{arctg} \frac{z_{ic} - H_3}{r_3 - r_c}, \quad (4.15)$$

где  $P_{\phi c}$  – предикат условия прохождения луча от точки на поверхности флюса к точке на поверхности слитка.

Отметим, что непрерывные координаты  $z_c, z_3, z_T, r_c, r_3, r_T$  связаны с соответствующими дискретными индексированными координатами соотношением  $z_{ij} = k_j z_j$ , где  $j$  – номер конструктивного элемента теплового узла,  $k_j$  – шаг дискретизации на данной поверхности.

Для экрана с переменным радиусом математическая модель

связи между геометрическими параметрами экрана и тепловыми потоками будет иметь иной вид.

На рис. 4.3 схематически показан разрез фрагмента теплового узла, включающего слиток и экран с дискретно изменяющимся радиусом.

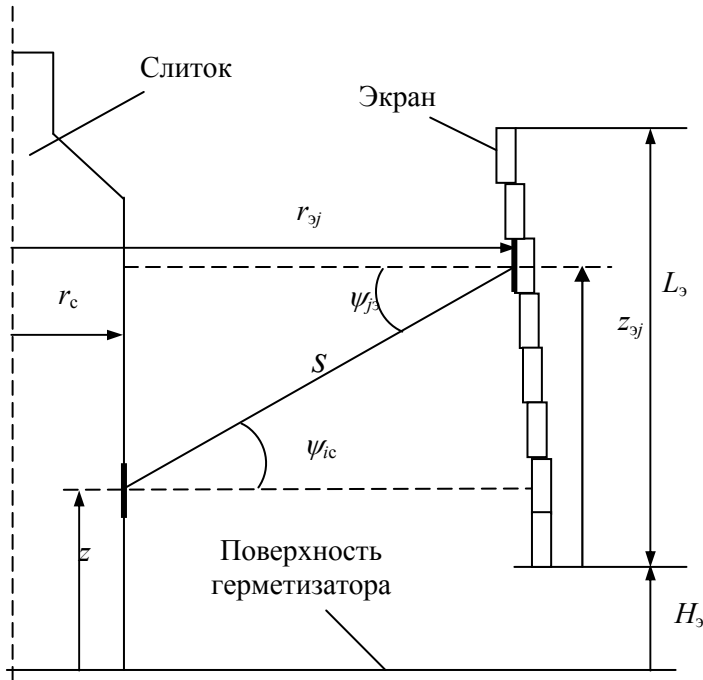


Рис. 4.3 – Геометрические параметры поверхностей:

$z_{ci}$  - дискретная осевая координата слитка;

$z_{эj}$  - дискретная осевая координата экрана;  $H_э$  - высота расположения экрана над расплавом в дискретных единицах;

$L_э$  - длина экрана в дискретных единицах.

Обозначим  $r_{эj}$  – радиус экрана на дискретном уровне с индексом  $j$ . Тогда, как и в случае, рассмотренном выше, длина луча  $s_{ij}$ , соединяющего элементарные площадки слитка и экрана может быть рассчитана, как



$$s_{ij} = \sqrt{(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}. \quad (4.16)$$

Тогда косинусы углов падения-отражения луча можно выразить через величины  $r_c$ ,  $r_{эj}$ ,  $H_э$ :

$$\text{Cos}\psi_i = \text{Cos}\psi_j = \frac{r_{эj} - r_c}{\sqrt{(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}}. \quad (4.17)$$

Отсюда

$$\varphi_{\Delta F_i - F_э} = \frac{\Delta F_j}{\pi} \sum_{j=1}^{L_э} \frac{(r_{эj} - r_c)^2}{\left[ (r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_э}. \quad (4.18)$$

Учитывая, что площадь элементарной поверхности экрана равна  $\Delta F_э = 2\pi r_э h$ , запишем:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_э} = 2h \sum_{j=1}^{L_э} \frac{r_{эj} (r_{эj} - r_c)^2}{\left[ (r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_э}. \quad (4.19)$$

Используя аналогичные рассуждения, запишем выражение для локального углового коэффициента между элементарной площадкой экрана и поверхностью слитка:

$$\varphi_{\Delta F_j - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_{эj} - r_c)^2}{\left[ (r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad i = \overline{1, L_c}. \quad (4.20)$$

где  $L_c$  – количество элементарных площадок на поверхности слитка. Аналитические выражения для пары поверхностей “слиток-тигель” приведены выше.

Выражения (4.19) и (4.20) позволяют описать тепловое взаимодействие излучением между поверхностью слитка и поверхностью экрана кусочно-цилиндрической формы с произвольно изменяющимся по высоте радиусом. Это в свою очередь даёт возможность рассчитывать температуру на поверхности слитка, задавая граничные условия на других поверхностях ростовой камеры, и оптимизировать форму экрана с учетом заданного критерия.

Выражения (4.6)-(4.10) и (4.13)-(4.20) составляют математическую модель, которая аналитически связывает координаты расчетных точек теплового узла с угловыми коэффициентами [154, 155].

Для использования полученной математической модели в тепловых расчетах необходимо встроить её в уравнения тепловых потоков излучения для поверхностей элементов теплового узла. Другими словами в этих уравнениях должны присутствовать выражения (4.6)-(4.10) и (4.13)-(4.15). Покажем связь между полученными выражениями для угловых коэффициентов и уравнениями тепловых потоков излучения.

Полный тепловой поток излучения между элементарной поверхностью слитка с площадью  $\Delta F_i$  и температурой  $T_i$  на всю поверхность экрана составляет:

$$q_{i\partial} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пз}} \left( \Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{L_3} \varphi_{ij}^3 - \Delta F_3 \sum_{j=1}^{L_3} \varphi_{ji}^3 T_j^4 \right), \quad (4.21)$$

где  $\sigma_0$  – постоянная Стефана-Больцмана,  $\varepsilon_{\text{пз}} = \frac{1}{\varepsilon_c} + \frac{1}{\varepsilon_3} - 1$  – при-

ведённая (с учетом переотражений) степень черноты слитка и экрана,  $\varphi_{ij}^3$  – элементарный угловой коэффициент между  $i$ -й элементарной поверхностью слитка и  $j$ -й элементарной поверхностью экрана,  $\varphi_{ji}^3$  – элементарный угловой коэффициент между  $j$ -й элементарной поверхностью экрана и  $i$ -й элементарной поверхностью слитка,  $T_j$  – температура  $j$ -й элементарной поверхности экрана. Тогда с учетом выражений (4.17)–(4.20) полный тепловой поток  $q_{i\partial}$  запишем в виде:

$$q_{i\partial} = 2h\sigma_0\varepsilon_{\text{пз}} \left[ r_c T_i^4 \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[ (r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} - r_3 \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2 T_j^4}{\left[ (r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (4.22)$$

С учетом выражений (4.8), (4.9) и (4.13), (4.14) аналогично можно записать и уравнения полных тепловых потоков между парами “слиток-тигель” и “слиток-герметизатор”:

$$q_{iT} = 2\sigma_0 \varepsilon_{\text{пт}} \left[ T_i^4 r_T h \sum_{j=1}^{L_T} \frac{(r_T - r_c)^2}{\left[ (r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} - r_c h \sum_{j=1}^{L_T} \frac{T_{jT}^4 (r_T - r_c)^2}{\left[ (r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (4.23)$$

$$q_{i\phi} = 2\sigma_0 \varepsilon_{\text{пф}} \left[ T_i^4 d \sum_{j=1}^{L_\phi} \frac{\Delta F_{\phi j} z_i (r_{\phi j} - r_c)}{z_i^2 + (r_{\phi j} - r_c)^2} - r_c h \sum_{j=1}^{L_\phi} \frac{T_{j\phi}^4 z_{ci} (r_{\phi j} - r_c)}{z_{ci}^2 + (r_{\phi j} - r_c)^2} \right], \quad (4.24)$$

Для соблюдения теплового баланса необходимо учесть конвективный перенос тепла от элементарной поверхности слитка в окружающую его среду [112]:

$$q_{\text{конв}} = \alpha_K (T_K - T_{\text{ср}})^{\frac{3}{4}} \quad (4.25)$$

Для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков:

$$q_{i\phi} + q_{iT} + q_{i\text{конв}} = 0. \quad (4.26)$$

Выражения (4.22)-(4.26) составляют основу для расчета температуры элементарного участка боковой поверхности слитка при условии, что распределения температуры на остальных поверхностях известны и тем или иным образом входят в граничные условия.

Для проверки адекватности полученной модели геометрии

теплового узла были проведены вычислительные эксперименты, в которых, в частности, определялось осевое распределение температуры на поверхности слитка. Расчеты проводились для процесса выращивания арсенида галлия при помощи модели, описанной в подразделе 4.3.

## 4.2. Модель расчета тепловых условий

В качестве граничных условий использовались априори заданное распределение температур на поверхности герметизатора, заданная температура внутренней открытой поверхности тигля и распределение температур на поверхности экрана. Для учета распределения температуры на стенке тигля используется функциональная зависимость, полученная аппроксимацией данных, полученных в ходе экспериментов. В табл. 4.1 представлены усредненные данные эксперимента. По оси ординат отложены отклонения температуры стенки тигля от температуры плавления GaAs. Аппроксимирующая кривая и её уравнение показаны на рис. 4.4.

Таблица 4.1 – Распределение температуры на стенке тигля

Дискретная координата	0	1	2	3	4
T, °C	0,7	8,0	25,5	39,8	45,4

Распределение температуры на поверхности герметизатора получено и аппроксимировано экспериментально, так же, как и распределение температуры на стенке тигля. В табл. 4.2 представлены усредненные данные эксперимента. По оси ординат отложены абсолютные значения температуры. По оси абсцисс отложена относительная координата, привязанная в радиусу тигля. Аппроксимирующая кривая и её уравнение представлены на рис. 4.5.

Температура на поверхности экрана была измерена при помощи термопар и зафиксирована в виде таблицы экспериментальных данных. В таблице 4.3 показаны усредненные значения температур, измеренные в процессе эксперимента.

Таблица 4.2 – Распределение температуры на поверхности герметизатора.

Относительная координата	0,43	0,57	0,71	0,86	1,0
T, °C	1071	1067	1066	1074	1092

Таблица 4.3 – Распределение температур на поверхности экрана

№ Тп	1	2	3	4	5	6	7
T, °C	903	869	832	793	741	681	623
№ Тп	8	9	10	11	-	-	-

T, °C	563	502	444	376	-	-	-
-------	-----	-----	-----	-----	---	---	---

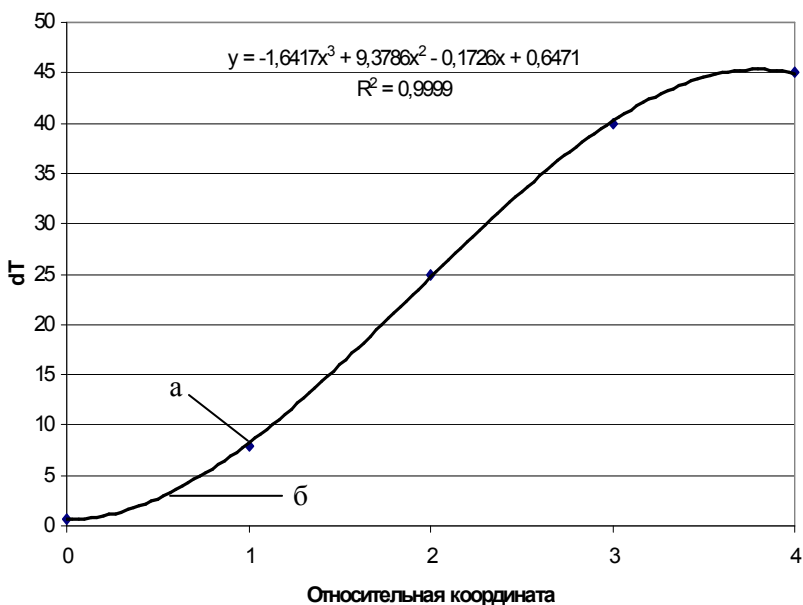


Рис. 4.4 – Кривая распределения температуры на стенке тигля: а) – эксперимент, б) – аппроксимация.

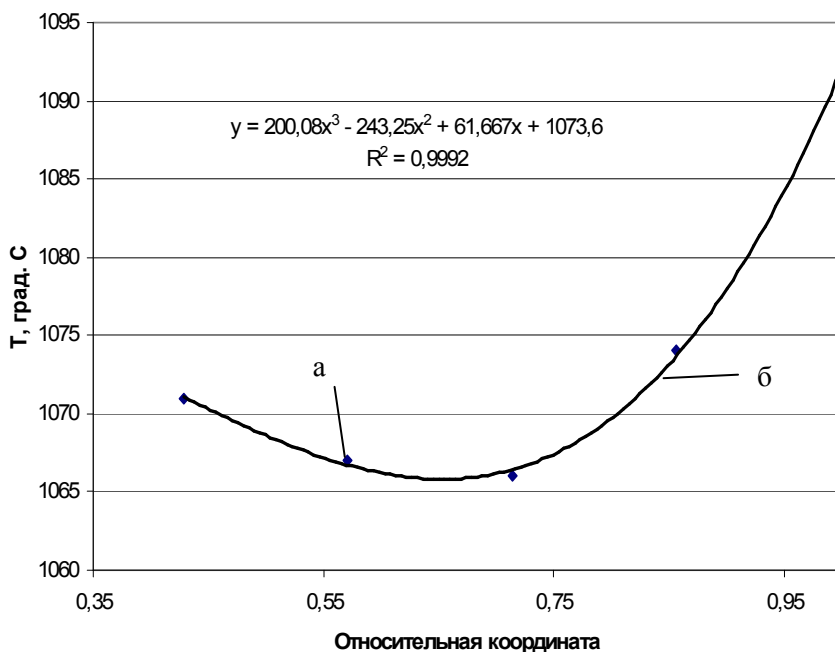


Рис. 4.5 – Кривая распределения температуры на поверхности герметизатора: а) – эксперимент, б) – аппроксимация.

Основной тепловой расчет включает в себя четыре задачи:

- расчет теплового поля и градиентов температуры в слитке;
- расчет лучевого теплообмена между слитком и поверхностями экрана, тигля и герметизатора;
- расчет теплового поля в расплаве и герметизаторе;
- определение координат фронта кристаллизации.

Первая из задач, состоит в решении стационарного уравнения теплопроводности Фурье-Кирхгофа [21]:

$$\frac{dT}{dt} = a \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{q_V}{c\rho} \quad (4.27)$$

где  $a = \lambda / c\rho$ , м<sup>2</sup>/с – коэффициент температуропроводности, который характеризует скорость распространения тепла в теле.

Задача решается методом конечных разностей (МКР), основанном на замене истинных значений производных, входящих в дифференциальное уравнение, приближёнными значениями в узлах сетки [16, 17]. Конечно-разностный подход является наиболее эффективным при решении квазистационарных задач. Простота записи конечно-разностных выражений и отсутствие необходимости построения конечно-элементных сеток делают МКР весьма популярным среди многих пользователей. Применение МКР способствует ускорению расчетов и позволяет при небольших затратах вычислительных ресурсов сделать ряд “снимков” теплового поля в реальном времени технологического процесса при решении задачи мониторинга температурного поля (см. раздел 3).

Расчетная схема построена с помощью метода переменных направлений [17], который, по-видимому, является лучшим из разностных методов для решения двумерных задач теплопроводности. Он позволяет значительно сократить объем вычислений и получить вполне адекватные результаты при счете даже на сравнительно грубых сетках.

Решение второй задачи основывается на принципе теплового баланса: для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков (4.26).

Для решения задачи расчета температурного поля слитка в нелинейной постановке предлагается метод прямой подстановки нелинейной зависимости коэффициента теплопроводности от температуры. Суть этого приема заключается в следующем. Пусть известно решение аналогичной по постановке линейной задачи и оно имеет вид:  $T = q_0 f(x, \alpha, \varepsilon, \lambda)$ , где  $T$  - искомое температурное поле какого-либо объекта;  $q_0$  - плотность мощности падающего на этот объект излучения;  $f(x, \alpha, \varepsilon, \lambda)$  - некоторая функция, выражающая пространственную (по  $x$ ) зависимость величины  $T$  и ее связь с результирующим коэффициентом теплообмена ( $\alpha$ ) с внешней средой, с поглощательной способностью  $\varepsilon$  объекта и с коэффициентом теплопроводности  $\lambda$ . Если теплофизическое свойство объекта нелинейное, то в функцию  $f(x, \alpha, \varepsilon$ .



$\lambda$ ) прямо вводятся известные зависимости  $\alpha(T)$  и  $\lambda(T)$ , где  $T$  принимается за искомую температуру. В итоге для величины  $T$  получается алгебраическое уравнение, которое сразу решается в явном виде:  $T = q_0 f(x, \varepsilon, \alpha(T), \lambda(T))$ . Анализ показал, что полученное решение достаточно хорошо совпадает с численным решением нелинейной задачи теплопроводности [126].

Для решения нелинейной задачи теплопроводности использовалась кусочно-линейная функция:

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda(1 + K_1 T), & T < T_1; \\ \lambda(1 + T_1(K_1 - K_2) + K_2 T), & T_1 \leq T < T_2; \\ \lambda(1 + T_1(K_1 - K_2) + T_2(K_2 - K_3) + K_3 T), & T \geq T_2, \end{cases} \quad (4.28)$$

где  $\lambda$ , - теплопроводность при значении температуры  $T = T_{нач}$ ;  $T_1$ ,  $T_2$  - уровни дискретизации;  $K_j$  - линейный коэффициент зависимости теплофизических свойств от температуры ( $j = 1...3$ ).

Построение тепловой модели поясняет рис. 4.6. Расчет тепловых потоков проводится относительно элементарной кольцевой площадки 7 на цилиндрической поверхности слитка 3. Площадь элементарной площадки –  $\Delta F_c$ . Стрелками показаны тепловые потоки излучения и конвекции, привязанные к элементарной площадке.

Из теории решения уравнения теплопроводности известно, что температура поверхности слитка однозначно определяет тепловое поле слитка [152]. Таким образом, сопрягая численное решение уравнения (1.10) с системой уравнений теплового баланса для элементарных участков поверхности слитка, можно рассчитать и тепловое поле слитка.

Запишем тепловой поток излучения между двумя поверхностями с площадями  $\Delta F_i$  и  $\Delta F_j$ :

$$q_{ij} = \sigma_0 \varepsilon_{np} \left( \Delta F_i \varphi_{ij} T_i^4 - \Delta F_j \varphi_{ji} T_j^4 \right), \quad (4.29)$$

где  $\sigma_0$  – постоянная Стефана-Больцмана,  $\varepsilon_{np}$  – приведенная степень черноты двух поверхностей с учетом переотражений,

$\varepsilon_{np} = \frac{1}{\varepsilon_i} + \frac{1}{\varepsilon_j} - 1$ ,  $T_i$ ,  $T_j$  – температура поверхностей  $\Delta F_i$  и  $\Delta F_j$  соответственно.

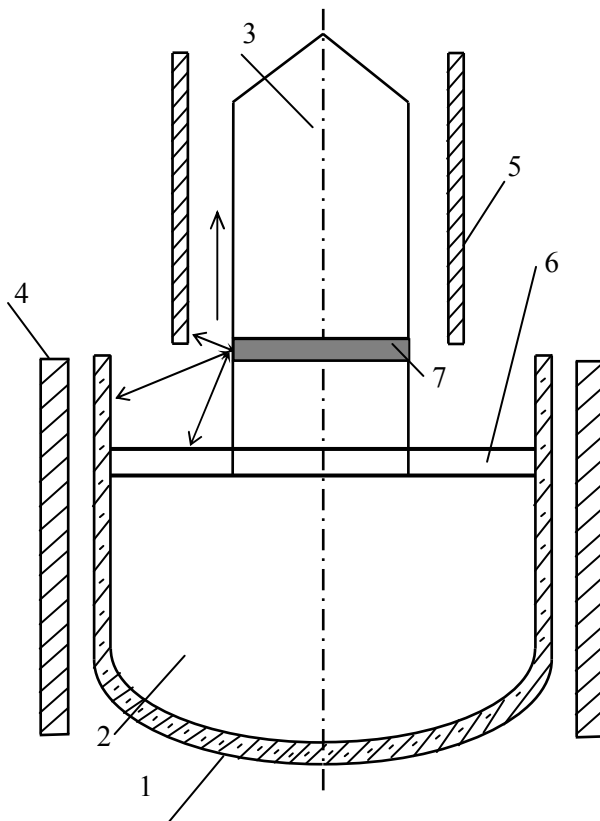


Рис. 4.6 – Геометрическая схема теплового узла. Стрелками показаны тепловые потоки излучения и конвекции. 1 – тигель, 2 – расплав, 3 – слиток, 4 – нагреватель, 5 – экран, 6 – жидкий герметизатор ( $B_2O_3$ ), 7 – элементарный участок поверхности слитка.

Учитывая, что в теплообмене излучением с поверхностью слитка участвуют пары поверхностей “слиток-экран”, “слиток-стенка тигля”, “слиток - поверхность герметизатора”, выделим на каждой поверхности элементарный участок с площадью  $\Delta F$ . Получим наборы элементарных участков  $\Delta F_{ci}$ ,  $\Delta F_{эj}$ ,  $\Delta F_{тj}$ ,  $\Delta F_{гj}$ . Запишем результирующий тепловой поток между элементарной поверхностью слитка  $\Delta F_{ci}$  и всеми элементарными поверхностями экрана  $\Delta F_{эj}$  в виде

$$q_{iэ} = \sigma_0 \varepsilon_{пэ} \left( \Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ij}^э - \Delta F_э \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ji}^э T_{jэ}^4 \right), \quad (4.30)$$

где  $\varepsilon_{пэ}$  - приведенная степень черноты поверхностей слитка и экрана с учетом переотражений;  $T_{jэ}$  - температура  $j$ -го участка поверхности экрана,  $L_э$  - количество элементарных участков экрана,  $\varphi_{ij}$  - элементарные угловые коэффициенты.

Аналогично запишем тепловые потоки для пар “слиток-тигель” и “слиток-герметизатор”:

$$q_{iT} = \sigma_0 \varepsilon_{пт} \left( \Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lт} \varphi_{ij}^т - \Delta F_т \sum_{j=1}^{Lт} \varphi_{ji}^т T_{jт}^4 \right); \quad (4.31)$$

$$q_{iГ} = \sigma_0 \varepsilon_{пф} \left( \Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lг} \varphi_{ij}^г - \Delta F_г \sum_{j=1}^{Lг} \varphi_{ji}^г T_{jг}^4 \right). \quad (4.32)$$

Обозначим:  $\sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ij}^э = A_{ij}^э$  ;  $\sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ji}^э = A_{ji}^э$  ;  $\sum_{j=1}^{Lт} \varphi_{ij}^т = A_{ij}^т$

$$\sum_{j=1}^{Lт} \varphi_{ji}^т = A_{ji}^т ; \sum_{j=1}^{Lг} \varphi_{ij}^г = A_{ij}^г ; \sum_{j=1}^{Lг} \varphi_{ji}^г = A_{ji}^г .$$

Тогда выражения (4.30) – (4.31) примут вид:

$$q_{iэ} = \sigma_0 \varepsilon_{пэ} \left( \Delta F_c T_i^4 A_{ij}^э - \Delta F_э A_{ji}^э T_{jэ}^4 \right), \quad (4.33)$$

$$q_{iT} = \sigma_0 \varepsilon_{пт} \left( \Delta F_c T_i^4 A_{ij}^т - \Delta F_т A_{ji}^т T_{jт}^4 \right), \quad (4.34)$$

$$q_{iГ} = \sigma_0 \varepsilon_{пф} \left( \Delta F_c T_i^4 A_{ij}^г - \Delta F_г A_{ji}^г T_{jг}^4 \right). \quad (4.35)$$

Учтем конвективный перенос тепла от элементарной поверхности слитка в окружающую его среду [126]:

$$q_{конв} = \alpha_k \left( T_k - T_{ср} \right)^{3/4}. \quad (4.36)$$

Для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков (4.26).

Выражения (4.27), (4.28) и (4.33)–(4.36) составляют модель расчета тепловых условий в слитке и тепловом узле. Наличие в

уравнениях (4.32)–(4.34) элементарных угловых коэффициентов, которые явно зависят от координат взаимного расположения слитка, экрана, тигля и поверхности герметизатора, позволяет аналитически связать геометрические параметры теплового узла с моделью вычисления параметров температурного поля в слитке.

Расчет температурного поля расплава производится также методом конечных разностей. В отличие от классического подхода, с применением уравнений Навье-Стокса, в данной тепловой модели учет влияния конвективных составляющих производится при помощи специальной нейросетевой модели, описанной в разделе 3.

Определение формы и расположения фронта кристаллизации проводится исходя из известной температуры плавления арсенида галлия и отклонений от неё в направлении поверхностей солидуса и ликвидуса. При определении формы фронта кристаллизации каждый из элементарных участков монокристалла и расплава под ним проверяется на выполнение следующего условия:

$$P(\Phi K) = (T \geq (T_{пл} - \Delta_r)) \wedge (T \leq (T_{пл} + \Delta_r)), \quad (4.37)$$

где  $P(\Phi K)$  – принадлежность элементарного участка зоне фронта кристаллизации;  $T$  – температура элементарного участка;  $T_{пл}$  – температура плавления арсенида галлия;  $\Delta_r$  – заданное максимальное отклонение температуры фронта кристаллизации от температуры плавления. Для повышения адекватности расчета температурного поля в зоне фронта кристаллизации используется нечеткий клеточный автомат, вычисляющий степень перехода от ликвидуса к солидусу для элементарных объёмов в зоне кристаллизации. Участки, для которых выполняется условие (4.37) составляют зону фронта кристаллизации.

Основная задача расчета в данном случае состоит в уточнении параметров температурного поля слитка путём вычисления невязки между результатами расчета температурного поля слитка и результатами расчета температуры боковой поверхности по уравнениям теплового баланса (4.33) – (4.36). Температуры остальных поверхностей, участвующих в теплообмене, считаются заданными и составляют граничные условия первого рода.

На рисунке 4.7 показан график распределения температуры

на цилиндрической поверхности слитка полученный расчетом на предлагаемой модели, а также график распределения температуры на внутренней поверхности экрана. Результаты расчета адекватны результатам, полученным другими авторами на численных локальных тепловых моделях [107].

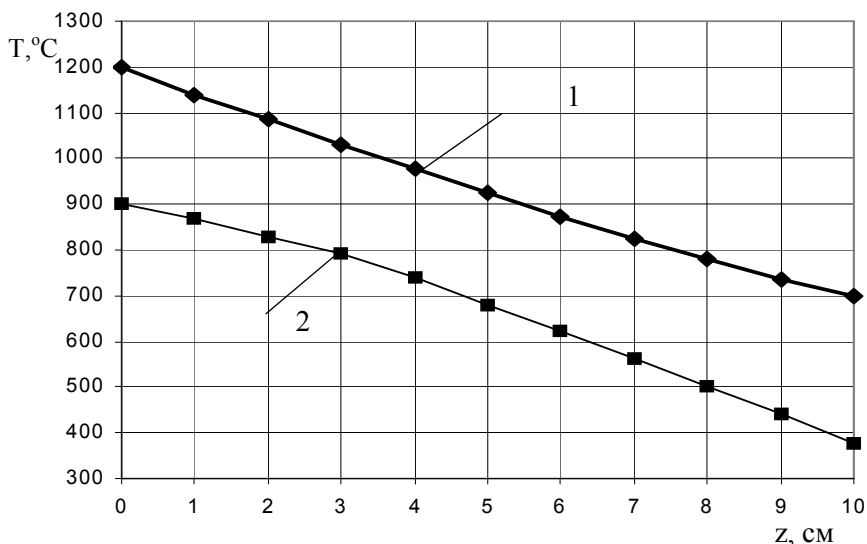


Рис. 4.7 – Результаты расчета температуры на боковой поверхности слитка (1) и измеренные значения температуры вдоль стенки экрана, приподнятого на 20 мм относительно расплава (2).

### 4.3 Метод и модель оптимизации конфигурации и положения теплового экрана

Тепловые узлы существующих в настоящее время ростовых установок по методу Чохральского включают экраны, которые должны обеспечить оптимальный тепловой режим для растущего слитка в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации и, соответственно, минимизацию неравномерности температурных градиентов. Однако, несмотря на большое количество исследований, в настоящее время не найдено оптимальных конфигураций

экрана для различных сочетаний геометрических параметров теплового узла.

Цель данного подраздела работы – разработка модели и метода автоматизированного решения задачи оптимизации размеров и положения теплового экрана ростовой установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского.

Для автоматизированного расчета оптимальных геометрических параметров теплового узла необходим другой подход, который заключается в установлении закономерностей влияния геометрии теплового экрана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в слитке. Для установления таких закономерностей была сформирована математическая модель, отражающая связь между геометрическими параметрами тепловых экранов и параметрами тепловых потоков в тепловом узле, а также разработаны модель и метод оптимизации конфигурации теплового экрана, форма и положение которого оказывают критическое влияние на режим охлаждения слитка в процессе выращивания [32, 33].

Рассмотрим математическую модель задачи оптимизации конфигурации и положения теплового экрана. Оптимизация параметров теплового экрана проводится по критерию минимизации неравномерности осевого и радиального градиентов температуры в слитке.

При математической постановке данной задачи необходимо учесть два важных фактора, связанных с физическими условиями роста монокристалла. Во первых, рост монокристалла возможен только при наличии некоторого минимального осевого градиента температуры на фронте кристаллизации. Во вторых, для минимизации радиальных температурных напряжений в зоне слитка, примыкающей к фронту кристаллизации, необходимо минимизировать радиальный градиент температуры в этой зоне.

В работе [158] разработана математическая модель задачи оптимизации конфигурации теплового экрана по критерию минимизации неравномерности осевого температурного градиента в остывающем слитке. В данной работе предлагается усовершенствованная модель, позволяющая решить две взаимосвязанные задачи – стабилизировать на минимальном уровне радиальный температурный градиент в зоне, примыкающей к фронту кри-

сталлизации и минимизировать неравномерность осевого температурного градиента в зоне остывания слитка.

Аналитическая связь между скоростью  $v_s$  роста кристалла и тепловыми условиями выражается формулой [152]:

$$v_s L \rho_s = \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} - \alpha (T_L - T_{пл}) \quad , \quad (4.38)$$

где  $T_{пл}$  - температура плавления (кристаллизации);  $\alpha$  - коэффициент теплопередачи на фазовой границе,  $\lambda_s$  - коэффициент теплопроводности в твердом состоянии,  $\rho_s$  - плотность монокристалла,  $L$  - скрытая теплота кристаллизации.

Отсюда

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = \frac{v_s L \rho_s + \alpha (T_L - T_{пл})}{\lambda_s} \quad . \quad (4.39)$$

В свою очередь, величина скорости выращивания непосредственно влияет на объем выращиваемого кристалла:

$$V_s = v_s \pi R_K^2 t \quad , \quad (4.40)$$

где  $t$  - время протекания процесса выращивания.

Таким образом, заранее определив параметры процесса выращивания и параметры материала, можно получить константу, устанавливающую заданное усредненное значение осевого градиента температуры в области фронта кристаллизации:

$$\frac{\partial \bar{T}_s}{\partial z} = G_0 \quad . \quad (4.41)$$

Меньшие значения градиента приведут к резкому замедлению роста монокристалла, а большие значения могут вызвать нежелательные изменения структуры.

Поскольку температурные напряжения в основном являются следствием неравномерного изменения градиента температуры  $GZ$  вдоль оси  $z$  слитка, локальным критерием оптимизации должен служить минимум величины квадрата отклонения значений усредненного по радиусу слитка градиента  $GZ$  от константы  $GZ_0$ , то есть

$$F(R_3, L_3, H_3) = \sum_{i=1}^N (GZ_i - GZ_0)^2 \rightarrow \min, \quad i = \overline{1, N}, \quad (4.42)$$

где  $N$  – количество дискретных цилиндрических областей слитка вдоль оси  $z$ ,  $R_3$  – радиус экрана,  $L_3$  – высота экрана,  $H_3$  – высота экрана на уровне расплава (герметизатора).

Вторым локальным критерием оптимизации служит критерий стабилизации на минимальном уровне радиального температурного градиента  $GR$ :

$$F(R_3, L_3, H_3) = \left[ \sum_{j=1}^M (GR_j - GR_0)^2 \right] \rightarrow \min, \quad j = \overline{1, M}, \quad (4.43)$$

где  $GR_0$  – пороговое значение градиента, превышение которого приводит к недопустимому риску увеличения плотности дислокаций в слитке.

Объединяя выражения (4.42) и (4.43), получим обобщенный критерий вида

$$F(R_3, L_3, H_3) = \left[ \alpha(i) \sum_{i=1}^N (GZ_i - GZ_0)^2 + \beta(i) \sum_{j=1}^M (GR_j - GR_0)^2 \right] \rightarrow \min, \quad (4.44)$$

где весовые коэффициенты  $\alpha(i)$  и  $\beta(i)$  изменяются следующим образом:

$$\alpha(i) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq i < 2 \\ 0,5 & \text{if } i = 2 \\ 0 & \text{if } i > 2 \end{cases}, \quad \beta(i) = \begin{cases} 1 & \text{if } i \in [0, 2] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (4.45)$$

Ограничениями задачи служат граничные условия по температуре, задаваемые на рабочих поверхностях тигля, на поверхности расплава и закон распределения температуры по поверхности экрана вдоль оси  $z$  с учетом изменения радиуса экрана:

$$T_{\text{фк}} = T_{\text{фк}}(r), \quad (4.46)$$

$$T_{\text{р}} = T_{\text{р}}(r), \quad (4.47)$$

$$T_{\text{т}} = T_{\text{т}}(h), \quad (4.48)$$

$$T_3 = T_3(z, r_3) \quad (4.49)$$

Тогда задачу оптимизации размеров и положения экрана



можно поставить следующим образом: найти оптимальные геометрические параметры экрана  $L_3$ ,  $R_3$ ,  $H_3$  при заданных значениях  $R_c$ ,  $R_t$ , граничных условиях (4.46) – (4.49) и минимизации критерия (4.44).

Решение задачи оптимизации производится эволюционным методом. Исходные положения метода решения задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана можно представить следующим образом:

1. Оптимизация размеров и положения теплового экрана происходит по интегральному критерию, учитывающему два важных показателя – неравномерность осевых градиентов температуры в слитке и минимум радиальных градиентов в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации.

2. В качестве исходных данных используются значения геометрических параметров теплового узла (радиус слитка  $R_c$ , закон изменения радиуса экрана  $R_3 = k \cdot z + c$ , высота экрана  $L_3$ , высота расположения экрана над расплавом  $H_3$ , радиус тигля  $R_t$ , и др.) и допустимые диапазоны изменения геометрических параметров экрана  $R_{\min}$ ,  $R_{\max}$ ,  $L_3$  и  $H_3$ . Задаётся также текущая высота слитка  $Z_t$ .

Метод состоит из следующих этапов:

Этап 1. Для численного решения задачи расчета теплового поля в слитке задаются граничные условия (распределение температуры на стенке тигля, распределение температуры по поверхности экрана, распределение температуры по поверхности расплава, температура окружающей среды).

Этап 2. При помощи эволюционного алгоритма генерируется популяция допустимых решений в виде четверок  $(k_3, c_3, L_{3k}, H_{3k})$ ,  $k = 1 \dots P$ , где  $P$  – число членов популяции.

Этап 3. Каждая четверка  $(k_3, c_3, L_{3k}, H_{3k})$  используется в модели конфигурации теплового узла и, соответственно, для вычисления градиентов температуры по оси и по радиусу слитка.

Этап 4. Для каждой четверки  $(k_3, c_3, L_{3k}, H_{3k})$  вычисляется значение критерия (4.44).

Этап 5. При помощи эволюционных процедур, описанных ниже отбирается наилучшее решение по критерию (4.44).

*Разработка эволюционного алгоритма для решения задачи оптимизации.* Предварительные исследования показали, что

критерий (4.44) является мультимодальной функцией. С учетом этого факта для решения поставленной задачи целесообразно использовать адаптивные методы случайного поиска, развитием которых являются эволюционные алгоритмы [160 – 162]. Основная продуктивная идея эволюционных алгоритмов состоит в том, что поиск ведется по всей области допустимых значений и в процессе его выполнения изменяются условия генерации вектора рабочих параметров. Обычно на начальных этапах распределение точек является равномерным, а потом количество точек увеличивается в тех областях, где предположительно находятся локальные экстремумы целевой функции. Уточнение значений локальных экстремумов можно производить с помощью случайного поиска в узкой области, которая предположительно содержит локальный экстремум. Вероятность быстрого схождения алгоритма при этом значительно возрастает и, тем самым, ускоряется весь процесс поиска оптимального решения. Таким образом, эволюционные алгоритмы используют информацию о рельефе поверхности функции цели.

С учетом изложенного сформулируем основные правила, которые должен использовать алгоритм поиска оптимального решения:

1. Обеспечение равномерного поиска во всей области определения функции цели.
2. Обеспечение сужения границ случайного поиска в отдельных областях, которые предположительно содержат локальные экстремумы.
3. Узкие границы локального поиска адаптивно смещаются по мере уточнения значения локального экстремума.
4. Выбор для локального анализа не только элитарных точек, но и нескольких случайных точек.

Ниже приведены шаги алгоритма для реализации разработанного метода:

ШАГ 1. Генерация исходной популяции. Синтезируется  $P$  точек  $\bar{X}_k$  ( $k = 1, \dots, P$ ), в которых определяется значение целевой функции.

ШАГ 2. Сортировка наборов  $\bar{X}_k$  (особей) по возрастанию значений (поскольку в решаемой задаче ищется минимум целевой

функции).

ШАГ 3. Из всех  $P$  точек отбирается  $\eta$  первых точек – претендентов на лидерство.

ШАГ 4. Из оставшихся  $P-\eta$  точек случайным образом выбираются еще  $\eta$  точек.

ШАГ 5. Вычисляются границы поиска уточненного значения экстремума для каждой из  $2\eta$  выбранных точек:

$$a' = x^* - A(b-a)/2, \quad b' = x^* + A(b-a)/2,$$

где  $a', b'$  – суженные границы поиска;  $a, b$  – начальные границы поиска;  $x^*$  – координата выбранного решения;  $A$  – размер границы для уточненного поиска экстремума.

ШАГ 6. Генерируется  $M$  точек в границах  $a', b'$ .

ШАГ 7. Для каждой точки  $X_l, l \in M$  вычисляется значение целевой функции. Если новое значение меньше предшествующего, соответственно изменяются значения  $x^*$ .

Как результат в массиве популяции для выбранных точек фиксируются новые значения координат и локальных экстремумов.

ШАГ 8. Массив популяции сортируется по возрастанию значения целевой функции.

ШАГ 9. Если количество заданных итераций не исчерпано, то для всех особей, кроме  $\eta$  лучших, генерируются новые случайные значения координат и происходит переход к шагу 3. Иначе переход к шагу 10.

ШАГ 10. Первый элемент в списке особей является найденным оптимальным решением. Конец.

Алгоритм имеет следующие параметры настройки:

- 1)  $P$  – количество членов популяции;
- 2)  $\eta$  – количество претендентов в элиту и количество особей, которые случайно добавляются к элите.
- 3)  $A$  – коэффициент уменьшения границ для уточненного поиска экстремума.
- 4)  $M$  – количество пробных точек в узких границах уточненного поиска.

Таким образом, разработаны модель и метод оптимизации конфигурации и положения теплового экрана, что дает возможность заранее выбрать наилучшие условия остывания слитка в

процессе технологической подготовки производства слитков различных размеров.

#### **4.4. Информационная технология оптимизации геометрических параметров теплового экрана**

Информационная технология оптимизации геометрических параметров тепловых экранов установок для выращивания монокристаллов полупроводников включает в себя:

1. Комплекс математических моделей и методов, в том числе:

- модель оптимизации геометрических параметров теплового экрана (M1);
- математическую модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения (M2);
- модель аппроксимации закона распределения температуры на стенке тигля (M3);
- модель аппроксимации закона распределения температуры на поверхности герметизатора (M4);
- модель аппроксимации закона распределения температуры в зоне кристаллизации (M5);
- модель расчета тепловых условий (M6);
- метод оптимизации геометрических параметров теплового экрана.

2. Систему взаимосвязанных информационных процессов.

3. Программный модуль, реализующий процедуру оптимизации.

Исходными данными для решения задачи оптимизации являются: заданный диаметр слитка, см; высота выращенного слитка, см; диаметр тигля, см; высота тигля, см; внутренний диаметр экрана, см; высота экрана, см; высота слоя герметизатора, см; плотность GaAs (кристалл), г/см<sup>3</sup>; плотность GaAs, (расплав) г/см<sup>3</sup>; плотность герметизатора (B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), г/см<sup>3</sup>; теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК; теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК; теплопроводность B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Вт/смК; излучательная способность GaAs (кристалл); излучательная способ-

ность  $V_2O_3$ ; температура плавления GaAs, °C; температура фонового нагревателя, °C; уровень расплава в тигле, %;

Промежуточными данными являются: массив значений температуры на поверхности герметизатора, °C; массив значений температуры на поверхности тигля, °C, теплопроводность GaAs в зоне фронта кристаллизации, Вт/смК; степень затвердевания дискретных областей в зоне фронта кристаллизации (ячеек клеточного автомата); температура в заданных точках расплава, °C; температура в заданных точках кристалла, °C; эффективный коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка.

Конечные данные: массив распределения температур в расплаве, °C; массив распределения температур в кристалле, °C; температурные градиенты в зоне фронта кристаллизации; температурные градиенты в слитке; геометрические параметры экрана.

Основу информационной технологию оптимизации геометрических параметров теплового экрана, окружающего выращиваемый слиток, составляет совокупность взаимосвязанных информационно-процессов (ИП) и моделей, перечисленных выше (рис. 4.8). Рассмотрим информационные процессы (ИП) и их взаимодействие.

**ИП1.** Задание исходных данных: радиус слитка  $R_c$ ; текущая высота слитка  $Z$ ; параметры функции изменения радиуса  $k$ ,  $c$ ; высота экрана  $L_3$ ; высота расположения экрана над расплавом  $H_3$ ; радиус тигля  $R_T$ ; высота тигля  $H_T$ ; допустимые диапазоны изменения геометрических параметров экрана  $R_{\min}$ ,  $R_{\max}$ ,  $L_3$  и  $H_3$ .

**ИП2.** Для расчета тепловых условий задаются граничные условия (распределение температуры на фронте кристаллизации, распределение температуры по поверхности экрана, распределение температуры по поверхности расплава, температура окружающей среды и температура стенки тигля). Задействованы модели М3, М4, М5.

Для учета распределения температуры на стенке тигля (модель М3) используется функциональная зависимость, полученная аппроксимацией данных, полученных в ходе экспериментов.

**ИП3.** Производится расчет (аппроксимация) температурного поля в зоне кристаллизации. Задействована модель М5, пред-

ставляющая собой нейросетевую аппроксимацию температурного поля, подобную описанной в работе [124].

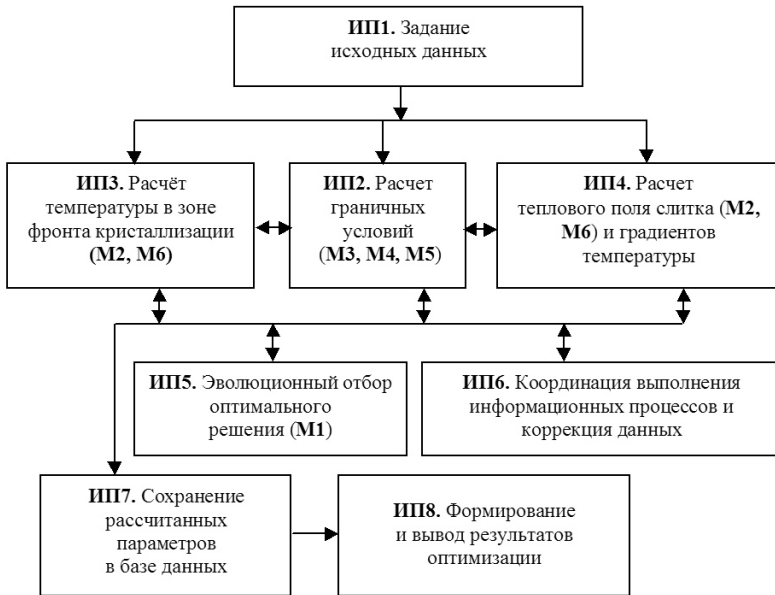


Рис. 4.8 – Общая схема информационной технологии оптимизации геометрических параметров теплового экрана

**ИП4.** Производится расчет температурного поля в слитке с учетом граничных условий методом конечных разностей на двумерной сетке. Задействована модель M2 – модель конфигурации теплового узла (угловые коэффициенты и уравнения тепловых потоков излучения) [138]. По результатам расчета определяются и градиенты температуры по оси и радиусу слитка. Задействована модель M6.

**ИП5.** При помощи эволюционного алгоритма оптимизации генерируется популяция допустимых решений  $P(k_{эj}, c_{эj}, L_{эj}, H_{эj})$  в виде четверок  $(k_{эj}, c_{эj}, L_{эj}, H_{эj})$ ,  $j=1...N$ , где  $N$  – число членов популяции. Каждая четверка  $(k_{эj}, c_{эj}, L_{эj}, H_{эj})$  используется для изменения конфигурации теплового узла в модели. При помощи эволюционных процедур, описанных выше, отбирается наилучшее решение по критерию (4.44). Задействована модель решения

задачи оптимизации М1.

**ИП6.** Координация выполнения информационных процессов и коррекция массивов данных.

**ИП7.** Сохранение рассчитанных параметров в базе данных.

**ИП8.** Формирование и вывод результатов оптимизации.

Разработанная информационная технология позволяет на стадии технической подготовки производства оптимизировать условия остывания слитка произвольного типоразмера.

Для решения описанной выше задачи оптимизации было разработано специальное программное обеспечение, которое обеспечивает ввод исходных данных через пользовательский интерфейс, решение тепловых уравнений методом конечных разностей, нейросетевую аппроксимацию решения в зоне фронта кристаллизации, выбор оптимальных размеров и положения экрана и вывод результатов решения в табличном виде. Результаты расчета экспортируются в электронную таблицу Microsoft Excel для построения графиков, а также могут обрабатываться в пакете MathCad. Для проверки результатов оптимизации были произведены расчеты температурных градиентов в слитке при двух вариантах конфигурации теплового экрана – существующем на стандартной установке “Арсенид–1” и экспериментальной – “Арсенид–М”. Результаты этих экспериментов приведены в разделе 5

Благодаря использованию комплексного критерия оптимизации удалось также ограничить значение радиального градиента температуры в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации на уровне  $7..8^{\circ}\text{C}$  против  $15..18^{\circ}\text{C}$  в установке “Арсенид–1”. Следует заметить, однако, что величина радиального градиента в этой зоне также в значительной степени зависит от температуры фонового нагревателя, который используется при выращивании слитков GaAs.

**РАЗДЕЛ 5**  
**ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ**  
**ТЕХНОЛОГИЙ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕПЛОВЫХ УСЛОВИЙ**  
**ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ GaAs**

**5.1. Экспериментальные исследования по синтезу  
 математической модели для косвенного измерения  
 температуры фонового нагревателя**

Как было указано в разделе 3, в перечень варьируемых факторов, которые следует учесть в модели вычисления температуры ФН входят:  $X1$  – потребляемая мощность ФН;  $X2$  – температура ОН;  $X3$  – скорость вытягивания;  $X4$  – скорость вращения заправки;  $X5$  – скорость вращения тигля;  $X6$  – уровень расплава. В табл. 5.1 приведены обозначения, названия и уровни перечисленных факторов.

Таблица 5.1 – Перечень и уровни изменения факторов

Факторы		Уровни действия факторов				
		1	2	3	4	5
1	Мощность, потребляемая ФН, Вт	1500	2300	–	–	–
2	Температура основного нагревателя, °С	1100	1300	–	–	–
3	Скорость вытягивания, мм/мин	0,07	0,14	–	–	–
4	Скорость вращения заправки, об/мин	10	20	–	–	–



Продолжение табл. 5.1

5	Скорость вращения тигля, об/мин	5	10	–	–	–
6	Уровень расплава, %	100	80	60	40	20

Для натурального исследования влияния перечисленных факторов на температуру фонового нагревателя был составлен предварительный план эксперимента, структура которого показана в табл. 5.2. В таблице указаны номера уровней. Специфика экспериментов на ростовой установке заключается в следующем:

1. Каждый эксперимент по измерению температуры ФН, температуры в отдельных точках расплава и окружающей слиток среды требует неоднократного механического вмешательства в сложный процесс роста монокристалла и, как правило, приводит к ухудшению его качества, то есть, к значительным материальным потерям. Поэтому количество экспериментов на ростовой установке приходится ограничивать.

2. Смена уровней факторов  $X1$  и  $X2$  предполагает выдержку времени, в течение которой затухает переходный процесс и устанавливается новый тепловой режим. Учитывая тот факт, что фактор  $X6$  (уровень расплава) является динамическим, строгая фиксация его уровня предполагает, что факторы  $X1$  и  $X2$  должны быть изменены заблаговременно.

3. Процесс выращивания является необратимым во времени и, следовательно, при планировании эксперимента приходится это учитывать. А именно – во время вытягивания кристалла уровень расплава в тигле (фактор  $X6$ ) последовательно проходит все указанные в таблице 1 ступени, и изменить их порядок невозможно.

Все эти условия определили стратегию проводимых экспериментов. Были проведены 7 процессов выращивания, в которых исследуемые факторы  $X1...X5$  изменялись так, чтобы строки таблицы 5.2 чередовались случайным образом, но без нарушения чередования уровней фактора  $X6$ .

Таблица 5.2 – План факторного эксперимента

Номер опыта	X1	X2	X3	X4	X5	X6
1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	2	2
3	1	1	1	2	1	3
4	1	1	1	2	2	4
5	1	1	2	1	1	5
6	1	1	2	1	2	1
7	1	1	2	2	1	2
8	1	1	2	2	2	3
9	1	2	1	1	1	4
10	1	2	1	1	2	5
11	1	2	1	2	1	1
12	1	2	1	2	2	2
13	1	2	2	1	1	3
14	1	2	2	1	2	4
15	1	2	2	2	1	5
16	1	2	2	2	2	1
17	2	1	1	1	1	2
18	2	1	1	1	2	3
19	2	1	1	2	1	4
20	2	1	1	2	2	5
21	2	1	2	1	1	1
22	2	1	2	1	2	2
23	2	1	2	2	1	3
24	2	1	2	2	2	4
25	2	2	1	1	1	5
26	2	2	1	1	2	1
27	2	2	1	2	1	2
28	2	2	1	2	2	3
29	2	2	2	1	1	4
30	2	2	2	1	2	5
31	2	2	2	2	1	1

Продолжение табл. 5.2.

32	2	2	2	2	2	2
33	1	2	1	1	1	3
34	2	2	1	1	2	4
35	2	1	1	2	1	5

Для всех точек плана проводились параллельные измерения в одинаковом количестве  $k = 3$ . Таким образом, общее число опытов, результаты которых легли в основу многофакторного анализа, составило 105. Для проверки адекватности модели впоследствии были проведены дополнительные эксперименты.

Для измерения температуры ФН и окружающих его элементов использовали алундированные микротермопары ТПР (тип В) диаметром 100 мкм, спаи которых вваривали в кварцевые чехлы, которые, в свою очередь, крепили к специальному кронштейну. С помощью специального координатного устройства осуществляли перемещение термопар как вдоль поверхности герметизатора и расплава, так и под поверхностью на стадиях разрачивания, вытягивания цилиндрической части и сведения слитка на конус в конце процесса. Погрешность измерения составляла  $\pm 3^\circ\text{C}$ .

Схема размещения точек измерения температуры в тепловом узле приведена на рис. 5.10. Обработка данных эксперимента и синтез регрессионной модели проводились в пакетах MS Excel и StatGraphics 3.

При предварительной обработке данных эксперимента проведена проверка однородности дисперсии воспроизводимости. Для оценки воспроизводимости эксперимента проводилась статистическая обработка его результатов.

Проверка воспроизводимости или постоянства дисперсии отклика сводится к проверке гипотезы об однородности дисперсий  $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$ , найденных по результатам  $N$  опытов. Уточнённая величина выборочной дисперсии отклика  $S_i^2$  для  $i$ -го опыта равна [176]:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{q=1}^m (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{m-1} \quad (i=1, 2, \dots, N),$$

где  $y_{iq}$  - отклики  $i$ -го опыта при  $q$ -м его повторе;  $m$  - количество повторов опыта;  $\bar{y}_i$  - среднее значение отклика в  $i$ -м опыте.

Для проверки гипотезы об однородности многих дисперсий при одинаковом для каждого опыта числе повторов применяется критерий Кохрена ( $G$  - критерий):

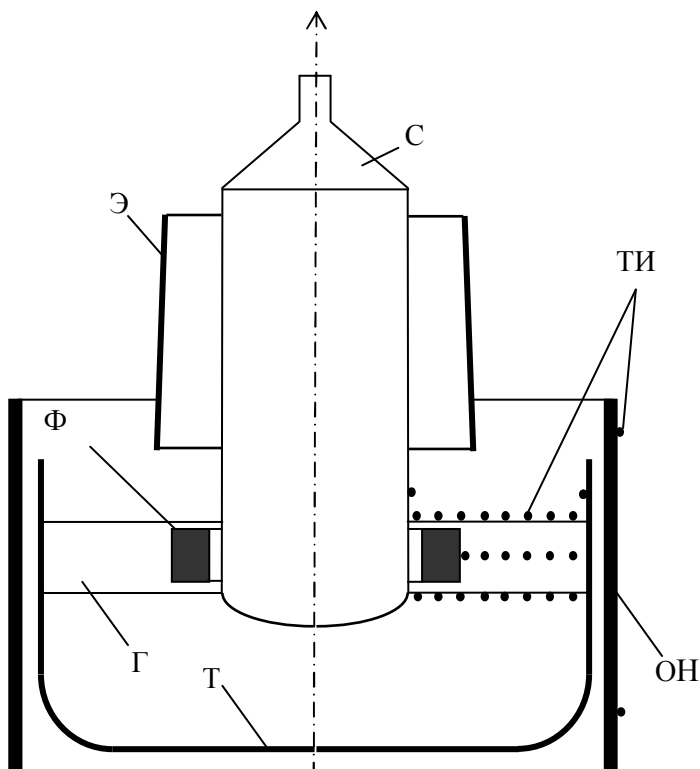


Рис. 5.10 – Схема размещения точек измерения температуры:  
С – слиток; ОН – основной нагреватель; ФН – фоновый нагреватель; Э – экран; Т – тигель; Г – герметизатор;  
Р – расплав; ТИ – точки измерения.

$$G = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2},$$

где  $S_{max}^2$  - наибольшая найденная выборочная дисперсия.

Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается, если вычисленное значение  $G$  -критерия не превышает критического, определённого по соответствующим таблицам [176] в зависимости от числа степеней свободы  $k_{G1} = m-1$ ,  $k_{G2} = N$  и выбранного уровня значимости. При заданном числе степеней свободы каждого измерения  $k_{G1}=2$  и общем числе опытов  $N=35$  оценка по числу Кохрена составила  $G_{эксп}=0,092537$ , что существенно меньше соответствующего интерполированного табличного значения (0,2152) для уровня значимости 0,01 [176].

Уравнение регрессии строилось в виде линейного полинома в истинных координатах:

$$Y = a_0 + \sum_{i=1}^p a_i X_i,$$

где  $p$  – число независимых переменных.

На первом этапе в модель были включены все 6 независимых переменных. Несмотря на то, что  $R^2$  статистика показала, что модель объясняет 99,2194% изменчивости отклика  $Y$ , оценка стандартной ошибки показывает отклонение остатков 6,07478, что не является удовлетворительным при точности прямых измерений платиновой термпарой  $\pm 2^\circ\text{C}$  и желательной точности косвенных измерений не хуже  $\pm 5^\circ\text{C}$ .

Статистический анализ исходной модели показал, что переменными  $X4$  и  $X5$  можно пренебречь, так как  $P$ -значение ( $P$ -value – граничный уровень значимости) для  $X4$  и  $X5$  больше или равно 0,10 (0,4634 и 0,5273 соответственно). Другими словами, эти факторы не являются статистически значимыми на 90% или более доверительном уровне и их влияние не является закономерным.

Дальнейшие исследования велись с переменными  $X1$ ,  $X2$ ,  $X3$ ,  $X6$ . Регрессионный анализ выявил структуру линейной модели следующего вида:

$$Y = 765,14 + 0,143649 * X1 + 0,0512563 * X2 + 48,9129 * X3 -$$

$$-0,079936 * X_6 \quad (5.19)$$

Как известно, качество регрессионной модели зависит от значимости коэффициентов модели и от качества регрессионного уравнения в целом. В табл. 5.3 показаны параметры качества коэффициентов модели, включая константу.

Таблица 5.3 – Оценки коэффициентов модели и их значимости.

Параметр	Стандартная оценка	Ошибка	t–статистика	P-Value
Константа	765,14	5,97353	127,895	0,0000
X1	0,143649	0,00105857	142,628	0,0000
X2	0,0512563	0,00426022	9,00704	0,0000
X3	48,9129	12,1232	7,35662	0,0000
X6	-0,079936	0,0150132	-2,20036	0,0036

Сравнивая значения коэффициента с его стандартной ошибкой, можно судить о значимости коэффициента. В данном случае сравнение указанных значений по t–статистике при уровне значимости P-Value не более 0,05, показывает, что все коэффициенты статистически значимы.

В табл. 5.4 приведена матрица оценок коэффициентов парной корреляции между переменными модели. Значимой корреляции с абсолютными значениями более 0,5 не выявлено.

Общие результаты регрессионного анализа таковы:

- $R^2$  –статистика составляет 99,855%, то есть более 99% изменчивости отклика обусловлено изменением четырех указанных переменных;
- скорректированная величина  $R^2$  (с учетом числа переменных регрессии – adjusted for d.f.) составляет 99,836%;
- стандартная ошибка остатков (SEE) составляет 2,48652;
- среднее значение остатков – 1,90981;

Таблица 5.4 – Оценки взаимной корреляции факторов

	X1	X2	X3	X6
X1	1,0000	0,0750	-0,0764	-0,0250
X2	0,0750	1,0000	0,0698	0,1130
X3	-0,0764	0,0698	1,0000	-0,0692
X6	-0,0250	0,1130	-0,0692	1,0000

Статистика Дарбина-Уотсона (DW) составляет 0,928572 ( $P=0,0000$ ). Эта статистика является результатом тестирования остатков для определения, есть ли существенная корреляция с порядком расположения данных в таблице. Так как P-значение для DW меньше 0,05, есть вероятность “серийной” корреляции. Это, на наш взгляд, связано с тем, что переменная X6 в ходе опытов изменялась в одном и том же порядке.

С учетом того, что самое высокое P-значение независимых переменных составляет 0,0336, что меньше, чем уровень 0,05, то все независимые переменные являются статистически значимыми на уровне достоверности 95%.

Для проверки качества уравнения регрессии (5.19) использовалась F-статистика, представляющая собой отношение объясненной суммы квадратов остатков (в расчете на одну переменную) к остаточной сумме квадратов (в расчете на одну степень свободы). Результаты расчета F-статистики показаны в табл. 5.5. Значения F-отношения и P-Value показывают, что уравнение (5.19) имеет достаточный уровень адекватности.

Статистическая значимость (F-статистика) для каждой переменной показана в таблице 5.6. Все включенные переменные статистически значимы.

Верхний и нижний пределы оценок коэффициентов модели в доверительном интервале 95% с учетом объема имеющихся данных и наличия шума показаны в таблице 5.7. Пределы изменения значений коэффициентов на 95%-ном доверительном уровне достаточно узкие.

Таблица 5.5 – Результаты вычисления F-статистики.

Ис точник	Сум марная квадра- тичная ошибка	Ч исло степ. сво- боды	Сред- няя кв. ошибка на одну степень свобо- ды	F -отно шение	P -Value
Мо дель	127963,0	4	31990,8	5 174,2	0, 0000
Ос татки	185,483	3 0	6,18277		
Об щая	128149,0	3 4			

Была вычислена также DFITS-статистика – диагностика влияния всех отдельно взятых наблюдений, которая показывает, насколько сильно данное наблюдение “оттягивает” на себя линию регрессии. Анализ не выявил точек с необычно большими значениями “рычага” DFITS.

На рис. 5.11 приведен график студентизированных остатков (нормированных разностей между модельными и наблюдаемыми значениями) в зависимости от номера наблюдения. Студентизированный остаток – это остаток, деленный на оценку своего стандартного отклонения, меняющегося от одного наблюдения к другому, в зависимости от расстояния между  $X_i$  и средним значением  $X$  [174]. Студентизированные остатки точнее отражают различия в дисперсиях истинных ошибок для разных наблюдений. Различимого криволинейного тренда остатков не наблюдается, что позволяет говорить о том, что гипотеза о линейности модели подтверждается.

Если рассматривать целевое предназначение модели, то под адекватностью понимают степень соответствия модели этому предназначению. Проверка адекватности проводится на основании экспериментальной информации. В данном случае проверка



адекватности заключается в доказательстве факта, что точность результатов измерения температуры ФН, полученных по модели, будет не хуже требуемой.

Таблица 5.6 – Результаты вычисления F-статистики по каждой переменной.

Параметр	Суммарная квадратичная ошибка	Число ст. св.	Сред. кв. ошибка на одну степень свободы	F-отношение	P-Value
X1	127134,0	1	127134	20562,7	0,0000
X2	476,251	1	476,251	77,03	0,0000
X3	322,449	1	322,449	52,15	0,0000
X6	29,9345	1	29,9345	4,84	0,0036
Модель	127963,0	4	—	—	—

Таблица 5.7 – Предельные оценки коэффициентов модели в доверительном интервале 95%.

Параметр	Стандартная оценка	Отклонение	Нижний предел	Верхний предел
Константа	765,14	2,04244	760,969	769,311
X1	0,143649	0,0003634	0,142907	0,144391
X2	0,0512563	0,0014446	0,048306	0,0542066
X3	48,9129	4,12283	40,493	57,3329
X6	-0,079936	0,00509	-0,0903248	-0,06955

Верификация разработанной математической модели проведена путем сравнения значений температуры ФН, полученных от виртуального датчика и значений, полученных путём прямого

измерения термопарой. Значения независимых переменных задавали в произвольных точках поверхности отклика. Эти же значения факторов использованы в модели для определения температуры ФН. Таблица 5.8 включает в себя: модельные значения  $Y$ , °С; стандартную ошибку для каждого модельного значения; 95,0%-й доверительный интервал модельных значений; 95,0%-й доверительный интервал для среднего отклика.

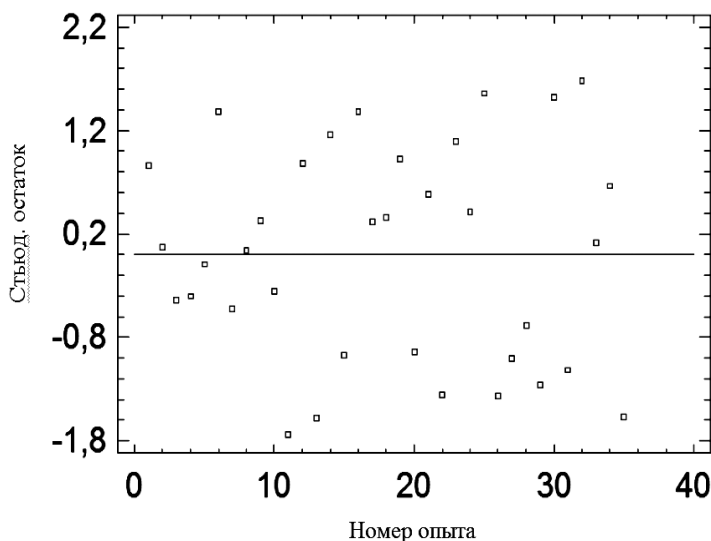


Рис. 5.11 – График стьюдентизированных остатков в зависимости от номера наблюдения.

Стандартные ошибки структурных параметров уравнения (5.19) и значение коэффициента детерминации  $R^2$  свидетельствуют о статистической адекватности модели. Однако при наличии возможности физического моделирования была осуществлена и верификация модели путем сравнения получаемых на ней данных и измеренных значениях температуры фонового нагревателя в процессе выращивания. Для этого были задействованы аппаратные средства существующей системы автоматизированного контроля и управления ростовой установки “Арсенид–1М”.

В таблице 5.9 сравниваются округленные до 1°С модельные и экспериментальные значения температуры ФН и показана ошибка модели относительно результатов реальных измерений. Несмотря на небольшое число опытов можно утверждать, что постоянной составляющей остатка не содержат. Анализ табличных данных показывает, что погрешность измерений при помощи виртуального датчика температуры в проведённых экспериментах не превышает  $\pm 4^\circ\text{C}$ , то есть сравнима с погрешностью измерений при помощи термопары с учётом неизбежных влияний динамики процесса вытягивания и нестабильности температуры расплава.

С использованием полученной математической модели, была сформирована методика косвенного измерения температуры фонового нагревателя при различных сочетаниях значений параметров технологического режима. Методика включает следующие этапы:

1. Для каждой конкретной ростовой установки виртуальный датчик верифицируется на типовом процессе выращивания. Для верификации достаточно одного пробного прогона процесса с измерением температуры ФН на трех этапах выращивания при помощи термопары, как это описано выше.

2. Если выявлена систематическая ошибка, оператор компенсирует её, регулируя значение постоянной составляющей модели в диалоговом окне программы контроля температуры.

3. В течении последующих процессов выращивания температура ФН вычисляется по следующим параметрам:

– температура основного нагревателя, °С (измеряется в реальном времени прямым методом);

– скорость вытягивания, мм/мин (значение задаётся оператором);

– уровень расплава, вычисляемый в реальном времени по формуле:

$$h_p = \left( \frac{m_3 - m_c}{\rho_p \pi R_m^2} + h_2 \right) \cdot 100\% , \quad (5.20)$$

где  $m_3$  – масса загрузки;  $m_c$  – измеренная в реальном времени масса выращенного на данный момент слитка;  $\rho_p$  – плотность

расплава;  $R_r$  - радиус тигля;  $h_r$  – высота слоя герметизатора.

– потребляемая мощность ФН, кВт (измеряется в реальном времени прямым методом).

Методика прошла испытания в условиях производства монокристаллов GaAs диаметром 75...100 мм. Подтверждена валидность методики, то есть точность измерений температуры и повторяемость (воспроизводимость) результатов измерения.

Таблица 5.8 – Прогнозные значения отклика модельной функции в доверительном интервале 95%.

№ оп.	Модельное значение, °C	Стандартная ошибка модельного значения	Нижний 95%-ный доверительный уровень модельного значения	Верхний 95%-ный доверительный уровень модельного значения	Нижний 95%-ный доверительный уровень для среднего модельного значения	Верхний 95%-ный доверительный уровень для среднего модельного значения
1	1034	0,9074	1033	1036	1034	1035
2	1057	0,8868	1055	1059	1056	1057
3	1063	0,9238	1061	1065	1062	1063
4	1084	0,8927	1082	1086	1083	1084
5	1107	0,9019	1105	1108	1106	1107
6	1106	0,8944	1104	1108	1106	1107
7	1129	0,8797	1127	1131	1128	1129
8	1134	0,9176	1133	1136	1134	1135
9	1041	0,9092	1039	1042	1040	1041
10	1063	0,9092	1062	1065	1063	1064
11	1063	0,8978	1061	1065	1062	1064
12	1086	0,8795	1084	1087	1085	1086

13	1091	0,9170	1089	1093	1091	1092
----	------	--------	------	------	------	------

Продолжение табл. 5.8.

14	1112	0,8889	1111	1114	1112	1113
15	1135	0,9043	1133	1137	1135	1136

Таблица 5.9 – Сравнение модельных и экспериментальных значений температуры ФН.

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Мод., °С	1034	1057	1063	1084	1107	1106	1129	1134	1041	1063	1063
Эксп., °С	1035	1057	1062	1084	1108	1105	1127	1136	1043	1064	1062
Ост., °С	1	0	-1	0	1	-1	-2	2	2	1	-1
Номер опыта	12	13	14	15							
Мод., °С	1086	1091	1112	1135							
Эксп., °С	1085	1091	1110	1133							
Ост., °С	-1	0	-2	-2							

Применение методики в 34-х процессах выращивания показало повышение стабильности плотности дислокаций на уровне  $N \leq 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$ . Данные по температуре ФН используются в подсистеме “Монитор” и подсистеме “Советчик”, основная функция которой – поддержка принятия оперативных решений по коррекции параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs.

Контроль температуры фонового нагревателя позволяет ввести дополнительный контур автоматического регулирования в автоматизированную систему управления процессом выращивания монокристаллов GaAs по ЛЕС-технологии.

## 5.2. Реализация метода и модели оптимизации геометрических параметров теплового экрана в установке для выращивания арсенида галлия

Для решения описанной выше задачи оптимизации было разработано специальное программное обеспечение, которое обеспечивает ввод исходных данных через пользовательский интерфейс, численный расчет температурного поля в слитке, выбор оптимальных размеров и положения экрана и вывод результатов решения в табличном виде. Табличные данные экспортируются в электронную таблицу Microsoft Excel для изображения графиков, а также могут обрабатываться в пакете MathCad.

Для проверки результатов моделирования и оптимизации была использована компьютерная программа для расчета теплового поля методом конечных элементов.

Свойства материалов, которые были определены для проведения расчета, приведены в таблице. 5.10. В списке свойств материалов, которые использовались для проведения расчета, приведены коэффициенты теплопроводности, плотности материалов и коэффициенты черноты поверхности.

Таблица 5.10 – Свойства материалов

Материал	Класс	Свойства
Аргон	газ	коэффициент теплопроводности: 0,045 Вт/(мК)
Графит для экранов	твердый	коэффициент теплопроводности: 0,33 Вт/(мК); коэффициент черноты поверхности: 0,8
Графит	твердый	коэффициент теплопроводности: 29,8 Вт/(мК); коэффициент черноты поверхности: 0,8
Молибден	твердый	коэффициент теплопроводности: 10 Вт/(мК) коэффициент черноты поверхности: 0,18

Продолжение табл. 5.10.

Кварц	твердый	коэффициент теплопроводности: 4 Вт/(мК) коэффициент черноты поверхности: 0,85
Сталь	твердый	коэффициент теплопроводности: 15 Вт/(мК) коэффициент черноты поверхности: 0,85
GaAs расплав	расплав	коэффициент теплопроводности: 14 Вт/(мК) коэффициент черноты поверхности: 0,55 плотность: 571 кг/м <sup>3</sup> $T_L = 1511$ К
GaAs кристалл	кристалл	коэффициент теплопроводности: 7 Вт/(мК) коэффициент черноты поверхности: 0,5 плотность: 517 кг/м <sup>3</sup>
Герметизатор (В <sub>2</sub> О <sub>3</sub> )	расплав	коэффициент теплопроводности: 2 Вт/(мК); коэффициент черноты поверхности: 0,75; плотность 151 кг/м <sup>3</sup>

С использованием информационной технологии, описанной в разделе 4, были проведены циклы оптимизации следующего содержания:

1. Высота слитка  $L_{сл}$  изменялась с шагом 1 см в интервале 6...12 см.
2. Для каждого значения  $L_{сл}$  по алгоритму п.р. 4.3 подбирались оптимальные значения параметров экрана  $L_э$ ,  $R_э$ ,  $H_э$ .
3. После осуществления расчетов по оптимизации положе-

ния экрана по критерию (4.44), было выяснено, что для слитков диаметром 60 мм наиболее приемлемыми являются такие значения рабочих параметров:  $L_э \approx 110$  мм,  $R_э \approx 43$  мм,  $H_э \approx 11$  мм.

4. Для оценки влияния изменений в геометрии теплового узла установки “Арсенид 1М” по сравнению с существующей установкой “Арсенид 1” на температурные профили и осевые градиенты полученные при расчетах данные были сведены в таблицы, по которым построены графики, показанные на рис. 5.1 и на рис. 5.2.

Преимущества теплового узла установки “Арсенид 1М” проявляются, прежде всего, в большей равномерности распределения температуры вдоль оси слитка. На рисунке 5.12 показаны температурные профили вдоль оси  $z$  слитка, рассчитанные для геометрии теплового узла ростовой установки “Арсенид 1” (кривая 1) и для геометрии теплового узла установки “Арсенид 1М” с оптимальным расположением и размерами экрана (кривая 2).

На рис. 5.13 показаны градиенты температуры вдоль оси  $z$  слитка для геометрии теплового узла ростовой установки “Арсенид 1” (кривая 1) и для геометрии теплового узла установки “Арсенид 1М” (кривая 2). Видно, что тепловой узел установки “Арсенид 1М” обеспечивает максимальную линейность распределения температуры, то есть оптимизация по критерию (4.44) прошла успешно.

Далее была исследована зависимость усреднённого температурного градиента  $Gz$  от радиуса экрана при различной длине слитка. Результаты исследования приведены на рис. 5.14. Видно, что существует совершенно четкая зона оптимального радиуса экрана (примерно 43...45 мм для слитка диаметром 60 мм), которая зависит от длины слитка.

Зависимость усредненного температурного градиента  $Gz$  от соотношения длины слитка и длины экрана (на начальной стадии роста монокристалла до 12 см) показана на рис. 5.15. Видно, что при изменении данного соотношения значение осевого градиента температуры изменяется слабо, если значение радиуса экрана выбрано в пределах оптимального диапазона.

На рис. 5.16 показано изменение усредненного значения  $Gz$  от высоты расположения экрана  $H_э$  при различных значениях радиуса экрана



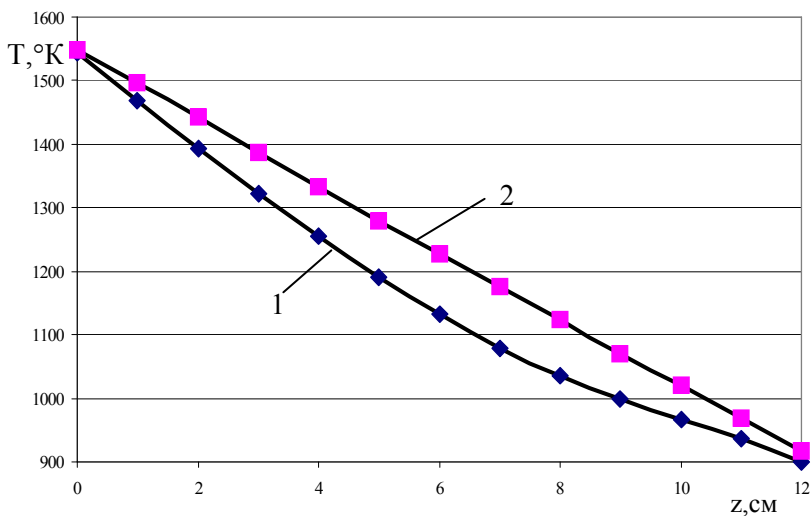


Рис. 5.12 – Результаты расчетов температурного профиля по оси z слитка: 1 – установка “Арсенид-1”; 2 - установка “Арсенид-1М”.

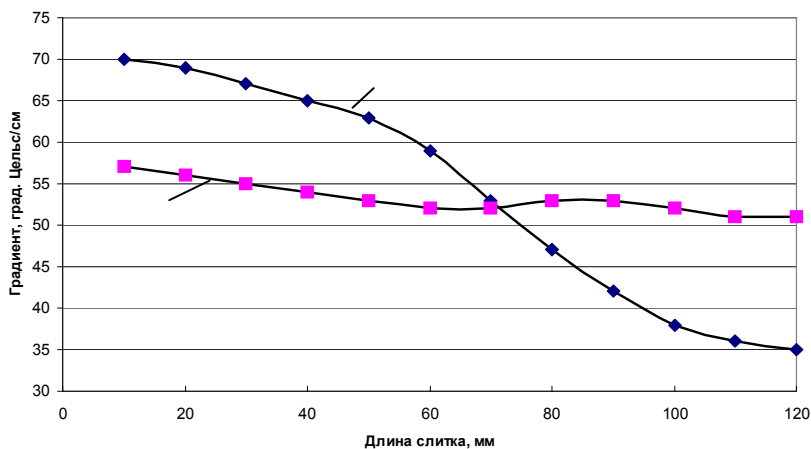


Рис. 5.13 – Результаты расчетов градиента температуры вдоль оси z слитка: 1 – установка “Арсенид-1”; 2 – установка “Арсенид-1М” с модернизированным тепловым узлом.

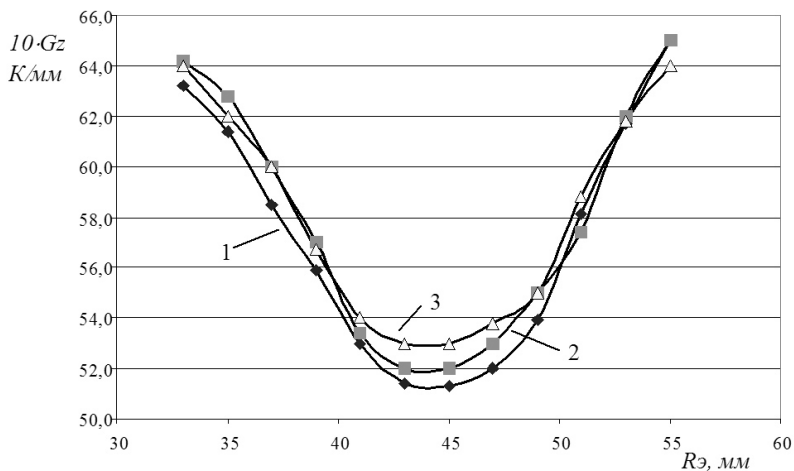


Рис. 5.14 Зависимость усредненного температурного градиента  $Gz$  от радиуса экрана при различной длине слитка диаметром 60 мм: 1 –  $L_{\text{сл}} = 50$  мм; 2 –  $L_{\text{сл}} = 80$  мм; 3 –  $L_{\text{сл}} = 120$  мм

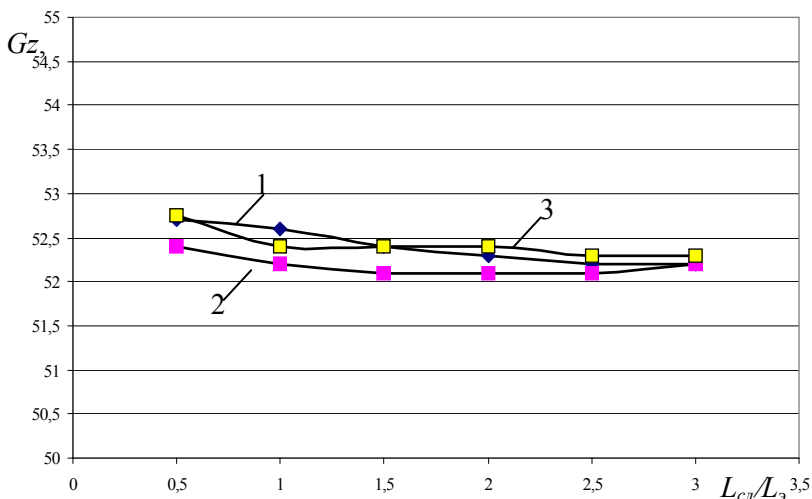


Рис. 5.15 – Зависимость усредненного температурного градиента  $Gz$  от соотношения длины выращенной части слитка и длины экрана для различных значений радиуса экрана: 1 –  $R_{\text{э}} = 41$  мм; 2 –  $R_{\text{э}} = 43$  мм; 3 –  $R_{\text{э}} = 45$  мм.

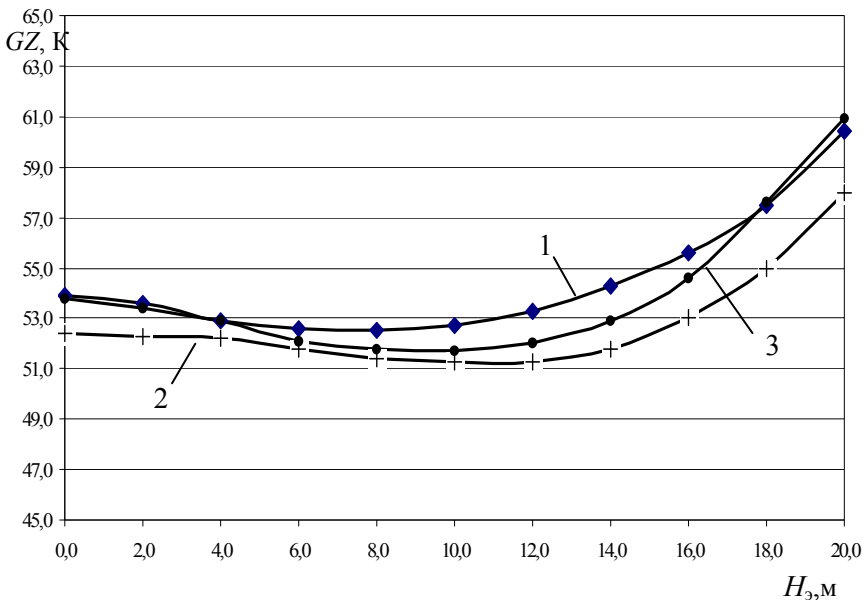


Рис. 5.16 – Изменение усредненного значения  $Gz$  от высоты расположения экрана  $H_s$  при различных значениях радиуса экрана: 1 –  $R_s = 39 \text{ мм}$ ; 2 –  $R_s = 43 \text{ мм}$ ; 3 –  $R_s = 47$

### 5.3. Применение подсистемы мониторинга температурных полей

#### 5.3.1 Задачи, решаемые подсистемой мониторинга

Разработанная подсистема “Мониторинг”, обеспечивает решение следующих основных задач:

1. Измерение температуры основного и фонового нагревателя с погрешностью  $\pm 4^\circ\text{C}$ ;
2. Воссоздание температурного поля (абсолютных значений,  $^\circ\text{C}$  и градиентов температуры по радиусу и по вертикальной оси,  $^\circ\text{C}/\text{см}$ ) в подкристалльной области и в слитке и вывод результатов измерений и вычислений на монитор промышленного компьютера АСУТП ростовой установки.
3. Вывод на монитор формы фронта кристаллизации в графическом виде;

4. уровень радиальных и осевых градиентов в зоне фронта кристаллизации и в слитке;

- стадия процесса выращивания;
- текущий уровень расплава в тигле;
- скорость вытягивания, скорости вращения слитка и тигля;

5. Периодическое уточнение параметров моделей прогнозирования.

6. Ведение базы данных подсистемы и ее синхронизация с централизованной базой данных.

Подсистема реализована на промышленном компьютере и интегрирована в автоматизированную систему управления ростовой установкой.

### **5.2.2 Методика мониторинга**

С использованием предложенного метода и нейросетевой модели разработана методика мониторинга температурного поля расплава в процессе выращивания монокристаллов GaAs по ЛЕС-технологии. Методика включает следующие этапы:

1. После начала процесса затравливания в расплав вместе с фоновым нагревателем погружается вольфрамо-родиевая термомпара в кварцевом чехле, который прикреплен к щупу фонового нагревателя (щуп используется для позиционирования ФН в слое герметизатора).

2. Производится выдержка времени равная 5 минутам для установления переходного процесса в температурном режиме теплового узла. Оператор производит калибровку измерительных каналов и задает параметры процесса выращивания.

3. Верифицируется виртуальный датчик температуры фонового нагревателя. Для этого используется специальная математическая модель и данные измерений погружной термомпары. Если выявлена систематическая ошибка, оператор компенсирует её, регулируя значение постоянной составляющей модели в диалоговом окне программы контроля температуры.

4. Для каждой конкретной ростовой установки система как совокупность виртуальных датчиков верифицируется на типовом процессе выращивания. Для верификации достаточно одного пробного прогона процесса с измерением температуры ФН, температуры расплава в контрольной точке, температуры основного

нагревателя на трёх этапах выращивания.

Если выявлены систематические ошибки, оператор компенсирует их, регулируя значения постоянных составляющих математических моделей в диалоговом окне программы контроля температуры.

4. В течение процесса выращивания оператор визуально контролирует изотермы температуры в графическом окне программы-монитора и численные значения осевых и радиальных градиентов в зоне фронта кристаллизации.

Методика прошла испытания в условиях производства монокристаллов GaAs диаметром 75...100 мм. Подтверждена валидность методики, то есть точность измерений температуры и повторяемость (воспроизводимость) результатов измерения. Применение методики в 28 процессах выращивания показало повышение стабильности плотности дислокаций на уровне  $N \leq 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$ . Подсистема “Монитор” используется совместно с подсистемой “Советчик”, основная функция которой – поддержка принятия оперативных решений по коррекции параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs.

#### **5.4 Исследование влияния тепловых условий на термоупругие напряжения и плотность дислокаций в слитках GaAs, выращиваемых по ЛЕС-технологии**

Внедрение подсистемы виртуального мониторинга температурных полей позволило более подробно исследовать влияние тепловых условий в зоне кристаллизации на уровень термоупругих напряжений в слитках GaAs [164].

Для минимизации уровня напряжений и соответственно плотности дислокаций идеальна ситуация, в которой существует постоянный осевой градиент температуры, тогда как радиальный градиент температуры близок к нулю. В этом случае, термоупругие напряжения будут минимальными. Исследования показали, что осевой градиент температуры в слитке можно сделать практически постоянным за счет выбора оптимального по размерам и положению теплового экрана. Радиальные градиенты температуры, однако, чрезвычайно зависимы от измене-

ний режима оттока тепла от слитка в зоне фронта кристаллизации и герметизатора и являются причиной избыточных значений термоупругих напряжений.

В поперечном сечении растущего слитка напряжения максимальны у его поверхности (за исключением областей, непосредственно примыкающих к фронту кристаллизации). Наблюдается возрастание термоупругих напряжений с увеличением диаметра слитка. Например, при увеличении диаметра слитка арсенида галлия вдвое (с 4 до 8 см) уровень термоупругих напряжений может возрасти более чем в два раза [44].

Установлено, что распределение напряжений по длине растущего слитка характеризуется кривой с максимумом, расположенным на некотором удалении от фронта кристаллизации. Положение и величина максимума напряжений зависят от величины относительного коэффициента теплоотдачи  $h$ , характеризующего теплообмен с окружающей средой. Такой характер распределения напряжений коррелирует с немонотонным изменением удельного теплового потока  $q$  с поверхности слитка.

Особо следует подчеркнуть, что при наличии температурного поля, линейного по перепадам, даже большие перепады температур не вызывают термоупругих напряжений. Это явление известно под названием свободного температурного изгиба (СТИ) [5]. Явление СТИ имеет важнейшее значение во всех задачах по термоупругим напряжениям. Фактически основная проблема снижения термоупругих напряжений до уровня, обеспечивающего безопасный режим выращивания кристалла, решается именно путем обеспечения СТИ.

При выращивании арсенида галлия борный ангидрид ( $B_2O_3$ ) используется как герметизатор, чтобы предотвратить разложение расплава и нижней, наиболее нагретой, части кристалла. Это приводит к изменениям в скоростях остывания при выходе горячего твердого материала из герметизатора, что должно быть особенно существенным в области конуса. Вполне вероятно, что если на стадии разращивания конуса образуются дислокации, то они могут наследоваться на более поздних стадиях. Многие проблемы, таким образом, касаются выращивания конической части слитка, и начала его цилиндрической части.

Некоторые предположения можно сделать по поводу свойств теплопередачи через герметизатор. Согласно современным представлениям герметизатор является средой частично прозрачной для излучения. Однако в процессе выращивания нарастающее загрязнение герметизатора делает его все менее прозрачным. В настоящее время теплопередача внутри борного ангидрида рассматривается в основном как теплообменная [144]. Также было показано, что конвективный тепловой поток в герметизаторе очень слабый [144]. При моделировании обычно ограничиваются моделированием потоков в борном ангидриде в области выращивания цилиндра кристалла, однако для минимизации термоупругих напряжений важны также результаты вычисления теплопередачи при разращивании конуса. В силу малой толщины слоя герметизатора конвективной теплопередачей можно пренебречь.

В течение процесса выращивания методом Чохральского слиток GaAs медленно поднимается из расплава, уровень которого внутри тигля снижается. Изменение со временем параметров вытягивания кристалла во многом зависит от изменения процессов теплопередачи в кристалле. Распределение температуры в любой стадии может быть получено с помощью решения стационарного уравнения теплопроводности в текущей конфигурации слитка. Выполняя расчёты температурного поля на различных стадиях выращивания, можно рассчитать и термические напряжения. Таким образом, можно осуществлять мониторинг качества получаемого слитка непосредственно в процессе выращивания. При этом нет необходимости в громоздких численных расчетах, если конфигурация теплового узла (форма и размеры тепловых экранов вокруг слитка, наличие фонового нагревателя) позволяет свести к минимуму нелинейность распределения температуры вдоль вертикальной оси слитка. В этом случае все компоненты напряжений во всех точках слитка определяются первой производной от температуры вдоль оси кристалла (градиентом температуры). Из всех компонент наибольшее значение имеет  $\sigma_{zz}$  при  $z = L_0$ . Остальными компонентами можно пренебречь. Максимальное напряжение можно аппроксимировать выражением:

$$\sigma_{ZZ} = k\alpha ER_C \frac{dT}{dZ}, \quad (5.21)$$

где  $\alpha$  – тепловой коэффициент расширения,  $E$  – модуль Юнга,  $R_C$  – радиус слитка,  $k$  - коэффициент, значение которого подбирается экспериментально ( $k \leq 1$ ).

Для этого же случая оценку максимальных касательных напряжений проводим по уравнению [164, 165]:

$$\tau_{kp} = \alpha GR_C \frac{dT}{dZ}, \quad (5.22)$$

где  $G$  – модуль сдвига.

Используя метод конечных разностей и двумерную осесимметричную модель, можно значительно ускорить вычисление температурного поля и градиентов  $dT/dz$  и  $dT/dr$ . Это позволяет проводить расчеты в реальном времени на вычислительных машинах небольшой мощности.

Радиальный температурный градиент  $(dT/dr)_{r=R}$  характеризует величину удельного теплового потока  $q$  с поверхности слитка [5]:

$$q = -\lambda (dT/dr)_{r=R}, \quad (5.23)$$

где  $\lambda$  - коэффициент теплопроводности.

Можно утверждать, что величина и распределение термоупругих напряжений в растущем слитке при достаточно плавной зависимости температурного поля от координаты  $z$  и отсутствии массопереноса тепла определяются распределением теплового потока  $q$ , то есть характером локального теплообмена слитка с окружающей средой. Основным максимум теплового потока наблюдается на расстоянии диаметра кристалла от фронта кристаллизации. На практике используемые приемы снижения уровня термических напряжений сводятся к соответствующему воздействию на сток тепла с боковой поверхности растущего слитка для снижения величины максимума  $q$  и смещения его в область более низких температур, где кристалл является менее пластичным. В пределе желательно теплоизолировать боковую поверхность слитка и обеспечить линейное осевое распределение температуры, обуславливающее эффект СТИ. Однако сам по себе этот прием может дать желаемый эффект только для медленно



вытягиваемых кристаллов достаточно малого радиуса. В противном случае объемное тепловыделение за счет переноса тепла при перемещении слитка приведет к возникновению значительного радиального перепада температур [5].

Регулировать отток тепла от боковой поверхности слитка в районе фронта кристаллизации можно путем регулирования температуры фонового нагревателя, размещенного в слое герметизатора.

Для исследования этой возможности были проведены численные и экспериментальные исследования температурного режима выращивания слитка ПИН GaAs с диаметром 60...75 мм. Во время численных исследований подбиралась такая температура фонового нагревателя, которая максимально спрямляет изотермы в зоне ФК, то есть уменьшает радиальные градиенты температуры.

Для натурального исследования влияния температуры фонового нагревателя были проанализированы результаты процессов выращивания слитков ПИН GaAs с 2008 по 2013 год. Кроме того, для более точного определения температуры фонового нагревателя специально были исследованы 10 процессов выращивания, в которых температура фонового нагревателя изменялась по специальной программе. При этом температура основного нагревателя поддерживалась постоянной. Далее определялись напряжения и плотности дислокаций в выращенных слитках.

В экспериментах использовали алундированные микротермомпары диаметром 100 мкм, спаи которых вваривали в кварцевые чехлы, которые, в свою очередь, приваривали к внутренней стенке кварцевого тигля. С помощью специального координатного устройства осуществляли перемещение термомпары как вдоль поверхности расплава (на глубине 2 мм от поверхности), так и в подкристалльной области расплава на любой стадии процесса выращивания.

Было проведено экспериментальное исследование температурного режима выращивания слитка ПИН GaAs с диаметром 60...75 мм и определение уровня дислокаций в выращенных слитках с целью установления оптимальной температуры фонового нагревателя на различных стадиях выращивания при фиксированной температуре основного нагревателя.

На рис. 5.18 приведены результаты измерений, показывающие, что для слитков указанного диаметра оптимальной температурой дополнительного нагревателя, минимизирующей модуль радиального градиента составляет около  $970^{\circ}\text{C}$ . На рис. 5.19 приведены результаты аналогичных экспериментов, проведенные для слитка цилиндрической формы. Видно, что оптимальной температурой, минимизирующей модуль радиального градиента составляет около  $1100^{\circ}\text{C}$ .

Таким образом, появилась возможность оптимизировать тепловые условия выращивания на разных стадиях процесса и добавить контур программного управления температурой ФН в АСУ ТП процесса выращивания арсенида галлия.

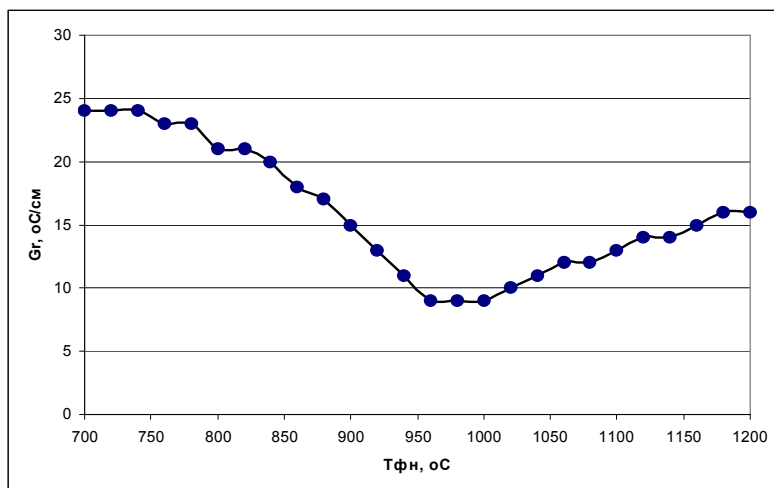


Рис. 5.18 – Экспериментальное изменение температуры фонового нагревателя при выращивании конусной части слитка: оптимальная температура соответствует примерно  $970^{\circ}\text{C}$ .

В результате внедрения системы мониторинга и в частности – виртуального датчика температуры фонового нагревателя удалось провести исследования влияния его температуры на

теплоотдачу в герметизаторе и, тем самым, на тепловые условия в зоне фронта кристаллизации. Предложен оптимальный тепловой режим для фонового нагревателя, погруженного в жидкий герметизатор при выращивании слитков ПИН GaAs, а именно 970 °С для стадии разрачивания слитка и 1100 °С для стадии выращивания цилиндрической части.

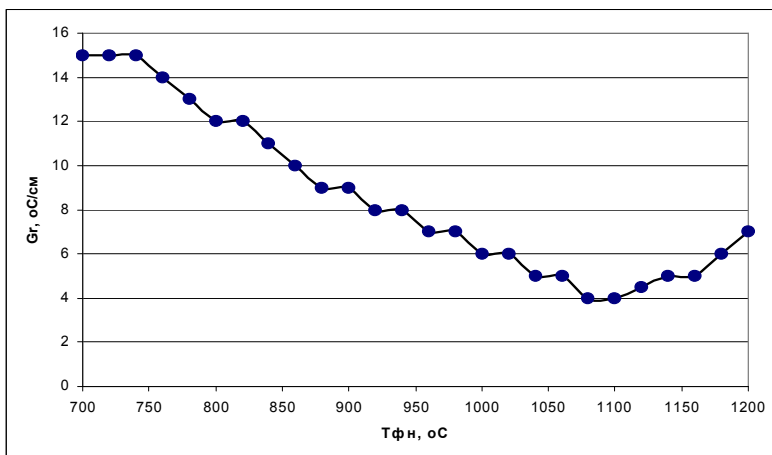


Рис. 5.19 – Экспериментальное изменение температуры фонового нагревателя при выращивании цилиндрической части слитка: оптимальная температура соответствует примерно 1100

### 5.5 Экспериментальное исследование закономерностей распределения остаточных напряжений и дислокаций в пластинах GaAs

Для подтверждения эффективности разработанных методов, моделей и информационных технологий в решении проблемы качества монокристаллов GaAs были проведены экспериментальные сравнительные исследования остаточных напряжений и плотности дислокаций в слитках арсенида галлия выращиваемых на стандартной установке “Арсенид 1” и модернизированной

установке “Арсенид 1М”. Экспериментальное исследование проводилось на технологической базе ЧП “Галар”, г. Светловодск.

Исследовались слитки полуизолирующего нелегированного арсенида галлия проводимости  $n$  – типа, марки АГЧ – ТУ 48-4-470-86 с ориентацией (100) диаметром  $d$  – 75 мм и длиной  $l$  – 110 мм. Выращивание производилось в соответствии со стандартной технологической картой под слоем герметика, в качестве которого использовался борный ангидрид  $B_2O_3$ . В процессе выращивания применялись следующие значения технологических параметров:

- температура расплава, °С – 1248;
- скорость вращения тигля, об/мин – 5;
- давление инертного газа, атм – 2...2,5;
- продолжительность процесса, ч – 8.

В качестве базы для сравнения использованы результаты ранее выполненных измерений и вычислений.

На пластинах, вырезанных из слитков перпендикулярно оси роста, измеряли остаточные напряжения  $\sigma_{ост}$  по методике, изложенной в работе [121], действующие в плоскости пластины, а также плотность дислокаций  $N_D$  по поперечному сечению слитка.

Для исследования остаточных напряжений по длине выращенных слитков, использовалась автоматизированная установка измерения внутренних напряжений в пластинах GaAs “Полярон-2”, реализующий метод SIRP и предложенную в работе [121] экспрессную методику определения структурного совершенства в пластинах GaAs.

Исследование остаточных напряжений проводилось на специально подготовленных шлифовано-травленных пластинах толщиной  $450 \pm 15$  мкм вырезанных из верхней части слитка, центральной части слитка и из нижней части слитка.

При исследовании плотности дислокаций применялся автоматизированный телевизионный метод подсчета дислокаций, описанный в [121].

Суть этого метода состоит в подсчете числа ямок травления в поле зрения металлографического микроскопа, подключенного к телевизионной камере, изображение с которой вводится в компьютер и обрабатывается специальной программой.

При этом локальная плотность дислокаций определяется выражением:

$$N_d = \frac{n}{S}, \quad (5.24)$$

где  $S$  – площадь пластины, находящейся в поле зрения видеокамеры,  $n$  – число ямок травления на этой площади.

Определяя среднее значение  $N_d$  в процессе сканирования пластины находится плотность дислокации на всей пластине в соответствии с выражением:

$$\bar{N}_d = \frac{1}{m} \cdot \sum_{i=1}^m N_{d,i}, \quad (5.25)$$

где  $m$  – число областей измерения, пройденных в процессе сканирования.

#### 5.4.1 Исследование остаточных напряжений и уровня дислокаций при использовании системы мониторинга температурных полей

Для определения изменения величины остаточного напряжения по длине слитков арсенида галлия для слитков, выращенных после внедрения управления по температуре были определены среднее значение выборок из 10 экспериментов. Среднее значение остаточного напряжения определялось по классическому выражению:

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n}, \quad (5.26)$$

где  $n$  – количество пластин GaAs, участвующих в эксперименте. Различие в результатах измерений, которое представляет собой уменьшение значения остаточного напряжения, выраженное в процентном отношении:

$$\Delta = \frac{\sigma_{1A}}{\sigma_1} \times 100\%, \quad (5.27)$$

где  $\sigma_{1A}$  – среднее значение остаточных напряжений в слитках, выращенных на установке “Арсенид 1М”, и  $\sigma_1$  – среднее значение

остаточных напряжений в слитках, выращенных на установке “Арсенид 1”.

Полученные результаты представлены в таблице 5.11. Результаты показывают, что значения остаточных напряжений в слитках, выращенных на усовершенствованной ростовой установке “Арсенид-1М”, снизились по сравнению со слитками, выращенными на установке “Арсенид-1”, в верхней части слитка на 54 %, в средней части слитка на 53 % и в нижней части слитка на 50 %.

Таблица 5.11 – Сравнительные результаты измерений значения остаточного напряжения в слитках GaAs, выращенных на установках “Арсенид 1” и “Арсенид 1М”

	Остаточное напряжение в слитке, установка “Арсенид 1”, $\cdot 10^6$ Па	Остаточное напряжение в слитке, установка “Арсенид 1М”, $\cdot 10^6$ Па	Относительное уменьшение остаточного напряжения, %
Верх слитка	5,8	2,66	54
Середина слитка	4,2	2,0	53
Низ слитка	3,4	1,7	50

На рис. 5.20 показано распределение плотности дислокаций в нелегированном слитке ПИН GaAs: а) в типовом процессе выращивания с оптимальной формой и размерами экрана; б) в усовершенствованном процессе с управлением температурой фонового нагревателя.

Из экспериментальных данных исследования плотности дислокаций по длине слитков выращенных на ростовой установке “Арсенид 1М”, можно сделать вывод о том, что технология вир-

туального мониторинга и управления по температуре эффективна как метод уменьшения остаточных напряжений и, как следствие, уменьшения плотности дислокаций в слитке.

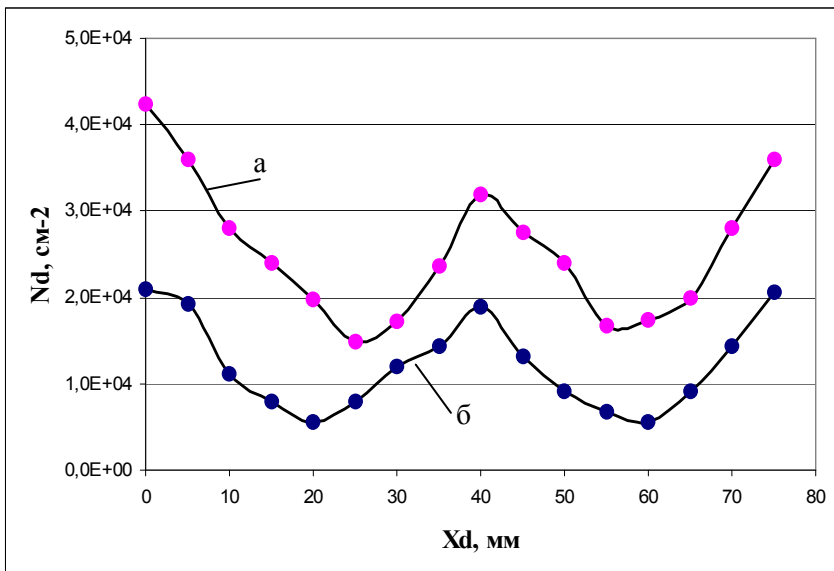


Рис. 5.21 – Распределение плотности дислокаций в нелегированном слитке ПИН GaAs: а) в типовом процессе выращивания; б) в усовершенствованном процессе с мониторингом и управлением температурой фонового нагревателя.

#### 5.4.2 Исследование остаточных напряжений и уровня дислокаций при использовании теплового экрана, оптимизированного по форме и расположению

Для увеличения информативности представляемых материалов телевизионный метод подсчета дислокаций был модернизирован таким образом, чтобы представлять результаты в виде линий изоплотностей дислокаций.

Полученными результаты для серийной установки “Арсенид 1” представлены на рисунках 5.21 - 5.23.

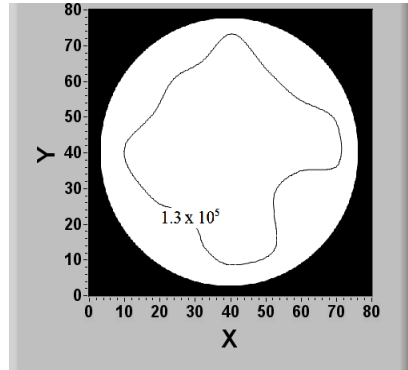
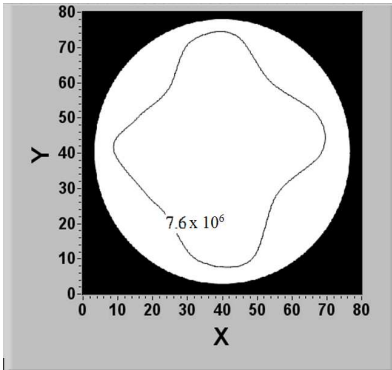
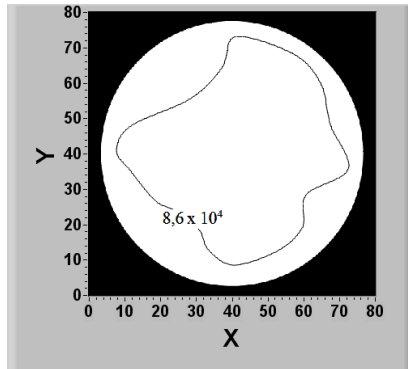
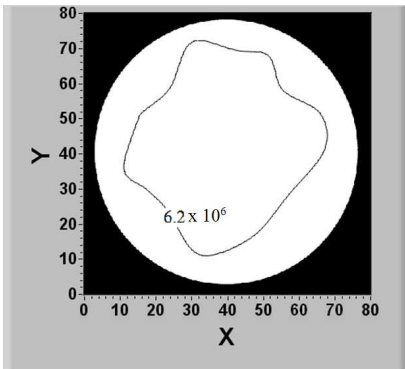


Рис. 5.21 – Установка “Арсенид 1”): а) – линия максимального  
 изонапряжения, Па; б) – линия максимальной изоплотности  
 дислокаций,  $\text{см}^{-2}$  в верхней части  
 слитка.

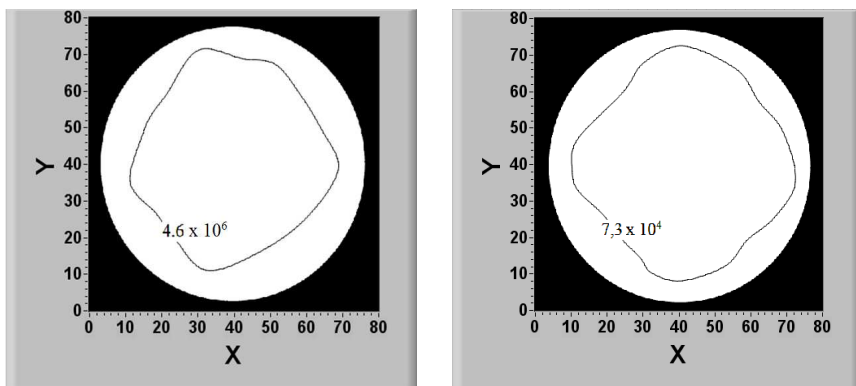


а)

б)

Рис. 5.22 – Установка “Арсенид 1”): а) – линия максимального  
 изонапряжения, Па; б) – линия максимальной изоплотности дис-  
 локаций,  $\text{см}^{-2}$  в средней части слитка.





а)

б)

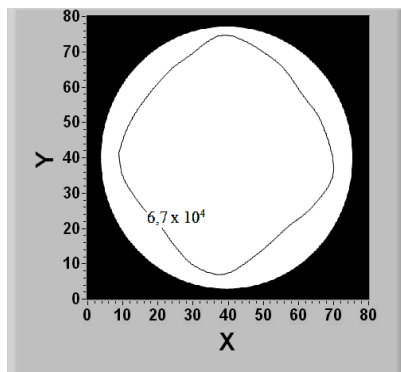
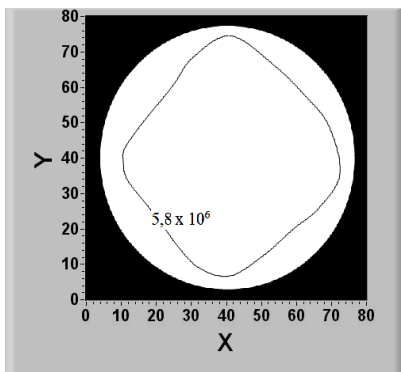
Рис. 5.23 – Установка “Арсенид 1”: а) – линия максимального изонапряжения, Па; б) – линия максимальной изоплотности дислокаций,  $\text{см}^{-2}$  в нижней части слитка.

Анализ полученных результатов подтверждает тезис о том, что плотность дислокаций в слитке арсенида галлия тесно коррелирует с величиной остаточного напряжения, что согласуется с теоретическими выводами [121].

Для исследования остаточных напряжений в слитках арсенида галлия, выращенных на ростовой установке “Арсенид-1М” также была проведена серия экспериментальных исследований. Выращивались слитки такой же марки и при тех же технологических параметрах, что и описанные выше для установки “Арсенид-1”.

Расположение тепловых экранов соответствовало рассчитанному в п. 5.2.

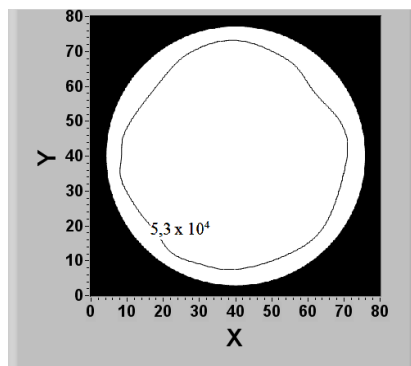
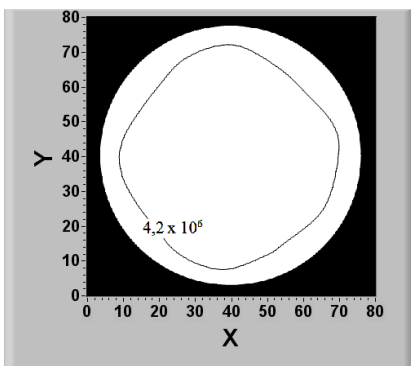
Для статистического подтверждения полученных результатов были проведены исследования пластин из 20 слитков, выращенных на ростовой установке “Арсенид 1М”. Результаты исследования пластин, вырезанных из верхней, средней и нижней частей различных слитков аналогичной марки и идентичного диаметра, приведенного выше, представлены на рисунках 5.25 – 5.27.



а)

б)

Рис. 5.24 – Установка “Арсенид 1М”: а) линия максимального изонапряжения, Па; б) линия максимальной изоплотности дислокаций, см<sup>-2</sup> (б) в верхней части слитка.



а)

б)

Рис. 5.25 – Установка “Арсенид 1М”: а) линия максимального изонапряжения, Па; б) линия максимальной изоплотности дислокаций, см<sup>-2</sup> (б) в средней части слитка.

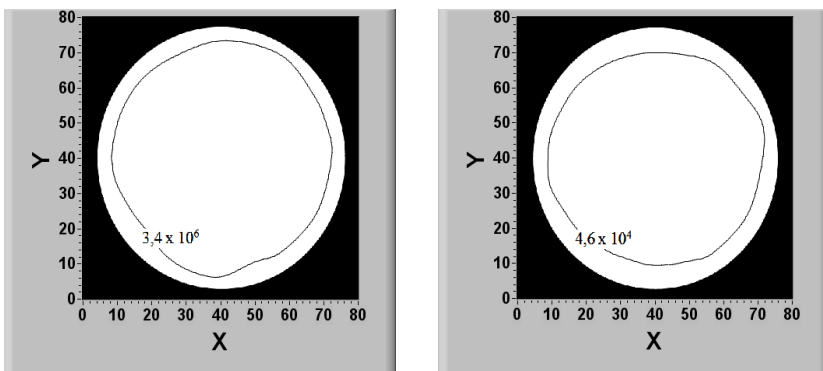


Рис. 5.26 – Установка “Арсенид 1М”: а) линия максимального изонапряжения, Па; б) линия максимальной изоплотности дислокаций,  $\text{см}^{-2}$  (б) в нижней части слитка.

Из экспериментальных данных исследования плотности дислокаций по длине слитков выращенных на ростовой установке “Арсенид 1М”, можно сделать вывод о том, что выбранная схема расположения теплового экрана приводит к уменьшению остаточного напряжения и, как следствие, к уменьшению плотности дислокаций в слитке. В верхней части исследуемого слитка плотность дислокаций снизилась в среднем с  $1,3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$  до  $6,7 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$ , в средней части с  $8,6 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$  до  $5,3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$  и в нижней части слитка с  $7,3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$  до  $4,6 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$ . Полученные результаты представлены в таблице 5.12.

Таблица 5.12 – Сравнительные результаты измерений плотности дислокаций в слитках GaAs выращенных на установках “Арсенид 1” и “Арсенид 1М”

	Плотность дислокаций в слитке, уст. “Арсенид 1” $\cdot 10^4, \text{ см}^{-2}$	Остаточное напряжение в слитке, уст. “Арсенид 1М” $\cdot 10^4, \text{ см}^{-2}$	Относительное уменьшение остаточного напряжения, %

Продолжение табл. 5.12

Верх слитка	7,3	4,6	63
Середина слитка	8,6	5,3	61
Низ слитка	13	6,7	51

### 5.6 Программное обеспечение

Данный подраздел посвящен разработке специализированного программного обеспечения для расчета и мониторинга температурных полей в системе кристалл-расплав. Программный комплекс используется как непосредственно в процессе выращивания, так и при численных экспериментах по оптимизации физических параметров теплового экрана, окружающего слиток [188, 189].

Отказ от использования готовых программных продуктов и создание собственного обусловлено рядом факторов – “тяжелые” программные пакеты, представленные на рынке, многофункциональны и ресурсоёмки, поскольку предназначены для решения широкого круга задач. Кроме того, в эти пакеты чрезвычайно трудно встроить дополнительные процедуры и модули оперативного изменения и оптимизации геометрических параметров теплового узла.

Программный комплекс позволяет задать:

- размеры и форму тигля и слитка;
- размеры, форму и положение экрана и фонового нагревателя;
- толщину слоя герметизатора и его теплопроводность;
- теплопроводность кристалла и расплава и их начальные температуры;
- граничные условия первого, второго и третьего рода;
- ряд других параметров, таких как приведенные коэффициенты черноты слитка, экрана, тигля, герметизатора, коэффициент конвективного теплового потока во внешнюю среду и др.

Применяемая в расчете математическая модель является плоской и осесимметричной, т.е. рассматривает тепловой узел в радиальном разрезе, секущая плоскость которого проходит через ось симметрии узла. В модель включены: слиток; система тепловых экранов, включая фоновый нагреватель, размещенный в слое герметизатора; герметизатор; расплав арсенида галлия и тигель. Тепловой экран считается активным и может составлять с фоновым нагревателем единое целое.

Важным элементом математической модели являются граничные условия, которые используются для сопоставления процесса моделирования определённым реальным условиям. К ним отнесён ряд распределений температур на поверхностях конструктивных элементов теплового узла ростовой установки. Граничными условиями третьего рода заданы условия лучевого теплообмена между поверхностью слитка и поверхностями экрана тигля и герметизатора. Для этого в программе задаются приведенные коэффициенты теплового поглощения соответствующих поверхностей. Для повышения адекватности результатов расчетов в различных режимах и на различных стадиях выращивания используются специальные нейронные сети (см. раздел 3).

Структура программного комплекса показана на рис. 5.27.

Программный комплекс реализует следующие функции:

1. Инициализацию модели в соответствии с заданными параметрами.
2. Моделирование лучевого теплообмена.
3. Моделирование теплообмена за счёт теплопроводности и конвекции.
4. Определение формы и расположения фронта кристаллизации.
5. Предоставление данных, полученных в результате моделирования в виде графиков и таблиц вертикального и горизонтального распределения температур, расположения и формы фронта кристаллизации.
6. Предоставление возможности экспорта полученных данных в форматах, принятых в программах MS Excel и MathCad.

Основной тепловой расчет включает в себя три задачи: сквозной расчет температурного поля и градиентов температуры в расплаве и слитке, расчет лучевого теплообмена между слитком

и поверхностями экрана, тигля и герметизатора и определение координат фронта кристаллизации.



Рис. 5.27 – Структура программного комплекса

Первая из задач решается методом конечных разностей (МКР), основанном на замене истинных значений производных, входящих в дифференциальное уравнение, приближёнными значениями в узлах сетки [17, 18]. Конечно-разностный подход является наиболее эффективным при решении квазистационарных задач.

Простота записи конечно-разностных выражений и отсутствие необходимости построения конечно-элементных сеток делают МКР весьма популярным среди многих пользователей. В данном случае применение МКР способствует ускорению расчетов и позволяет при небольших затратах вычислительных ресурсов сделать ряд “снимков” теплового поля в реальном времени технологического процесса.

Расчетная схема построена с помощью метода переменных направлений [14, 17] который, по-видимому, является лучшим из разностных методов для решения двумерных задач теплопроводности. Он позволяет значительно сократить объем вычислений и получить вполне адекватные результаты при счете даже на сравнительно грубых сетках.

Решение второй задачи основывается на принципе теплового баланса: для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков (4.26).

Определение формы и расположения фронта кристаллизации проводится исходя из известной температуры плавления арсенида галлия и отклонений от неё в направлении поверхностей солидуса и ликвидуса.

Процесс моделирования включает в себя итеративное исполнение всех трёх указанных этапов расчета. После каждой из таких итераций известны: текущее распределение температур в теле монокристалла и размещение и форма фронта кристаллизации. Моделирование заканчивается после достижения требуемой точности, расчёт которой проводится анализом изменения температурного поля в теле монокристалла на текущей итерации по сравнению с предыдущей, либо по достижении заданного числа итераций.

Модуль оптимизации параметров теплового экрана работает по схеме, приведенной в п. 4.4.

На рис. 5.28 и 5.29 показаны программные формы, на которых задаются исходные данные для теплового расчёта, показана общая схема теплового узла ростовой установки и указаны отдельные, наиболее важные геометрические параметры.

В одной из версий программы радиус теплового экрана является дискретной переменной величиной.

На рис. 5.30 показано окно ввода данных для модуля координации работы агентов, участвующих в процессе мониторинга. В частности, требуется своевременное переключение структуры нейронных сетей по мере роста монокристалла.

На рис. 5.31 показано отображение распределения температуры в слитке вдоль вертикальной оси. В программе можно задавать радиус, на котором желательнее контролировать осевое распределение температуры в слитке. При  $R=R_c$  отображается распределение температуры на поверхности слитка.

Исходные данные		
Масса загрузки, кг	Диаметр тигля, мм	Теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК
43	96	T=270 C 150
Масса герметизатора, кг	Высота тигля, мм	Теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК
0,2	200	T=1240 C 140
Масса затравки, кг	Внутренний диаметр экрана, мм	Теплопроводность B2O3, Вт/смК
0,1	92	T=1240 C 20
Заданный диаметр слитка, мм	Высота экрана, мм	Излучательная способность, GaAs (кристалл)
75	200	0,5
Радиус затравки, мм	Плотность GaAs (кристалл), г см <sup>3</sup>	Излучательная способность B2O3
10	5,4	0,75
Длина затравки, мм	Плотность GaAs, (расплав) г см <sup>3</sup>	Кристаллографическое направление плоскости роста
25	5,9	111
Скорость вращения затравки, об/мин	Плотность B2O3, г см <sup>3</sup>	Способ нагрева
6	151	<input checked="" type="radio"/> Радиальный
Скорость вращения тигля, об/мин	Температура плавления GaAs, C	<input type="radio"/> Донно-радиальный
4	1237	
		Сохранить Отмена

Рис. 5.28 – Окно ввода исходных данных для теплового расчета



На рис. 5.32 показано распределение температуры в слитке по радиусу на заданной высоте над уровнем герметизатора. На рис. 5.33 показан график расположения и формы фронта кристаллизации.

Таким образом, разработано программное обеспечение для решения задач виртуального мониторинга температурных полей системы расплав-кристалл и оптимизации формы и расположения основного экрана теплового узла ростовой установки.

Разработанный программный комплекс включает программные модули, реализующие задачи определения температурного поля расплава, слитка и моделирования процесса кристаллизации, которые связаны между собой через главный модуль “Монитор”, обеспечивающий согласованную работу всех частей системы. Пользователь имеет возможность задавать геометрические и физические параметры элементов теплового узла ростовой установки, изменять уставки значений параметров режима выращивания, при необходимости проводить дообучение системы.

На рисунке 5.34 показана панель, на которой отображается динамика параметров процесса выращивания. Полученные данные поступают в базу данных автоматизированной системы управления процессом выращивания на установке “Арсенид-1М”.

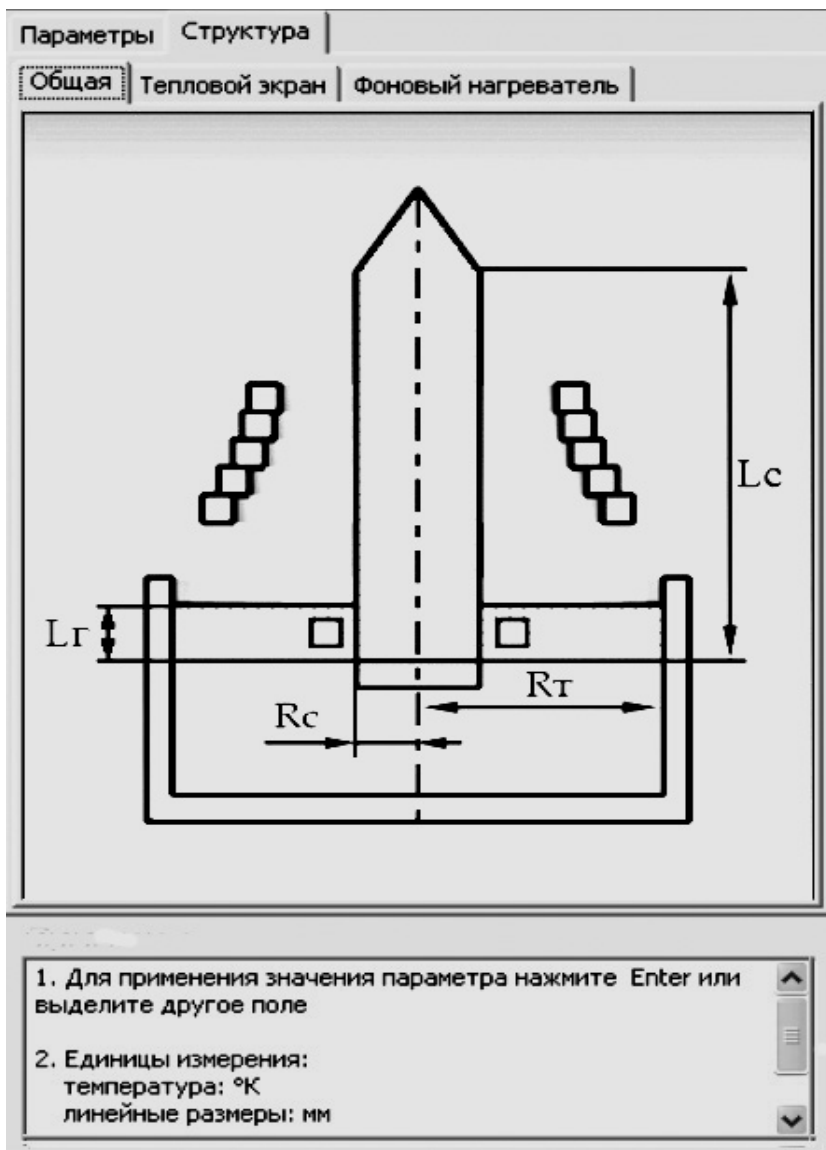


Рис. 5.29 – Общая схема теплового узла ростовой установки

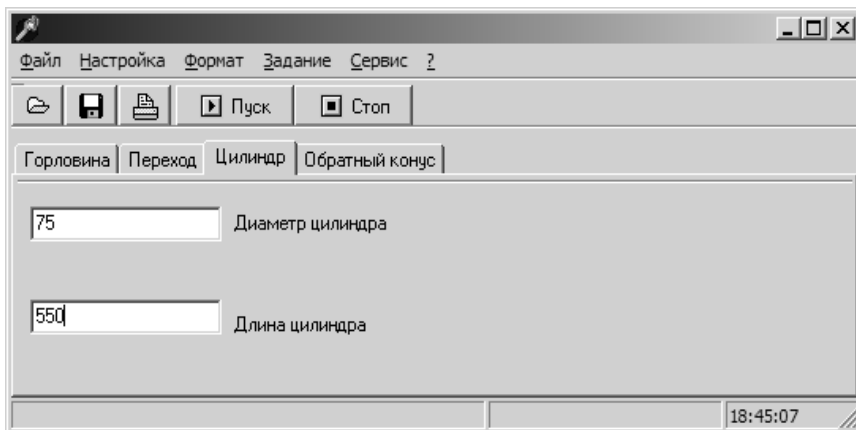


Рис. 5.30 – Окно ввода данных для координатора

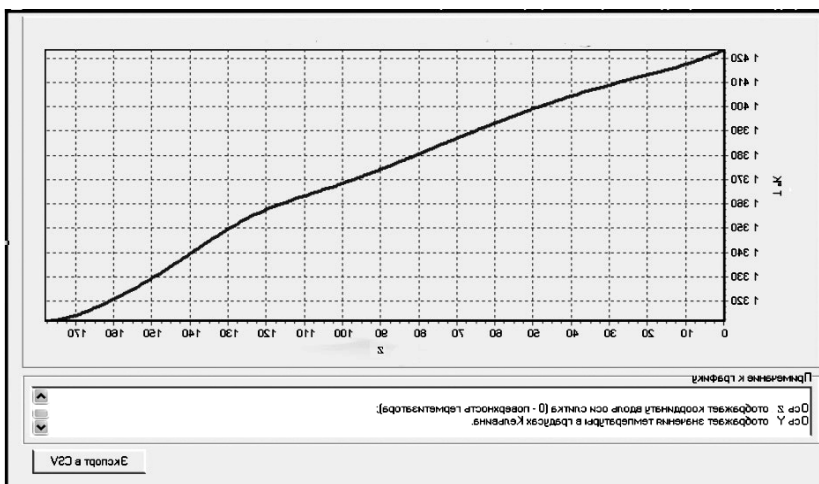


Рис. 5.31 – График распределения температуры в осевом направлении на радиусе 10 мм

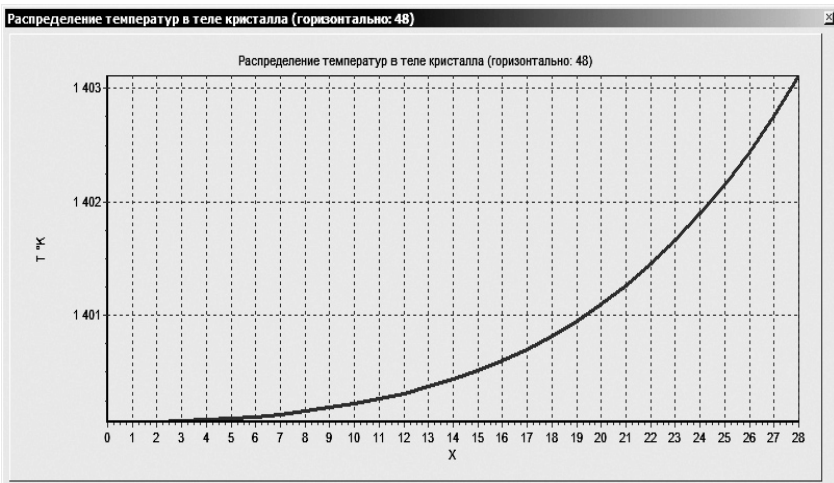


Рис. 5.32 – Пример графика распределения температуры по радиусу слитка на высоте 48 мм над уровнем герметизатора

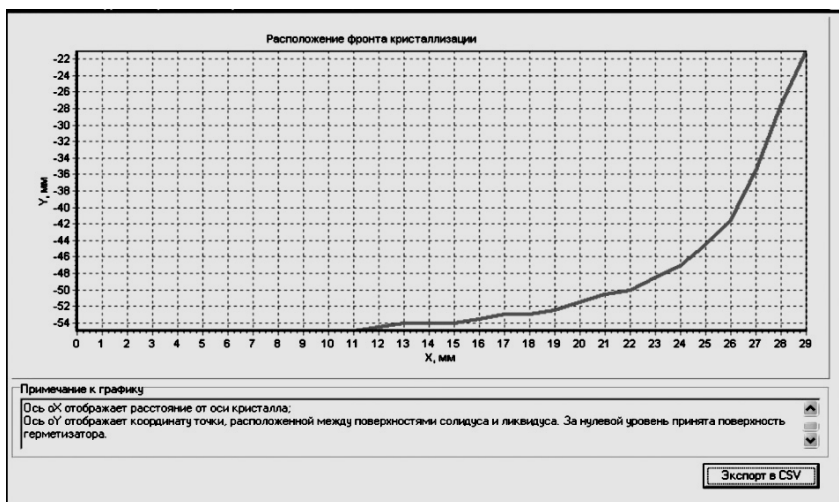


Рис. 5.33 – График расположения и формы фронта кристаллизации

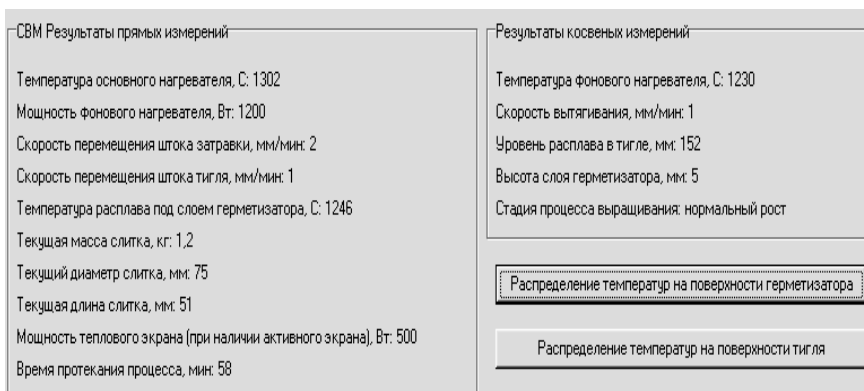


Рис. 5.34 – Панель отображения текущих значений параметров процесса выращивания

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подходы, модели и информационные технологии, рассмотренные в данной книге, составляют теоретический базис для разработки специального программного обеспечения, решающего на новом технологическом уровне задачи оптимизации и контроля тепловых условий при выращивании монокристаллов арсенида галлия методом Чохральского.

Проблему повышения качества выращиваемых монокристаллов можно разрешить, путём решения двух задач. В первой задаче совершенствуются элементы конструкции теплового узла ростовой установки, непосредственно влияющие на температурные поля в расплаве и слитке, которые в свою очередь, влияют на структурное совершенство монокристаллов. Производственный опыт и математическое моделирование показали, что тепловой режим в остывающей части слитка определяется в основном формой, размерами, положением и температурой теплового экрана, окружающего слиток. Именно по этой причине в книге уделяется много внимания моделям и информационной технологии оптимизации геометрических параметров теплового экрана.

Вторая задача – обеспечение непрерывного контроля температурных полей расплава в подкристалльной области и в остывающем слитке.

В существующих серийных ростовых установках мастер-технолог вынужден оценивать температурный режим выращивания, ориентируясь на значение потребляемой мощности нагревателей и свой опыт визуального наблюдения за ходом процесса. Однако для обеспечения стабильных и приемлемых показателей по структурному совершенству при выращивании монокристаллов арсенида галлия диаметром более 60 мм необходимо контролировать температурные поля и градиенты в зоне фронта кристаллизации и в слитке в течение всех стадий процесса.

Реализовать косвенные измерения параметров температурного поля в системе кристалл-расплав можно, используя специальные методики и комплекс предназначенных для этого математических моделей, которые служат виртуальными датчиками

параметров теплового поля. Основным компонентом в этом комплексе является математическая модель расчета температурного поля в расплаве и слитке на основе нейронных сетей. Такая модель позволяет избежать технических сложностей, связанных с частым изменением сложной конфигурации расчетных сеток в реальном времени процесса выращивания.

Таким образом, предлагаемые методы и модели свободны от ряда недостатков и сложностей применения, присущих классическим методам математического моделирования явлений тепломассопереноса. Это дает возможность реализовать косвенные измерения (мониторинг) в режиме реального времени, используя стандартные промышленные компьютеры.

Примеры решения практических задач оптимизации тепловых условий доказывают эффективность и целесообразность применения рассмотренных моделей и информационных технологий.

Обобщая материалы, изложенные в настоящей книге, можно заключить, что применение методов моделирования, основанных на комбинации традиционных численных методов, и технологий искусственного интеллекта при построении моделей сложных объектов и процессов является необходимым условием для обеспечения их качества, устойчивости и надежности.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Информационная технология. Автоматизированные системы. Термины и определения: ГОСТ 34.003-90. – Введ. 01.01.92 – М.: Стандартиформ, 2009. Издание (июль 2009 г.) с Поправкой (ИУС 1-2003) – 16 с. – (Комплекс стандартов на автоматизированные системы).
2. Гроп Д. Методы идентификации систем: пер. с англ. / Д. Гроп. – М. : Мир, 1979. – 302 с.
3. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия: пер. с англ. / М. Шур. – М.: Мир, 1991. – 632 с.
4. Уиссен У. Арсенид галлия в микроэлектронике: пер. с англ. / У. Уиссен, У. Френсли, У. Дункан. – М.: Мир, 1988. – 555 с.
5. Мильвидский М.Г. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников / М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. – М. : Металлургия, 1984. – 256 с.
6. Эйдензон А.М. Условия возникновения дислокаций в первоначально бездислокационных монокристаллах кремния, выращенных из расплава/ А.М. Эйдензон // Изв. АН СССР. Сер. Физическая. 1980. Т. 44. № 2. Т. 44 – С. 312-319.
7. Нашельский А.Я. Технология полупроводниковых материалов / А.Я. Нашельский. – М. : Металлургия, 1972. – 432 с.
8. Шашков Ю.М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания / Ю.М. Шашков. – М. : Металлургия, 1982. – 312 с.
9. Вильке К. Выращивание кристаллов / К. Вильке. – Л. : Недра, 1977. – 600 с.
10. Татарченко В.А. Устойчивый рост кристаллов / В.А. Татарченко. – М. : Наука, 1988. – 310 с.
11. Пузанов Н.И. Влияние условий выращивания на формирование микродефектов в бездислокационном кремнии / Н.И. Пузанов, А.М. Эйдензон, В.И. Роговой // Кристаллография. – 1989. – Т. 34, № 2. – С. 461–470.
12. Бурagas С.Ф. Получение и исследование кристаллов / С.Ф. Бурagas, П.Е. Стадник, Б.Л. Тиман // Сб. научн. трудов Ин-та монокристаллов. – 1978. – С. 78-80.



13. Технология полупроводникового кремния / [Фалькевич Э.С., Пульнер Э.О., Червоний И.Ф. и др.]. – М. : Металлургия, 1992. – 408 с.
14. Калиткин Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
15. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Марчук // М.: Наука, – 1989. – 328 с.
16. Самарский А.А. Теория разностных схем : учебное пособие для ВУЗов / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
17. Самарский А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
18. Каханер Д. Численные методы и программное обеспечение / Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш. – М.: Мир, 1998. – 435 с.
19. Джордж А. Численное решение больших разреженных систем уравнений: пер с англ. / А. Джордж, Дж. Лю. – М. : Мир, 1984. – 343 с.
20. Формалев В.Ф. Метод переменных направлений с экстраполяцией по времени для параболических задач со смешанными производными / В.Ф. Формалев // Вычислительные технологии. – 1996. - №2 – Том 1. – С. 99 – 103.
21. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики: учебное пособие для ВУЗов / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский А.А. – М.: Наука, 1977. – 735 с.
22. Гольд И.М. Математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского / И.М. Гольд, В.С. Лейбович // Автоматизация химической промышленности. – 1973. – С. 7–11.
23. Тевяшев А.Д. Математические модели физических процессов при выращивании монокристаллов методом Чохральского / А.Д. Тевяшев, В.С. Суздаль, Ю.М. Бородавко, А.А. Пелипец // Радиозлектроника и информатика. – 2001. – № 4(17). – С. 33–43.
24. Finite-element simulation of Czochralski bulk flow / M.J. Crochet, P.J. Wouters, F.T. Geyling, A.S. Jordan // J. Crystal Growth. – 1983. – Vol.65, № 1–3. – P. 153–165.
25. Finite elemente analysis of the thermal history for Czochralski growth of large diameter silicon single crystals / A. Virzi // J. Crystal Growth. – 1989. – Vol.97, №1. – С. 152–161.
26. Analysis of crystal-meniscus system behaviour under Czochralski

- crystal growth. Vladimir A. Antonov. *Journal of Crystal Growth* 226 (2001). – p. 555- 561.
27. Везуб Н.А., Простомолотов А.И. Моделирование трехмерных течений расплава при асимметричном выращивании монокристаллов методом Чохральского // Рост монокристаллов и тепломассоперенос. Труды пятой международной конференции в 4-х томах. Обнинск: ГНЦ РФ ФЭИ, 2005. – Т.3. – С. 686-695.
  28. Мамян А.Л. Концентрационное переохлаждение при флуктуациях температуры расплава при выращивании кристаллов методом Чохральского / А.Л. Мамян, О.Г. Налбандян // Физика и химия обработки материалов. – 1985. – № 3. – С. 107 – 110.
  29. Jones A.D.W. The temperature field of a model Czochralski melt / A.D.W. Jones // *J. Crystal Growth*. – 1984. – Vol. 69, № 1. – P. 165–172.
  30. Простомолотов А.И. Сложный теплообмен и гидродинамика в различных вариантах метода Чохральского / Простомолотов А.И., Сидельников С.А., Хенкин В.С., Атабаев С.Ч. – М. Ин-т. пробл. мех., 1989. – 47 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. пробл. мех.; ИПМ 1989–427).
  31. Простомолотов А.И. Математическое моделирование тепловых процессов при выращивании монокристаллов: математические модели и их программная реализация / Простомолотов А.И., Сидельников С.А., Черкасов А.В., Чернышенко О.В. – М. Ин-т. пробл. мех., 1990. – 44 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. пробл. мех.; ИПМ 1990–108).
  32. Бакирова О.И. Численное исследование тепло- и массопереноса в системе расплав-кристалл при получении полупроводниковых материалов / О.И. Бакирова, О.В. Пелевин, А.М. Соколов // Известия АН СССР. Серия: физика. – 1983. – Т. 47, № 2. – С. 334–337.
  33. Chan Y.T. Numerical simulations of Czochralski silicon growth / Y.T. Chan, H.J. Gibeling, H.L. Grubin // *J. Appl. Phys.* – 1988. – Vol. 64, № 3. – С. 1425–1439.
  34. Жариков Е.В. Исследование распределения температур в расплаве при выращивании методом Чохральского / Жариков Е.В., Заварцев Ю.Д., Калитин С.П. – М. Ин-т. общ. физ., 1987. – 14 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. общ. физ.; ИОФ 19879–38).

35. Influence of growth conditions on melt interface temperature oscillations in silicon Czochralski growth / Kuroda Ekyo, Kozuka Hirotosugu. // *J. Crystal Growth*. – 1983. – Vol. 63, № 2. – P. 276–284.
36. Virzi A. Finite element analysis of the thermal history for Czochralski growth of large diameter silicon single crystals / A. Virzi // *J. Crystal Growth*. – 1989. – Vol. 97, № 1. – P. 152–161.
37. Простомолотов А. И. Разработка и применение методов моделирования в технологиях выращивания монокристаллов из расплава: дис. доктора техн. наук : 05.27.06 / Анатолий Иванович Простомолотов. – Москва, 2004. – 362 с.
38. Калаев В. В. Решение сопряжённой задачи гидродинамики и теплообмена в устройствах Чохральского для выращивания кристаллов кремния : дис. канд. физ.-мат. наук : 01.02.05 / Владимир Владимирович Калаев. – Санкт-Петербург, 2003. – 168 с.
39. Numerical modelling of heat transfer in GaSb Czochralski crystal growth (CZ and LEC) / K. Bottcher, A. Kruger, B. Schleusener // *Crystal Res. and Technol.* – 1988. – Vol. 23, № 6. – P. 821–829.
40. Crowley A. A. Modelling of the growth of GaAs by LEC Technique. 1. Thermal distribution in the crystal / A.A. Crowley, E. I. Stern, D. I. Hurle // *Cryst. Growth*. – 1991. – Vol. 108 – № 2. – P. 627–636.
41. Schvezov C. Mathematical modelling of the liquid encapsulated Czochralski growth of gallium arsenide: II. Stress model / C. Schvezov, I. V. Samarasekera, F. Weinberg // *Journal of Crystal Growth*. – 1987. – V. 84, № 2. – P. 219–230.
42. Meduoye G.O. Computer modelling of temperature and stress distributions in LEC-grown GaAs crystals / G.O. Meduoye, D.J. Bacon, K.E. Evans // *Journal of Crystal Growth*. – 1991. – V. 108, № 3–4. – P. 627–636.
43. Looze D.P. Modeling and identification of the liquid encapsulated Czochralski GaAs process for control / Douglas P. Looze, Farzin Azad, Bruce Bernstein, Tom Collins // *Journal of Crystal Growth*. – 1995. – V. 148, № 1–2. – P. 79–95.
44. Meduoye G.O. The minimisation of thermal stresses during the growth of GaAs crystals / G.O. Meduoye, D.J. Bacon, K.E. Evans // *Journal of Crystal Growth*. – 1988. – V. 88, № 3. – P. 397–410.

45. Meduoye G.O. Modelling of the growth of GaAs by the LEC technique : II. Thermal stress distribution and influence of interface shape / G.O. Meduoye, K.E. Evans, D.J. Bacon // Journal of Crystal Growth. – 1989. – V. 97, № 3-4. – P. 709-719.
46. A.S. Jordan, A.R. von Neida and R. Caruso. The theory and practice of dislocation reduction in GaAs and InP. Journal of Crystal Growth, Volume 70, Issues 1–2, December 1984, Pages 555–573.
47. Kelly K.W. Model-based control of thermal stresses during LEC growth of GaAs II. Crystal growth experiments / Kevin W. Kelly, Shahryar Motakef, Keith Koai // Journal of Crystal Growth. – 1991. – V. 113, №s 1-2. – P. 265-278.
48. Ostrogorsky A.G. Infrared absorbance of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> at temperatures to 1250 °C / A.G. Ostrogorsky, K.H. Yao, A.F. Witt // Journal of Crystal Growth. – 1987. – V.84, № 3. – P. 460-466.
49. Hicks T.W. Fluid motion in the encapsulant region of the LEC growth system / T.W. Hicks // Journal of Crystal Growth. – 1987. – V. 84, № 4. – P. 598-600.
50. Бодяньський Є.В., Кучеренко Є.І., Михальов О.І., Філатов В.О., Гасик М.М., Куцин В.С., Методи обчислювального інтелекту в системах керування технологічними процесами феросплавного виробництва / Монографія (Наукове видання) – Днепропетровськ: Національна металургійна академія України, 2011. – 420 с.
51. Цыпкин Я.З. Информационная теория идентификации. М.: Наука, 1995. – 336 с.
52. Бунич А.Л., Бахтадзе Н.Н. Синтез и применение дискретных систем управления с идентификатором. М.: Наука, 2003. – 232 с.
53. Хартман К., Лецкий Э.И., Шеффер В. Планирование эксперимента в исследовании процессов. М.: Мир, 1977. – 552 с.
54. Кашьяп Р.Л., Рао А.Р. Построение динамических стохастических моделей по экспериментальным данным. М.: Наука, 1983. – 383 с.
55. Анализ и моделирование производственных систем / Б.Г. Тамм, М.Э. Пуусепп, Р.Р. Таваст; Под общ. ред. Б.Г. Тамма. – М.: Финансы и статистика, 1987. – 191 с.
56. Бусленко Н.П.. Моделирование сложных систем. М.: Наука, 1978. – 384 с.
57. Дмитриев А.К., Мальцев П.А. Основы теории построения и

- контроля сложных систем. Л.: Энергоатомиздат, 1988. – 192 с.
58. Подчуфаров Ю.Б.. Физико-математическое моделирование систем управления и комплексов / Под ред. А.Г.Шипунова. – М.: Изд-во физико-математической литературы, 2002. – 168с.
59. Ивахненко А.Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем / Ивахненко А.Г. – Киев: Наукова думка, 1981. – 296 с.
60. Люггер Дюю.Ф. Искусственный интеллект. Стратегии и методы решения сложных проблем: Пер. с англ. – 4-е изд. – М.: Издательский дом “Вильямс”, 2003. – 864 с.
61. Нечеткие множества в моделях управления и искусственного интеллекта / Под ред. Д.А. Пospelова. — М.: Наука, 1986. – 312 с.
62. Заде Л.А. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений / Л.А. Заде. – М. : Мир, 1976. – 167 с.
63. Представление и использование знаний: Пер. с япон. / Под ред. Х. Уэно, М. Исидзука. – М.: Мир, 1989. – 220 с.
64. Базы знаний интеллектуальных систем / Т.А. Гаврилова, В.Ф. Хорошевский. – СПб.: Питер, 2000. – 384 с.
65. Гаврилова Т.А., Червинская К.Р. Извлечение и структурирование знаний для экспертных систем. — М.: Радио и связь, 1992. — 200 с.
66. Борисов, В.А. Обработка нечеткой информации в системах принятия решений / В.А. Борисов. – М. : Радио и связь, 1989. – 304 с.
67. Райбман Н.С., Чадеев В.М. Адаптивные модели в системах управления. М.: Советское радио, 1966. – 157 с.
68. Бокс Дж., Дженкис Г. Анализ временных рядов. Прогноз и управление. М.: Мир, 1974. – 408 с.
69. Сейдж Э.П., Мелса Д.Л. Идентификация систем управления. М.: Мир, 1974. – 247 с.
70. Каминская В., Немура А. Статистические методы в идентификации динамических систем Вильнюс: Минтис, 1975. – 198 с.
71. Райбман Н.С., Чадеев В.М. Построение моделей процессов производства. М.: Энергия, 1975. – 336 с.
72. Анисимов С.А., Дынькин В.М., Касавин А.Д. и др. Основы управления технологическими процессами / Под ред. Н.С.

- Райбмана. М.: Наука, 1978. – 440 с.
73. Куржанский А.Б. Управление и наблюдение в условиях неопределенности / Куржанский А.Б. – М. : Наука, 1977. – 392 с.
  74. Малюгин Ю.М., Экало А.В. Применение ЭВМ для решения задач идентификации объектов. Л.: Ленингр. ун-т, 1980. – 257 с.
  75. Райбман Н.С., Капитоненко В.В., Овсепян Ф.А. и др. Дисперсионная идентификация / Под ред. Н.С. Райбмана. М.: Наука, 1981. – 336 с.
  76. Перельман И.И. Оперативная идентификация объектов управления. М.: Энергоиздат, 1982. – 272 с.
  77. Цыпкин Я.З. Основы информационной теории идентификации. М.: Наука, 1984. – 320 с.
  78. Эйкхофф П., Ванечек А., Савараги Е. и др. Современные методы идентификации систем / Под ред. П. Эйкхоффа. М.: Мир, 1984. – 400 с.
  79. Серая О.В. Модели и информационные технологии оценки и прогнозирования состояния многомерных динамических объектов в условиях нечетких входных данных / Дис. канд. техн. наук: 05.13.06 / Оксана Владимировна Серая. – Харьков, 2001. – 251 с.
  80. Суздаль В.С. Системы управления процессами получения монокристаллов из расплава / В.С. Суздаль, П.Е. Стадник // Функциональные материалы для науки и техники. 2001. – С. 514–526.
  81. Алгоритмы оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводниковых материалов методом Чохральского / К.И. Аболмасов, Е.М. Кадер, В.А. Пискунов [и др.] // Научные труды ГИРЕДМЕТА: Средства и системы автоматического контроля и управления. – 1976. – Т. 78. – С. 34–45.
  82. Лейбович В.С. Автоматическое управление процессом роста монокристаллов / В.С. Лейбович, В.А. Сухарев, В.М. Шушков, В.А. Федоров // Приборы и системы управления. – 1975. – № 5. – С. 7–9.
  83. Лейбович В.С. Управление формообразованием кристаллов на основе динамической модели объекта регулирования / В.С. Лейбович // Материалы электронной техники. – 1983. – Ч.1. – С. 161–179.
  84. Лейбович В.С. Динамические модели процессов кристалли-

- зации из расплавов / В.С. Лейбович // Математические модели в АСУТП. – 1983. – Вып. 47. – С.15–27.
85. Satunkin G.A. Mathematical modeling and control system design of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski process: the basic low order mathematical model / G.A. Satunkin // J. Crystal Growth. – 1995. – Vol. 154. – P. 172-188.
86. Оксанич А.П. Автоматизация выращивания монокристаллов полупроводников по методу Чохральского / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко // Научные труды КГПИ. – 2000. – №1. – С. 364–367.
87. Оксанич А.П. Автоматизация и моделирование процессов выращивания структурно-совершенных монокристаллов кремния большого диаметра / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко // АСУ и приборы автоматики. – 2001 – Вып. 117. – С. 165–175.
88. Оксанич А.П. Автоматизированная система управления процессом выращивания совершенных монокристаллов кремния по методу Чохральского (АСУ “Кремень”) / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко, С.Э. Притчин // Нові технології. Науковий вісник Інституту економіки та нових технологій. – 2002. – № 1(1). – С.7–13.
89. Оксанич А.П. Разработка стохастических моделей передаточных функций для системы управления процессом выращивания монокристаллов кремния большого диаметра / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко // Вестник Херсонского государственного технического университета. –2002. - № 2(15). – С. 360-363.
90. Оксанич А.П. Оценивание адекватности стохастических моделей передаточных функций системы управления процессом выращивания монокристаллов кремния / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко // Нові технології. Науковий вісник Інституту економіки та нових технологій. – 2004. – № 3(6). – С. 12–14.
91. Суздаль В.С. Алгоритмизация управления процессами выращивания монокристаллов из расплава / В.С. Суздаль // Сб. науч. тр. Харьковского государственного политехнического университета. – 1998. – Вып.6, ч.1. – С. 421-425.
92. Налбандян О.Г. Управление процессом выращивания кристаллов методом Чохральского с помощью скорости вытягивания / О.Г. Налбандян // Кристаллография. – 1982. – Т. 29, № 3. – С. 620–621.
93. Nalbandyan H.G. Possibility of programming and optimal control

- of growth in the Czochralski technique / H.G. Nalbandyan // J. Crystal Growth. – 1984. – Vol. 67, № 1. – P. 115–118.
94. Горилецкий В.И. Автоматизация процессов выращивания и управление свойствами крупногабаритных щелочногалоидных монокристаллов / В.И. Горилецкий, К.В. Шахова // Функциональные материалы для науки и техники. – 2001. – С. 466 – 489.
95. Булавский Д.В. Автоматизированная система управления установкой для выращивания монокристаллов кремния / Д.В. Булавский, В.Е. Зюбин, Н.Н. Карлсон, В.О. Криворучко, В.В. Миронов // Автометрия. – 1996. – № 2. – С. 32–34.
96. Горилецкий В.И. Принцип управляемого вытягивания монокристаллов из расплава / В.И. Горилецкий, А.В. Радкевич, Л.Г.Эйдельман. // Сб. науч. тр. НИИТЭХИМ. – 1977. – С. 37–40.
97. Оксанич А.П. Новые принципы построения устройств контроля процессов выращивания структурно-совершенных слитков кремния большого диаметра / А.П. Оксанич, Н.Д. Вдовиченко // Радиоэлектроника и информатика. – 2001. – № 1. – С. 42–45.
98. Суздаль В.С. Архитектура АСУ ТП получения монокристаллов из расплава / В.С. Суздаль // Вестник Харьковского государственного политехнического университета. – 2000. – Вып. 119. – С.15–18.
99. Волохов С.А. Разработка аппаратуры, систем управления и контроля технологических процессов выращивания слитков кремния для солнечной энергетики / Дис. кандидата техн. наук: 05.27.06 / Сергей Александрович Волохов. – Кременчуг, 2010. – 163 с.
100. Тавровский И.И. Синтез робастного регулятора заданной структуры для процесса кристаллизации / Дис. кандидата техн. наук: 05.13.07 / Игорь Игоревич Тавровский. – Харьков, 2011. – 156 с.
101. Оксанич А.П. Архітектура і функціональність дворівневої системи управління вирощуванням злитків кремнію / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко, С.Э. Притчин // Радіоелектроніка та інформатика. – 2007. - № 4 (39). – с. 49-53.
102. А. с. 1798396 СССР, МКИ С30 В 15/28, G05 D 27/00. Способ выращивания кристаллов из расплава в автоматическом



- режиме / В.Н. Курлов, И.С. Пентьков, Б.С. Редькин (СССР). – № 4848199/26 ; заявл. 09.07.90 ; опубл. 28.02.93, Бюл. № 8.
103. Пат. 2023063 РФ, МКИ С30 В 15/00, G05 D 27/00. Способ выращивания кристаллов из расплава в автоматическом режиме / В.Н. Курлов, И.С. Пентьков, Б.С. Редькин (РФ). – №4863983/26 ; заявл. 09.07.90 ; опубл. 28.02.94, Бюл. № 21.
104. Пат. 47988А Україна, 330В 15/20, 33В 15/126. Спосіб вирощування монокристала та пристрій для його здійснення / О.В. Третьяков, А.П. Оксанич, С.Е. Притчин, В.Р. Петренко, О.О. Слюсаренко.; заявники і патентовласники О.В. Третьяков, А.П. Оксанич, С.Е. Притчин, В.Р. Петренко, О.О. Слюсаренко. - № 2002021161 ; заявл. 12.02.02 ; опубл. 15.07.02, Бюл. №7
105. Выращивание кристаллов постоянного диаметра методом контроля уровня расплава / Б.Л. Тиман, С.Ф. Бурачас // Кристаллография. – 1981. – Т. 26, Вып. 4. – С. 892-894.
106. Automated pulling of large alkali halide single crystals / V.I. Goriletzky, V.A. Nemenov, A.A. Protsenko [at al] // J. Crystal Growth. - 1981. – Vol. 52, № 3. – P. 509-513.
107. Analysis of the dynamics of the controlled crystallization process using the Czochralski method / G.A. Satunkin, S.N. Rosolenko // J. Cryst. Res. Technol. – 1986. - Vol. 21, № 9. – P. 1125-1138.
108. Automated growing of large single crystals controlled by melt level sensor / V.I. Goriletzky, L.G. Eidelman, V.A. Nemenov [at al] // Crystal Res. and Technol. – 1985. – Vol. 20, № 2. – P. 167–172.
109. Bardsley W. Automatic control of czochralski crystal growth / W. Bardsley, G. W. Green, C. H. Holliday and D. T. J. Hurle // Journal of Crystal Growth. – 1972. – №16. – P. 277–279.
110. Riedling K. Autonomous liquid encapsulated Czochralski (LEC) growth of single crystal GaAs by “intelligent” digital control / K. Riedling // Journal of Crystal Growth. – 1988. – №89. – P. 435–446.
111. M. A. Gevelber. Dynamics and control of the Czochralski process. II. Objectives and control structure design / M.A. Gevelber, G. Stephanopoulos, M. J. Wargo //Journal of Crystal Growth. – 1988. – №91. – P. 199–217.
112. Панфилов И.В. Применение математического моделиро-

- вания для анализа процессов теплообмена при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского в промышленных установках: дис. на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.27.06 / Игорь Владимирович Панфилов. – Москва, 2002. – 129 с.
113. Shahryar Motakef. Thermoelastic analysis of GaAs in lcc growth configuration : II. Temporal evolution of the stress field / Shahryar Motakef // Journal of Crystal Growth. – 1988. – V. 88, № 3. – P. 341-352.
114. Ramachandran P.A. Simulation of temperature distribution in crystals grown by Czochralski method / P. A. Ramachandran, M. P. Dudukovi // Journal of Crystal Growth. – 1985. – V. 71, № 2. – P. 399-408.
115. Оксанич А.П. О связи напряженного состояния с дефектами кристаллической структуры в арсениде галлия / А.П. Оксанич, Ю.А. Концевой, В.М. Чернер, Г.Д. Мельников // Заводская лаборатория. – 1987. – №7. – С. 90-91.
116. Principles of the control system for dislocation-free silicon single crystal diameter and melt temperature / A.P. Oksanich, S.E. Pritchyn, N.D. Vdovichenko // Functional materials. – 2001. – Vol. 8, № 2. – P. 377-380.
117. Оксанич А.П. Моделирование процессов образования дислокаций под действием термических напряжений в слитках GaAs, выращиваемых из расплава методом Чохральского с жидкостной герметизацией / А.П. Оксанич, Л.Г. Шепель, В.В. Батареев // Прикладная радиоэлектроника. – 2005. – Т.4, №2. – С. 185–194.
118. Оксанич А.П. Разработка процедуры определения температурных полей и термопластических напряжений в слитках GaAs, выращенных ЛЕС методом / А.П. Оксанич, П.А. Хозя, С.Э. Притчин // Новые технологии. Научный вестник Кременчугского университета экономики, информационных технологий и управления. – 2008. – № 1(9). – С. 4–10.
119. Оксанич А.П. Промышленные методы и устройства исследования напряженно-деформированного состояния полупроводниковых материалов / А.П. Оксанич. – Харьков : Институт монокристаллов, 2001. – 82 с.
120. Оксанич А.П. Модель термоупругих напряжений и плот-

- ности дислокаций в кристаллах GaAs, выращиваемых из расплава / А.П. Оксанич, А.В. Вашерук, П.А. Хозя // Сложные системы и процессы. – 2007. – №2. – С. 3–8.
121. Оксанич А.П. Математическое моделирование процесса выращивания Cz монокристаллов GaAs с использованием 3D информации о термоупругих напряжениях / А.П. Оксанич, А.В. Вашерук, П.А. Хозя // Праці Луганського відділення Міжнародної Академії інформатизації. – 2007. – №2(15), Ч.1. – С. 89-93.
122. Степанов А.Е. Математическое моделирование процессов выращивания кристаллических полупроводниковых материалов / А.Е. Степанов, Л.Г. Кириллова. – Киев: Наукова думка, 1988.–184 с.
123. Бургагас С.Ф. Анализ условий выращивания монокристаллов методом Чохральского / С.Ф. Бургагас // Физика и химия кристаллов. – 1977. – № 5 – С. 88-94.
124. Гольд И.М. Математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского / И.М. Гольд, В.С. Лейбович // Автоматизация химической промышленности. – 1973. – С. 7-11.
125. Ландау Л.Д. Гидродинамика / Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - М. : Наука, 1986. –736 с.
126. Галин Н. М. Тепломассообмен / Н.М. Галин, П.Л. Кириллов. – Москва : Энергоатомиздат, 1987. – 347 с.
127. Когаловский М. Р. Перспективные технологии информационных систем. –М.: ДМК Пресс; М.: Компания АйТи, 2003. – 288 с.
128. Васильев А.Н. О нейросетевом подходе к построению приближенных решений прикладных задач математической физики / А.Н. Васильев // Научно-технические ведомости СПбГТУ. – 2006. – №3. – с. 182-186.
129. Горбаченко В. И. Пути использования нейронных сетей для решения обратных задач математической физики // В. И. Горбаченко, С. А. Москвитин // Нейроинформатика и ее приложения: Материалы XIV Всероссийского семинара, 6–8 октября 2006 г. / ИВМ СО РАН – Красноярск, 2006 – С. 35 - 36.
130. H. Lee and I. Kang. Neural algorithms for solving differential equations // Journal of Computational Physics. – 1990. – V.91. –

- P.110-117.
131. L.Wang and J.M.Mendel. Structured trainable networks for matrix algebra // IEEE Int. Joint Conference on Neural Networks. – 1990. – V. 2. – P. 125-128.
  132. Anshul Gupta, George Karypis, Vipin Kumar. Highly Scalable Parallel Algorithms for Sparse Matrix Factorizations. // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. – 1995. – V.8. N.5. – P. 502-520.
  133. I.E. Lagaris, A. Likas and D.I. Fotiadis. Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations // IEEE Transactions on Neural Networks. – 1998. – V. 9. N 5. – P.422-448.
  134. I.E. Lagaris, A. Likas and D.I. Fotiadis. Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations // IEEE Trans. on Neural Networks. – 1998. – V. 4. – P. 987-1000.
  135. Васильев А.Н. Математическое моделирование систем с распределенными параметрами на основе нейросетевой технологии / Дис. доктора техн. наук: 05.13.18 / Александр Николаевич Васильев. – С. – Петербург, 2011. – 365 с.
  136. Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы: пер. с польск. / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский. – М.: Горячая линия – Телеком, 2004. – 452с.
  137. Оксанич А.П. Метод и нейросетевая модель расчёта температурного поля расплава в процессе выращивания методом Чохральского / А.П. Оксанич, И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская // Інформаційні системи і технології. Математичне моделювання. Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського. – 2010. – № 1(72). Частина 1. – С. 54-60.
  138. A Neural Network Approach in a Backward Heat Conduction Problem / F. T. Mikki, E. I. Issamoto, J. da Luz, P. P. B. de Oliveira, H. F. Campos-Velho, J. D. S. da Silva // Proceedings of the IV Brazilian Conference on Neural Networks, 1999. P. 19 – 24.
  139. Краснопольская Ю.А. Нейросетевая модель расчёта температурного поля слитка в процессе выращивания монокристаллов методом Чохральского / Ю.А. Краснопольская, И.В. Шевченко, Е.А. Глушков, М.В. Репин // Нові технології. Науковий вісник ІЕНТ. – 2009. – № 2(24). – С. 3-9.

140. Технологические приемы улучшения теплового режима выращивания кристаллов GaAs методом Чохральского / Г.П. Ковтун, А.И. Кравченко, А.И. Кондрик, А.П. Щербань. // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2004. – №6. – с. 3–6.
141. Шевченко И.В. Моделирование процесса выращивания полупроводниковых материалов на основе нейронной сети и нечёткого клеточного автомата / И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская, Е.А. Глушков, С.Л. Шкатуло // Нові технології. Науковий вісник ІЕНТ. – 2010. – № 1(27). – С. 169–177.
142. Wolfram S. Universality and complexity in cellular automata / S. Wolfram // Physica № 10. – 1984. – Р. 1–35.
143. Тоффоли, Т. Машины клеточных автоматов / Т. Тоффоли, Н. Марголус. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
144. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации / Авдонин Н.А. – Рига : Знание, 1980. – 178 с.
145. Кан Дж. Теория роста кристалла и движения границы раздела фаз в кристаллических материалах // Успехи физ. наук. – 1967. – 91, вып. 4. – С. 677-689.
146. Рост кристаллов / [Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С.]. – Х. : АКТА, 2002. – 535 с.
147. Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур / [Самарский А.А., Попов Ю.П. и др.]. – М. : Наука, 1986. – 200 с.
148. Татарченко В.А. Параметрическое исследование модели роста кристаллов способами Чохральского и Степанова / В.А. Татарченко, Е.В. Татарченко, В.С. Успенский // Известия АН СССР. Серия: физика. - 1988. – Т. 52, № 10. – С. 1927–1931.
149. Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации / В.З. Беленький. - М. : Наука, 1980. – 88 с.
150. Темкин Д. Е. О молекулярной шероховатости границы кристалл-расплав // Механизм и кинетика кристаллизации. – Минск : Наука и техника, 1964. – С. 86-97.
151. Лодиз Р. Рост монокристаллов / Лодиз Р., Паркер Р.: пер. с англ. – М. : Мир, 1974. – 540 с.
152. Тевяшев, А. Д. Математическое моделирование термо- и

- гидродинамических процессов в тепловом узле установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского / Тевяшев А. Д., Бородавко Ю. М., Гуменный А. Ф. // Новые технологии. – Кременчуг: ИЭНТ. – 2003. – №2(3). – С. 6-10.
153. Оксанич А.П. Виртуальный датчик для мониторинга температуры фонового нагревателя в тепловом узле установки для выращивания монокристаллов арсенида галлия / А.П. Оксанич, И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская // Автоматизированные системы управления и приборы автоматики: Всеукраинский межведомственный научно-технический сборник. Харьковский Национальный университет радиоэлектроники. – 2011. – вып. 156. – С. 16-26.
154. Оксанич А.П. Математическая модель геометрии теплового узла установки для выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А.П. Оксанич, П.А. Хозя, И.В. Шевченко, В.А. Тербан // Прикладная радиоэлектроника. – Харьков, 2008. – Т. 7, №4. – С. 351–355.
155. Оксанич А.П. Усовершенствование математической модели взаимодействия тепловых потоков излучения слитка и экрана в установке для выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А.П. Оксанич, И.В. Шевченко, В.А. Тербан // 3-я Международная научная конференция “Функциональная компонентная база микро-, опто- и наноэлектроники”, 28 сентября – 2 октября 2010 г. : Сборник научных трудов. – Харьков – Кацивели: ХНУРЭ 2010. – с. 201 – 204.
156. Оксанич А.П. Чисельно-аналітичне рішення задачі теплообміну з поверхні злитка в процесі вирощування монокристалів GaAs методом Чохральського з рідинною герметизацією / А.П. Оксанич, П.О. Хозя, І.В. Шевченко // Нові технології. Науковий вісник Кременчуцького університету економіки, інформаційних технологій і управління. – 2008. – №4(22). – С. 10–17.
157. Оксанич А.П. Численно-аналитический подход к моделированию тепловых явлений в процессе выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А.П. Оксанич, А.П. Хозя, И.В. Шевченко // Складні системи і процеси. – 2008. – №2. – С. 14–18.
158. Шевченко І.В. Оптимизация конфигурации теплового

- экрана ростовой установки по критерию минимума неравномерности осевых температурных градиентов / И.В. Шевченко, А.П. Оксанич, С.А. Волохов // Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Дніпропетровськ, 2010. – №1(66). – с. 3–17.
159. Тилман Б.Л. Анализ условий выращивания монокристаллов методом Чохральского / Б.Л. Тилман, С.Ф. Бурачас // Физика и химия кристаллов. – 1977. – № 3. – С. 1–5.
160. Васильев В.Ф. Методы оптимизации / В.Ф. Васильев. – М.: изд. Факториал-Пресс, 2002. – 824 с.
161. Курейчик В. М. Генетические алгоритмы и их применение / В. М. Курейчик. – Таганрог: ТРТУ, 2002. – 242 с.
162. Beasley J.E., Chu P.C. A Genetic Algorithm for the Set Covering Problem // European J. Oper. Res. – 1996. – Vol. 94, – 2. – P. 394-404.
163. Balas E., Niehaus W. Optimized Crossover-Based Genetic Algorithms for the Maximum Cardinality and Maximum Weight Clique Problems // Journ. of Heuristics. – 1998. – Vol. 4, – 4. – P. 107-122.
164. Оксанич А.П. Влияние тепловых условий на термоупругие напряжения в слитках ПИН GaAs, выращиваемых по ЛЕС технологии / А.П. Оксанич, И.В. Шевченко, В.А. Тербан // Прикладная радиоэлектроника. – 2011 – Харьков. – Том 10, № 1. – С. 101-105.
165. Лебедев В.Л. Исследование динамических характеристик основных параметров, воздействующих на рост кристалла методом Чохральского / В.Л. Лебедев, И.Д. Раскин // Научные труды ГИРЕДМЕТА. – 1984. – Вып. 5. – С. 57–61.
166. Горилецкий В.И. Динамика процесса кристаллизации при вытягивании из расплава крупногабаритных оптических монокристаллов / В.И. Горилецкий, В.А. Нейменов, А.В. Радкевич, Л.Г. Эйдельман // Сб. науч. тр. : Физика и химия оптических и сцинтилляционных материалов. – 1985. – № 14. – С. 6-10.
167. Пономарёв С.В. Теоретические и практические аспекты теплофизических измерений : моногр. / С.В. Пономарёв, С.В. Мищенко, А.Г. Дивин ; Тамбовский гос. техн. ун-т. – Тамбов, 2006. – 204 с.

168. Кирьянов Д.В. Вычислительная физика / Д.В. Кирьянов, Е.Н. Кирьянова. - М.: Полибук Мультимедиа, 2006. – 352 с.
169. Лыков А.В. Теория теплопроводности / А.В. Лыков. – М.: Высшая школа, 1967. – 600 с.
170. Берман Г. Теплопроводность твёрдых тел : моногр. / Г. Берман . – М.: Мир, 1979. – 286 с.
171. Лейбович В.С. Динамика процессов кристаллизации из расплава / В.С. Лейбович // Рост кристаллов. – 1986. – Т. 15. – С. 143-156.
172. Хартман К. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов / К. Хартман, Э. Лецкий, В. Шефер. – М.: Мир, 1977. – 552 с.
173. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ. /Д.К. Монтгомери. – Л.: Судостроение, 1980. – 384 с.
174. Афифи А. Статистический анализ. Подход с применением ЭВМ / А. Афифи, М. Эйзен : Мир, 1982. – 484 с.
175. Мудров В.И. Методы обработки измерений / В.И. Мудров, В.Л. Кушко. – М. : Радио и связь, 1983. – 304 с.
176. Айвазян С.А. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных / Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. – М. : Финансы и статистика, 1983. – 471 с.
177. Куржанский А.Б. Управление и наблюдение в условиях неопределенности / Куржанский А.Б. - М. : Наука, 1977. - 392 с.
178. Добрыдень В.А. Об одном классе стратегий контроля случайного процесса с независимыми приращениями / В.А. Добрыдень, О.К. Илюнин, В.П. Кольцов // Радиотехника. – 1976. – Вып. 41. – С. 49-58.
179. Оксанич А.П. Оптимизация решений при возникновении нештатных ситуаций в процессе выращивания монокристаллов кремния / А.П. Оксанич, В.Р. Петренко, Л.Г. Шепель // Вісник Кременчуцького державного політехнічного університету. – 2007. – Вип. 3(44), ч. 2. – С. 164-168.
180. Борзенко И.М. Адаптация, прогнозирование и выбор решений в алгоритмах управления технологическими процессами / Борзенко И.М. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 144 с.
181. Методы робастного, нейро-нечеткого и адаптивного управления / Под ред. Н.Д. Егупова. – М. : Изд-во МГТУ им. Н.



- Э. Баумана, 2002. – 744 с.
182. Красовский А.А. Универсальные алгоритмы оптимального управления непрерывными процессами / А.А. Красовский, В.Н. Буко, В.С. Шендрик. – М. : Наука, 1977. – 272 с.
183. Уотермен Д. Руководство по экспертным системам: пер. с англ. / Д. Уотермен. – М.: МИР, 1989. – 338 с.
184. Бочарников В.П. Fuzzy Technology: основы моделирования и решения экспертно-аналитических задач. – К.: Эльга, Ника – Центр, 2003. – 296с.
185. Takagi T. Fuzzy identifications of systems and its application to modeling and control / T. Takagi, M. Cugeno // IEEE Trans. SMC, 1985. – p. 116-132.
186. Орловский С.А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации. / С.А. Орловский. – М.: Наука, 1984. – 206с.
187. Захаров В.Н. Современная информационная технология в системах управления // Известия академии наук. Теория и системы управления. 2000. №1, С. 70–78.
188. Шевченко И.В. Программное обеспечение для расчёта температурного поля в слитках GaAs, выращиваемых по ЛЕС-технологии / И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская, С.Л. Шкатуло // Інформаційно-управляючі системи та технології. Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського. – 2011. – № 4(69). Частина 1.– С. 38-42.
189. Шевченко І.В., Краснопольська Ю.О. Програмне забезпечення для розрахунку температурного поля у злитку монокристала арсеніду галію, вирощеного методом Чохральського за ЛЕС-технологією: перша міжнародна науково-практична конференція “Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка”, м. Кременчук, КрНУ ім. М. Остроградського, 5–7 травня 2011р. – Кременчук, 2011. – С. 72-74.