
**ВИРТУАЛЬНЫЙ ДАТЧИК ДЛЯ МОНИТОРИНГА ТЕМПЕРАТУРЫ
ФОНОВОГО НАГРЕВАТЕЛЯ В ТЕПЛОМ УЗЛЕ УСТАНОВКИ
ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ**

Разрабатывается математическая модель – виртуальный датчик температуры фонового нагревателя, используемого для формирования оптимальных тепловых условий в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации при выращивании слитков полуизолирующего GaAs по LEC-технологии. Выполняется проверка адекватности модели в ходе экспериментов на различных стадиях процесса выращивания. Модель используется как составная часть информационной технологии мониторинга качества процесса выращивания монокристаллов полупроводников.

1. Введение

Выращивание монокристаллов GaAs по LEC-технологии является сложным, многофакторным процессом, и для обеспечения выполнения требований к структурному совершенству и другим параметрам кристаллов требует применения эффективных технологий контроля и управления. Существующие системы контроля параметров процесса выращивания используют прямые измерения температуры основного нагревателя, потребляемой фоновым нагревателем (ФН) мощности, скорости вращения кристалла и тигля, а также косвенные измерения уровня расплава в тигле и диаметра слитка [1]. Однако для мастера-технолога важным является температура фонового нагревателя, которая во многом определяет температурные градиенты в зоне кристаллизации. Измерять температуру ФН и определять параметры температурного поля в расплаве путем прямых измерений при помощи термопар допустимо только в ходе специально поставленных экспериментов, связанных с научно-техническими исследованиями. Это обусловлено тем, что согласно методу Чохральского слиток, вращаясь, вытягивается из расплава, который в свою очередь находится во вращающемся тигле. Расплав имеет температуру более 1000°C. Во время вытягивания монокристалла постоянно держать в расплаве какой либо датчик температуры практически невозможно. Температуру расплава на его поверхности в принципе можно определять косвенным методом, например пирометрическим. Однако при выращивании монокристаллов арсенида галлия над расплавом располагается слой герметизатора (Ba_2O_3), который, имея низкую теплопроводность, искажает результаты пирометрических измерений. Таким образом, мастер-технолог вынужден субъективно оценивать температуру ФН, ориентируясь на значение потребляемой мощности и свой опыт.

Реализовать косвенные измерения температуры ФН и вычислять температурные градиенты в зоне кристаллизации можно, используя специальные методики и комплекс предназначенных для этого математических моделей, которые служат виртуальными датчиками параметров теплового поля. Основным компонентом в этом комплексе является численная модель расчета температурного поля в расплаве и слитке на основе метода конечных разностей. Вспомогательные модели, построенные на основе нейронных сетей и нечетких клеточных автоматов, позволяют повысить адекватность результатов расчета температурного поля [2, 3].

Поскольку при выращивании монокристаллов полуизолирующего GaAs используется фоновый нагреватель, помещенный в слой герметизатора, в упомянутый комплекс моделей необходимо включать и виртуальный датчик измерения температуры фонового нагревателя, как источника теплоты в расчетной сетке метода конечных разностей. Кроме того, постоянный контроль температуры фонового нагревателя представляет отдельную проблему, связанную с необходимостью оптимизации значения его температуры на разных этапах процесса выращивания в автоматизированной системе управления качеством процесса выращивания.

Целью данного исследования является разработка математической модели – виртуального датчика температуры ФН и усовершенствование функциональной модели системы “Советчик мастера”, использующей информационную технологию виртуального мониторинга параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs по LEC-технологии.

2. Постановка задачи и её связь с научными проблемами

Регулировать отток тепла от боковой поверхности слитка в районе фронта кристаллизации и тем самым влиять на радиальные температурные градиенты можно путем регулирования температуры (мощности) дополнительного (фонового) нагревателя, размещенного в слое герметизатора [4, 5] (рис. 1). Конструкция фоновых нагревателей выбрана таким образом, чтобы обеспечить локальное воздействие на поверхность расплава в области формирования растущего слитка и создание температур на нагревателе от 800 до 1300°C. Следует сказать, что технологические условия выращивания, обеспечивающие получение монокристаллов с требуемой плотностью дислокаций $N \leq 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$, являются весьма жесткими. Например, повышение температуры ФН свыше 1200°C приводит к сильному поверхностному разложению монокристалла и срыву монокристаллического роста. Снижение температуры ФН ниже 850°C незамедлительно сказывается на возрастающей плотности дислокаций. Уменьшение скорости подъема затравки также приводит к сильному поверхностному разложению кристалла, а увеличение скорости подъема приводит к ухудшению монокристаллического роста и двойникованию. Такая жесткость требует корректировки теплового режима у фронта кристаллизации в процессе выращивания и непрерывного контроля температуры 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 для построения адекватной математической модели косвенного измерения температуры ФН следует признать регрессионный метод.

Таким образом, для разработки адекватной математической модели и методики измерения, пригодной для косвенного измерения температуры ФН на разных стадиях выращивания, 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.

3. Эксперименты и результаты

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, скорость вращения затравки и тигля, уровень расплава в тигле, скорость вытягивания затравки.

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 от 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:

$$q_{\text{пгi}} = \sigma \varepsilon_i T_i^4 + p_i N_i + \alpha (T_i - T_{\text{ср}}), \quad (1)$$

где σ – постоянная Больцмана; ε_i – коэффициент излучения с единичной i -й поверхности герметизатора; T_i – температура единичной i -й поверхности герметизатора; p_i – отражательная способность единичной поверхности; N_i – внешний теплопоток на единичную поверхность от поверхностей теплового узла и слитка; α – коэффициент конвективной теплоотдачи; $T_{\text{ср}}$ – температура среды над герметизатором.

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 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 течение 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 (1), т.е. 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 снижение 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: X_1 – потребляемая мощность ФН; X_2 – температура ОН; X_3 – скорость вытягивания; X_4 – скорость вращения затравки; X_5 – скорость вращения тигля; X_6 – уровень расплава.

В табл. 1 приведены обозначения, названия и уровни перечисленных факторов.

Таблица 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 затравки, об/мин	10	20	–	–	–
5	Скорость вращения тигля, об/мин	5	10	–	–	–
6	Уровень расплава, %	100	80	60	40	20

Уровни факторов нумеровались и кодировались в соответствии с общепринятой практикой по формуле:

$$x_j = \frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{0j}}{\Delta\tilde{x}_j},$$

где x_j – кодированные значения факторов; $\tilde{x}_j$ – натуральные значения факторов на верхнем, основном и нижнем уровнях; $\tilde{x}_{0j}$ – натуральные значения факторов на основном уровне; $\Delta\tilde{x}_j$ – натуральное значение интервалов варьирования факторов; j – номер фактора.

Для натурального исследования влияния перечисленных факторов на температуру фонового нагревателя был составлен предварительный план эксперимента, структура которого показана в табл. 2, где 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, т.е. к значительным материальным потерям. Поэтому количество экспериментов на ростовой установке приходится ограничивать.

2. Смена уровней факторов X_1 и X_2 предполагает выдержку времени, в течение которой затухает переходный процесс и устанавливается новый тепловой режим. Учитывая тот факт, что фактор X_6 (уровень расплава) является динамическим, строгая фиксация его уровня предполагает, что факторы X_1 и X_2 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 X_6) последовательно проходит все указанные в табл. 1 ступени, и изменить их порядок невозможно.

Все эти условия определили стратегию проводимых экспериментов. Были проведены 7 процессов выращивания, в которых исследуемые факторы $X_1...X_5$ изменялись так, чтобы строки табл. 2 чередовались случайным образом, но без нарушения чередования уровней фактора X_6 . 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 их 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 разращивания, 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. 1. Обработка данных эксперимента и синтез регрессионной модели проводились в пакетах MS Excel и StatGraphics 3.

Таблица 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
18	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
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

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 [6]:

$$S_i^2 = (\sum_{q=1}^m (y_{iq} - \bar{y}_i)^2) / (m - 1), i=1, 2, \dots, N,$$

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):

$$G = S_{\max}^2 / \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

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 [2] 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 $G_{\text{эксп}}=0,092537$, что существенно меньше соответствующего интерполированного таблично-го значения (0,2152) для уровня значимости 0,01 [5].

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 R2 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 термопарой $\pm 1^\circ\text{C}$ и желательной точности косвенных измерений не хуже $\pm 3^\circ\text{C}$.

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 можно удалить.

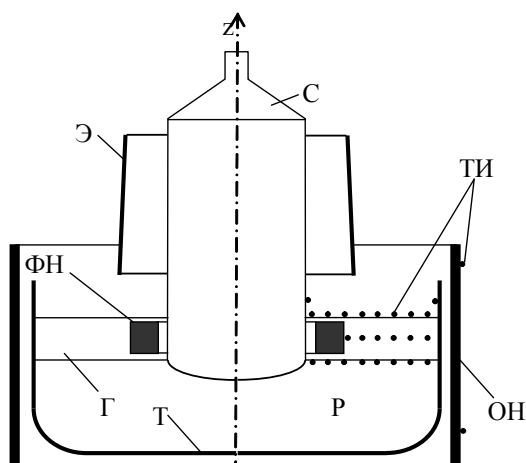


Рис. 1. Схема размещения точек измерения температуры: С – слиток; ОН – основной нагреватель; ФН – фоновый нагреватель; Э – экран; Т – тигель; Г – герметизатор; Р – расплав; ТИ – точки измерения

Дальнейшие исследования велись с переменными X1, X2, X3, X6. Регрессионный анализ выявил структуру линейной модели следующего вида:

$$Y = 765,14 + 0,143649 \cdot X1 + 0,0512563 \cdot X2 + 48,9129 \cdot X3 - 0,079936 \cdot X6. \quad (2)$$

Как известно, качество регрессионной модели зависит от значимости коэффициентов модели и от качества регрессионного уравнения в целом. В табл. 3 показаны параметры качества коэффициентов модели, включая константу.

Таблица 3

Оценки коэффициентов модели и их значимости

Параметр	Стандартная оценка	Ошибка	t – Статистика	P-Value
Константа	763,982	5,97353	127,895	0,0000
X1	0,150982	0,00105857	142,628	0,0000
X2	0,038372	0,00426022	9,00704	0,0000
X3	89,1859	12,1232	7,35662	0,0000
X6	-0,0330345	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. 4 приведена матрица оценок коэффициентов парной корреляции между переменными модели. Значимой корреляции с абсолютными значениями более 0,5 не выявлено.

Таблица 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

Общие результаты регрессионного анализа таковы:

- R²-статистика составляет 99,855%, т.е. более 99% изменчивости отклика обусловлено изменением четырех указанных переменных;
- скорректированная величина R² (с учетом числа переменных регрессии – adjusted for d.f.) составляет 99,836%;

- стандартная ошибка остатков (SEE) составляет 2,48652;
- среднее значение остатков – 1,90981.

Статистика Дарбина-Уотсона (DW) составляет 0,928572 ($P=0,0000$). Она 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 “сериальной” корреляции. Это, на наш взгляд, связано с тем, что переменная X_6 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 (2) 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. Значения F -отношения и P -Value показывают, что уравнение (2) имеет достаточный уровень адекватности.

Таблица 5
Результаты вычисления F -статистики

Источник	Суммарная квадратичная ошибка	Число степеней свободы	Средняя кв. ошибка на одну степень свободы	F -отношение	P -Value
Модель	127963,0	4	31990,8	5174,18	0,0000
Остатки	185,483	30	6,18277		
Общая	128149,0	34			

Статистическая значимость (F -статистика) для каждой переменной показана в табл. 6. Все включенные переменные статистически значимы.

Таблица 6
Результаты вычисления F -статистики по каждой переменной

Параметр	Суммарная квадратичная ошибка	Число степеней свободы	Средняя кв. ошибка на одну степень свободы	F -отношение	P -Value
X_1	127134,0	1	127134,0	20562,70	0,0000
X_2	476,251	1	476,251	77,03	0,0000
X_3	322,449	1	322,449	52,15	0,0000
X_6	29,9345	1	29,9345	4,84	0,0036
Модель	127963,0	4			

Верхний и нижний пределы оценок коэффициентов модели в доверительном интервале 95% с учетом объема имеющихся данных и наличия шума показаны в табл. 7. Пределы изменения значений коэффициентов на 95%-ном доверительном уровне достаточно узкие.

Таблица 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
X_1	0,143649	0,000363361	0,142907	0,144391
X_2	0,0512563	0,00144461	0,048306	0,0542066
X_3	48,9129	4,12283	40,493	57,3329
X_6	-0,079936	0,00508686	-0,0903248	-0,0695472

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 [7].

На рис. 2 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 [8]. 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.

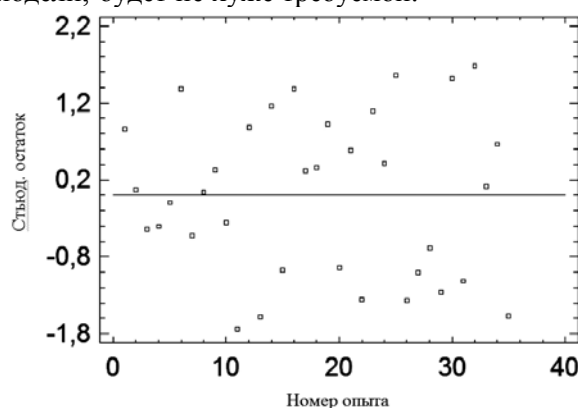


Рис. 2. График студентизированных остатков в зависимости от номера наблюдения.

Стандартные ошибки структурных параметров уравнения (2) 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”. 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 8 включает в себя: модельные значения Y , °C; стандартную ошибку для каждого модельного значения; 95,0%-й доверительный интервал модельных значений; 95,0%-й доверительный интервал для среднего отклика. В табл. 9 сравниваются округленные до 1°C модельные и экспериментальные значения температуры ФН и показана ошибка модели относительно результатов реальных измерений. На рис. 3 приведен график ошибок (остаточных компонент) модели относительно измеренных термопарой значений. Несмотря на небольшое число опытов, можно утверждать, что систематической составляющей остатки не содержат. Анализ табличных данных показывает, что погрешность измерений при помощи виртуального датчика температуры в проведенных экспериментах не превышает $\pm 3^\circ\text{C}$, т.е. 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 течение 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:

$$h_p = \left(\frac{m_3 - m_c}{\rho_p \pi R_t^2} + h_r \right) \cdot 100\% ,$$

где m_3 – масса загрузки; m_c – измеренная в реальном времени масса выращенного на данный момент слитка; ρ_p – плотность расплава; R_t – радиус тигля; h_r – высота слоя герметизатора;

– потребляемая мощность ФН, кВт (измеряется в реальном времени прямым методом).

Таблица 8

Прогнозные значения отклика модельной функции в доверительном интервале 95%

Номер опыта	Модельное значение, °С	Стандартная ошибка модельного значения	Нижний 95%-й доверительный уровень модельного значения	Верхний 95%-й доверительный уровень модельного значения	Нижний 95%-й доверительный уровень для среднего модельного значения	Верхний 95%-й доверительный уровень для среднего модельного значения
1	1034,38	0,907361	1032,53	1036,24	1033,72	1035,04
2	1056,94	0,886822	1055,13	1058,75	1056,4	1057,47
3	1062,65	0,923769	1060,76	1064,54	1061,9	1063,4
4	1083,74	0,892662	1081,92	1085,56	1083,17	1084,31
5	1106,53	0,901888	1104,69	1108,37	1105,9	1107,16
6	1106,21	0,894386	1104,38	1108,03	1105,62	1106,79
7	1128,76	0,879739	1126,97	1130,56	1128,28	1129,25
8	1134,48	0,917574	1132,6	1136,35	1133,76	1135,19
9	1040,65	0,909207	1038,79	1042,5	1039,97	1041,32
10	1063,44	0,909215	1061,58	1065,29	1062,76	1064,11
11	1063,11	0,897792	1061,28	1064,95	1062,51	1063,72
12	1085,67	0,879503	1083,87	1087,46	1085,19	1086,15
13	1091,38	0,916987	1089,51	1093,25	1090,67	1092,1
14	1112,47	0,888918	1110,65	1114,29	1111,92	1113,02
15	1135,26	0,9043	1133,41	1137,11	1134,62	1135,91

Таблица 9

Сравнение модельных и экспериментальных значений температуры ФН

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Модель, °С	1034	1057	1063	1084	1107	1106	1129	1134	1041	1063	1063	1086
Эксперимент, °С	1035	1057	1062	1084	1108	1105	1127	1136	1043	1064	1062	1085
Остаток, °С	1	0	-1	0	1	-1	-2	2	2	1	-1	-1
Номер опыта	13	14	15									
Модель, °С	1091	1112	1135									
Эксперимент, °С	1091	1110	1133									
Остаток, °С	0	-2	-2									

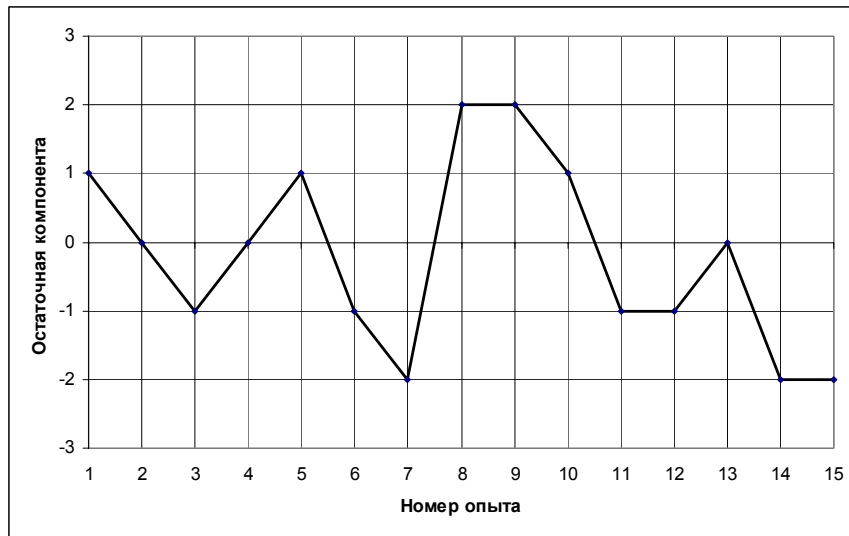


Рис. 3. График остаточных компонент модели в сравнении с прямым измерением температуры ФН

Методика прошла испытания в условиях производства монокристаллов GaAs диаметром 75...100 мм. Подтверждена валидность методики, т.е. точность измерений температуры и повторяемость (воспроизводимость) результатов измерения. 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 “Советчик мастера”, основная функция которой – поддержка принятия оперативных решений по коррекции параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs.

Выводы

Впервые предложена математическая модель для определения температуры фонового нагревателя теплового узла, которая учитывает значение потребляемой нагревателем мощности, значение скорости вытягивания, значение температуры основного нагревателя и значение уровня расплава, что позволяет обеспечить погрешность косвенного измерения не превышающую $\pm 3^\circ\text{C}$, и использовать в технологическом процессе виртуальный мониторинг теплового поля в зоне кристаллизации.

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

Разработанная модель является прикладной основой для построения информационной технологии реализации полнофункциональной системы “Советчик мастера”, которая позволяет в режиме реального времени процесса выращивания контролировать температурное поле в зоне кристаллизации, оптимизировать температурный режим и повышать структурное совершенство монокристаллов GaAs.

Список литературы: 1. Оксанич А.П. Архітектура та 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. 2. Нейросетевая модель расчета температурного поля слитка в процессе выращивания монокристаллов методом Чохральского / И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская, Е.А. Глушков, М.В. Репин // Нові технології. 2009. № 2 (24). С. 3-9. 3. Моделирование процесса выращивания полупроводниковых материалов на основе нейронной сети и нечеткого клеточного автомата / И.В. Шевченко, Ю.А. Краснопольская, Е.А. Глушков, С.Л. Шкатуло // Нові технології. 2010. № 1 (27). С. 169–177. 4. Ковтун Г.П. 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. 5. 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. 6. Хартман К., Лецкий Э., Шефер В. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. М.: Мир, 1977. 552 с. 7. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных:

Пер. с англ. Л.: Судостроение, 1980. 384 с. 8. Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ. Подход с применением ЭВМ. М.: Мир, 1982. 484 с.

Поступила в редколлегию 11.09.2011

Оксанич Анатолий Петрович, д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедрой информационно-управляющих систем, директор НИИ технологии полупроводников и информационно-управляющих систем Кременчугского национального университета им. М. Остроградского. Научные интересы: методы и аппаратура контроля структурно совершенных полупроводниковых монокристаллов. Адрес: Украина, 39600, Кременчуг, ул. Первомайская, 20, тел.: (05366) 30157. E-mail: oksanich@kdu.edu.ua.

Шевченко Игорь Васильевич, канд. техн. наук, доцент кафедры информационно-управляющих систем Кременчугского национального университета им. М. Остроградского. Научные интересы: интеллектуальные информационные технологии контроля и управления в производстве полупроводниковых материалов. Адрес: Украина, 39600, Кременчуг, ул. Первомайская, 20, E-mail: athome050@yandex.ru.

Краснопольская Юлия Алексеевна, аспирант кафедры информационно-управляющих систем Кременчугского национального университета им. М. Остроградского. Научные интересы: интеллектуальные информационные технологии мониторинга технологического процесса производства полупроводниковых материалов. Адрес: Украина, 39600, Кременчуг, ул. Первомайская, 20, E-mail: ulya.k@mail.ru.