

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ УГЛЕРОДА В СЛИТКАХ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

ОКСАНИЧ А.П., ВОЛОХОВ С.А.,
ШЕВЧЕНКО И.В.

Делается статистический анализ данных о тенденциях изменения концентрации углерода в слитках кремния для солнечной энергетики на протяжении длительного периода работы ростовых установок. Полученные данные используются для синтеза прогнозной модели, позволяющей предотвращать запуск технологического процесса выращивания при переходе графитового нагревателя в состояние повышенного испарения углерода в атмосферу ростовой установки.

Введение

В настоящее время значительная часть монокристаллов кремния для полупроводникового производства выращивается методом Чохральского. Использование данного метода обусловлено возможностью реализации повышенных требований к структурному совершенству и увеличению размеров выращиваемых монокристаллов, возможностью легирования кристаллов из расплава желаемой примесью (или несколькими примесями) с заданным распределением удельного сопротивления по длине слитка и возможностью управления содержанием фоновых примесей углерода и кислорода в процессе роста кристаллов [1].

К недостаткам указанного метода для выращивания кристаллов кремния для солнечной энергетики следует отнести повышенное содержание в выращенных кристаллах фоновых примесей углерода и кислорода, а также других примесей, содержащихся в кварцевом тигле, из которого обычно производится вытягивание слитка; существование неоднородного распределения легирующих и фоновых примесей, определяемого условиями роста кристаллов ("полос роста"), радиальных неоднородностей различных видов (канальных либо спирально-кольцевых) и др. Причины образования этих неоднородностей описаны в ряде работ [1-3].

Углубление понимания процессов дефектообразования в реальных кристаллах кремния связано с изучением природы и свойств сложных структурных нарушений типа дефектных скоплений [1]. Одним из видов таких нарушений являются невыявляемые селективным травлением примесно-дефектные скопления (ПДС), которые формируются в бездислокационных кристаллах при их выращивании [3]. Как предполагается, они представляют собой включения второй фазы в виде ядер, которые окружены упругими полями и примесной атмосферой, состоящей в основном из атомов кислорода и углерода [2].

Вблизи поверхности слитка кремния дефектно-примесные реакции имеют особенности, определяемые характеристиками исходного материала, механическими и химическими операциями, термическими и радиационными условиями обработок. Исследованию этих реакций посвящены работы [3, 4]. При этом был обнаружен эффект формирования высокоомного приповерхностного слоя (ВПС) при отжигах облученного электронами кремния в диапазоне температур 180...300 °С [3]. Установлено, что эффект наблюдается только в кислородсодержащем (выращенном по методу Чохральского) кремнии, и ответственным за образование ВПС являются центры с энергетическим уровнем $E_c - 0.37$ эВ. Данный дефект находится в зависимости от концентрации углерода (примеси, охотно вступающей в реакции с вакансиями и кислородом [4] и обычно присутствующей в кремнии в больших концентрациях - $N_C \approx 5 \cdot 10^{16} \dots 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$). Анализ экспериментальных данных позволил сделать вывод о составе центров $E_c - 0.37$ эВ ($[V-O-C]$) и заключить, что их формирование стимулировано потоком межузловых атомов кремния (I) и углерода (C_i) от границы раздела в объеме полупроводника в процессе отжига [4].

Поскольку объективно установлено, что присутствие углерода в кремнии приводит к образованию микродефектов, актуальным является выявление тенденций к увеличению концентрации примеси углерода непосредственно в процессе выращивания или даже до его начала. Это может существенно увеличить процент выхода годной продукции.

1. Постановка задачи

Задача анализа текущего состояния технологического процесса (ТП) в целях прогноза качества продукта может решаться различными методами. Наиболее распространен мониторинг с использованием датчиков физических величин. Однако прямые измерения параметров ТП не всегда возможны по следующим причинам:

- предложенные средства дают возможность диагностировать значения параметров, но нет информации, действительно ли эти параметры адекватно и с наименьшими затратами отображают состояние ТП в интересующем аспекте;
- их использование не снимает проблемы избыточности или недостатка набора параметров для адекватного мониторинга ТП;
- чем интеллектуальнее средство мониторинга, тем оно дороже (до сотен тысяч долларов);
- все известные нам средства не обладают инструментом выявления специфического минимального набора информативных параметров для решения задачи мониторинга состояния графитового нагревателя и, соответственно, ограничены по функции идентификации состояний ТП.

В данной работе ставится задача статистического анализа данных о тенденциях изменения концентрации

углерода в слитках кремния на протяжении нескольких месяцев работы ростовой установки и разработки прогнозной модели, позволяющей предотвращать запуск технологического процесса выращивания при переходе графитового нагревателя в состояние повышенного испарения углерода в атмосферу ростовой установки.

2. Анализ экспериментальных данных

На первом этапе исследования были собраны данные по результатам технологических процессов выращивания монокристаллического кремния на установках Редмет-60, которые включали в себя данные по потреблению электроэнергии за процесс, кВт·ч, процент выхода годного материала, удельное потребление электроэнергии на килограмм выхода, кВт·ч/кг, концентрацию углерода в слитке $n \cdot 10^{16}$, см^{-3} и время работы нагревателя, ч. Была проведена проверка описательной статистики и корреляционной связи между указанными параметрами. Установлено, что измеренные значения концентрации углерода зависят от времени эксплуатации нагревателя: с увеличением срока работы нагревателя положение интервалов разброса значений концентрации углерода в слитке смещается в область больших значений (рис. 1). Коэффициент парной корреляции для параметров “Время работы нагревателя в одном процессе, ч” и “Концентрация углерода” составил 0,43093.

С другой стороны, на основании обработки и анализа данных по выходу годного продукта установлена корреляционная и регрессионная зависимость между содержанием углерода в слитке и долей выхода годной продукции (рис. 2). Коэффициент парной корреляции для параметров “Концентрация углерода” и “Выход годной продукции” составил -0,39222.

Это дало основания для более тщательного статистического исследования данных по разбросу содержания углерода в слитках в зависимости от времени эксплуатации. С этой целью весь изучаемый период времени эксплуатации ростовой установки (после ремонта и замены графитового нагревателя) был разбит на несколько перекрывающихся интервалов. В каждом интервале были сформированы статистические выборки, которые

подверглись анализу при помощи пакета MS Excel. Результаты анализа показаны в таблице. Видно, что между 5-м и 6-м интервалами происходит резкий скачок дисперсии концентрации. Это указывает на необходимость учета данного показателя в сочетании с отсчетом временного ресурса графитового нагревателя.

Рост дисперсии (гетероскедастичность) не дает возможности адекватного оценивания влияния времени работы нагревателя и мгновенных значений концентрации углерода на качество продукции и долю выхода годного по стандартной регрессионной зависимости.

Выход может быть найден при применении нейросетевых технологий. Применение нейронных сетей занимает отдельное место среди методов обработки данных, превосходя статистические методы в универсальности и оставаясь при этом методом, мало чувствительным к форме данных как таковых [5].

Растущее применение НС обусловлено их достоинствами: высокая параллельность и синхронность выполняемых операций на нейронных сетях; инвариантность методов синтеза нейронных сетей от размерности пространства признаков; отображение сложности

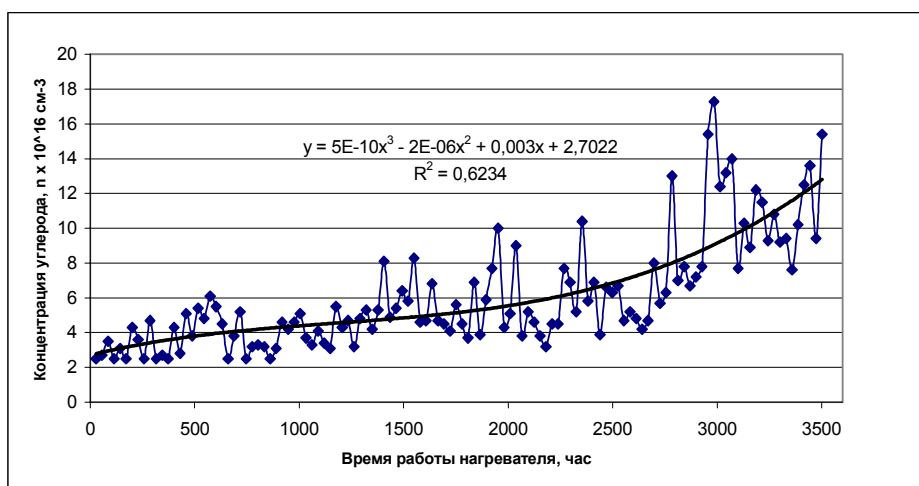


Рис. 1. Экспериментальные данные по изучению влияния времени эксплуатации графитового нагревателя на концентрацию углерода в слитках кремния. Приведена регрессионная зависимость в виде степенного полинома

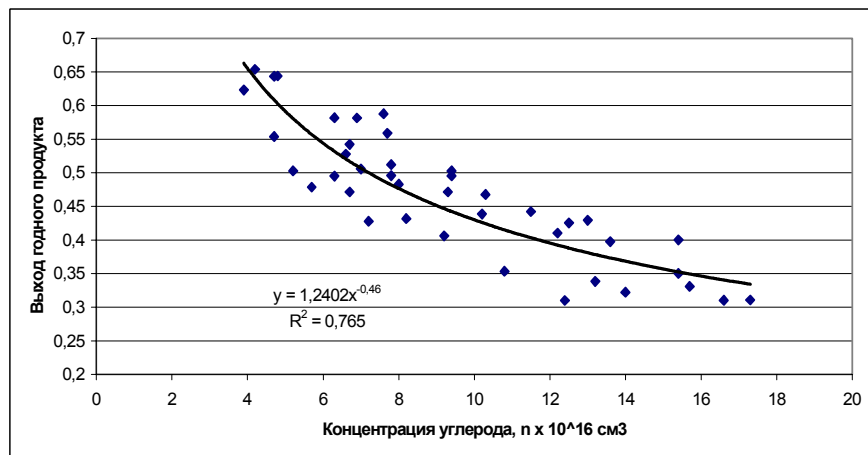


Рис. 2. Зависимость доли годного продукта от концентрации углерода в атмосфере ростовой камеры. Приведена регрессионная зависимость в виде экспоненциальной функции

решаемой задачи в сложности нейронной сети, используемой для решения конкретной задачи. При этом параметры нейросети не имеют непосредственной физической связи с параметрами объекта, т. е. нейросети являются непараметрическими моделями; скорость сходимости алгоритма настройки нейронной сети зависит от размера тренировочного набора данных, в отличие от гладких функций, у которых скорость сходимости зависит от размерности входного пространства признаков; возможность управления числом элементов суммирования и типом связей в процессе поиска наилучшей аппроксимации; способность дообучения на новых данных.

Существуют и ограничения: сложность или невозможность обоснования адекватности используемой (выбранной) архитектуры НС; необходимость формирования обучающих выборок, адекватных решаемой задаче; несмотря на широкое развитие НС, до сих пор нет единого оптимального алгоритма формирования ее архитектуры.

3. Метод прогноза концентрации углерода

В соответствии с изложенным выше сформулируем метод прогноза концентрации углерода в слитках кремния.

1. В качестве основных исходных данных для прогноза концентрации углерода используются результаты предыдущих замеров, сделанных после завершения очередного технологического процесса.
2. Для улучшения достоверности прогноза помимо результатов предыдущих замеров концентрации используются данные по суммарному времени работы установки с данным графитовым нагревателем.
3. Для реализации прогноза применяется нейросетевая модель, специально разработанная для решения данной задачи.
4. Нейросетевая модель дообучается при эксплуатации конкретной ростовой установки для повышения достоверности прогноза.

4. Синтез нейросетевой прогнозной модели

Из сказанного выше ясно, что нейросетевая модель должна решать одну из задач мониторинга технологического процесса – прогнозировать концентрацию углерода в новом слитке по значениям концентрации в предыдущих процессах и выработке ресурса нагревателя.

Прежде всего, для решения данной задачи следует разработать адекватную архитектуру НС. Необходимо

выбрать структуру входных и выходных данных, подобрать количество слоев НС, количество нейронов в каждом слое, выбрать передаточные функции нейронов.

Для решения задач распознавания и прогноза в большинстве случаев выбирают трехслойную НС прямого распространения [5]. Такая архитектура достаточна для аппроксимации практически любой функции [5]. Входной слой НС содержит некоторое количество рецепторов в соответствии с мощностью множества информативных параметров. Количество нейронов скрытого слоя подбирается экспериментально. Передаточная функция нейронов скрытого слоя в большинстве случаев сигмоидальная [5]. 3-й слой, выходной, содержит столько нейронов, сколько требуется для решения задачи.

Для определения прогнозной величины концентрации углерода в слитке было решено использовать один выходной нейрон с кусочно-линейной функцией активации (линейная с ограничением) [5].

Структура НС показана на рис. 3.

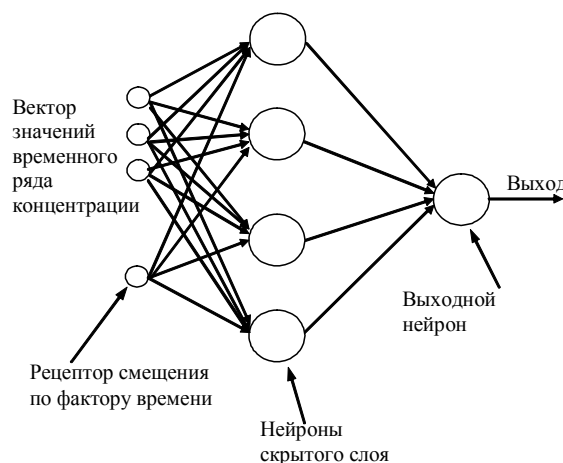


Рис. 3. Структура нейронной сети

Входной вектор сети содержит временное окно, шириной от 3 до 15 отсчетов предыдущих значений концентрации и дополнительный рецептор, указывающий условное время эксплуатации нагревателя. Данный рецептор играет роль переменного смещения для всех нейронов скрытого слоя. Передаточная функция нейронов скрытого слоя – сигмоидальная.

Для обучения и тестирования нейронной сети необходимы обучающая и тестирующая выборки.

Применительно к данной задаче целесообразно в качестве основы для генерации примеров использовать значения концентрации, полученные вычислением функции скользящего среднего (рис. 4). Обучение на реальных данных из-за большой дисперсии не даёт положительного результата, так как сеть не в состоянии уловить требуемой

Статистические данные по изменению концентрации углерода

	Выборочные периоды						
	1	2	3	4	5	6	7
Среднее	3,603333	4,826667	5,75	5,780645	6,103333	7,116129	9,796875
Медиана	3,25	4,65	5,2	5,2	5,75	6,6	9,35
Мода	2,5	4,2	4,5	5,1	5,6	6,3	7,8
Дисперсия	1,249989	1,657885	3,0586	3,59428	4,87619	10,2254	11,44612
Минимум	2,5	3,1	3,2	3,2	3,2	3,2	4,2
Максимум	6,1	8,3	10,4	10,4	13	17,3	17,3

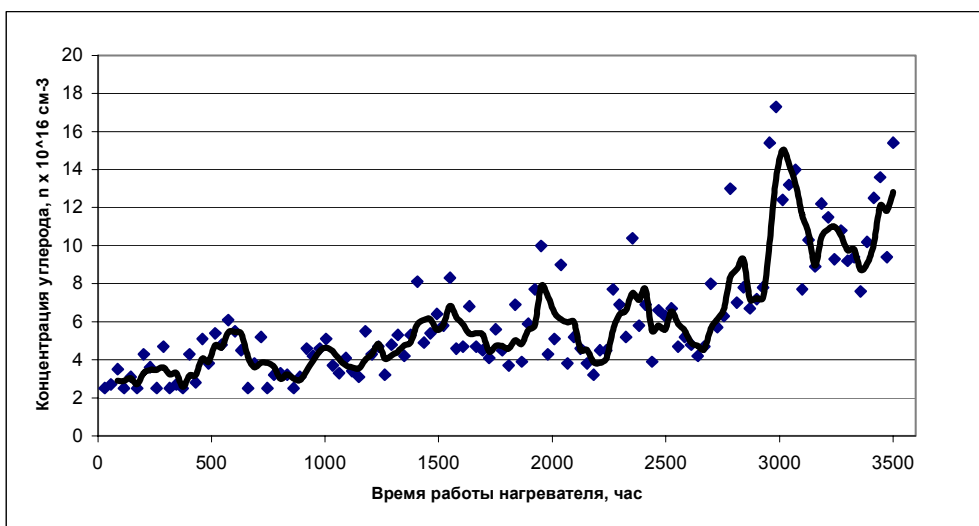


Рис. 4. График функции скользящего среднего, которая использовалась для генерации примеров обучающей и тестирующей выборок

закономерности. При этом интервал усреднения выбирается небольшим (2-3 отсчета).

Для повышения способности сети к обучению и обобщению кроме усреднённых отсчетов концентрации за предыдущие сессии, на вход сети подается фактор времени работы нагревателя. Весь рассматриваемый период от 0 до 3500 часов разбит на 7 перекрывающихся отрезков времени длительностью 800 часов. Некоторое перекрытие по времени было сделано для лучшей стыковки примеров из соответствующих интервалам времени обучающих выборок. Каждый временной интервал получил порядковый номер от 1 до 7. Во время предъявления примеров на каждом интервале на рецептор смещения по фактору времени подавались дискретные значения из интервала $[0, 1 \dots 0, 7]$ с шагом 0,1.

Для обучения было сгенерировано по 100 примеров на каждом интервале. Поскольку в действительности на указанных интервалах имеется меньшее количество значений, полученных вычислением скользящего среднего, для генерации дополнительных примеров использовалась линейная интерполяция между двумя соседними точками. Кроме того, входные данные изменялись случайным образом путем добавления белого шума, изменяющего отдельные значения входного вектора в пределах $\pm 10\%$.

Таким же образом были сгенерированы примеры для тестирующей выборки. Количество ее примеров составляет 25% от количества примеров обучающей выборки.

Для обучения сети были использованы два алгоритма – случайный адаптивный поиск (САП) и алгоритм обратного распространения ошибки (ОРО) [5].

На первом этапе сеть обучалась по алгоритму САП согласно следующей методике [5]:

1. Случайный шаг. При этом к любому весовому коэффициенту прибавляется случайная величина, составляющая не более 15% текущего значения веса. Вычисляется полная ошибка сети на всей обучающей

выборке. Если новая полная ошибка меньше, чем предыдущее наилучшее её значение, текущие значения весов, включающие случайный шаг, становятся новым множеством “наилучших” весов. Текущая погрешность предсказания сохраняется как новая, наилучшая погрешность предсказания.

2. Шаг реверсирования. Если результаты случайного шага хуже предыдущего наилучшего значения ошибки, случайная величина отнимается от начального значения веса. Это создает множество весов, которые находятся в противоположном направлении к предыдущему случайному шагу. Если новое значение полной ошибки меньше предыдущего наилучшего, текущие значения весов и текущая ошибка предсказания сохраняются как наилучшие. Если и прямой и обратный шаги не улучшают результат, к наилучшим весам прибавляется полностью новое множество случайных значений, и процесс начинается сначала.

3. Учет данных по успешности обучения. Если в течение заданного количества шагов текущее значение ошибки не уменьшается, происходит новая инициализация весовых коэффициентов.

4. Останов, если совершено заданное число эпох обучения.

После того, как процедура обучения по алгоритму САП завершена, происходило дообучение сети по алгоритму ОРО. При этом примеры предъявлялись в хронологическом порядке, а коэффициент изменения весов составлял не более 0,02.

5. Результаты моделирования и тестирования

Эффективность обучения сети, её способность к адекватному прогнозу проверялась при различных сочетаниях размерностей рецепторного и скрытого слоёв. На диаграмме рис. 5 показаны полные ошибки сети при некоторых соотношениях количества рецепторов и нейронов скрытого слоя. Оптимальное соотношение этих двух величин составляет от 8/20 до 10/22.

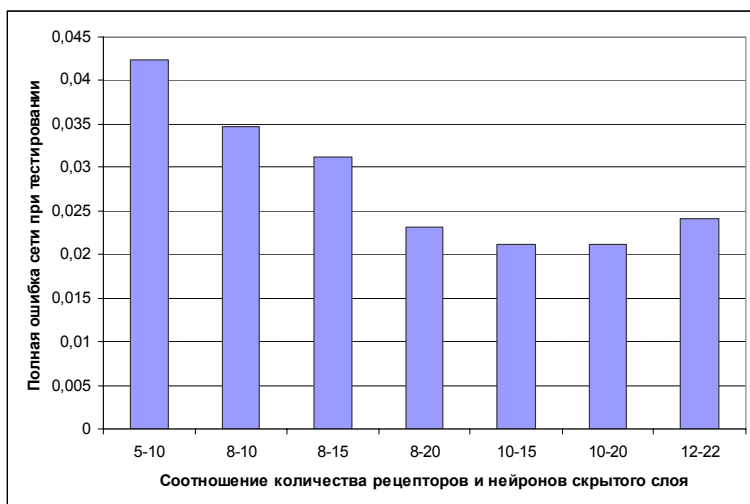


Рис. 5. Изменение полной ошибки сети в зависимости от соотношения количества рецепторов и нейронов скрытого слоя

При большем количестве нейронов и рецепторов сеть становилась склонной к переобучению.

Таким образом, синтезированная нейросетевая модель вполне способна решать задачу прогноза концентрации углерода в слитках кремния по предыдущим показателям концентрации и временному фактору. Однако следует учитывать то обстоятельство, что каждая ростовая установка имеет индивидуальные особенности, которые можно учесть только в том случае, если нейросетевая модель, встроенная в автоматизированную систему контроля и управления, будет дообучаться после каждого нового процесса выращивания. При этом оператор-технолог должен иметь возможность:

- учесть или игнорировать прогноз концентрации, соотнеся его с текущими технологическими задачами;

- отменить дообучение, если текущий ТП не соответствует каким-либо техническим условиям.

6. Заключение

Статистический анализ данных о тенденциях изменения концентрации углерода в слитках кремния, выращиваемых методом Чохральского, на протяжении нескольких месяцев работы ростовых установок показал заметное влияние состояния графитового нагревателя на концентрацию примеси углерода в выращиваемых слитках. Повышенная концентрация углерода коррелирует с долей выхода годной продукции.

Проведенное исследование послужило основой для разработки метода прогнозирования концентрации углерода на основании результатов предыдущих замеров концентрации и отсчета времени работы графитового нагревателя и инструмента прогнозирования - нейросетевой модели.

Нейросетевая модель имеет слой входных рецепторов для приема значений временного ряда концентрации углерода и отдельный рецептор для ввода дискретного значения фактора времени работы нагревателя. Количество рецепторов и нейронов скрытого слоя подбирались экспериментально во время обучения

сети. Выходной нейрон вычисляет масштабированное значение концентрации углерода.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Создан метод прогноза концентрации углерода в слитках кремния для солнечной энергетики, позволяющий изменить режим технологического процесса и уменьшить вероятность ухудшения качества продукта, использующий отсчеты предыдущих замеров концентрации, временной фактор ресурса нагревателя и специальную нейросетевую модель.

2. Разработана нейросетевая модель решения задачи прогнозирования концентрации углерода в слитках кремния, отличающаяся тем, что кроме значений временного ряда концентрации углерода в сеть введен отдельный рецептор для ввода дискретных значений фактора времени работы нагревателя.

Практическая значимость работы состоит в уменьшении риска выхода негодной продукции при реализации технологического процесса выращивания монокристаллов кремния для солнечной энергетики.

Литература: 1. Оксанич А.П. Моделирование процесса образования микродефектов при выращивании слитков кремния диаметром 200 мм / А.П. Оксанич, С.Э. Притчин, И.Г. Кротюк, А.В. Вашерук. *Нові технології. Науковий вісник ІЕНТ.* 2005. № 3(9). С. 5-11. 2. Наумова О.В. Природа центров $E_c - 0:37$ эВ и образование высокоомных слоев в Si n-типа проводимости / О.В. Наумова, Л.С. Смирнов, В.Ф. Стась. *Физика и техника полупроводников.* 1997. Том 31, № 8. С. 993-997. 3. *Радиационные эффекты в полупроводниках* / Под ред. Л.С. Смирнова, Герасименко Н.Н., Кибалина Н.П., Стась В.Ф. / Новосибирск, 1979. С. 78. 4. Lindstrom J.L., Svenson B.G. In: *Mater. Sci. Forum. Defects in Semiconductors* (1989) V. 38-41. P. 45. 5. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей. Пер. с англ. / Каллан Р. М.: Изд. дом "Вильямс", 2001. 291 с. 6. Дулесов А.С. Возможности применения нейронных сетей в задачах прогнозирования и соблюдение принципа согласованности полученных результатов // *Радіоелектроніка, інформатика, управління.* 2001. № 1. С. 76-78.

Поступила в редколлегию 20.08.2009

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Гордиенко Ю.Е.

Оксанич Анатолий Петрович, д-р техн. наук, профессор Кременчугского университета экономики, информационных технологий и управления. Научные интересы: оборудование и технологии производства материалов электронной техники.

Волохов Сергей Александрович, генеральный директор ООО "СИЛИКОН". г. Светловодск. Научные интересы: оборудование и технологии производства материалов электронной техники.

Шевченко Игорь Васильевич, канд. техн. наук, доцент, профессор кафедры информационных технологий проектирования Кременчугского университета экономики, информационных технологий и управления. Научные интересы: интеллектуальные технологии в управлении производством. Увлечения: фотография, электрогитара, блюз.