

УДК 621.315.592

А.П. Оксанич, И.В. Шевченко, С.А. Волохов

**ОПТИМИЗАЦИЯ КОНФИГУРАЦИИ ТЕПЛООВОГО ЭКРАНА
РОСТОВОЙ УСТАНОВКИ ПО КРИТЕРИЮ МИНИМУМА
НЕРАВНОМЕРНОСТИ ОСЕВЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ГРАДИЕНТОВ**

Аннотация. Разработана математическая модель задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана и метод её решения, включающий численно-аналитическую эволюционную процедуру оптимизационных расчетов. Это позволяет обеспечить необходимый температурный режим в зоне выращивания и остывания слитка. Показано, что полученная конфигурация теплового экрана позволяет снизить неравномерность осевых температурных градиентов и обеспечить оптимальное распределение температуры по оси выращиваемого слитка.

Введение

Решение проблемы повышения качества монокристаллов кремния считается одной из первоочередных задач развития технологии полупроводниковой электроники. За счет повышения структурного совершенства монокристаллов кремния могут быть удовлетворены потребности современного полупроводникового приборостроения: увеличение степени интеграции, уменьшение допусков на параметры микросхем, повышение выхода годных полупроводниковых приборов [1].

Анализируя механизмы формирования структурного совершенства в выращиваемых методом Чохральского монокристаллах кремния можно сделать вывод, что они обусловлены, главным образом, следующими факторами: несовершенством конструкции теплового узла промышленного ростового оборудования; нестабильностью скорости кристаллизации из-за колебаний температуры в расплаве; интенсивностью конвективных потоков в расплаве. Формирование структурных неоднородностей в растущем монокристалле кремния во многом обусловлено тепловыми условиями. Поэтому проблема формирования тепловых условий в зоне роста на протяжении времени существования технологии выращивания монокристаллов была и остается весьма актуальной.

© Оксанич А.П., Шевченко И.В., Волохов С.А., 2010

Конструктивные и технологические приемы улучшения тепловых условий выращивания направлены на снижение температурных градиентов в растущем кристалле, так как известно, что именно неравномерность температурных градиентов является основным препятствием для получения однородных монокристаллов все большего диаметра с совершенной структурой и заданными электрофизическими свойствами [1]. Снизить неравномерность температурных градиентов можно путем использования специальных тепловых экранов и многозонных нагревателей.

Цель работы – синтез математической модели задачи параметрической оптимизации геометрических параметров теплового экрана и метода её решения, включая численно-аналитическую процедуру оптимизационных расчетов.

Постановка задачи исследования

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. Однако, несмотря на большое количество исследований, в настоящее время не найдено оптимальной конфигурации экрана. Это связано с тем, что разработчики не имеют специализированного инструментального средства оптимизации конфигурации теплового экрана и вынуждены искать оптимальное решение задачи методом пробного численного моделирования, изменяя от сессии к сессии геометрические параметры экрана и сетку конечных элементов. При этом для расчетов обычно используются «тяжелые» программные средства, такие как NASTRAN, ANSYS, FEMLAB.

После многократных запусков численной модели на основании полученных данных в принципе можно решать задачу оптимизации граничных условий, а вместе с тем – и задачу оптимизации конфигурации экрана. Однако данный метод моделирования не гарантирует оптимальности конструктивного решения в силу отсутствия в контуре оптимизации явно выраженного критерия оптимальности и алгоритма, позволяющего в автоматическом режиме искать оптимальное решение.

Кроме того численный расчет тепловых параметров, основанный на методе конечных элементов требует мощных вычислительных

ресурсов, которые не всегда доступны.

В работе [2] разработано численно-аналитическое решение задачи теплообмена с поверхности слитка, позволяющее связать тепловые потоки излучения в рабочей зоне ростовой установки и распределение температурных градиентов в слитке выращиваемого монокристалла. Численно-аналитическая тепловая модель содержит уточненное аналитическое решение уравнения теплопроводности в цилиндрических координатах. Вычисление распределения температур в слитке проводится методом итерационного сопряжения решения этого уравнения и системы уравнений тепловых потоков излучения и конвекции.

В работе [3] разработана математическая модель конфигурации теплового узла, которая связывает величины L (высота экрана), R_c (радиус слитка), R_e (радиус экрана), H_e (высота над уровнем расплава), R_T (радиус тигля) с угловыми коэффициентами, определяющими потоки излучения и отражения экрана и других рабочих поверхностей теплового узла.

Результаты работ [2, 3] позволяют поставить следующую задачу: разработать математическую модель и метод оптимизации геометрических параметров теплового экрана, включающий численно-аналитическую процедуру оптимизационных расчетов.

Математическая модель задачи оптимизации конфигурации теплового экрана

Расчетная схема модели теплового узла представлена на рис. 1.

Оптимизация параметров конфигурации теплового экрана проводится по критерию минимизации неравномерности осевого градиента температуры в слитке.

При математической постановке данной задачи необходимо учесть важный фактор, связанный в физическими условиями роста монокристалла, а именно – рост монокристалла возможен только при наличии некоторого минимального градиента температуры на фронте кристаллизации. В работе [4] определена аналитическая связь между скоростью v_s роста кристалла и тепловыми условиями:

$$v_s L \rho_s = \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} - \alpha (T_L - T_{пл}), \quad (1)$$

где $T_{пл}$ - температура плавления (кристаллизации); α – коэффициент теплопередачи на фазовой границе, λ_s – коэффициент

теплопроводности в твердом состоянии, ρ_s – плотность монокристалла, L – скрытая теплота кристаллизации.

Отсюда

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = \frac{v_s L \rho_s + \alpha (T_L - T_{пл})}{\lambda_s}. \quad (2)$$

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

$$V_s = v_s \pi R_k^2 t, \quad (3)$$

где t – время протекания процесса выращивания.

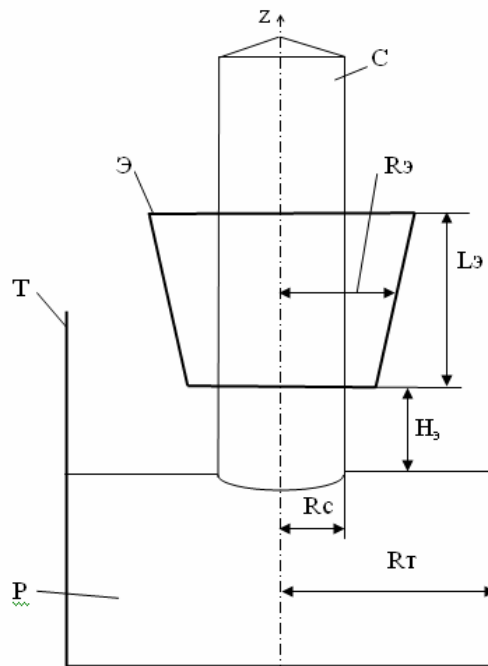


Рисунок 1 - Расчетная схема модели теплового узла:

С - слиток; Э – экран; Т – тигель; Р – расплав; R_T – радиус тигля; R_c – радиус слитка; $R_э$ – переменный радиус экрана; L - длина экрана; $H_э$ – высота экрана над расплавом

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

$$\frac{\partial \bar{T}_s}{\partial z} = G_0. \quad (4)$$

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, критерием оптимизации должен служить минимум величины квадрата отклонения значений усредненного по радиусу слитка градиента GZ от константы G_0 , то есть

$$F(R_s, L_s, H_s) = \sum_{i=1}^{N_L} (GZ_i - G_0)^2 \rightarrow \min, \quad (5)$$

где N_L – количество дискретных цилиндрических областей слитка вдоль оси z .

Ограничения задачи служат граничные условия по температуре, задаваемые на фронте кристаллизации, на рабочих поверхностях тигля, на поверхности расплава и закон распределения температуры по поверхности экрана вдоль оси z с учетом изменения радиуса экрана:

$$T_{fk} = T_{fk0}, \quad (6)$$

$$T_p = T_{p0}, \quad (7)$$

$$T_t = T_{t0}, \quad (8)$$

$$T_s = T_s(z, r_s). \quad (9)$$

Тогда задачу оптимизации размеров и положения экрана можно поставить следующим образом: найти оптимальные геометрические параметры экрана L_s , R_s , H_s при заданных значениях R_t , R_s , граничных условиях (6) - (9) и минимизации критерия (5).

Метод решения задачи оптимизации

С учетом математических моделей схему процесса оптимизации размеров и положения цилиндрического экрана, окружающего выращиваемый слиток, можно представить следующим образом (рис. 2):

1. Задаются исходные значения геометрических параметров теплового узла (радиус слитка R_s , закон изменения радиуса экрана $R_s = k \cdot z + c$, высота экрана L_s , высота расположения экрана над расплавом H_s , радиус тигля R_t , и др.) и допустимые диапазоны изменения геометрических параметров экрана $R_{s\min}$, $R_{s\max}$, L_s и H_s . Задаётся также текущая высота слитка Z_t .

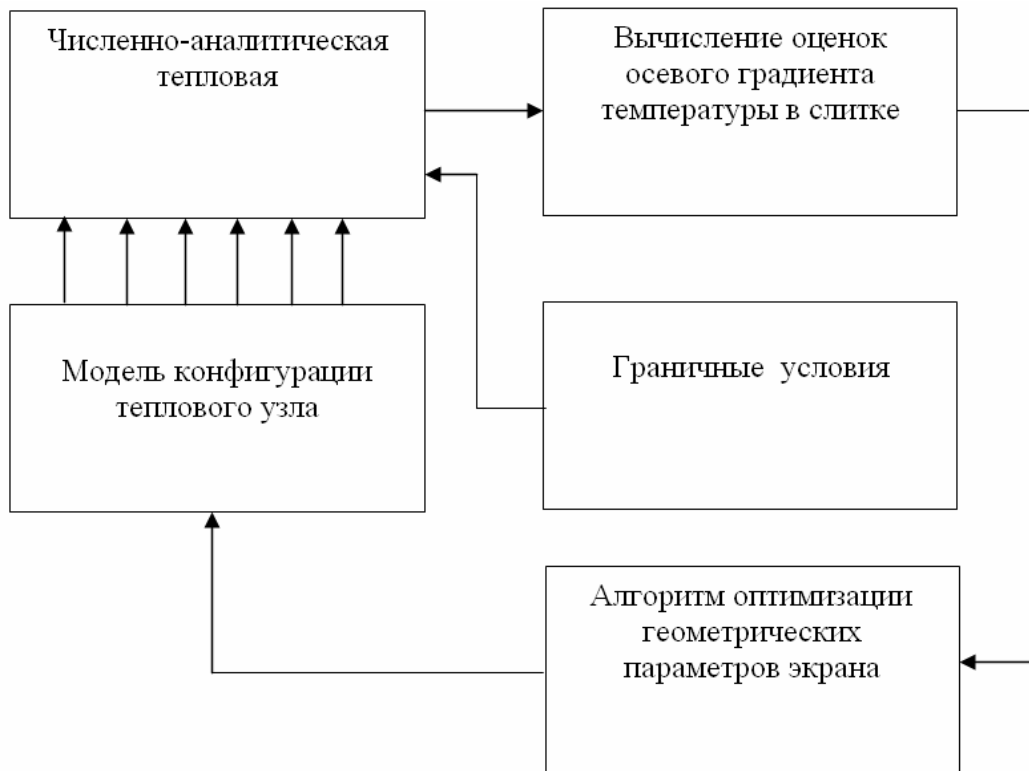


Рисунок 2 - Схема процесса оптимизации геометрических параметров теплового узла

2. Для численно-аналитической модели 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).

3. При помощи переборного эволюционного алгоритма оптимизации генерируется популяция допустимых решений в виде четверок $(k_{э}, c_{э}, L_{эj}, H_{эj})$, $j=1...N.$, где N – число членов популяции.

4. Каждая четверка $(k_{э}, c_{э}, L_{эj}, H_{эj})$ используется в модели конфигурации теплового узла и, соответственно, в численно-аналитической модели для вычисления градиентов температуры по оси слитка.

5. Для каждой четверки $(k_{э}, c_{э}, L_{эj}, H_{эj})$ вычисляется значение критерия (5).

6. При помощи эволюционных процедур, описанных ниже, с повторением пунктов 3-5, отбирается наилучшее решение по критерию (5).

Процедура оптимизации с применением эволюционного алгоритма

Любое отдельное решение задачи, как правило, можно описать

единым набором переменных:

$$X = (x_1, \dots, x_n). \quad (10)$$

Такой набор является точкой в пространстве допустимых решений.

Любое допустимое решение должно удовлетворять заданным ограничениям:

$$a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (11)$$

Математическая модель задачи оптимизации ставит в соответствие каждому набору X некоторый критерий качества (функцию цели) $F(X)$.

Тогда решение задачи оптимизации состоит в поиске такого набора X , который удовлетворяет неравенствам (11) и обеспечивает глобальный экстремум критерия оптимизации (5).

Основная продуктивная идея эволюционных алгоритмов случайного поиска оптимальных решений 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. Таким образом, эволюционные алгоритмы используют информацию о рельефе поверхности функции цели.

В данной работе реализовано уточнение значений локальных экстремумов с помощью алгоритма 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.

С учетом изложенного выше 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, то есть уточнение значений локальных оставшейся

части популяции также выбираются η особей.

5. Для выбранных 2η точек запускается цикл уточнения значений локальных экстремумов, то есть:

5.1. Определяются экстремумов за счет сужения границ случайного поиска.

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 этапы разработанного алгоритма:

1. Генерация исходной популяции. Синтезируется N точек \bar{X}_j ($j = 1, \dots, N$), в которых определяется значение целевой функции.

2. Сортировка наборов \bar{X}_j (особей) по возрастанию значений (поскольку в решаемой задаче ищется минимум целевой функции).

3. Из всех N точек отбирается η точек – претендентов на лидерство.

4. Вычисляются границы поиска уточненного значения экстремума:

$$a' = x_i^* - A(b-a)/2, b' = x_i^* + A(b-a)/2,$$

где a' , b' – суженные границы поиска; a , b – начальные границы поиска; x_i^* – координата найденного решения; A – размер границы для уточненного поиска экстремума.

5. Генерируется M точек в границах a' , b' .

6. Для каждой точки X_k , $k \in M$ вычисляется значение целевой функции. Если новое значение меньше предшествующего, соответственно изменяются значения x_i^* .

Как результат в массиве популяции для выбранных точек фиксируются новые значения координат и локальных экстремумов.

7. Массив популяции сортируется по возрастанию значения целевой функции.

8. Если количество заданных итераций не исчерпано, то для всех особей, кроме η лучших, генерируются новые случайные значения координат и происходит переход к п.2. Иначе переход к п.9.

9. Первый элемент в списке особей является найденным оптимальным решением. Конец.

Алгоритм имеет следующие параметры настройки:

- 1) N – количество членов популяции;
- 2) η – 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.

Определение оптимальной конфигурации теплового экрана

Для решения описанной выше задачи оптимизации было разработано специальное программное обеспечение, которое обеспечивает ввод исходных данных через пользовательский интерфейс, решение уравнений численно-аналитической модели, 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. Один из вариантов сетки конечных элементов приведен на рис.3. Свойства материалов, которые были определены для проведения расчета, приведены в таблице. В списке свойств материалов, которые использовались для проведения расчета, приведены коэффициенты теплопроводности, плотности материалов и коэффициенты черноты поверхности.

С использованием описанной выше методики были проведены циклы оптимизации следующего содержания.

1. Высота слитка $L_{сл}$ изменялась с шагом 1 см в интервале 6...46 см.

2. Для каждого значения $L_{сл}$ по алгоритму п.п. 3.1.3 подбирались оптимальные значения параметров экрана $k_э$, $c_э$, $L_{эj}$, $H_{эj}$.

3. После осуществления расчетов по оптимизации положения экрана по критерию (5), было выяснено, что для слитков диаметром 60 мм наиболее приемлемыми являются такие значения рабочих параметров: $k_э=0,43$, $c_э=20...30$, $L_э \approx 300$ мм, $H_э \approx 14$ мм.

4. Для оценки влияния изменений в конфигурации теплового экрана установки «Редмет 60А» по сравнению с существующей установкой «Редмет 60» на температурные профили и осевые градиенты полученные при расчетах данные были сведены в таблицы, по которым построены графики, показанные на рис. 4 - 6. Преимущества теплового узла установки «Редмет 60А» проявляются прежде всего в большей равномерности распределения температуры вдоль оси слитка. На рисунке 4 показаны температурные профили вдоль оси z слитка, рассчитанные для конфигурации теплового экрана ростовой установки «Редмет-60» (кривая 1) и конфигурации теплового экрана установки «Редмет-60А» с оптимальным расположением и размерами экрана.

Свойства материалов

Материал	Класс	Свойства
Аргон	газ	коэффициент теплопроводности: 0,045 Вт/(м·К)
Графит для экранов	твердый	коэффициент теплопроводности: 0,33 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,8
Графит	твердый	коэффициент теплопроводности: 29,8 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,8
Молибден	твердый	коэффициент теплопроводности: 10 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,18
Кварц	твердый	коэффициент теплопроводности: 4 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,85
Сталь	твердый	коэффициент теплопроводности: 15 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,85
Si расплав	расплав	коэффициент теплопроводности: 110 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,3 плотность: 2570 кг/м ³ $T_L = 1686$ К
Si кристалл	кристалл	коэффициент теплопроводности: 23 Вт/(м·К) коэффициент черноты поверхности: 0,7 плотность: 2530 кг/м ³

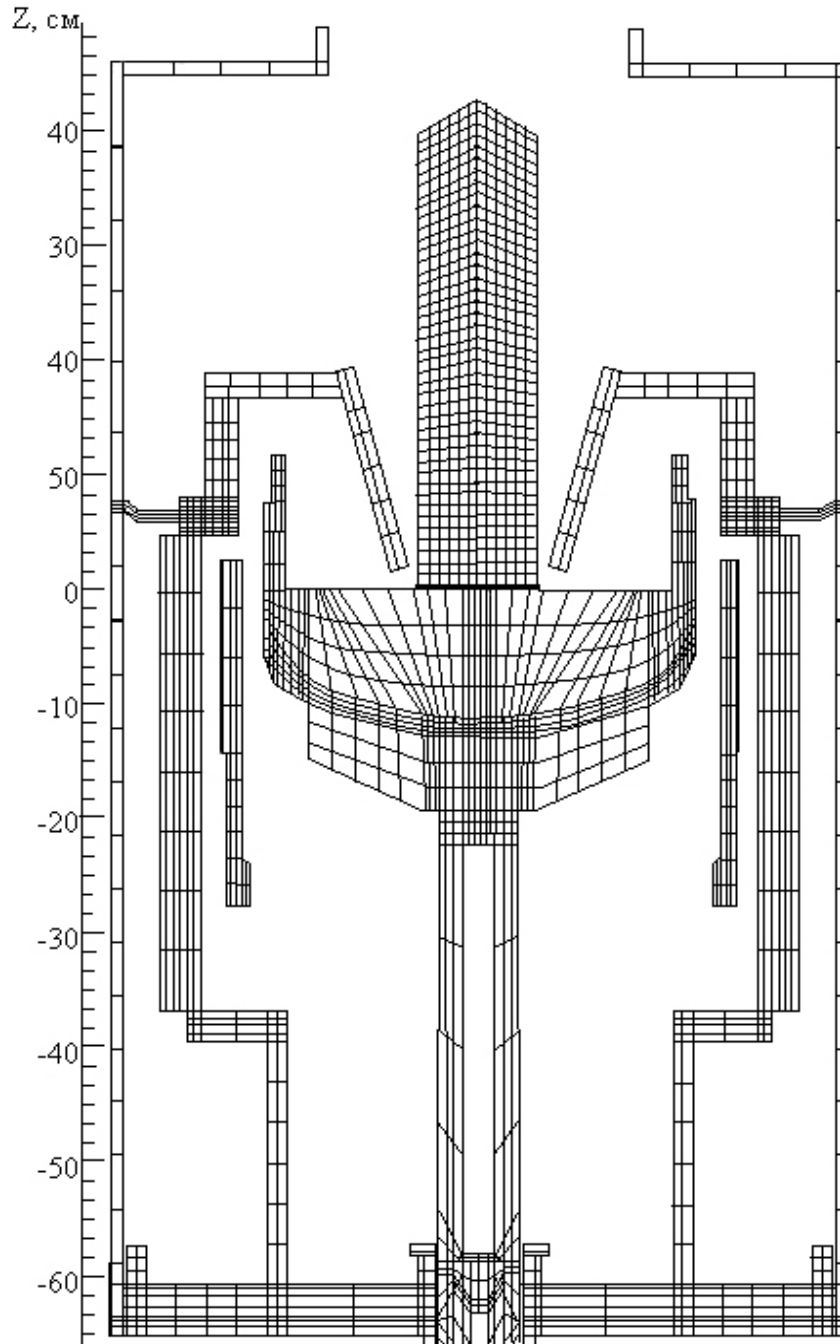


Рисунок 3 - Сетка конечных элементов

На рис. 5 показаны градиенты температуры вдоль оси z слитка для конфигурации теплового экрана ростовой установки «Редмет 60» (кривая 1) и для конфигурации теплового экрана установки «Редмет 60А» (кривая 2).

Видно, что тепловой узел установки «Редмет-60А» обеспечивает максимальную линейность распределения температуры, то есть оптимизация по критерию (5) прошла успешно.

Далее была исследована зависимость усреднённого температурного градиента GZ от радиуса экрана при различной длине

слитка. Результаты исследования приведены на рис. 6.

Видно, что существует совершенно четкая зона оптимального значения параметра конфигурации конусообразного экрана (примерно 0,43...0,47 для слитка диаметром 60 мм).

На рис. 7 показано распределение температуры по сечению слитка при выбранном положении и размерах экрана.

Расчет проводился методом конечных элементов при помощи программы, упомянутой выше. Дальнейшие численные эксперименты показали, что подобное распределение температуры (с учетом естественных флуктуаций, которые в тепловой модели воспроизвести трудно) дает вполне приемлемые результаты по уровню неравномерности градиентов температуры в слитке.

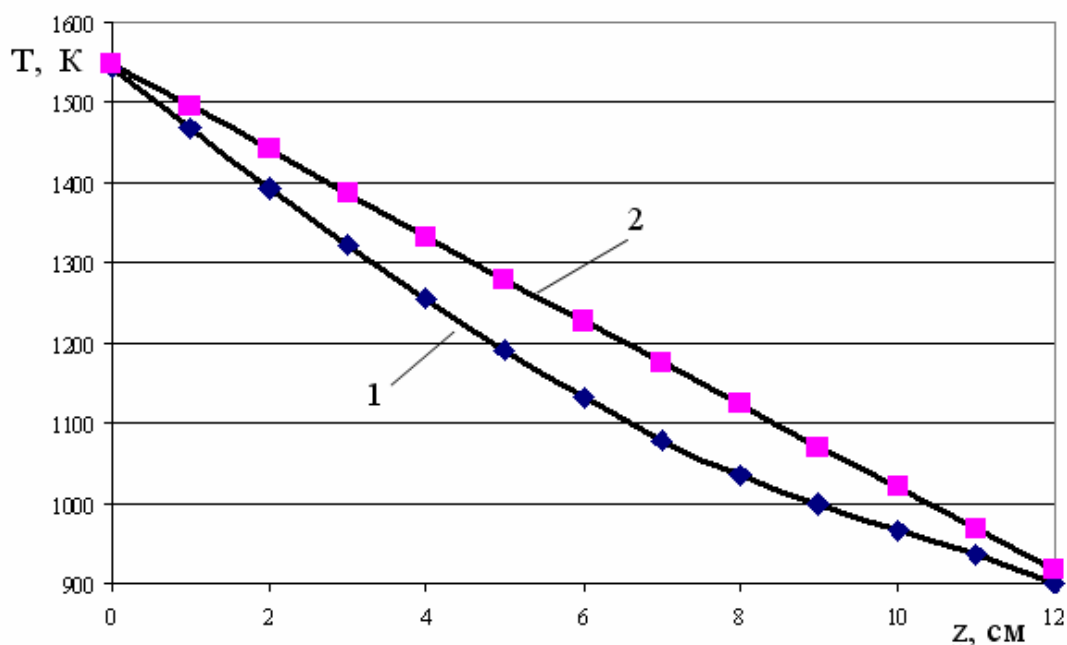


Рисунок 4 - Результаты расчетов температурного профиля по оси z слитка: 1 – установка «Редмет-60». 2 - установка «Редмет-60А» с модернизированным тепловым узлом

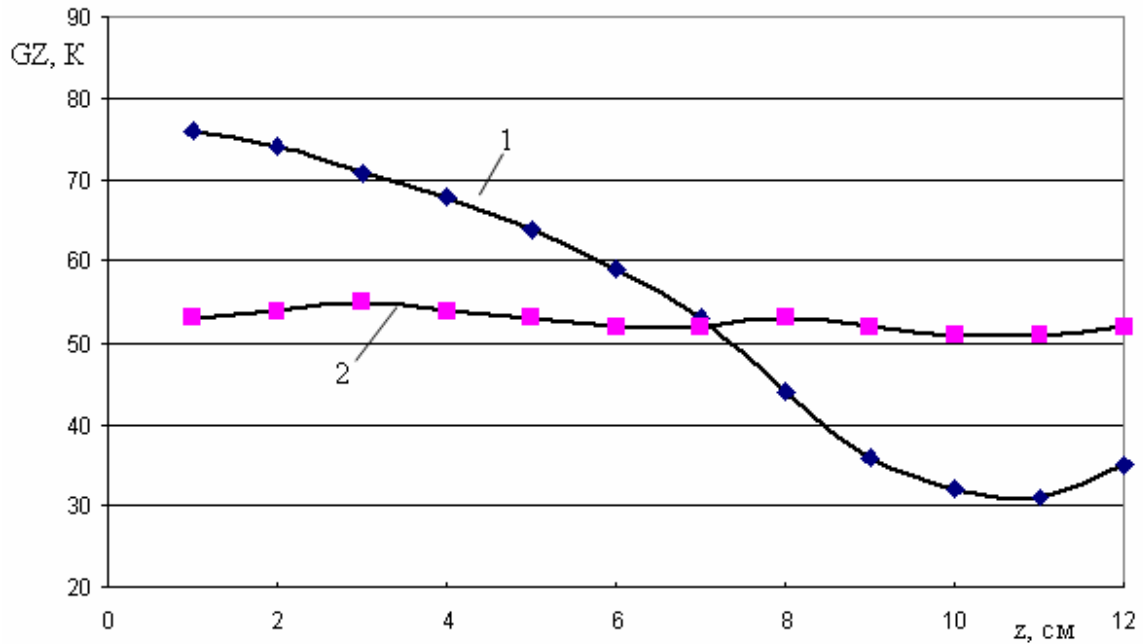


Рисунок 5 - Результаты расчетов градиента температуры вдоль оси z слитка: 1 – установка «Редмет-60»; 2 – установка «Редмет-60А» с модернизированным тепловым узлом

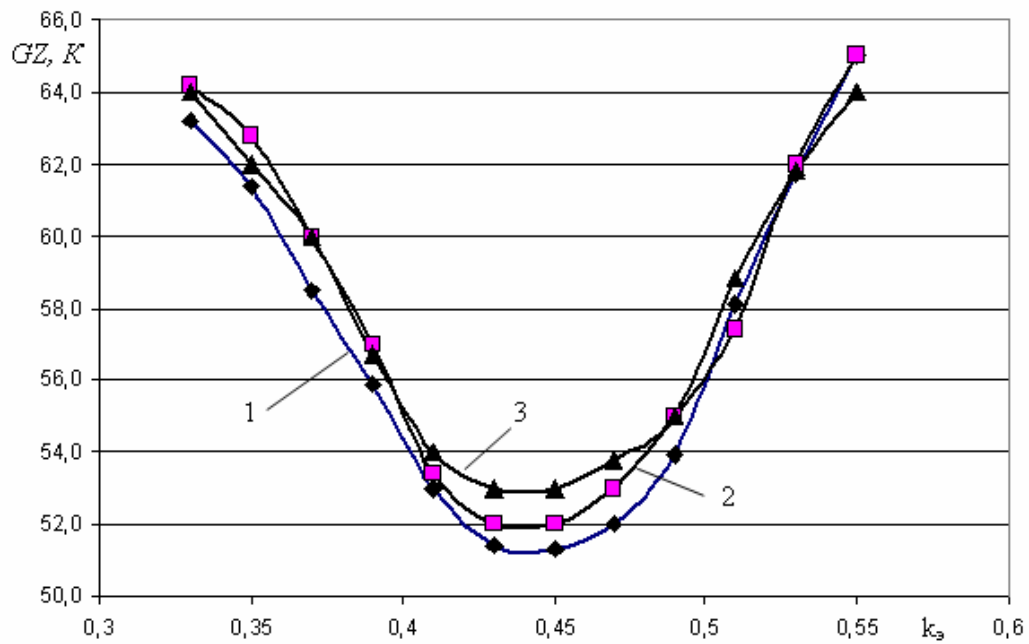


Рисунок 6 - Зависимость усредненного температурного градиента Gz от параметра конфигурации экрана $k_э$ при различном значении величины $c_э$: 1 – $c_э = 20$ мм; 2 – $c_э = 30$ мм; 3 – $c_э = 40$ мм

Выводы

Разработана математическая модель задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана и метод её решения, включающий численно-аналитическую эволюционную процедуру оптимизационных расчетов, что позволяет обеспечить необходимый температурный режим в зоне выращивания и остывания слитка.

Проведены расчеты по оптимизации положения теплового экрана и выбрана его конфигурация и высота расположения над уровнем расплава для конкретной ростовой установки.

Показано, что полученная конфигурация теплового экрана позволяет снизить неравномерность осевых температурных градиентов и обеспечить оптимальное распределение температуры по оси выращиваемого слитка.

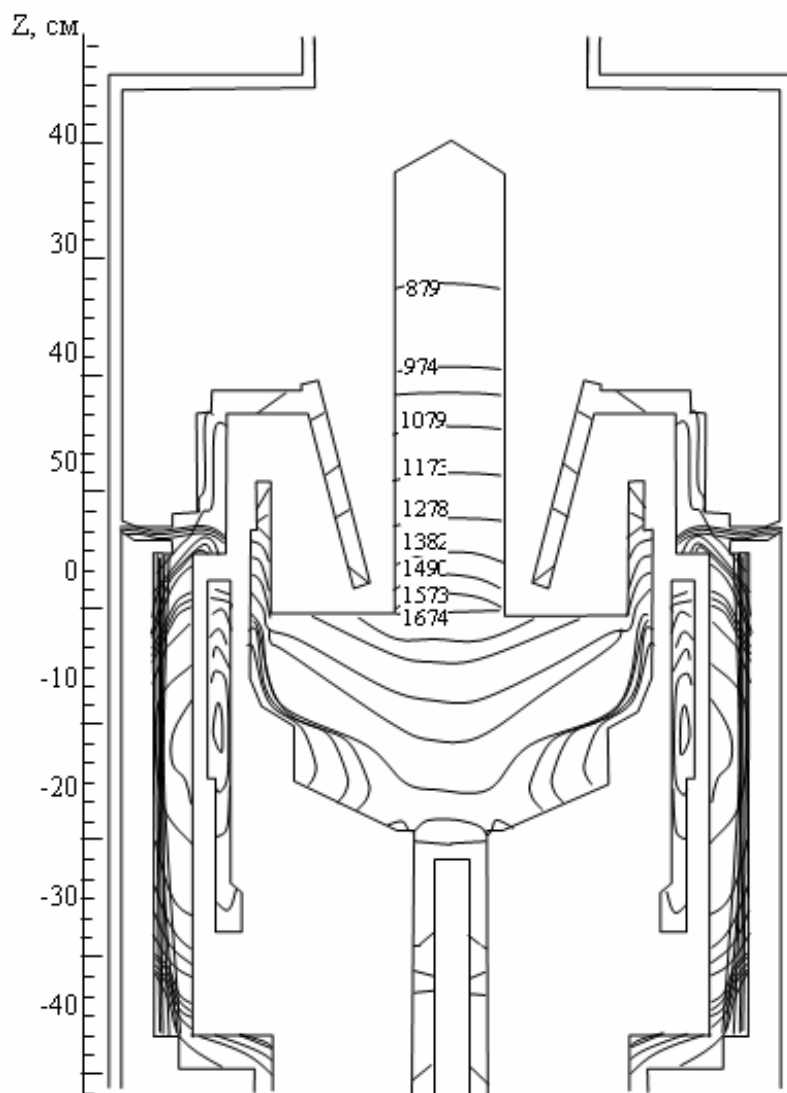


Рисунок 7 - Распределение температуры по сечению слитка

ЛИТЕРАТУРА

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. Тилман Б.Л. Анализ условий выращивания монокристаллов методом Чохральского / Б.Л. Тилман, С.Ф. Бурачас // Физика и химия кристаллов. - 1977. - № 3. – С. 1-5.

Получено 12.01.2010г.