

直拉硅单晶非均匀相变温度场最优控制

张 晶, 刘 丁[†], 杜燕军

(西安理工大学 晶体生长设备及系统集成国家地方联合工程中心, 陕西 西安 710048)

摘要: 针对直拉硅单晶固液界面相变温度场的非均匀性导致晶体直径不均匀问题, 提出一种基于偏微分方程(Partial Differential Equation, PDE)模型的温度场最优控制策略. 考虑生长速率波动的影响, 建立了一种改进的提拉动力学模型, 确定了域边界演化动力学关系. 研究基于抛物型PDE的时变空间域对流扩散过程的温度模型, 描述了域运动在对流扩散系统上的单向耦合. 针对无限维分布参数系统建模控制难问题, 采用谱方法进行系统近似, 选取整个空间域的全局和正交的空间基函数, 通过Galerkin方法对无限维系统进行降维, 获得了该系统的近似模型. 采用线性二次型方法控制晶体生长温度, 通过仿真实验对相变温度场模型进行验证. 结果表明, 优化后的模型能够获得较为平稳的晶体生长速率, 减小了生长直径的波动, 使得固液界面径向温度分布更加均匀, 验证了该方法的有效性.

关键词: 直拉硅单晶; 相变温度场; 生长直径; 抛物型PDE; 分布参数系统

引用格式: 张晶, 刘丁, 杜燕军. 直拉硅单晶非均匀相变温度场最优控制. 控制理论与应用, xxxx, xx(x): xxx – xxx
DOI: 10.7641/CTA.2020.00040

Optimal control for heterogeneous phase transition temperature field of Czochralski monocrystalline silicon

ZHANG Jing, LIU Ding[†], DU Yan-jun

(Crystal Growth Equipment and System Integration Engineering Research Center, Xi'an University of Technology, Xi'an Shaan Xi 710048, China)

Abstract: The study proposed an optimal strategy for controlling temperature field based on PDE model (Partial Differential Equation, PDE) in order to resolve non-uniformed diameters during crystal growth resulted by heterogeneity of phase-transition temperature field at solid-liquid interface for Czochralski monocrystalline silicon. In considering the influences brought by growth rate fluctuations, an improved lift-pull kinetic model was set up with dynamic relation been determined for the evolving domain boundary. Since the study was on the basis of the parabolic PDE temperature model of convection- diffusion process in time-varying spatial domain, it described one-way coupling of domain movement in convection- diffusion system. As for controlling difficulties occurred when modelling infinite distributed parameter system, the study adopted spectral method for system approximation. Within which, spatial primary functions that are global and orthogonal in the entire spatial domain were selected; thus, dimension reduction was performed to infinite-dimension system by taking Galerkin method so as to obtain approximation model of the system. Then, linear quadratic type method was applied to control crystal growth temperature, and simulation experiment was conducted for verifying phase-transition temperature field model. The results not only verify the effectiveness of the methods, but also show that the optimized model could stabilize crystal growth rate and reduce the problems of non-uniformed diameters for crystal growth; furthermore, temperature in radial direction at solid-liquid interface is more well-distributed.

Key words: Czochralski monocrystalline silicon; phase transition temperature field; growth diameter; parabolic PDE; distributed parameter system

Citation: ZHANG Jing, LIU Ding, DU Yanjun. Optimal control for heterogeneous phase transition temperature field of Czochralski monocrystalline silicon. *Control Theory & Applications*, xxxx, xx(x): xxx – xxx

收稿日期: xxxx-xx-xx; 录用日期: xxxx-xx-xx.

[†]通信作者. E-mail: liud@xaut.edu.cn; Tel.: +029-82312088.

本文责任编辑:

国家自然科学基金项目(61533014), 陕西省自然科学基金(2019JQ-734)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 61533014), and the Natural Science Foundation of Shaanxi Province (No. 2019JQ-734).

1 引言

直拉法生长直径均匀的硅单晶是目前半导体芯片材料制造的关键技术^[1-2],也是衡量晶体品质的重要指标之一.在硅单晶生长过程中,通过提拉运动在相变界面(即熔体-晶体交界面)处形成一定的温度差,依据晶体生长原理^[3],相变界面温度场的均匀性决定了该温度差的稳定性,是硅单晶均匀生长的根本保证.然而,相变温度场受提拉速度、加热器温度、晶体旋转和坩埚旋转等工艺参数的影响且随着热能、动能和质量运输的状态而变化,呈现非均匀性特征.

当前,针对相变温度场非均匀性问题,在晶体生长温度建模的研究中,在表征固液界面径向温度梯度和轴向温度梯度共同作用规律时,往往忽略了提拉速度动力学因素^[4-6].然而,由拉速引起的结晶潜热所引发的热补充对固液界面轴向温度梯度有着不可忽视的影响. Brown^[7]和Lan^[8]分别给出了详细的晶体生长过程建模和动力学分析方法,合理的调整晶转和坩埚转工艺参数,能够提高固液界面温度的均匀性.然而,随着硅单晶生长直径增大,热场尺寸增加,液面位置变化等因素仍对相变温度场的均匀性产生影响,从而引起晶体直径波动.与此同时,熔体内部热传输机理复杂,晶体生长直径控制系统所具有的强非线性、大时滞、不确定性特征,给控制器设计带来困难^[9-10].因此,从晶体内部热传输和温度分布入手研究其直径控制问题是一有效途径. Derby^[11]等人通过研究质量和能量平衡关系建立了晶体的热传输模型,该模型为时变空间域上的偏微分方程. Wang^[12-13]等人研究了基于稳定温度场的最优控制器,提出了时变空和间域的分布式系统的稳定与控制模型.然而,该模型描述的晶体温度随时空变换且具有无穷个自由度,本质上是无限维的,难以获得解析解.同时,受实际生产条件限制,生长温度难以实时测量,大大增加了直径控制难度.

针对这一问题,对无限维分布参数系统进行降维是分析、优化和控制生长直径的有效方法^[14].传统的降维方法如差分法和有限元法只能得到阶数非常高的近似模型,并不适用于分布参数系统的快速仿真和控制器设计^[15-17].因此,研究合理的降维方法来获得较为准确的温度场模型是十分重要的.针对上述问题,本文建立一种基于PDE模型的温度场优化模型,该模型采用二阶常微分方程(Ordinary Differential Equation, ODE)描述了机械拉动臂引起的边界演化,考虑生长速率波动的时变空间域上的抛物型PDE来描述晶体温度的变化.基于PDE无限维空间上晶体热传输的时变模型,采用谱方法和Galerkin方法获得有

限维近似模型,以此来简化温度调节和域运动控制问题的数值实现.采用线性二次型对改进后的温度模型进行控制,对比分析了相变界面温度分布和晶体生长直径,从而验证方法的有效性.

2 非均匀相变温度场问题描述

2.1 问题分析

依据点缺陷在固液界面处的相变温度场形成理论,相变温度场的某时空临界尺度由 V/G 比值决定, V 为晶体的提拉速度, G 为固液界面靠近晶体侧的轴向温度梯度.当 V/G 比值维持在 $0.134 \times (1 \pm 10\%) \text{mm}^2/\text{C} \cdot \text{min}$ 范围时,晶体可在稳定的相变温度场中生长,形成无缺陷的完美硅单晶^[18].当相变温度场不稳定波动超过 V/G 理想范围时,会引起晶体生长速率波动并反映在晶体等径生长时直径的变化上.实际中往往通过提拉速度来调控固液界面相变温度场的均衡性,这是由于直径能够快速响应拉速调节,而通过加热器温度调节晶体直径的过程中,由加热器传至固液界面的热传输通道存在较大滞后,因而调节响应慢.因此,由生长速率波动引起的提拉速度的波动是导致晶体直径波动的根本原因.

本质上,相变温度场不稳定波动一方面来自提拉速度对温度分布影响,即晶体不断生长使得晶体边界发生变化,影响固液界面处的温度分布.另一方面熔体液位不断下降导致热辐射增强,影响了固液界面处温度分布的均匀性.因此,建立晶体生长过程提拉动力学模型与热传输模型时,需要进一步考虑晶体生长和熔体液位下降对相变温度场的影响,从而改善相变温度场的非均匀性.

2.2 提拉动力学模型

根据晶体生长原理,晶体生长过程满足质量守恒定律和牛顿第二定律,如图1所示.

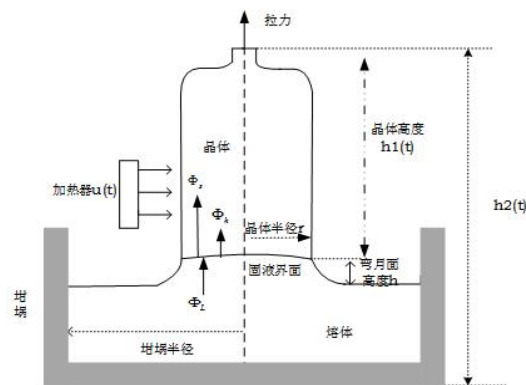


图1 直拉法晶体生长过程示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the Czochralski crystal growth progress

文献^[19]中假设固液界面平直, 提出基于晶体生长提拉过程的动力学模型, 该模型能够很好的描述提拉作用对晶体直径和晶体生长速率的影响. 但是, 在晶体生长过程中, 固液界面处热通量并不是一成不变的, 会随着温度场的变化而发生改变, 从而影响晶体生长直径. 由1.1分析可知, 液面位置下降所引起的相变温度场非均匀性是改变固液界面形状的根本原因, 如图1所示, 固液界面形状凸向晶体. 针对这一问题, 通过建立考虑坩埚上升速率的提拉动力学模型, 以保证液面位置的稳定来改善相变温度场的非均匀性, 从而避免生长速率的波动.

在晶体生长过程中, 根据质量守恒定律可得: $M_t = M_l + M_m + M_s$, M_t 为总投料量, M_l 为熔体质量, M_m 为弯月面的质量, M_s 为晶体质量. 假设在晶体生长过程中 M_m 恒定, 则熔体减少的质量等于晶体增加的质量, 即:

$$-\rho_l \pi R^2 \dot{H}_m = \rho_s \pi r^2 \dot{h}_1. \quad (1)$$

其中: ρ_l 为硅熔液密度, ρ_s 为晶体密度, R 为坩埚半径, r 为晶体半径, \dot{H}_m 为熔液高度变化率, \dot{h}_1 为晶体生长速率.

根据晶体生长过程, 可知晶体的轴向生长速率表示为:

$$h_1 = v_p - v_c - \dot{H}_m. \quad (2)$$

其中: v_p 为晶体提拉速度, v_c 为坩埚上升速度. 可由式(3)得到:

$$v_c = kv_p. \quad (3)$$

其中: k 为坩跟比.

直拉法硅单晶生长过程中, 相变界面处能量的传递和变化均直接影响界面温度, 从而影响生长界面温度差. 图1给出了晶体生长过程中固液界面的热量传递过程. 根据固液界面的能量守恒方程, 可得晶体生长速度与热量的关系为:

$$\Phi_h = \Phi_s - \Phi_l = \pi r^2(t) \rho_c \Delta H \dot{h}_1. \quad (4)$$

其中: Φ_s 表示穿过固液界面进入晶体的热量, Φ_l 表示从熔体进入固液界面的热量, Φ_h 表示晶体结晶时释放的潜热, ΔH 为晶体结晶时释放的潜热. 上式表明, 在单位时间内相变界面传递到晶体中的热量等于通过熔体传递至相变界面的热量和相变过程中释放的潜热之和. 因此, 希望相变界面处有稳定热量传输就意味着 $\Phi_s - \Phi_l$ 在晶体生长过程中保持稳定.

根据牛顿第二定律可得:

$$\frac{d(M_s v_p)}{dt} = F_{ext}(t). \quad (5)$$

联立式(1)–(5), 可得提拉动力学模型:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) &= \frac{1-k}{\rho_s x_3(t)} \left(F_{ext}(t) - \rho_s \pi C \left(x_2(t) - \frac{\rho_s C}{\rho_l R^2} \right) \right) \\ \dot{x}_3(t) &= \pi C. \end{aligned} \quad (6)$$

晶体半径作为输出, 表达式为:

$$r(t) = y(t) = \sqrt{\frac{C}{x_2(t)}}. \quad (7)$$

其中: $x_1 = l(t)$, $x_2(t) = i(t)$, $x_3(t) = V_s(t)$, $C = \frac{\Phi_s - \Phi_l}{\pi \rho_c \Delta H}$, 其取决于固液界面的热通量, C 值的变化体现了固液界面的热量传递, 能够反映固液界面温度场的均匀性.

2.3 温度场优化模型

根据提拉动力学模型得到了晶体边界演化和晶体的生长速率, 通过对晶体生长动力学特性与热传输方式的分析, 式(8)描述了在时变空间域上对流扩散过程的热传输过程^[16].

$$P_e \frac{\partial x(r, z, t)}{\partial t} = \nabla \cdot k_r \nabla x(r, z, t) - P_e V(r, z, t) \frac{\partial x(r, z, t)}{\partial z}. \quad (8)$$

其中: $x(r, z, t)$ 表示晶体的温度, P_e 为 Peclet 常数, k_r 表示热传导率, V 表示晶体生长速度. 忽略径向生长速率, 并通过适当的坐标变换, 在柱坐标系下式(8)可以表示为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_0 r \frac{\partial x}{\partial r} \right) + k_0 \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} - V_z(t) \frac{\partial x}{\partial z} \\ &= A(r, z, t) x. \end{aligned} \quad (9)$$

其中: $k_0 = k_r / P_e$, $V_z(t)$ 表示晶体沿轴向的生长速度, $A(r, z, t)$ 为对 $x(r, z, t)$ 的操作的算子.

如图1所示, 加热器 $u(t)$ 作用在晶体的边界上, 并且在晶体生长过程中, 加热器位置保持不变. 晶体在固液界面处结晶, 固液界面处的温度恒为晶体的熔点 x_f , 且在 $r = 0$ 处无热量交换, 并假设在其余边界处热通量为零, 边界条件可表示为:

$$\begin{aligned} x|_{z=l(t)} &= x_f; \quad \frac{\partial x}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \\ \frac{\partial x}{\partial z} \Big|_{z=0} &= 0; \quad \frac{\partial x}{\partial z} \Big|_{z=(t)} = 0 \\ \frac{\partial x}{\partial r} \Big|_{r=r(t)} &= u(t) \end{aligned} \quad (10)$$

其中: $r(t)$ 表示晶体的半径, $l(t)$ 表示晶体的高度, $u(t)$

表示加热器输入。

由式(8)可知,晶体的温度是相对时间和空间位置的函数,具有无穷维自由度,且往往不能通过有限个状态进行求解.因此,需要对该模型进行降维.

3 晶体生长温度场降维

针对无限维分布参数系统的求解问题,采用有限维的常微分方程描述的系统来近似无限维分布参数系统.首先需要确定热传输作用的有效边界,即晶体直径和长度的变化.在晶体生长过程中,总是期望晶体直径恒定,因此,控制晶体直径尤其重要.本文在提拉动力学模型和直径控制的基础上确立热传输边界,进一步对热传输模型进行降维.

3.1 热传输边界的确立

根据式(6)和式(7)所示的晶体提拉动力学模型,对输入输出进行线性化,可定义 $F_{ext}(t)$ 为:

$$F_{ext}(t) = \frac{2\rho_s\pi C^2}{r(t)^2} - \frac{\rho_s^2\pi C}{\rho_l R^2} - \frac{2C\rho_s(V_0 + \pi Ct)}{r(t)^3(1-k)}v(t). \quad (11)$$

为了保证半径为预先设定的期望值 R_d ,控制律选取为: $v = \dot{R}_d - Ke$,其中, $\dot{R}_d = 0$, $e = r(t) - R_d$, K 为待调节的参数,表示控制器增益,因此,在晶体生长过程中如下的控制作用可以保证半径稳定在 R_d ,即:

$$F_{ext}(t) = \frac{2\rho_s\pi C^2}{r(t)^2} - \frac{\rho_s^2\pi C}{\rho_l R^2} - \frac{2C\rho_s(V_0 + \pi Ct)}{r(t)^3(1-k)}(-K(r(t) - R_d)). \quad (12)$$

3.2 PDE模型降维方法

基于上述方法确立的边界条件对PDE模型进行降维.谱方法在整个空间域上选择全局和正交的空间基函数,相比较于有限单元法的空间离散能够得到维数更低的近似模型.谱方法适用于一类能够进行快慢变量分离的系统,快慢变量是指空间基函数在空间频率域中的排列顺序往往是由慢到快,由于快变量对系统的贡献较小,因此,选择慢变空间基函数即可满足降维的要求.快慢变量的区分通过Galerkin截断准则来判定.

谱方法对模型降维的基本步骤为:

1) 选取空间基函数,将系统变量在空间基函数上展开;

空间微分算子的特征函数常用作空间基函数^[14],

对于算子 A ,其与特征值和特征函数之间关系为:

$$A\Phi(r, z, t) = \lambda(t)\Phi(r, z, t). \quad (13)$$

式中, λ 为特征值, Φ 为特征函数,可通过式(14)对算子 A 分离变量进行求解^[19].

将系统变量 $x(r, z, t)$ 在空间基函数上展开,即:

$$x(r, z, t) = \sum_{m,n=1}^{\infty} a_{mn}(t)\varphi_{mn}(r, z, t). \quad (14)$$

对于式(9)和(10)所描述的系统,输入控制 $u(t)$ 加在边界上,并假设输入控制作用函数为 $b(z_c) = \delta_{[z_c - \varepsilon_1, z_c + \varepsilon_1]}(z)$,该函数代表输入的作用范围,其中, $\varepsilon_1 > 0$,通过采用Dirac delta函数将边界控制系统转化为与其等价的分布控制系统,则输入算子 $B(t)$ 可以定义为:

$$B(t)u(t) = \int_{\Omega} b(z_c)\varphi_{mn}(1, z, t)u(t)drdz. \quad (15)$$

结合式(9)和式(15)可以将热传输模型写为:

$$\frac{dx}{dt} = A(t)x + B(t)u(t). \quad (16)$$

2) 采用Galerkin方法得到描述展开系数的无限维常微分方程组;

Galerkin方法中选取与空间基函数相同的权重函数使系统残差最小,获得展开系数的无限维常微分方程组,记为:

$$\dot{a}_{mn}(t) = \lambda_{mn}(t)a_{mn}(t) + b_{mn}(t)u(t). \quad (17)$$

其中:

$$b_{mn}(t) = \int_{\Omega} b(z_c)\varphi_{mn}(1, z, t)\varphi_{mn}(r, z, t)drdz \quad (18)$$

其中: $mn = 1, 2, \dots, \infty$, λ_{mn} 表示算子 A 的第 mn 个特征值.

3) 通过有限维截断与空间基函数综合得到系统的低维近似模型;

为了对无穷维常微分方程降维,需根据Galerkin截断理论确定慢变空间基函数的个数.Galerkin截断准则^[20]如下:

对于分布参数系统, $\text{Re}\lambda_j$ 表示的是系统空间算子特征值 λ_j 的实部,如果 $0 \geq \text{Re}\lambda_1 \geq \text{Re}\lambda_2 \geq \dots \geq \text{Re}\lambda_j \geq \dots$,且存在 k 使之满足 $|\text{Re}\lambda_1|/|\text{Re}\lambda_k| = O(1)$, $|\text{Re}\lambda_k|/|\text{Re}\lambda_{k+1}| = O(\varepsilon)$,其中, ε 是一个很小的正实数,那么该系统可以通过特征值分解成包含 k 个慢特征值的有限维部分和其余无穷个快特征值的无限维部分,即 $\sigma(\bar{A}) = \sigma_1(\bar{A}) + \sigma_2(\bar{A})$,其中,

$\sigma_1(\bar{A}) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}, \sigma_2(\bar{A}) = \{\lambda_{k+1}, \lambda_{k+2}, \dots\}$.

假设在系统轴向和径向基函数上的截断值分别为 M, N , 可以将上述无穷维系统表示为:

$$x(r, z, t) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}(t) \varphi_{mn}(r, z, t). \quad (19)$$

$$\dot{a}_{mn}(t) = \lambda_{mn}(t) a_{mn}(t) + b_{mn}(t) u(t). \quad (20)$$

其中: $a_{mn}(t) = [a_1(t), a_2(t), \dots, a_{mn}(t)]$.

3.3 温度控制

对于系统的最优控制, 线性二次型性能指标能够更好地兼顾系统的状态以及输入能量消耗. 因此, 将线性二次型最优控制应用于抛物PDE系统低维模型, 结合晶体域运动来简化晶体温度调节, 得到系统的最优输入与温度分布. 设计一个最优输入 $u(t)$, 使如下的性能指标函数达到最小值:

$$J = \frac{1}{2} \int_0^T a^T(t) Q(t) a(t) + u^T(t) R(t) u(t) dt. \quad (21)$$

其中: Q 和 R 为非负定对称和正定对称的系数矩阵, a 为系统的状态. 为使性能指标 J 最小, 最优输入取为:

$$\begin{aligned} u(t) &= -R^{-1}(t) B^T(t) P(t) a(t) \\ &= -K(t) a(t). \end{aligned} \quad (22)$$

其中, $P(t)$ 是 Riccati 方程的解.

4 结果与分析

本次仿真实验数据来自本中心12英寸硅单晶炉的实际拉晶试验, 记录了整个晶体生长过程中直径, 生长速率和加热器功率等数据, 采样时间为2s. 选取放肩和等径阶段10000个直径数据作为晶体的参考直径, 其中前1500个数据为放肩阶段, 其余数据为等径阶段. 仿真过程中各初始状态取值参考实际晶体生长数据, 如表1所示, 且模型中坩跟比设置参考实际晶体生长中坩跟比.

表 1 仿真过程参数选取

Table 1 Parameter selection of simulation process

参数	值
初始晶体长度	3.8cm
初始晶体半径	4.4cm
初始晶体体积	70.25cm ³
初始生长速率	0.0759cm/min
坩跟半径	27.9cm
坩跟半径	2340kg/m ³
坩跟半径	2530kg/m ³

在晶体生长过程中, 固液界面热通量时刻变化. 在

不考虑坩跟上升时, C 值的变化可以看作温度场变化对固液界面热通量的影响, 如图2中 $C1$ 所示. 在考虑坩跟上升时, 由图2中 $C2$ 给出了在仿真阶段 C 的变化曲线

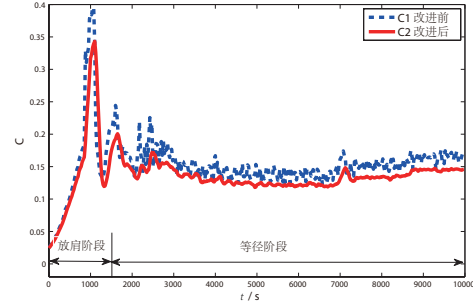


图 2 晶体生长过程固液界面 C 值变化

Fig. 2 Change of C at solid-liquid interface during crystal growth process

在晶体生长的不同阶段, 固液界面热通量变化不同, 反映在 C 值上. 放肩阶段是使晶体直径平滑放大至预设直径的过程. 由图2可知, 在放肩前期, C 值较高, 随着晶体进入等径阶段, C 值基本保持恒定. 原因是在放肩前期, 生长界面距离晶棒顶部距离较小, 大量的热通过提拉杆流出, 固液界面轴向温度梯度较高, C 值较大. 随着直径不断增大, 在放肩阶段液面变化微小可忽略不计, 假设流入固液界面热量不变, 由式(4)可知, Φ_s 逐渐减小, C 值逐渐减小. 在等径阶段, 固液界面热通量相对稳定, 晶体保持稳定生长, 符合晶体生长工艺要求, 验证了模型的正确性. 由图2可知, $C2$ 值波动较小, 说明相变温度场波动较小, 在等径阶段维持液面位置不变有利于改善固液界面相变温度场的均匀性. 因此, 在晶体生长过程中考虑坩跟上升速率能够有效地减少固液界面下降引起的相变温度场变化.

针对改进前和改进后两种模型对晶体直径控制进行仿真, 仿真过程设置控制增益 $K=0.1$, 可得晶体生长速率变化曲线如图3所示.

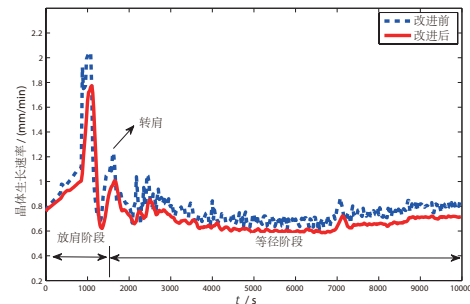


图 3 晶体生长速率

Fig. 3 Crystal growth rate

图3给出了晶体在放肩和等径阶段生长速率的变化曲线. 由 C 值分析可得, 在放肩阶段, 提拉速度较高, 生长速率近似于提拉速率, 因此, 在放肩阶段晶体生长速率较高. 由放肩至等径的过程需要进行转肩工艺, 即需提高拉速抑制晶体直径放大, 如图3所示, 此处拉速明显升高. 将优化后的生长速率进行对比, 由图3可知, 改进前模型中 C 值波动较大, 为了能够获得稳定的直径, 须通过调节拉速来减小直径波动, 即导致晶体生长速率波动较大; 而改进后模型中 C 值较为稳定, 能够获得稳定的生长速率.

图4给出了改进前和改进后模型直径控制结果, 并给出了与期望直径之间的误差.

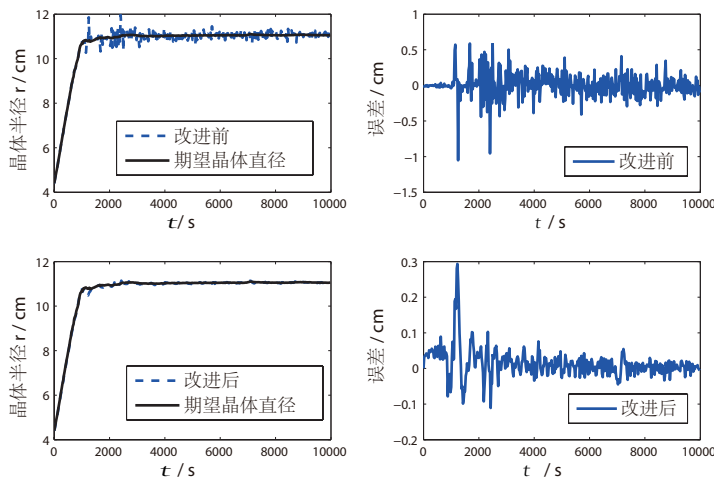


图4 晶体半径变化及误差对比

Fig. 4 Change of crystal radius and deviation comparison

由图4可知, 改进后模型能够更好稳定晶体的直径. 通过计算均方根误差对结果进行精确评估, 改进前模型求得直径的均方根误差为0.1636, 改进后模型求得直径的均方根误差为0.0423, 可以得出, 考虑坩埚上升能够减小相变温度场变化, 有利于实现晶体直径控制.

为了进一步验证液面位置对晶体生长过程的影响, 在加热温度不变条件下对晶体直径控制进行仿真, 如图5所示. 在不考虑坩埚上升的情况下, 由于液面位置下降, 坩埚壁的裸露面积不断增加, 形成大量的热辐射, 使晶体生长热量无法及时散出, 即 Φ_s 减小, 导致晶体直径减小. 实际中需降低拉速来进行补偿, 不但容易引起拉速的波动, 同时降低了效率. 由图5可知, 在考虑坩埚上升的情况下能够获得期望的晶体直径.

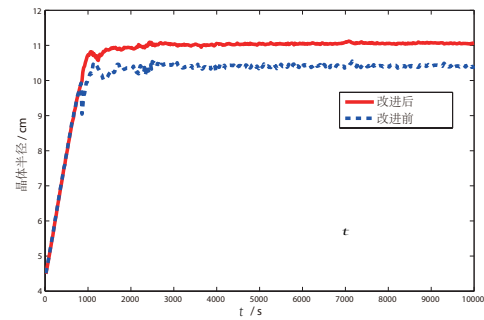


图5 两种条件下晶体的生长半径对比

Fig. 5 Comparison of the growth radius of crystals under two conditions

通过上述结果获得了温度模型边界条件, 将提拉动力学模型得到的晶体直径与高度变化应用于偏微分方程算子 A 的特征值计算中, 可得到特征值变化. 表2为径向特征函数对应的特征值, 不随时间变化. 图6为轴向特征函数对应的特征值, 其随时间变化, 这里仅给出前5项特征值的变化.

表2 部分径向特征值

Table 2 Partial radial eigenvalues

i	特征值 λ_i
1	-3.67
2	-12.3
3	-25.8
4	-44.38
5	-67.82

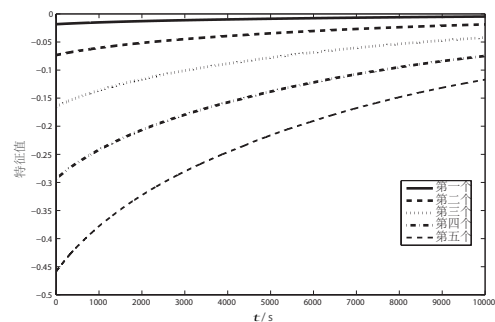


图6 部分轴向特征值

Fig. 6 Partial axial eigenvalues

根据Galerkin截断准则可知, 当算子 A 的特征值满足截断条件时, 可以将分布参数系统进行快慢分离. 一般, 当 $\lambda_1/\lambda_n = 0.1$, 即 λ_k 十倍于 λ_1 时, 就可截断前 k 阶低维慢变量部分来近似该无限维系统. 由表2

可得. 径向特征值满足 $0 \geq \text{Re } \lambda_1 \geq \text{Re } \lambda_2 \geq \dots$, $\frac{|\text{Re } \lambda_1|}{|\text{Re } \lambda_4|} \approx 0.082$, $\frac{|\text{Re } \lambda_4|}{|\text{Re } \lambda_5|} \approx 0.65$. 因此, 截取到前4个特征值即可满足降维要求. 同理, 根据图6所示, 轴向特征函数对应的特征值只需截取前4个即可满足降维要求, 即式(19)中 $M=4, N=4$, 因此, 将分布参数系统模型降维到16维.

根据特征值的截断数, 在图7和图8分别给出了径向和轴向前4个特征函数的变化曲线, 其作为空间基函数来实现模型降维. 从图中可以看出, 特征函数之间频率变化明显, 具有良好的快慢分离特性, 适于模型降维.

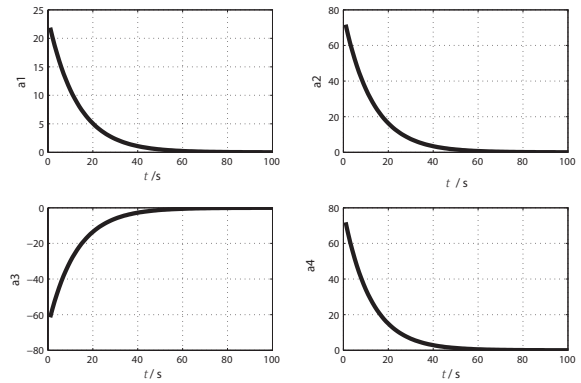


图9 时间系数 $a_{mn}(t)$ 的变化曲线

Fig. 9 Change curve of time coefficient $a_{mn}(t)$

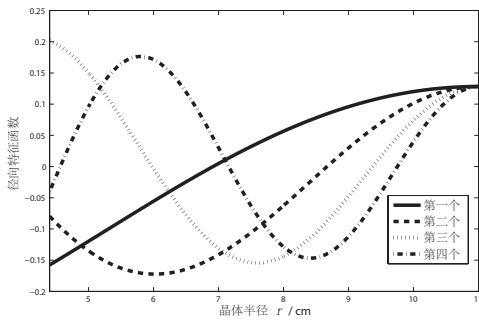


图7 前4个径向特征函数

Fig. 7 The first 4 radial eigenfunctions

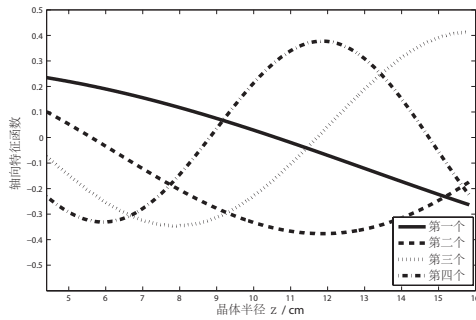


图8 前4个轴向特征函数

Fig. 8 The first 4 axial eigenfunctions

为了稳定固液界面附近的温度分布, 对降维后的模型进行线性二次型最优控制, 图9仅给出了前4维时间系数 $a_{mn}(t)$ 的变化曲线:

最优控制得到系统的输入变化曲线如图10所示:

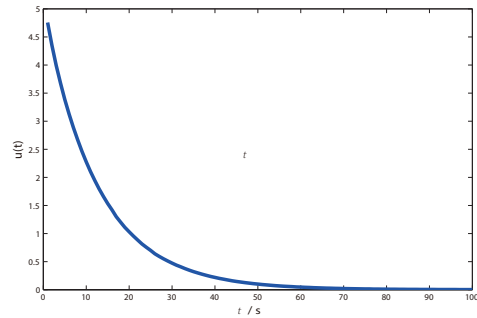


图10 输入 $u(t)$ 变化曲线

Fig. 10 Change curve of input $u(t)$

图11给出了降维后固液界面处晶体径向温度随时间的变化. 从中选取不同时刻的温度分布加以分析, 如图12所示. 图12(1)中初始时刻晶体径向温度存在波动, 通过对系统进行最优控制后, 晶体固液界面附近温度逐渐稳定, 如图12(1) - (4)所示.

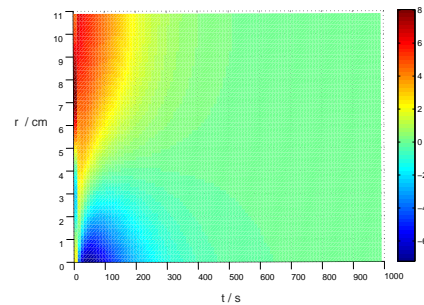


图11 固液界面处温度分布

Fig. 11 Temperature distribution at solid-liquid interface

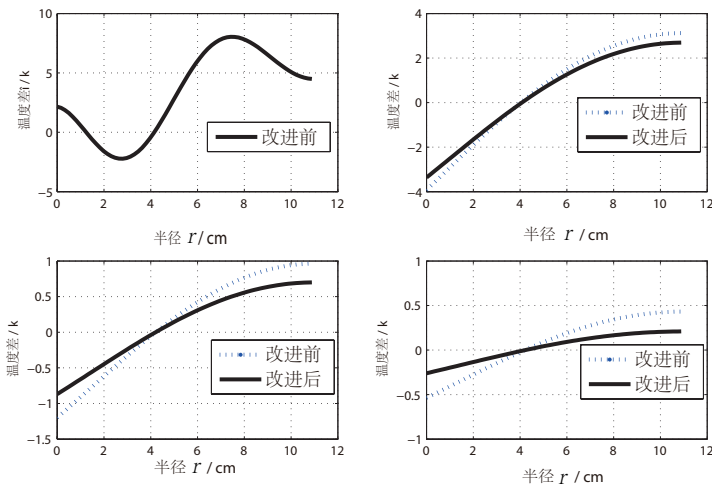


图 12 不同时刻温度分布曲线

Fig. 12 Temperature distribution curve at different time

上图中温度差表示与凝固点温度的差值,即可通过温度差变化来表示温度分布变化.从图11中可以看出,固液界面处温度分布随时间增长而更加平稳.图12中对模型改进前后得到的温度差分布比较可以得出,改进前与改进后模型中固液界面径向温度梯度的差值逐渐增大,是由于随着晶体的不断生长,液面位置不断下降,使得相变界面的非均匀性增强,且随着时间推移表现更为明显.改进后模型能够大幅度提高径向温度分布均匀性,得到的固液界面径向温度梯度较小,能够获得更加平坦的固液界面形状.在线性二次型最优控制作用下,改进前后模型的固液界面径向温度梯度在逐渐减小,最终获得稳定的相变界面温度分布.在这一过程中,改进后模型温度梯度低于改进前模型,进一步验证了改进模型与降维方法的有效性.

5 结论

直拉法晶体生长相变界面温度分布非均匀性导致晶体生长直径不均匀.针对这一问题本文提出了基于PDE模型的温度场最优控制策略.建立了考虑坩埚上升的改进提拉动力学模型,确定晶体域边界的演化,从而使液位下降导致的相变温度场非均匀性得到改善.采用谱方法选择特征函数作为空间基函数,Galerkin将时间系数展开为无限维常微分方程组,并根据截断准则得到低维近似模型,解决了PDE模型无法直接求解的问题.通过反馈线性化和线性二次型来求解域运动以及域运动单向耦合的温度分布问题.仿真实验结果表明,改进模型使得相变界面径向温度分布更加均匀,有利于直拉硅单晶稳定生长.

参考文献:

- [1] LIU Ding. *CZ silicon single crystal growth modeling and control*. Beijing: Science Press, 2015. (刘丁. 直拉硅单晶生长过程建模与控制. 北京: 科学出版社, 2015.)
- [2] LIU Ding, ZHAO Xiaoguo, ZHAO Yue. A review of growth process modeling and control of Czochralski silicon single crystal. *Control Theory & Applications*, 2017, 34(1): 1 – 12. (刘丁, 赵小国, 赵跃. 直拉硅单晶生长过程建模与控制研究综述. 控制理论与应用, 2017, 34(1): 1 – 12.)
- [3] MIN Naiben. *Physical basis of crystal growth*. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 1993. (闵乃本. 晶体生长的物理基础. 上海: 上海科学技术出版社, 1993.)
- [4] NG J, DUBLJEVIC S. Optimal control of convection-diffusion process with time-varying spatial domain: Czochralski crystal growth. *Journal of Process Control*, 2011, 21(10):1361–1369.
- [5] ASSAKER R, VANDENBOGAERT N, DUPRET F. Time-dependent simulation of the growth of large silicon crystals by the Czochralski technique using a turbulent model for melt convection. *Journal of Crystal Growth*, 1997, 180(3–4): 450 – 460.
- [6] JUNG T, SEEBECK J, FRIEDRICH J. Combined global 2D – local 3D modeling of the industrial Czochralski silicon crystal growth process. *Journal of Crystal Growth*, 2013, 368 : 72 – 80.
- [7] BROWN R A. Theory of transport processes in single crystal growth from the melt. *AIChE Journal*, 1988, 34(6): 881 – 911.
- [8] LAN C W. Recent progress of crystal growth modeling and growth control. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(7): 1437 – 1457.
- [9] LIANG Yanming. *Data-drive based growth control for silicon single crystal*. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2014. (梁炎明. 基于数据驱动的硅单晶生长过程控制研究. 西安: 西安理工大学, 2014.)
- [10] DUAN Weifeng. *Model identification and control of silicon single crystal diameter for constant-diameter growth stage*. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2017. (段伟锋. 硅单晶等径阶段直径模型辨识与控制研究. 西安: 西安理工大学, 2017.)
- [11] DERBY J J, BROWN R A. On the dynamics of Czochralski crystal growth. *Journal of Crystal Growth*, 1987, 83(1): 137 – 151.
- [12] WANG P K C. Stabilization and control of distributed systems with time-dependent spatial domains. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 1990, 65(2).
- [13] WANG P K C. Feedback control of a heat diffusion system with time-dependent spatial domain. *Optimal Control Applications and Methods*, 1995, 16(5): 305 – 320.
- [14] JIANG Mian. *New model reduction approaches for spatio-temporal systems and its applications in the modelling of aluminum alloy rolling processes*. Changsha: Central South University, 2012. (蒋勉. 时空耦合系统降维新方法及其在铝合金板带轧制过程建模中的应用. 长沙: 中南大学, 2012.)
- [15] JIANG M, WU J, ZHANG W, et al. Empirical gramian-based spatial basis functions for model reduction of nonlinear distributed parameter systems. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 2018: 1 – 17.
- [16] REN Y Q, DUANX G, LI H X, et al. Dynamic switching based fuzzy control strategy for a class of distributed parameter system. *Journal of Process Control*, 2014, 24(3): 88 – 97.
- [17] SHUAI Jun. *Study on some Issues of model reduction for nonlinear partial differential equations dynamical systems*. Changsha: Central South University, 2014.

(帅军. 若干非线性偏微分方程动态系统降维问题的研究. 长沙: 中南大学, 2014.)

- [18] VORONKOV V V. The mechanism of swirl defects formation in silicon. *Journal of Crystal Growth*, 1982, 59(3): 625 – 643.
- [19] ABDOLLAHI J, DUBLJEVIC S. Crystal radius and temperature regulation in Czochralski crystallization process. *American Control Conference*. IEEE, 2013.
- [20] BAKER J, CHRISTOFIDES P D. Finite-dimensional approximation and control of non-linear parabolic PDE systems. *International Journal of Control*, 2000, 73(5): 439 – 456.

作者简介:

张 晶 博士, 目前研究方向为多场耦合环境下的建模与控制、直拉单晶生长过程温度场建模与优化, E-mail: zhjing@xaut.edu.cn;

刘 丁 教授, 目前研究方向为控制理论与控制工程, 复杂系统建模与控制、硅单晶炉控制方法, E-mail: liud@xaut.edu.cn;

杜燕军 研究生, 目前研究方向为晶体生长过程辨识与数值分析, E-mail: duyj9569@163.com.