

АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ МОЩНОСТЕЙ НАГРЕВАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В МНОГОЗОННОЙ УСТАНОВКЕ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ ПО БРИДЖМЕНУ

М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков*, В.Е. Гинсар*

Томский политехнический университет

*Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск

E-mail: imces@yandex.ru

Рассмотрена модель многозонной термической установки для выращивания кристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте с произвольным числом нагревательных элементов. Разработан алгоритм оценки мощностей нагревателей, формирующих априорно заданное распределение температуры в рабочем объеме. Алгоритм позволяет оперативно оценивать мощности как на этапе проектирования, так и во время эксплуатации термической установки.

Ключевые слова:

Многозонная термическая установка, метод Бриджмена, алгоритм.

Key words:

Multizone thermal device, Bridgman method, algorithm.

Одной из задач, возникающих при проектировании многозонных термических установок, в том числе установок для выращивания монокристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте, является расчет мощностей нагревательных элементов, позволяющих сформировать не только номинально необходимые термические условия для выращивания кристаллов, но и обеспечить возможность оптимизации режимов на всех этапах технологического процесса [1, 2]. Сложность задачи обусловлена тем, что гипотетически оптимальные условия, требуемые для роста монокристаллов (в частности, динамика осевого распределения температур $T(z)$ в рабочем объеме установки в течение технологического процесса) формируются с помощью N -го количества дискретных нагревательных модулей, термически связанных между собой через рабочий объем.

В качестве объекта исследования рассматривается термическая установка для выращивания монокристаллов $ZnGeP_2$ методом Бриджмена. Установка представляет собой многозонную печь на основе планарных нагревательных модулей [3].

Рабочий объем установки представляет собой цилиндр, ограниченный в радиальном направлении внутренними поверхностями кольцевых нагревательных модулей (23 планарных элемента, соосно установленных друг относительно друга и разделенных теплоизолирующими прокладками). На рис. 1, *a*, показан продольный разрез установки с заполненным рабочим объемом. Осевое распределение температуры, номинально обеспечивающее условия для роста кристаллов $ZnGeP_2$, приведено на рис. 1, *б*.

Управление температурным полем установки производится на основе измерений температуры термопарами, располагаемыми вблизи электрических нагревателей (регулирующие термопары). В качестве источников тепла используются секционные электрические нагреватели, изготовленные по оригинальной технологии в ИМКЭС СО РАН, г. Томск. Максимальные мощности нагревательных элементов приведены в [4].

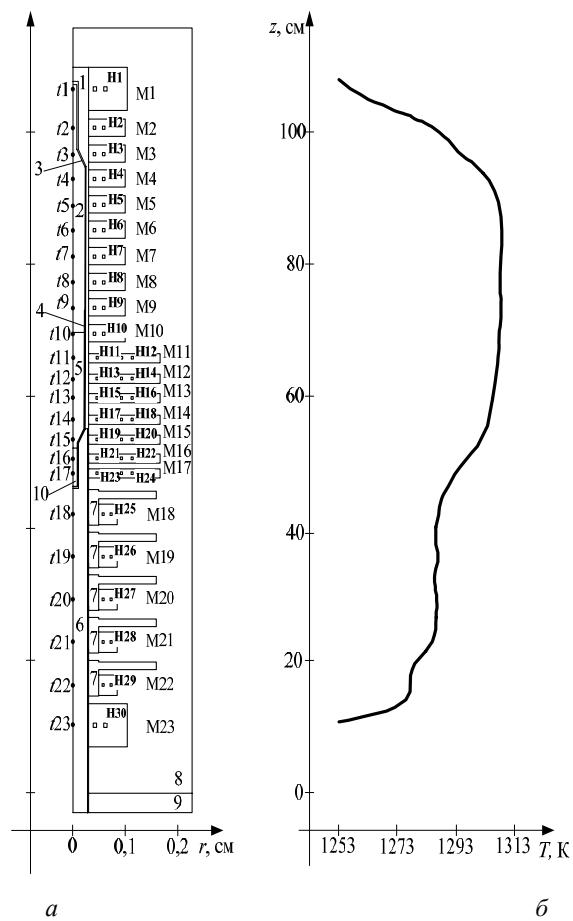


Рис. 1. Разрез установки для выращивания кристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте с заполненным рабочим объемом (*а*). Обозначения: 1) воздух; 2) паровая фаза над расплавом кристаллизуемого вещества; 3) ампула; 4) тигель; 5) рабочее вещество; 6) теплоизвод; 7) тепловые шунты; 8) теплоизолятор; 9) подставка печи; 10) затравочный кристалл, $H1-H30$ и $M1-M23$ – нагревательные элементы и модули, $t1-t23$ – контрольные точки измерения температуры на оси установки. Осевое распределение температуры, номинально обеспечивающее условия выращивания монокристаллов $ZnGeP_2$ (*б*)

Пусть для некоторого распределения мощностей нагревателей P_{ij} ($j=1, \overline{N}$, N – количество нагревательных элементов) известно начальное осевое распределение температуры в рабочем объеме установки $T_0(z)$, которое в i -ой контрольной точке с координатой z_i имеет значение T_{0i} . Предположим, что по технологическим соображениям в рабочем объеме установки необходимо получить некоторое заранее заданное осевое распределение температур $T_{si}(z)$ с температурами T_{si} ($i=1, \overline{M}$, M – количество точек измерения температуры) в тех же контрольных точках z_i . Требуется определить, при каком распределении мощностей нагревателей P_{ij} будет реализовано распределение T_{si} .

Пусть вариации δP_j ($j=1, \overline{N}$) от начального распределения мощностей нагревателей вызывают изменение начального осевого распределения температуры до некоторого текущего $T(z)$ с значениями T_i , измеряемыми в i -ых точках z_i .

Потребуем, чтобы функционал F из суммы квадратов невязок текущего осевого распределения температуры, относительно заданного с весовыми коэффициентами w_i достигал минимума:

$$F = \sum_{i=1}^M w_i (T_i - T_{si})^2 \rightarrow \min. \quad (1)$$

Полагая $T_i = T_i(P_1, P_2, \dots, P_N)$ и ограничиваясь первыми членами разложения T_i в ряд Тейлора относительно начального осевого распределения температуры T_{0i} , получим:

$$T_i = T_{0i} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \delta P_j, \quad (2)$$

где $\frac{\partial T_i}{\partial P_j}$ – частные производные от i -й температуры по мощности j -го нагревателя.

Подстановка (2) в (1) приводит функционал к виду:

$$F = \sum_{i=1}^M w_i \left(T_{0i} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \delta P_j - T_{si} \right)^2 \rightarrow \min. \quad (3)$$

Условие минимума будет выполнено, если производная от правой части (3) по всем вариациям δP_n ($n=1, \overline{N}$) будет равна нулю:

$$\sum_{i=1}^M w_i \left(T_{0i} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \delta P_j - T_{si} \right) \frac{\partial T_i}{\partial P_n} = 0, \quad n = \overline{1, N}$$

или

$$\sum_{i=1}^M w_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial P_n} (T_{0i} - T_{si}) + \frac{\partial T_i}{\partial P_n} \sum_{j=1}^N \frac{\partial T_i}{\partial P_j} \delta P_j \right) = 0, \quad (4)$$

$$n = \overline{1, N}.$$

Расписывая суммирование по индексу j , получим

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{ccc} \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_1} \frac{\partial T_i}{\partial P_1} & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_2} \frac{\partial T_i}{\partial P_1} & \dots & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_N} \frac{\partial T_i}{\partial P_1} \\ \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_1} \frac{\partial T_i}{\partial P_2} & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_2} \frac{\partial T_i}{\partial P_2} & \dots & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_N} \frac{\partial T_i}{\partial P_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_1} \frac{\partial T_i}{\partial P_N} & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_2} \frac{\partial T_i}{\partial P_N} & \dots & \sum_{i=1}^M w_i \frac{\partial T_i}{\partial P_N} \frac{\partial T_i}{\partial P_N} \end{array} \right] \times \\ & \times \begin{bmatrix} \delta P_1 \\ \delta P_2 \\ \dots \\ \delta P_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^M w_i (T_{si} - T_{0i}) \frac{\partial T_i}{\partial P_1} \\ \sum_{i=1}^M w_i (T_{si} - T_{0i}) \frac{\partial T_i}{\partial P_2} \\ \dots \\ \sum_{i=1}^M w_i (T_{si} - T_{0i}) \frac{\partial T_i}{\partial P_N} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

или в матричной форме

$$A \times \delta P = V, \quad (5)$$

где $A[n \times n]$ – матрица, характеризующая интегральное влияние вариации мощностей нагревателей на температуры установки в измеряемых точках, $\delta P[n]$ – вектор вариации мощностей нагревателей, $V[n]$ – вектор, характеризующий отклонение заданного распределения температуры от начального.

На основании полученных соотношений алгоритм расчета распределений мощностей нагревательных элементов сводится к следующему:

- определяется требуемое условиями технологического процесса осевое распределение температур в рабочем объеме многозонной печи T_{si} , измеряемое в i -ых точках ($i=1, \overline{M}$);
- с помощью математической модели (на этапе проектирования) либо на реальной установке находится начальное осевое распределение температур T_{0i} ($i=1, \overline{M}$) для некоторого известного распределения мощностей P_{ij} ($j=1, \overline{N}$) нагревателей;
- варьируя последовательно $\delta P \approx 1...5\%$ от P_{ij} ($j=1, \overline{N}$) регистрируются вариации температур δT_j ($i=1, \overline{M}$);
- рассчитываются коэффициенты влияния нагревателей на изменение температур

$$\frac{\partial T_i}{\partial P_j}, \quad (i = \overline{1, M}, j = \overline{1, N});$$

- на основании полученных данных и выбранных весовых коэффициентов рассчитывается матрица A и вектор V ;
- путем решения (5) находится вектор вариаций δP ;
- искомое распределение мощностей электрических нагревателей находится по формуле

$$P_{ij} = P_{0j} + \delta P_j, \quad j = \overline{1, N}.$$

Экспериментальную оценку алгоритма планируется провести на многозонной печи при вводе в эксплуатацию. Проверка алгоритма, реализованного в

Таблица 1. Распределение мощностей нагревательных элементов

Мощность, Вт	Нагреватели								
	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9
P_{0j}	267,21	113,99	94,33	76,65	72,13	70,36	68,79	61,32	54,83
P_{3j}	267,21	113,99	94,33	76,65	72,13	70,36	68,79	61,35	54,89
	H10	H11	H12	H13	H14	H15	H16	H16	H17
P_{0j}	41,27	10,92	203,3	10,92	127,92	10,4	125,64	125,64	10,4
P_{3j}	43,65	11,91	203,41	12,07	126,5	10,59	127,4	127,4	13,59
	H18	H19	H20	H21	H22	H23	H24	H24	H25
P_{0j}	116,5	6,24	111,93	5,46	109,65	6,24	148,48	148,48	141,52
P_{3j}	110,75	4,68	113,59	2,99	111,12	5,42	157,35	157,35	138,79
	H26	H27	H28	H29	H30	-	-	-	-
P_{0j}	193,9	192,6	230,67	175,68	432,89				
P_{3j}	193,97	192,56	230,66	175,68	432,89				

Таблица 2. Осевое распределение температуры

Температура, К	Контрольные точки							
	t1	t2	t3	t4	t5	t6	t7	t8
τ_{0i}	1255,26	1282,15	1293,13	1302,76	1307,48	1308,63	1308,58	1308,16
τ_{3i}	1257,26	1284,15	1295,13	1304,76	1309,48	1310,63	1310,58	1310,16
τ_{pi}	1257,27	1284,15	1295,13	1304,76	1309,48	1310,63	1310,58	1310,16
	t9	t10	t11	t12	t13	t14	t15	t16
τ_{0i}	1308,48	1308	1307,59	1306,91	1305,95	1304,6	1302,35	1297,47
τ_{3i}	1310,48	1310	1309,59	1308,91	1307,95	1306,6	1304,35	1299,47
τ_{pi}	1310,48	1309,99	1309,59	1308,9	1307,94	1306,58	1304,32	1299,81
	t17	t18	t19	t20	t21	t22	t23	-
τ_{0i}	1293,71	1287,41	1286,78	1286,65	1285,38	1277,74	1297,47	
τ_{3i}	1295,71	1289,41	1288,78	1288,65	1287,38	1279,74	1299,47	
τ_{pi}	1295,69	1289,41	1288,78	1288,61	1287,39	1279,75	1299,81	

пакете Matlab [5], производилась на математической модели многозонной термической установки, рис. 1, а, для $M=23$ и $N=30$. Начальное распределение тепловых мощностей электрических нагревательных элементов P_{0j} и соответствующее ему распределение температур τ_{0i} приведены в таблицах 1 и 2.

С помощью математической модели установки [4] найдем коэффициенты влияния нагревателей на изменение температур.

При $w_i=1$ рассчитаем элементы матрицы A . Найдем распределение мощностей, необходимое для перехода от исходного профиля температуры к профилю с температурами, повышенными на 2° . Решая (5), найдем распределение мощностей для реализации нового распределения температуры. Для полученного распределения мощностей P_{3j}

рассчитаем осевое распределение τ_{pi} , (табл. 1 и 2). Видно, что максимальное отклонение расчетного распределения температуры от заданного в контрольных точках не превышает $0,34^\circ$.

Выводы

- Предложен алгоритм оценки мощностей нагревательных элементов многозонной термической установки для выращивания кристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте.
- Алгоритм позволяет оперативно найти распределение тепловых мощностей нагревательных элементов для формирования заданного температурного распределения в рабочем объеме установки.
- Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Грибенюков А.И., Гинсар В.Е. Оценка динамики температурного поля в рабочем объеме вертикальной установки Бриджмена при продольно-осевом перемещении ростового контейнера в процессе выращивания кристаллов // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315. – № 2. – С. 104–109.
- Официальный сайт Matlab [Электронный ресурс]. – режим доступа: <http://www.mathworks.com/>. – 07.09.2009.

Поступила 09.09.2009 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Kurz M., Muller G. Control of thermal conditions during crystal growth by inverse modeling // Journal of Crystal Growth. – 2000. – V. 208. – № 1. – P. 341–349.
- Lin K., Boschert S., Dold P., Benz K.W., Kriessl O., Schmidt A., Siebert K.G., Dziuk G. Numerical methods for industrial vertical Bridgman growth of (Cd,Zn)Te // Journal of Crystal Growth. – 2002. – V. 237–239. – № 39. – P. 1736–1740.
- Пат. 1830132 СССР. МПК⁵ F27B 5/06. Трубчатая печь / В.Е. Гинсар, В.А. Десятов. Заявлено 22.01.1991; Опубл. 23.07.1993, Бюл. № 27. – 8 с.: ил.