

На правах рукописи



Филиппов Максим Михайлович

**МОДЕЛИ, АЛГОРИТМИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ
ОБЕСПЕЧЕНИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ МНОГОЗОННОЙ
ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАНОВКОЙ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ
КРИСТАЛЛОВ**

05.13.01 – Системный анализ, управление и обработка информации
(отрасль: промышленность)

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Томск – 2010

Работа выполнена на кафедре «Прикладная математика» Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ).

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
Кочегуров Владимир Александрович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Гончаров Валерий Иванович

кандидат технических наук
Бакин Николай Николаевич

Ведущая организация: **Институт геологии и минералогии
имени В.С. Соболева СО РАН,
г. Новосибирск**

Защита состоится 1 декабря 2010 г. в 17 часов на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.269.06 при Национальном исследовательском Томском политехническом университете по адресу:
634034, г. Томск, ул. Советская, 84, Институт Кибернетики ТПУ, ауд. 214.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального исследовательского Томского политехнического университета по адресу:
634034, г. Томск, ул. Белинского, 55.

Автореферат разослан 29 октября 2010 г.

Ученый секретарь совета по защите докторских
и кандидатских диссертаций Д 212.269.06
кандидат технических наук, доцент



Сонькин М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Существенный прогресс и экономическая эффективность во многих современных областях техники связаны с применением новых материалов, обладающих уникальными свойствами или структурой, позволяющими создавать новые приборы и системы с нетрадиционными функциями. К таким материалам относятся и материалы нелинейной оптики, которые должны работать в условиях высоких интенсивностей лазерного излучения, и, следовательно, иметь низкий уровень оптических потерь и высокий порог оптического разрушения. Получение монокристаллов с необходимыми для практических приложений параметрами является трудной научно-технической задачей, успех решения которой зависит не только от понимания физико-химических процессов, происходящих на всех этапах технологии, но и от возможностей термического оборудования контролируемым образом влиять на параметры технологических процессов. Особую актуальность проблема создания прецизионного термического оборудования приобретает по мере повышения требований к однородности свойств получаемых кристаллов и необходимости увеличения их размеров. Термическое оборудование, соответствующее требованиям технологии, должно обеспечивать создание, поддержание и контролируемые изменения необходимого температурного поля в рабочем объеме установки в течение достаточно длительного временного интервала (3–4 недели) и с достаточно высоким пространственным разрешением. Кроме того, оборудование должно быть оснащено системой управления для представления оператору текущей информации о процессе выращивания кристалла и обеспечивающей сбор и хранение данных в течение всего технологического цикла, а также способной осуществлять целенаправленные воздействия на температурное поле установки.

Целью диссертационной работы является:

– создание математического и программного обеспечения для углубленного изучения особенностей процессов теплового взаимодействия системы «заполненный кристаллизующим материалом ростовой контейнер – термическая установка» и разработка рекомендаций по управлению технологическим процессом для выращивания кристаллов с улучшенными свойствами и увеличенными размерами;

– разработка и реализация программно-алгоритмических средств управления технологическим процессом выращивания кристаллов в многозонных термических установках (МТУ), реализующих метод Бриджмена.

Для достижения поставленных целей необходимо решить следующие задачи:

– провести анализ особенностей физических процессов, протекающих при выращивании кристаллов методом Бриджмена в рабочем объеме МТУ, для выявления связи реализуемых термических условий с качеством выращиваемых кристаллов;

– разработать математическую модель, максимально приближенную к реальным условиям для тепловых процессов, протекающих при выращивании

кристаллов в МТУ с учетом перемещения ростового контейнера и происходящих в нем изменений относительных долей расплава и кристалла;

- программно реализовать разработанную модель с помощью современных пакетов программного обеспечения и средств компьютерного моделирования сложных физических процессов;

- провести численные исследования для выявления связи между фактической осевой скоростью роста кристалла и температурным полем, реализуемым в рабочем объеме термической установки, а также для оценки поведения формы фронта кристаллизации в ходе процесса выращивания кристалла;

- разработать методические основы коррекции термических условий в процессе выращивания кристаллов для улучшения их свойств;

- разработать, с учетом особенностей МТУ, программно-алгоритмическое обеспечение для управления технологическим процессом выращивания кристаллов.

Методы исследований

Для решения поставленных задач использовались методы теории теплопроводности, численные методы, экспериментальные методы исследования, методы компьютерного моделирования и методы теории управления. Для исследований структуры и однородности выращенных кристаллов использовались топографические методы – оптические (на просвет) и рентгеновские (на просвет по Лэнгу, отражение и аномальное прохождение по Борману).

Научная новизна

- разработана физическая модель МТУ и ее математическое описание, включающее классические представления о тепловых процессах и максимально учитывающее особенности конструктивных элементов и изменения в рабочем объеме, связанные с перемещением ростового контейнера;

- методами численного моделирования получены оценки формы фронта кристаллизации, а также временной эволюции скорости роста кристалла в зависимости от положения ростового контейнера, впервые установлена связь изменений температурного поля с пространственным положением реального ростового контейнера;

- разработана новая методика стабилизации осевой скорости роста кристалла, основанная на непрерывной коррекции осевого распределения температуры в рабочем объеме установки с использованием для оценок скорости роста кристалла пакета калибровочных математических моделей, учитывающих текущее положение ростового контейнера;

- разработан алгоритм оценки тепловых мощностей рассредоточенных нагревательных модулей МТУ для формирования заданного осевого распределения температуры в рабочем объеме.

Практическая значимость

- модель термической установки, реализованная в пакете прикладных программ Comsol Multiphysics, позволяет на этапе проектирования оценить поведение осевых скоростей роста кристалла и положения фронта кристаллизации в процессе выращивания кристалла;

– разработанная методика численного моделирования тепловых процессов в МТУ в пакете прикладных программ Comsol Multiphysics может быть адаптирована для других термических установок, реализующих процесс выращивания кристалла по Бриджмену;

– алгоритмическое и программное обеспечение, разработанное для управления МТУ позволяет получать необходимые термические условия для выращивания кристаллов сложных веществ;

– применение разработанных моделей, алгоритмов и программ для коррекции термических условий ориентировано на улучшение пространственной однородности свойств и увеличение размеров выращиваемых кристаллов.

Достоверность полученных результатов

Достоверность результатов подтверждается использованием хорошо зарекомендовавших и апробированных физико-математических представлений о тепловых процессах и граничных условиях в отдельных элементах установки, разработкой расчетных схем, максимально приближенных к реальной конструкции МТУ и рабочего объема, а также близостью экспериментальных и расчетных данных о температурных распределениях, полученных на этапах калибровки установки.

Реализация результатов работы

Результаты диссертации используются в разработке термической установки для выращивания кристаллов, изготавливаемой для Института геохимии СО РАН, г. Иркутск в рамках программы импортозамещения.

Разработанное программно-алгоритмическое обеспечение, алгоритмы и модели сложного термического технологического оборудования применяются в Институте мониторинга климатических и экологических систем СО РАН (ИМКЭС СО РАН, г. Томск), ООО "Лаборатория оптических кристаллов" (г. Томск) и в учебном процессе кафедры Прикладной математики ТПУ.

Работа поддержана грантом «Индивидуальный грант молодого ученого Томского политехнического университета».

Основные положения, выносимые на защиту

– математическая модель МТУ, учитывающая взаимное влияние системы «ростовой контейнер – термическая установка», позволяет производить оценки изменения температурного поля в рабочем объеме установки при перемещении ростового контейнера;

– алгоритм оценки тепловых мощностей рассредоточенных нагревательных элементов установки позволяет формировать требуемое осевое распределение температуры в рабочем объеме;

– методика стабилизации осевых скоростей роста кристалла, основанная на непрерывной коррекции осевого распределения температуры в рабочем объеме, позволяет снизить отклонения осевых скоростей роста кристалла от номинальной, улучшить однородность выращиваемых кристаллов и снизить концентрационный контраст полос роста.

Апробация работы

Основные положения и результаты диссертационной работы представлялись и обсуждались на: XV^й Международной научно-практической конферен-

ции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии» (Томск, 2009), VII^й–VIII^й Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и современные информационные технологии» (Томск, 2009, 2010), I^й Международной научной конференции «Современные проблемы информатизации в системах моделирования, программирования и телекоммуникациях» (Москва, 2009), IV^й Всероссийской конференции молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в 3-м тысячелетии» (Томск, 2009), X^й научно-практической конференции «Средства и системы автоматизации: проблемы и решения» (Томск, 2009), V^й Международной научно-практической конференции «Физико-технические проблемы атомной энергетики и промышленности» (Томск, 2010), а также на научных семинарах ИМКЭС СО РАН и кафедры прикладной математики ТПУ.

По теме диссертации опубликовано 14 работ, в том числе 4 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений, содержит 169 страниц машинописного текста, 62 рисунка, 20 таблиц, список литературы из 109 наименований.

Личный вклад автора.

Основная часть диссертации выполнена лично автором. Автор участвовал в постановке задач исследований. Лично им разработана модель многозонной термической установки, проведены вычислительные эксперименты. Автором разработаны методики и алгоритмы управления процессом выращивания кристаллов, реализовано программно-алгоритмическое обеспечение системы управления.

Содержание работы

Во введении дается обоснование актуальности исследуемой проблемы, определяются цели, методы, задачи исследования.

В первой главе рассматриваются основные методы направленной кристаллизации, определяются факторы, влияющие на качество выращиваемых кристаллов, и рассматриваются современные тенденции в проектировании и изготовлении термического оборудования для выращивания кристаллов.

В настоящее время существует 3 основных метода направленной кристаллизации: метод Чохральского, метод зонной плавки и метод Бриджмена. Кристаллы, предназначенные для технических приложений, должны обладать комплексом свойств, необходимых при решении конкретных задач и часто именно этот комплекс определяет выбор метода выращивания. Большинство технически важных полупроводниковых соединений и оптических кристаллов относятся к химически активным и диссоциирующим вблизи точки плавления веществам, поэтому для их выращивания предпочтительно использовать метод Бриджмена.

Многочисленными экспериментальными работами показано, что благоприятными условиями в ходе процесса выращивания кристалла методом Бридж-

жмена являются реализация плоской или выпуклой в сторону расплава формы фронта кристаллизации и постоянной скорости роста, близкой к номинальной (скорость перемещения ростового контейнера).

Совершенствование технологии выращивания кристаллов невозможно без улучшения конструкции ростовых установок и создания систем управления для обеспечения термических условий процесса выращивания. Но экспериментальная оценка влияния конструкционных параметров установки и технологических параметров процесса выращивания кристаллов на факторы, определяющие качество растущего кристалла, является длительным и дорогостоящим процессом. Поэтому, необходимо разработать математическую модель термической установки, максимально учитывающую особенности реальной установки для численных исследований влияния различных параметров на осевые скорости роста кристалла и форму фронта кристаллизации для выбора рациональных проектных решений или режимов ведения технологического процесса.

Во второй главе проведен обзор литературных источников по вопросам моделирования процессов выращивания кристаллов методом Бриджмена. Описан объект моделирования. Разработано математическое описание нагревательного модуля термической установки и модель термической установки. Разработана методика моделирования установок для выращивания кристаллов методом Бриджмена. Проведена настройка параметров разработанной модели.

В качестве объекта исследования выступает инновационная МТУ для выращивания кристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте (рис. 1, а), существенно отличающаяся от предыдущих разработок структурой нагревательных модулей, а также используемыми теплоизолирующими и теплопроводящими материалами.

Рабочий объем установки представляет собой цилиндр, ограниченный в радиальном направлении внутренними поверхностями кольцевых нагревательных модулей, заполненный атрибутами, связанными с выращиванием кристаллов: ростовой контейнер (ампула, тигель, рабочее вещество, затравочный кристалл) и подставка ростового контейнера. В соответствии с функциональным назначением установки ее рабочий объем разделен на три температурные зоны (рис 1, б): высокотемпературная (М1–М10) предназначена для плавления рабочего вещества и поддержания его в жидком состоянии, градиентная (М11–М17) – для непосредственного роста кристалла, низкотемпературная (М18–М23) – для организации необходимого теплоотвода.

Основными элементами установки являются нагревательные модули различного конструктивного исполнения (М1–М23), разделенные теплоизолирующими прокладками. В градиентной зоне рабочего объема, где требуется повышенная точность и динамичность работы, используются модули, имеющие по два нагревательных элемента, разнесенных по радиусу (рис. 2), что позволяет дифференцировать их функциональное назначение: внешний элемент предназначен для создания высокостабильного температурного фона, а внутренний – для прецизионного управления температурой в рабочем объеме.

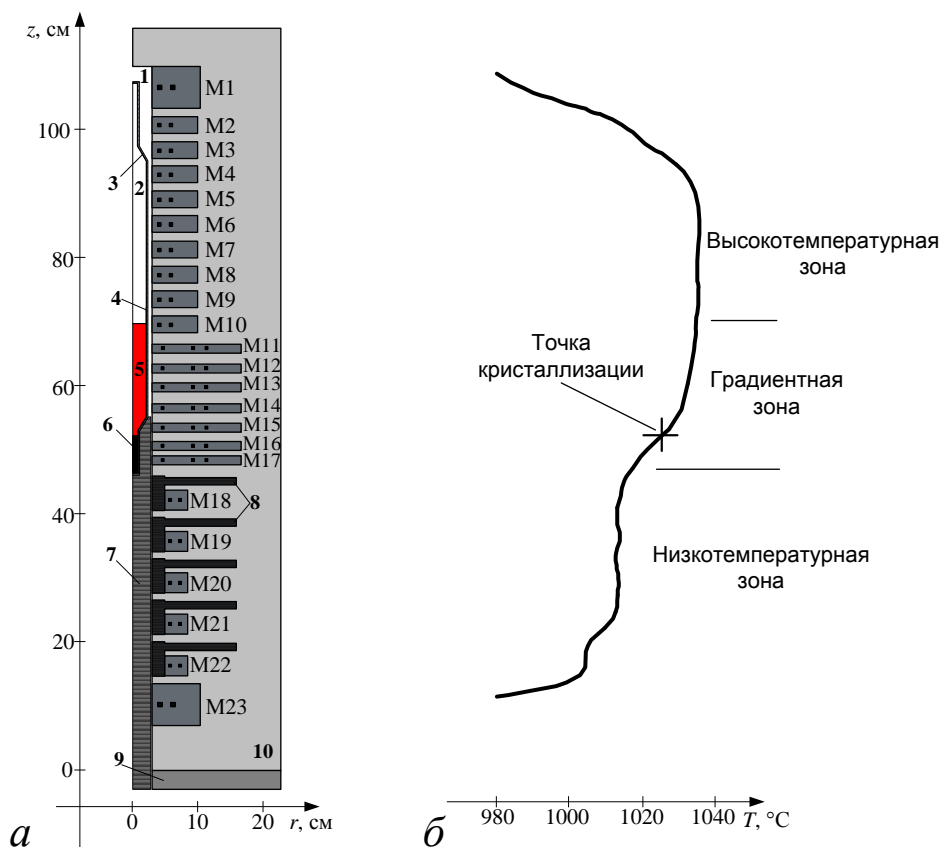


Рис. 1. Схема продольного разреза МТУ (а) и пример осевого распределения температуры (б). Обозначения: 1) воздух; 2) паровая фаза над расплавом; 3) ампула; 4) тигель; 5) рабочее вещество (расплав); 6) затравочный кристалл; 7) подставка ростового контейнера; 8) теплопроводящие диски; 9) подставка установки; 10) теплоизолятор; М1–М23 – нагревательные модули

Нагреватели встроены в кольцевую структуру из электроизоляционных материалов с различными теплофизическими свойствами. Изолятор 1 изготавливается из материала с высокой теплопроводностью и предназначен для оперативной передачи тепловой энергии от нагревателей к рабочему объему. Изолятор 2 из материала с низкой теплопроводностью предназначен для сохранения тепловой энергии в рабочем объеме.

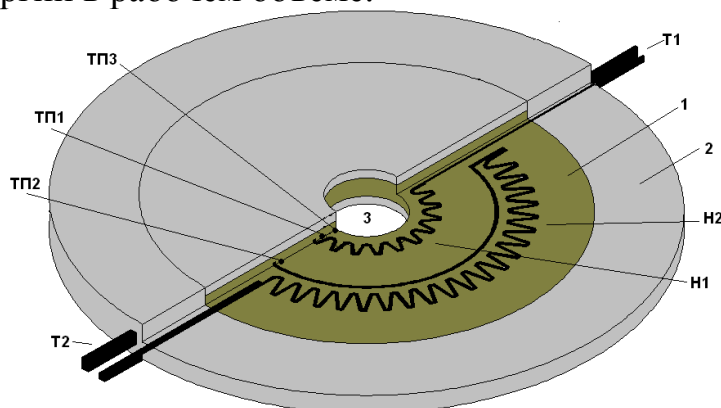


Рис. 2. Нагревательный модуль градиентной зоны. Обозначения: 1) изолятор 1; 2) изолятор 2; 3) рабочий объем; Н1, Н2 – нагреватели; Т1, Т2 – токовыводы; ТП1 – ТП3 – датчики температуры

Численная оценка температурных полей, формируемых нагревательными модулями, показала, что их можно считать симметричными и для моделирования установки использовать двумерную осесимметричную геометрию.

К настоящему времени разработан ряд математических моделей, описывающих процессы кристаллизации по Бриджмену, отличающихся между собой исходными предположениями, упрощающими решение задачи. Все они основаны на использовании законов сохранения импульса, энергии и уравнений движения конвективных потоков с соответствующими граничными условиями. Анализ используемых подходов моделирования процессов выращивания кристаллов показал, что они не позволяют провести оценку динамики реальных процессов, протекающих при росте кристалла из-за отсутствия связей, описывающих взаимодействие в системе «ростовой контейнер – термическая установка». Для получения информации о динамических параметрах процессов роста представляется необходимым создание расчетной модели, в которой совместное решение уравнений теплопроводности проводится с автоматическим учетом изменяющихся в ходе кристаллизационного процесса граничных условий на внешней поверхности рабочего объема в зависимости от положения ростового контейнера и соотношения между объемами расплава и кристалла.

Тепловые процессы в элементах установки и рабочего объема описываются двумерным уравнением теплопроводности вида:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_i = c_i \rho_i \frac{\partial T}{\partial t},$$

где ρ – плотность, кг/м³; c – удельная теплоемкость, Дж/(кг·К); λ – коэффициент теплопроводности материала, Вт/(м·К); T – температура, К; Q – удельная мощность нагревателя, Вт/м³. Все теплофизические свойства материалов зависят от температуры.

Граничные условия представлены в таблице.

Таблица. Граничные условия.

№	Вид граничного условия	Границы
1	$\lambda_i \frac{\partial T}{\partial n} \Big _{-} = \alpha (T _{+} - T_0) + \varepsilon \sigma (T _{+}^4 - T_0^4), T _{+} = T _{-}$	на внешней поверхности МТУ
2	$\lambda_i \frac{\partial T}{\partial n} \Big _{+} = \lambda_j \frac{\partial T}{\partial n} \Big _{-}, T _{+} = T _{-}$	на внутренних поверхностях i -го и j -го элементов
3	$-\lambda_i \frac{\partial T}{\partial n} \Big _{-} = \varepsilon \sigma (T_y^4 \Big _{+} - T_z^4 \Big _{+}), T _{+} = T _{-}$	между элементами рабочего объема и его поверхностью
4	$\frac{\partial T}{\partial r} \Big _{r=0} = 0$	вдоль оси $r=0$

Обозначения: α – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К); ε – приведенная степень черноты; σ – постоянная Стефана-Больцмана, Вт/(м²·К⁴); T_0, T_y, T_z – температуры окружающей среды, поверхности рабочего объема и его загрузки соответственно, К.

В качестве начального условия задачи принимается условие равенства температуры T во всем рассматриваемом объеме температуре окружающей среды T_0 . Положение фронта кристаллизации определяется положением изотермы кристаллизации. В области фазового перехода предполагается смежная зона, в которой происходит изменение теплофизических свойств рабочего вещества от кристалла до расплава. Предполагается, что теплофизические свойства рабочего вещества в смежной зоне изменяются линейно. Оценка величины потока тепла, вызванного выделением скрытой теплоты кристаллизации, относительно величины потоков тепла от нагревателей установки в области раздела фаз показала, что он на порядок ниже и им можно пренебречь.

Модель термической установки реализуется следующим образом. На первом этапе определяются цели и задачи вычислительного эксперимента. Составляется расчетная схема, максимально учитывающая геометрию элементов. Затем определяется вид дифференциального уравнения, определяются граничные условия. Составляется библиотека физических свойств применяемых материалов. Оцениваются мощностные параметры, полученные значения связываются с переменными модели. Строится сетка конечных элементов, дискретизирующая рассматриваемую область. На втором этапе, в соответствии с типом задачи выбирается соответствующий солвер и происходит решение задачи методом конечных элементов. На третьем этапе осуществляется визуализация и анализ результатов.

Настройка теплофизических параметров модели проводилась на основании экспериментальных данных, полученных с помощью МТУ, рассмотренной выше. Результаты сравнения расчетных осевых распределений температуры с экспериментальными данными (рис. 3) показывают, что модель удовлетворительно описывает реальную систему, что позволяет использовать ее для дальнейших исследований. Максимальное отклонение при сравнении значений температуры в 48-ми контрольных точках на оси рабочего объема составляет $\sim 1,9$ °C, среднеквадратическое $\sim 0,085$ °C.

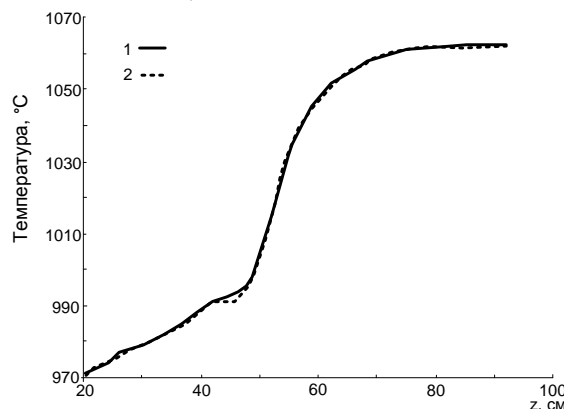


Рис. 3. Результаты настройки параметров модели. Экспериментальное (1) и расчетное (2) осевые распределения температуры

В главе 3 приведены результаты численных исследований по определению изменений температурного поля в рабочем объеме установки в процессе выращивания монокристаллов $ZnGeP_2$ и исследования по влиянию конструкционных

параметров элементов установки и рабочего объема, а также параметров технологического процесса на форму фронта кристаллизации и осевые скорости роста кристалла.

Проведенный совместно с сотрудниками ИМКЭС СО РАН анализ структурной однородности кристаллов, выращиваемых в МТУ, показал, что на их поверхности наблюдаются полосы роста, неравномерно расположенные по его длине с формой, выпуклой в сторону затравочного кристалла, следовательно, процессы роста проводятся при неблагоприятных условиях. Наиболее вероятной причиной появления этих неоднородностей структуры являются изменения температурного поля в рабочем объеме, связанные с перемещением ростового контейнера и, соответственно, с изменением тепловых потоков, протекающих через систему «кристалл – расплав».

Для исследования вариаций температурного поля в рабочем объеме и их влияния на качество выращиваемых кристаллов проведена серия вычислительных экспериментов. При этом в рабочем объеме реализовано осевое распределение температуры, изображенное на рис. 1, б. В связи с тем, что скорость движения ростового контейнера мала, то процесс выращивания кристалла можно считать квазистационарным, а оценку динамики получить путем нахождения последовательности стационарных распределений температур при различных положениях ростового контейнера.

Результаты вычислительных экспериментов показали, что в процессе выращивания кристалла наблюдаются отклонения осевых скоростей роста кристалла от номинальной скорости перемещения ростового контейнера.

С помощью разработанной модели проведены исследования по влиянию различных параметров процесса выращивания кристаллов и элементов МТУ на осевые скорости роста кристалла и форму фронта кристаллизации. Показано, что:

- вариация теплофизических свойств элементов установки дает возможность определить требования к материалам, с помощью которых можно улучшить условия проведения процесса выращивания кристаллов;
- существует возможность управлять условиями протекания технологического процесса с помощью изменения осевого распределения температуры;
- теплофизические свойства кристалла и расплава – важные факторы, определяющие изменения температурного поля в зоне кристаллизации;
- в течение процесса выращивания кристалла в большом числе случаев наблюдается выпуклая в сторону затравочного кристалла форма фронта кристаллизации;
- уменьшение отношения коэффициентов теплопроводностей кристалла и расплава благоприятно влияет на форму фронта кристаллизации.

При проектировании МТУ, а также их эксплуатации требуется знание распределения мощностей нагревателей, обеспечивающих необходимое распределение температуры в рабочем объеме. Обычно это делается с помощью расчета уравнений теплового баланса для одномерной геометрии, что не всегда дает

приемлемый результат. Поэтому был разработан алгоритм оценки тепловых мощностей, основанный на расчете интегрального влияния вариаций мощностей нагревателей на температуры в рабочем объеме установки, который позволяет оперативно найти распределение тепловых мощностей нагревательных элементов, необходимых для формирования заданного температурного распределения.

В главе 4 описаны особенности управления МТУ. Разработана структурная схема и реализовано программное обеспечение системы управления установкой. Разработана методика непрерывной коррекции термических режимов выращивания кристалла. Проведены натурные эксперименты, в ходе которых получен монокристалл $ZnGeP_2$ с улучшенной однородностью свойств. Предложена схема системы управления МТУ с интегрированной математической моделью.

Процесс выращивания кристалла делится на три термических режима (разогрев, выдержка (кристаллизация), охлаждение), каждый из которых определяется длительностью, распределением уставок регуляторов мощности установки, скоростью перемещения ростового контейнера. Совокупность этих данных составляет программу термических режимов технологического процесса выращивания кристаллов.

Основная особенность управления процессом выращивания кристаллов в МТУ заключается в учете внутренних возмущений, связанных с перемещением ростового контейнера, изменением относительных долей расплава и кристалла, выделением скрытой теплоты кристаллизации, конвективными потоками в расплаве, а также изменениями условий теплоотдачи в окружающую среду и напряжения питающей сети U_c .

Система управления МТУ должна обеспечивать следующие возможности:

- управление на основе программы термических режимов технологического процесса выращивания кристалла;
- управление на основе программы технологического процесса с непрерывной коррекцией термических режимов выращивания кристалла;
- управление с интегрированной моделью в качестве советчика.

Экспериментально показано, что хорошее качество кристаллов достигается, если в технологическом процессе выполняются следующие условия:

- скорость изменения температуры не превышает $1\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ для обеспечения допустимого уровня термомеханических напряжений элементов установки и рабочего объема;
- точность регулирования и поддержания заданных термических режимов не хуже $0,1\text{ }^\circ\text{C}$ для достижения однородности структурных свойств выращиваемого кристалла.

На рис. 4 приведена разработанная система управления МТУ в виде управляющего вычислительного комплекса (УВК), включающего информационно-измерительную (ИИС) и управляющую (УС) системы. ИИС выполняет функ-

ции представления максимально возможной информации, а именно: показания термопар для контроля и организации управления термическими режимами, выделяемая мощность нагревателей, положение ростового контейнера $h(t)$. С помощью УС поддерживается необходимое температурное поле, а также выполняется перемещение ростового контейнера. В состав УС входят: программируемый логический контроллер (ПЛК) серии LinCon, модули вывода, силовые преобразователи на симисторах с соответствующими схемами управления, система управления механизмом перемещения ростового контейнера на основе шагового двигателя и редуктора, ПЭВМ.

Программное обеспечение ПЭВМ предназначено для организации интерфейса взаимодействия оператора-технолога с УВК. Программное обеспечение ПЛК предназначено для управления режимами функционирования МТУ, перемещением ростового контейнера и для связи с ПЭВМ.

Результаты разработки и опытной эксплуатации системы автоматического управления термическими режимами установки показали, что система регулирования позволяет отрабатывать влияние внутренних и внешних возмущений и поддерживает заданный термический режим с точностью $0,1\text{ }^{\circ}\text{C}$, а фактическая скорость изменения температуры не превышает предельную на всех этапах технологического процесса.

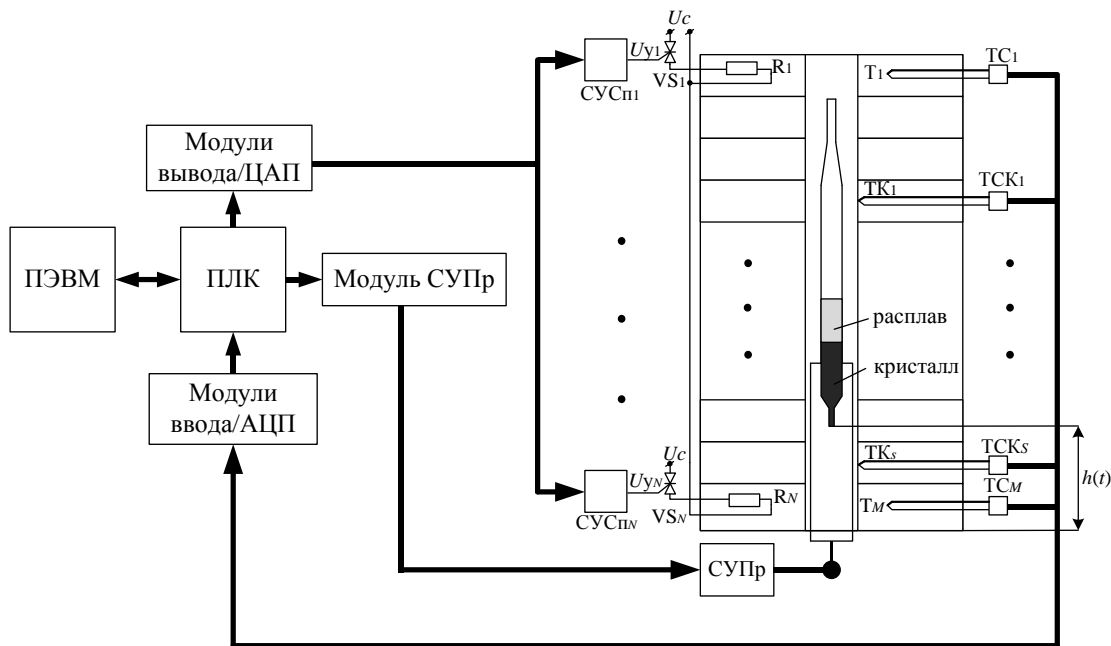


Рис. 4. Функциональная схема УВК. Обозначения: ПЭВМ – персональная электронная вычислительная машина; СУПр – система управления механизмом перемещения ростового контейнера; Т, ТК – термопары; ТС, ТСК – термостаты; СУСП – схемы управления силовыми преобразователями; U_c – текущее напряжение сети; U_y – управляющие сигналы; R – нагреватели; VS – симисторы

Численные эксперименты показали, что хотя система управления установкой поддерживает заданный термический режим с высокой точностью, в рабочем объеме установки происходят вариации температурного поля, которые вызывают отклонения осевых скоростей роста кристалла от номинальной. Сниже-

ние этих отклонений предлагается осуществить путем непрерывной коррекции термических режимов процесса выращивания кристаллов. Проблема заключается в том, что в настоящее время нет технических средств контроля формы фронта кристаллизации и фактических осевых скоростей роста, реализующихся непосредственно в ходе процесса выращивания кристаллов. Их поведение оценивается только после проведения дорогостоящих и длительных экспериментов над образцами уже выращенных кристаллов. Применение методов математического моделирования для сопровождения процесса выращивания кристаллов позволит сократить объем экспериментальных работ и окажется эффективным, если технологические работы и моделирование будут замкнуты в едином цикле, на каждом шаге которого параметры моделей корректируются по результатам измерений экспериментально полученных образцов, а результаты моделирования используются в процессе выращивания кристаллов.

Для снижения отклонений осевых скоростей роста кристалла от номинальной предлагается весь процесс кристаллизации разделить на несколько этапов, соответствующих различному положению ростового контейнера относительно установки и непрерывно на каждом из этапов производить коррекцию распределения температуры в рабочем объеме, с помощью оценок осевых скоростей роста кристалла и формы фронта кристаллизации, полученных с использованием пакета калибровочных математических моделей.

Эффективность предложенного подхода проверена методом математического моделирования тепловых процессов в установке с учетом процессов в ростовом контейнере при дискретных его положениях с шагом 1 см (рис. 5).

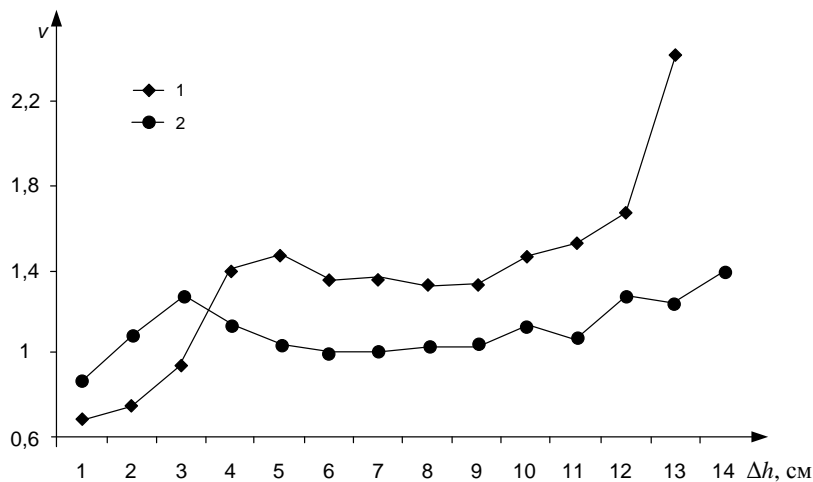


Рис. 5. Результаты непрерывной коррекции термических режимов выращивания. Зависимость нормированной осевой скорости роста кристалла ($v=V_{\text{роста}}/V_{\text{контейнера}}$) от положения ростового контейнера Δh без коррекции (1) и с коррекцией термических режимов (2)

Результаты вычислительных экспериментов проверены на натурном эксперименте. Образец 1, выращенный без коррекции термических режимов (рис. 6, а) с коэффициентом оптического поглощения $\sim 62 \text{ см}^{-1}$, имеет неоднородную структуру. Из распределения оптического пропускания образца 2, выращенного с применением программы динамической коррекции термических режимов

(рис. 6, б) видно, что его структура более однородна, коэффициент оптического поглощения $\sim 44 \text{ см}^{-1}$.

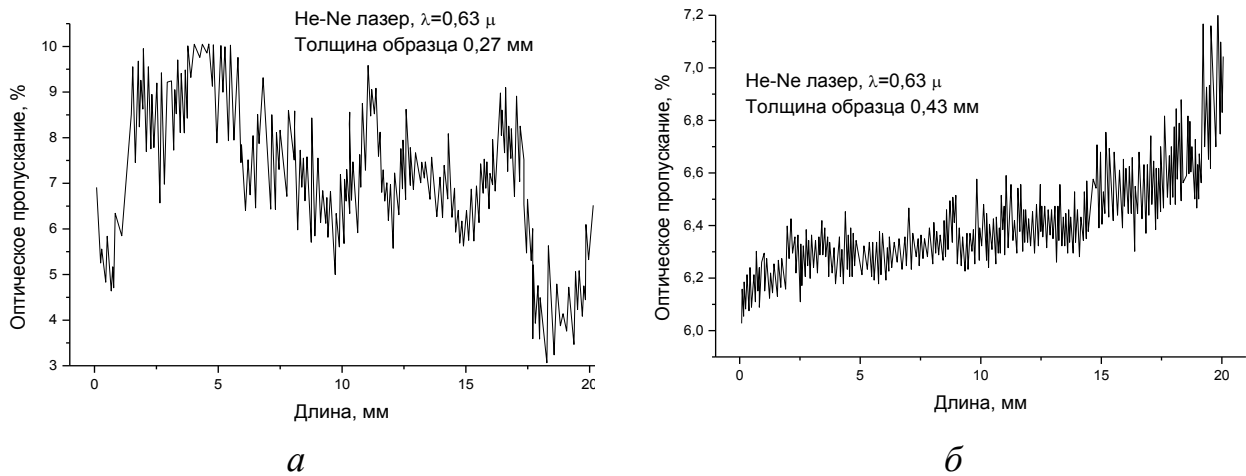


Рис. 6. Распределение оптического пропускания по длине монокристалла ZnGeP_2 . а) образец 1; б) образец 2

Видно, что коррекция термических режимов позволяет снизить отклонения осевых скоростей роста кристалла от номинальной, но калибровочные модели не учитывают различия теплофизических свойств кристалла и расплава, что приводит к тому, что сохраняются некоторые отклонения осевых скоростей роста кристалла. Для приближения осевых скоростей роста кристалла к номинальной необходимо использовать сочетание информации, получаемой из модельных расчетов и из текущих значений температуры, измеряемых датчиками МТУ (рис. 7).

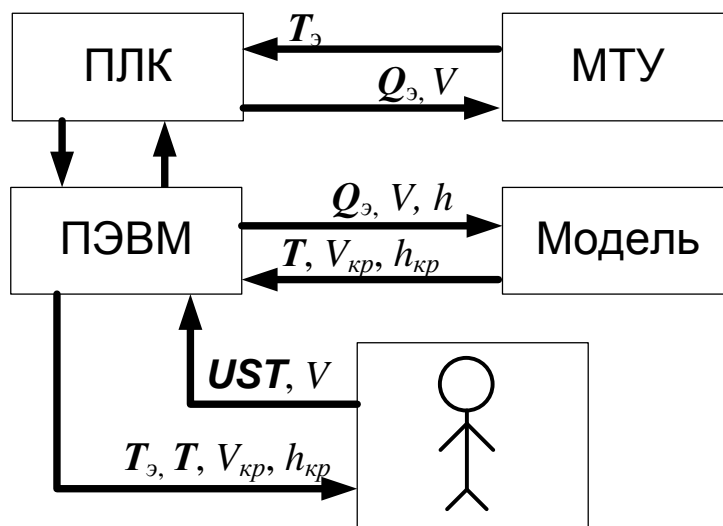


Рис. 7. Структурная схема системы управления экспериментальной установкой. Обозначения: $T_э$ – измеряемое, T – расчетное распределения температуры; h – положение ростового контейнера; $h_{кр}$ – положение фронта кристаллизации, V – скорость перемещения ростового контейнера; $V_{кр}$ – осевая скорость роста кристалла; $Q_э$ – тепловые мощности нагревателей; UST – уставки регуляторов мощности

Вычислительные эксперименты показали, что коррекция программы термических режимов технологического процесса, полученная с помощью включения математической модели в состав системы управления МТУ, позволяет приблизить осевую скорость роста кристалла к номинальной.

Основные результаты работы

В процессе выполнения работы решен комплекс задач по разработке и реализации программно-алгоритмических средств управления процессом выращивания кристаллов $ZnGeP_2$ в многозонной термической установке Бриджмена, создано математическое и программное обеспечение для углубленного изучения особенностей процессов теплового взаимодействия в системе «ростовой контейнер – термическая установка».

Основные результаты диссертационной работы.

1. Проведен анализ тепловых процессов при выращивании кристаллов. Выявлены основные факторы, влияющие на процесс кристаллизации. Дан анализ методов направленной кристаллизации, показано преимущество применения метода Бриджмена для выращивания монокристаллов разлагающихся многокомпонентных соединений в промышленном производстве. Определены требования к современным термическим ростовым установкам. Сформулированы цели и задачи исследования.

2. Выявлены конструктивные особенности и функциональное назначение элементов инновационной термической установки. Разработана модель нагревательного модуля. Показана осевая симметрия температурного поля модуля.

3. Разработано математическое описание термической установки, максимально учитывающее особенности реальной системы и методика моделирования термических установок в пакете прикладных программ Comsol Multiphysics.

4. Проведены натурные эксперименты по выращиванию монокристаллов $ZnGeP_2$, которые показали пространственную неоднородность полученных образцов. Расчеты показали, что неоднородность свойств кристалла связана с изменениями температурного поля в рабочем объеме установки. Получены оценки поведения осевых скоростей роста кристалла, положения и формы фронта кристаллизации в процессе выращивания кристаллов.

5. Проведены исследования влияния конструкционных параметров термической установки и технологических параметров процесса выращивания кристаллов на факторы, определяющие качество растущего кристалла. Предложены рекомендации по улучшению условий выращивания кристаллов.

6. Выполнен анализ поведения осевых скоростей роста в ходе процесса выращивания кристалла.

7. Разработан алгоритм оценки мощностей рассредоточенных нагревательных элементов многозонной термической установки для выращивания кристаллов методом Бриджмена в вертикальном варианте.

8. Предложена функциональная схема и структура системы управления многозонной термической установкой на базе совокупности независимых ПИД-регуляторов. Создано программное обеспечение, позволяющее реализовывать в автоматическом режиме функции оперативного контроля и управления технологическим процессом выращивания кристаллов.

9. Создана методика стабилизации осевых скоростей роста кристалла с использованием пакета математических моделей для оценок формы фронта кристаллизации и осевых скоростей роста. Проведены натурные эксперименты по выращиванию монокристаллов $ZnGeP_2$, которые показали улучшение пространственной однородности кристаллов, получаемых с помощью разработанной методики.

10. Разработан алгоритм управления термической установкой для выращивания кристаллов с интегрированной математической моделью, применение которого позволило стабилизировать положение фронта кристаллизации и приблизить осевую скорость роста кристалла к скорости перемещения ростового контейнера.

Основные публикации по теме диссертации

1. Система управления многозонной термической установкой для выращивания кристаллов по методу Бриджмена/ М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Известия Томского политехнического университета. – 2010. – Т. 316. – № 5. – С. 146–151.

2. Оценка динамики температурного поля в рабочем объеме вертикальной установки Бриджмена при продольно-осевом перемещении ростового контейнера в процессе выращивания кристаллов/ М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315. – № 2. – С. 104–109.

3. 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 // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 315. – № 2. – С. 110–112.

4. Стабилизация скорости движения фронта кристаллизации при выращивании кристаллов в многозонной термической установке методом Бриджмена/ М.М. Филиппов, В.А. Кочегуров, Ю.В. Бабушкин и др. / Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 317. – № 2. (в печати).

5. Филиппов М.М. Математическая модель многозонной термической установки для выращивания монокристаллов // Современные наукоёмкие технологии. – 2009. – № 11. – С. 91–93.

6. Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Гинсар В.Е. Моделирование температурных режимов нагревательного модуля многозонной планарной печи // Современные техника и технологии: труды XV Международной научно-практической конференции студентов и молодых учёных.– Т2.– Томск: Изд-во ТПУ, 2009.– С. 315–316.

7. Филиппов М.М., Медведева М.Ю., Бабушкин Ю.В. Влияние теплопроводности материалов на температурное поле планарной печи для выращи-

вания монокристаллов // Молодежь и современные информационные технологии: сборник трудов VII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.– Ч1. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009.– С. 217–218.

8. Моделирование нагревательных модулей различного исполнения многозонной планарной печи / М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Молодежь и современные информационные технологии: сборник трудов VII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.– Ч1. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009.– С. 215–216.

9. Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Гинсар В.Е. Численное моделирование температурных режимов нагревательного модуля многозонной планарной печи // Материаловедение, технологии и экология в 3-м тысячелетии: сборник трудов IV Всероссийской конференции молодых ученых. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009.– С. 635–638.

10. Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Гинсар В.Е. Управление температурным полем многозонной печи для выращивания кристаллов по методу Бриджмена // Средства и системы автоматизации: проблемы и решения: материалы десятой научно-практической конференции. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009.– С. 123–126.

11. Влияние различия свойств расплава и кристалла на скорость роста и форму фронта кристаллизации при выращивании монокристаллов методом Бриджмена/ М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Молодежь и современные информационные технологии. Сборник трудов VIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.– Ч1. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010.– С. 164–165.

12. Применение математической модели для сопровождения процесса выращивания кристаллов методом Бриджмена/ М.М. Филиппов, Ю.В. Бабушкин, А.И. Грибенюков, В.Е. Гинсар // Молодежь и современные информационные технологии: сборник трудов VIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.– Ч1. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010.– С. 162–163.

13. Шуваева Ю.В., Бабушкин Ю.В., Филиппов М.М. Формирование температурного поля в многозонной термической установке // Молодежь и современные информационные технологии: сборник трудов VIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.– Ч1. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010.– С. 89–90.

14. Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Гальченко В.Г., Шевелев Г.Е., Грибенюков А.И., Гинсар В.Е. Система управления многозонной термической установкой для выращивания кристаллов по методу Бриджмена // Физико-технические проблемы атомной энергетики и промышленности. Сборник тезисов докладов V Международной научно-практической конференции. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010.– С. 197.