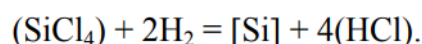


Лекция 6. Планирование эксперимента

Экспериментальный этап моделирования ХТП с использованием статистических моделей начинается с анализа соответствующего ХТП. Этот анализ предполагает определение цели моделирования и выбор способов достижения этой цели с помощью расчетного исследования. Мы уже обсуждали, что для этого необходимо проанализировать влияние технологических параметров на показатели процесса, связанные с поставленной целью. Например, в рамках Моделирования процесса газофазной эпитаксии пленок кремния с использованием статистической модели на основании данных полнофакторного эксперимента студентам предлагается проведение расчетного исследования процесса нанесения микроразмерных монокристаллических пленок кремния, основанного на реакции восстановления или диссоциации гидридно-хлоридных источников кремния, например в соответствии с суммарным уравнением



Анализ данного процесса позволяет установить, что его технологическими параметрами являются: расход (л/ч) и состав (моль/л или об. %) газовой смеси, температура эпитаксии ($^{\circ}\text{C}$), скорость нагрева и охлаждения пластин (град/мин), диаметр пластин (мм, например, 100, 150 или 200), скорость вращения подложкодержателя (об./мин), расход воды для охлаждения стенок реактора (л/ч), рабочее давление (Па), продолжительность цикла и отдельных стадий обработки (мин, в том числе, загрузка, нагрев, газофазное травление, эпитаксия, охлаждение, выгрузка). Показателями данного процесса являются: толщина пленки (мкм) и ее разброс в партии (%), линейная скорость роста пленки (мкм/мин), плотность дислокаций (см^{-2}), удельное электросопротивление пленки ($\text{Ом}\cdot\text{м}$) и другие характеристики.

Целью является определение времени роста пленки заданной толщины при определенных условиях проведения процесса. Решение данной задачи возможно в результате определения вида количественной зависимости между скоростью роста пленки (v_p) и ключевыми технологическими параметрами. То есть в качестве выходной переменной при моделировании выбираем скорость роста пленки $y = v_p$, а в качестве независимых управляющих переменных (x_1, x_2, x_3), называемых факторами, принимаем соответственно 3 параметра:

- 1) температуру эпитаксии T , $^{\circ}\text{C}$;
- 2) концентрацию SiCl_4 в реакционной газовой смеси C , моль/л;
- 3) соотношение расходов SiCl_4 и $\text{H}_2 - K_G$

Для создания статистической модели необходимо провести эксперимент по получению данных, отражающих количественную зависимость между выбранными дискретными значениями входных переменных и выходной переменной. Эту зависимость можно получить в результате:

- эксперимента на реальном объекте, например в эпитаксиальном реакторе;
- эксперимента на физической модели, например в лабораторной печи;
- расчетного эксперимента с использованием физико-химической модели;
- использования данных достоверных литературных источников.

В теории эксперимента различают пассивный и активный эксперимент. Пассивный эксперимент сопряжен с регистрацией всех возможных неповторяющихся комбинаций значений входных и выходных переменных в рамках поля эксперимента. Это означает фиксацию значений выходной переменной при всех случайных или закономерных колебаниях входных переменных, что требует больших затрат времени и имеет низкую эффективность. В пассивном эксперименте сильное негативное влияние на точность модели оказывают случайные ошибки, а также наблюдается сильная закореллированность факторов, что мешает учесть влияние каждого из них.

На практике при моделировании ХТП приходится описывать сложные многофакторные системы, то есть объекты, функционирование которых зависит от множества переменных. При этом возможно два пути: 1) проведение множества однофакторных наглядных экспериментов; 2) проведение одного многофакторного эксперимента, который дает большую точность результатов при том же объеме опытов и той же точности измерений. Для этого обычно используется активный эксперимент, который предполагает использование статистических методов при планировании эксперимента и обработке его результатов. Среди методов планирования опытов наиболее часто используют:

- факторные эксперименты по плану I порядка, включая полнофакторный и дробнофакторный эксперимент;
- центральные композиционные планы II порядка, включая ротатабельные и ортогональные планы;
- симплекс-планирование.

Центральные композиционные планы используют в случае, если число факторов, то есть входных переменных, превышает 3 и линейное уравнение модели оказывается неадекватным. Эти планы характеризуются наличием центра симметрии в поле эксперимента и составляются путем добавления определенного числа опытов (звездных точек) к полнофакторному или дробнофакторному эксперименту (ПФЭ и ДФЭ соответственно).

Проведение ПФЭ предполагает решение задачи обеспечения заданной точности данных при минимальном количестве опытов и отсутствии корреляции (взаимосвязанности) факторов. Планирование ПФЭ включает следующие этапы:

- 1) выбор центра плана или базового уровня x_{i0} по каждой переменной, представляющего среднее значение данного фактора (например, $T_0 = 1250$ °С, $C_0 = 0,15$ моль/л, $K_{G0} = 50$);
- 2) выбор величины и количества уровней варьирования переменных Δx_i (для ПФЭ достаточно двух уровней варьирования величиной, например, $\Delta T = \pm 25$ °С, $\Delta C = \pm 0,05$ моль/л, $\Delta K_G = \pm 20$);
- 3) приведение натуральных входных переменных x_i к кодированным безразмерным значениям $Z_i = \pm 1$ в соответствии с формулой

$$Z_i = \frac{x_i - x_{i0}}{\Delta x_i}.$$

При этом значение «+1» соответствует максимальному значению фактора, а «-1» – минимальному значению, например $T = 1250 + 25 = 1275$ °С $\rightarrow +1$, а $T = 1250 - 25 = 1225$ °С $\rightarrow -1$;

4) составление матрицы (табл. 3.1) или плана эксперимента по принципу перебора всех возможных комбинаций значений факторов в кодированных переменных с учетом общего количества опытов в плане N_Σ , рассчитанного по формуле

$$N_\Sigma = n^k,$$

где n – количество уровней варьирования; k – число факторов (входных переменных). В нашем примере двухуровневого трехфакторного эксперимента $N_\Sigma = 2^3 = 8$.

Перебор возможных комбинаций факторов осуществляют путем варьирования частоты перехода от значения кодированной переменной +1 к значению -1.

После составления матрицы эксперимента проводят выполнение опытов по полученному плану при условиях соответствующего опыта. Например, опыт № 6 в рамках рассматриваемого примера исследования эпитаксиального процесса проводится при

температуре $T = 1225 \text{ }^\circ\text{C}$, концентрации $C = 0,2$ моль/л и соотношении расходов $K_G = 130$. Результатом этого опыта является полученное значение скорости роста пленки $y_i = v_p = 2,91$ мкм/мин.

Таблица 3.1

Матрица и результаты двухуровневого трехфакторного эксперимента при моделировании газофазной эпитаксии кремния

Номер опыта	Кодированные значения факторов			Значения функции $y_i = v_p$ (мкм/мин)
	$Z_1(T)$	$Z_2(C)$	$Z_3(K_G)$	
1	+1	+1	+1	$y_1 = 1,20$
2	-1	+1	+1	$y_2 = 3,11$
3	+1	-1	+1	$y_3 = 2,43$
4	-1	-1	+1	$y_4 = 3,71$
5	+1	+1	-1	$y_5 = 0,82$
6	-1	+1	-1	$y_6 = 2,91$
7	+1	-1	-1	$y_7 = 2,09$
8	-1	-1	-1	$y_8 = 3,51$