

Учреждение образования  
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

## МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ

**Методические указания к лабораторным работам  
по одноименной дисциплине для студентов  
специальности 1-48 01 01 «Химическая технология  
неорганических веществ, материалов и изделий»  
специализации 1-48 01 01 13 «Химическая технология  
квантовой и твердотельной электроники»**

Минск 2019

УДК 620.197+620.22(076.5)

ББК 30.3я73

М74

Рассмотрены и рекомендованы к изданию редакционно-издательским советом Белорусского государственного технологического университета.

С о с т а в и т е л и :

*Н. В. Богомазова, О. А. Алисиенок*

Р е ц е н з е н т

заведующий кафедрой нефтегазопереработки  
и нефтехимии БГТУ кандидат химических наук, доцент

*А. И. Юсевич*

**М74 Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов** : метод. указания к лабораторным работам по одноименной дисциплине для студентов специальности 1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий» специализации 1-48 01 01 13 «Химическая технология квантовой и твердотельной электроники» / сост. : Н. В. Богомазова, О. А. Алисиенок. – Минск : БГТУ, 2019. – 60 с.

ISBN 978-985-530-742-7.

Пособие содержит указания к выполнению семи базовых лабораторных работ по исследованию различных химико-технологических процессов производства материалов и изделий электронной техники с использованием статистических и физико-химических моделей. Даны название и цель работы, характеристика объекта и модели, алгоритм выполнения расчетных исследований, пример или фрагмент листинга и необходимые исходные данные, а также контрольные вопросы для подготовки к защите лабораторной.

УДК 620.197+620.22(076.5)

ББК 30.3я73

ISBN 978-985-530-742-7

© УО «Белорусский государственный технологический университет», 2019

## ПРЕДИСЛОВИЕ

---

Данное издание является пособием для проведения лабораторных занятий по учебной дисциплине «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов». Теоретический материал по указанной дисциплине включает основные понятия моделирования химико-технологических процессов (ХТП) и систем (ХТС), сведения об оптимизации ХТП, а также о моделировании ХТП с использованием статистических или физико-химических моделей. Освоение этого материала предполагает участие в лекционных занятиях, работу с электронным конспектом и другими источниками, а также выполнение расчетных исследований ключевых процессов производства электронных устройств в рамках предусмотренных программой лабораторных работ. Тематика лабораторных работ максимально приближена к тематике курсовых и дипломных проектов.

В пособии представлено 7 базовых лабораторных работ, охватывающих основные разделы теоретического материала. Среди них первой выполняется работа по оптимизации технологического процесса, который студенты изучали в рамках индивидуального задания при выполнении программы общеинженерной производственной практики. Вторая работа посвящена статистическим моделям. Остальные пять предполагают моделирование с использованием физико-химических моделей в рамках изучения алгоритма такого моделирования, а также процессов распределения частиц в аппаратах, теплообмена, массообмена и химических превращений.

Методические указания содержат название и цель работы, алгоритм проведения расчетных исследований, пример листинга выполнения всей работы или ее ключевой части, а также контрольные вопросы для подготовки к защите работы, выполненной в предложенном индивидуальном варианте. Оформленные работы включают титульный лист, цель, теоретические сведения, исходные данные, листинг расчетов в пакете MathCAD, основные результаты расчетов и вывод о достижении поставленной цели. Для теоретической подготовки в защите работ достаточно использовать электронный и рукописный конспекты лекций. Дополнительную информацию по вопросам моделирования, а также технологическим процессам производства материалов и изделий электронной техники можно изучать по приведенным в конце издания литературным источникам.

## ОБЩИЕ ТРЕБОВАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

---

В соответствии со структурой лекционного материала по дисциплине «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов» данный лабораторный практикум включает 7 базовых расчетных работ по математическому исследованию химико-технологических процессов на примере отдельных этапов производства различных изделий электронной техники, например керамических магнитных элементов, монокристаллических лазерных элементов, керамических конденсаторов, полупроводниковых приборов и интегральных схем, жидкокристаллических индикаторов и других устройств. Работы выполняются в следующем порядке:

- 1) оптимизация ХТП;
- 2) моделирование по статистическим моделям;
- 3) алгоритм моделирования по физико-химическим моделям;
- 4) моделирование гидродинамической структуры потоков;
- 5) моделирование теплообменных процессов;
- 6) моделирование массообменных процессов;
- 7) моделирование химических превращений.

Работы выполняются с использованием пакета MathCAD по оригинальному варианту в соответствии с нижеприведенными методическими указаниями. Защита осуществляется либо в виде устного ответа, либо путем тестирования.

Отчеты по выполненным работам оформляются в электронном виде и при необходимости распечатываются. Они содержат:

– *титульный лист* с указанием названия учреждения высшего образования, факультета, кафедры, номера и наименования лабораторной работы, ФИО студента и преподавателя, города и года;

– *цель* выполнения работы, включающую, с одной стороны изучение конкретной процедуры моделирования ХТП и с другой – получение численных данных по изучению конкретного ХТП;

– *характеристику объекта* моделирования с указанием кратких теоретических сведений об исследуемом ХТП, в том числе физико-химические основы процесса, основные технологические параметры и показатели;

– *характеристику модели* с указанием используемых математических уравнений и пояснением выбранных входных, выходных переменных и варьируемых параметров;

– *алгоритм* моделирования с перечислением основных этапов расчетного исследования в рамках данной работы;

– *перечень исходных данных*, которые соответствуют оригинальному варианту выполняемой работы;

– *листинги* расчетных исследований в соответствии с приведенным алгоритмом моделирования при варьировании выбранных параметров и входных переменных;

– *сводную таблицу* результатов расчетных исследований с указанием варьируемых величин и рассчитанных значений выходных переменных;

– *вывод*, отражающий достижение цели данной работы и содержащий анализ полученных результатов расчетного исследования ХТП.

Нижеприведенные методические указания изложены в порядке, соответствующем приведенной структуре отчета.

# Лабораторная работа № 1

## ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРОИЗВОДСТВА ИЗДЕЛИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭМПИРИЧЕСКОГО ПОДХОДА

---

*Цель:* изучение алгоритма оптимизации ХТП, проведение одномерной однокритериальной условной параметрической оптимизации заданного технологического процесса.

В качестве *объекта* моделирования в данной работе студентам обычно предлагается ХТП, который изучался ими в рамках летней общеинженерной практики в соответствии с индивидуальным заданием. Примеры таких процессов, их основные технологические параметры и показатели приведены в электронном конспекте по одноименной учебной дисциплине.

Поскольку в данной работе используется эмпирический подход к моделированию, то математическая *модель* представляет собой зависимость, полученную в результате аппроксимации экспериментальных данных. Эти данные отражают зависимость между входными (обычно некоторые технологические параметры данного ХТП) и выходными (обычно основные показатели данного ХТП) переменными, т. е. в данной работе построение модели осуществляется в результате статистической обработки заданных исходных данных. Обычно в качестве уравнения модели используется полиномиальная зависимость, порядок которой может составлять от 1 до 5. При выполнении работы математическая зависимость между входной и выходной переменными используется в графическом виде.

*Алгоритм* оптимизации как процесса нахождения условий, обеспечивающих оптимальный результат функционирования объекта, включает 3 основных этапа:

- 1) постановку задач оптимизации;
- 2) нахождение оптимальных условий;
- 3) реализацию оптимальных условий.

*Исходные данные* в работе № 1 представляют собой набор дискретных значений, отражающих для исследуемого ХТП экстремальную

зависимость некоторого показателя процесса (критерий оптимальности) от какого-либо технологического параметра (оптимизирующий фактор). Примерами таких данных могут быть зависимости пористости керамических изделий от температуры спекания, коэрцитивной силы феррита от содержания определенной добавки, скорости травления от концентрации компонента травителя и другие эмпирические данные. При представлении набора практических данных следует обратить внимание на размерность используемых величин.

*Листинг* собственно расчетов в данной работе имеет минимальный объем. Вместе с тем следует помнить, что в соответствии с алгоритмом оптимизации такие минимальные расчеты предваряются выполнением первого экспертного этапа, предполагающего определение:

- критерия оптимальности (зависимой переменной), т. е. параметра (или нескольких параметров), наиболее полно отражающего качество функционирования объекта в заданных условиях;
- условий ограничения по критерию оптимальности, т. е. количественных условий, выполнение которых необходимо обеспечить независимо от их влияния на величину критерия оптимальности;
- оптимизирующих факторов (независимых переменных), т. е. управляющих переменных, которые описывают объект и определяют величину критерия оптимальности;
- вида целевой функции, т. е. вида зависимости критерия оптимальности от оптимизирующих факторов.

На данном этапе оптимизации необходимо выбрать для заданного ХТП показатель процесса (критерий оптимальности), который экстремально зависит от какого-либо технологического параметра (оптимизирующий фактор). Нормирование величины выходной переменной задается условием ограничения обычно в виде строгого или нестрогого одностороннего неравенства.

Второй этап оптимизации является расчетным и выполняется с помощью встроенных функций пакета MathCAD *regress* ( $x, y, k$ ), *maximize* ( $f, x1, \dots$ ) или *minimize* ( $f, x1, \dots$ ).

Третий этап – аналитический, он отражается в выводе в виде анализа целесообразности внедрения полученных оптимальных условий в реальный ХТП.

В данной лабораторной работе не приводится сводная таблица результатов. Результат расчетов отражается в виде графиков экспериментальной и аппроксимированной целевой функции,

с указанием области введенных ограничений по критерию оптимальности и точки, соответствующей найденным оптимальным условиям (прил. А).

*Вывод* по работе включает характеристику критерия оптимальности, оптимизирующего фактора, условия ограничения, значения, характеризующие полученные оптимальные условия, а также анализ целесообразности их использования в реальном производственном процессе.

### ***Контрольные вопросы***

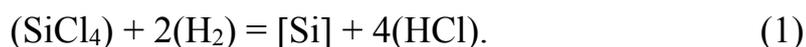
1. Определение процедуры оптимизации.
2. Алгоритм оптимизации ХТП.
3. Содержание основных этапов оптимизации ХТП.
4. Классификация оптимизационных процессов по различным критериям.
5. Методы решения оптимизационных задач.

*Лабораторная работа № 2*  
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГАЗОФАЗНОЙ  
ЭПИТАКСИИ КРЕМНИЕВЫХ ПЛЕНОК  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТАТИСТИЧЕСКОЙ  
МОДЕЛИ НА ОСНОВАНИИ ДАННЫХ  
ПОЛНОФАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

---

**Цель:** изучение алгоритма моделирования ХТП с использованием статистических (или эмпирических, или вероятностных) моделей, определение вида эмпирического уравнения для скорости роста эпитаксиальной пленки, а также проведение расчетов скорости и продолжительности выращивания кремниевой пленки заданной толщины при фиксированных условиях проведения процесса в пределах матричного поля значений входных переменных.

В качестве *объекта* моделирования студентам в данной работе предлагается процесс гидридно-хлоридной эпитаксии микроразмерных монокристаллических пленок кремния, который широко используется в производствах кремниевых приборов и интегральных схем, в том числе на ОАО «Интеграл». Такой процесс основан на реакции восстановления или диссоциации гидридно-хлоридных источников кремния, например, в соответствии с уравнением (1):



Основные технологические параметры данного ХТП: расход (л/ч) и состав (моль/л или об. %) газовой смеси, температура эпитаксии (°С), 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, включая загрузку, нагрев, газофазное травление, эпитаксию, охлаждение, выгрузку). Показателями данного процесса являются толщина пленки (мкм) и ее разброс в партии (%), линейная скорость роста пленки (мкм/мин), плотность дислокаций (см<sup>-2</sup>), удельное электросопротивление пленки (Ом·м) и другие характеристики.

Поскольку в данной работе, как и в работе № 1, используется эмпирический подход к моделированию, то математическая модель представляет собой зависимость, полученную в результате аппроксимации экспериментальных данных. Получение конкретного вида этой модели в виде полиномиальной зависимости первого порядка фактически составляет основную часть выполнения работы № 2. При моделировании в качестве выходной переменной предлагается выбрать скорость роста пленки  $y = v_p$ , а в качестве входных (независимых) управляющих переменных ( $x_1, x_2, x_3$ ), называемых факторами, можно принять соответственно 3 параметра:

- 1) температуру эпитаксии  $T, ^\circ\text{C}$ ;
- 2) концентрацию  $\text{SiCl}_4$  в реакционной газовой смеси  $C$ , моль/л;
- 3) соотношение расходов  $\text{SiCl}_4$  и  $\text{H}_2$   $\frac{G_{\text{SiCl}_4}}{G_{\text{H}_2}} = K_G$ .

*Алгоритм* моделирования с использованием статистических моделей без учета финишного процесса оптимизации включает пять основных этапов.

1. *Анализ* ХТП, предполагающий выбор входных и выходных переменных, а также условий и целей исследования.

2. Получение набора *эмпирических данных*, отражающих зависимость между входными и выходными переменными, на основании составленного плана эксперимента.

3. Построение математической *модели* в общем и частном виде с использованием методов математической статистики.

4. Проверка *адекватности* полученной математической модели набору экспериментальных данных.

5. Проведение анализа и интерполяционных *расчетов* выходной переменной с использованием полученной адекватной модели.

В работе для получения набора *исходных* дискретных *данных*, отражающих количественную зависимость между значениями выбранных входных и выходных переменных, используется обработка достоверных литературных данных, представленных в прил. Б, поскольку для реальных экспериментов, связанных с эпитаксиальными процессами, необходимо сложное специализированное оборудование. Так как в предлагаемой статистической модели число входных переменных или факторов не превышает трех, то для получения эмпирических данных в рамках активного эксперимента может быть использован полнофакторный план I порядка.

Планирование полнофакторного эксперимента включает следующие этапы:

1) выбор центра плана или *базового уровня*  $x_{i0}$  по каждой переменной, представляющего среднее значение данного фактора (например, в рассматриваемой лабораторной работе № 2 принимаются значения базового уровня  $T_0 = 1250^\circ\text{C}$ ,  $C_0 = 0,15$  моль/л,  $K_{G0} = 50$ );

2) выбор уровней варьирования переменных  $\Delta x_i$  и количества этих уровней (для ПФЭ достаточно двух уровней варьирования, например,  $\Delta T = 25^\circ\text{C}$ ,  $\Delta C = 0,05$  моль/л,  $\Delta K_G = 20$ );

3) приведение натуральных входных переменных  $x_i$  к кодированным безразмерным значениям  $Z_i = \pm 1$  (при этом значение «+1» соответствует максимальному значению фактора, а «-1» – минимальному значению, например  $T = 1275^\circ\text{C} \rightarrow +1$ , а  $T = 1225^\circ\text{C} \rightarrow -1$ ) в соответствии с формулой

$$Z_i = \frac{x_i - x_{i0}}{\Delta x_i}; \quad (2)$$

4) составление матрицы (табл. 1) или плана эксперимента по принципу перебора всех возможных комбинаций значений факторов в кодированных переменных после расчета общего количества опытов в плане  $N_\Sigma$  по формуле

$$N_\Sigma = n^k, \quad (3)$$

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 при варьировании частоты перехода от значения кодированной переменной +1 к значению -1 (табл. 1). После составления матрицы в рамках данной работы с использованием эмпирических данных прил. Б определяют скорость роста пленки при условиях, соответствующих каждому опыту плана. При этом следует учесть направление (возрастание или убывание) влияния каждого фактора в выбранном диапазоне его значений. Удобно начинать заполнение таблицы матричного эксперимента с опыта, в котором достигается максимальная скорость эпитахии, а далее принимать во внимание понижающие коэффициенты по каждому фактору.

**Матрица и результаты двухуровневого трехфакторного эксперимента моделирования газофазной эпитаксии кремния**

| Номер опыта | Кодированные значения факторов |          |           | Значения функции<br>$y_i = v_p$ (мкм/мин) |
|-------------|--------------------------------|----------|-----------|---|
|             | $Z_1(T)$                       | $Z_2(C)$ | $Z_3(KG)$ |   |
| 1           | +1                             | +1       | +1        | $y_1 = 1,21$                              |
| 2           | -1                             | +1       | +1        | $y_2 = 3,11$                              |
| 3           | +1                             | -1       | +1        | $y_3 = 2,41$                              |
| 4           | -1                             | -1       | +1        | $y_4 = 3,71$                              |
| 5           | +1                             | +1       | -1        | $y_5 = 0,81$                              |
| 6           | -1                             | +1       | -1        | $y_6 = 2,91$                              |
| 7           | +1                             | -1       | -1        | $y_7 = 2,11$                              |
| 8           | -1                             | -1       | -1        | $y_8 = 3,51$                              |

Полнофакторный эксперимент по плану I порядка предполагает использование полиномиальных регрессионных уравнений в виде полинома первой степени. Для трехфакторного эксперимента такое уравнение в кодированных переменных имеет общий вид:

$$y = b_0 + b_1Z_1 + b_2Z_2 + b_3Z_3. \quad (4)$$

Для перехода к частному виду уравнения модели необходимо провести расчет *коэффициентов*  $b_j$  уравнения регрессии, число которых равно  $k + 1$ , с помощью статистической обработки полученного набора дискретных эмпирических значений (табл. 1) по формулам (5).

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N}; \quad b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ij} y_i}{N}, \quad (5)$$

где  $N$  – общее число опытов в матрице эксперимента ( $N = N_\Sigma = 8$ ).

Уравнение в частном виде включает переменные только со значимыми коэффициентами. Оценка *значимости коэффициентов*  $b_j$  уравнения регрессии в кодированных переменных проводится с использованием  $t$ -критерия Стьюдента, который отражает существенность или несущественность влияния  $j$ -того фактора на выходную переменную с учетом ошибки данного эксперимента:

$$t_j = \frac{|b_j| \sqrt{N}}{\sqrt{S_y^2}}, \quad (6)$$

где  $S_y^2$  – дисперсия воспроизводимости экспериментальных данных по значениям  $y_i$ , характеризующая ошибку эксперимента. В случае однородной дисперсии воспроизводимости, когда ошибка эксперимента близка по всем факторам, ее можно оценить по формуле (7):

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_y} (y_i - \bar{y})^2}{f_y}, \quad (7)$$

где  $\bar{y}$  – среднее значение выходной переменной в серии опытов по проверке воспроизводимости;  $N_y$  – число опытов по проверке воспроизводимости значений выходной переменной (опыты проводятся в отдельной серии при одинаковых значениях факторов, например в центре плана эксперимента, т. е. для рассматриваемой работы в точке  $x_1 = T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $x_2 = C = 0,15$  моль/л,  $x_3 = K_G = 150$ );  $f_y$  – число степеней свободы в данном эксперименте, равное числу связей независимых наблюдений ( $f_y = N_y - 1$ ).

Условием значимости коэффициентов  $b_j$ , рассчитанных по формулам (5), является превышение рассчитанного значения критерия Стьюдента  $t_j$  над критическим табличным значением  $t_{\text{табл}}$  (см. прил. Б), т. е. соотношение  $t_j > t_{\text{табл}}$ . Табличное значение  $t_{\text{табл}}$  определяется по таблицам критических значений статистических критериев при соответствующем значении  $f_y$  и выбранном значении уровня значимости  $\alpha$ , отражающего уровень строгости испытаний объекта. На практике наиболее применим уровень значимости  $\alpha = 0,05$ , при котором учитывается вероятность недостоверности 5% проведенных опытов.

Важным этапом моделирования с использованием статистических моделей является *оценка адекватности* полученного уравнения регрессии, т. е. проверка гипотезы об адекватности полученной модели объекту моделирования. Проверка адекватности модели может быть проведена с помощью расчета  $F$ -критерия Фишера, отражающего сравнение двух дисперсий: *дисперсии воспроизводимости* результатов эксперимента  $S_y^2$  и *дисперсии адекватности* значений функции, рассчитанных по модели, значениям функции, полученным в эксперименте,  $S_{\text{ад}}^2$ :

$$F = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_y^2}, \quad (8)$$

где  $S_y^2$  – дисперсия воспроизводимости эксперимента, определяемая по уравнению (7);  $S_{ад}^2$  – дисперсия адекватности модели эксперименту, определяемая по уравнению (9):

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_y} (y_i - y_i^{рас})^2}{f_{ад}}, \quad (9)$$

где  $y_i$  – значения выходной переменной, полученные в эксперименте (см. табл. 1);  $y_i^{рас}$  – значения выходной переменной, рассчитанные по модели, полученной в частном виде;  $f_{ад}$  – число степеней свободы, т. е. независимых связей, которое соответствует адекватности модели ( $f_{ад} = N - d$ , где  $d$  – число значимых коэффициентов уравнения регрессии).

*Условием адекватности* уравнения регрессии является превышение табличного значения критерия Фишера  $F_{табл}$  (см. прил. Б) над значением  $F$ , рассчитанным по формуле (8), т. е.  $F_{табл} > F$ . Табличное значение  $F_{табл}$  определяется по таблицам критических значений статистических критериев при соответствующих значениях  $f_y, f_{ад}$  и выбранном значении уровня значимости  $\alpha$ .

*Листинг* расчетов по полученной модели в данной работе имеет незначительный объем. Эти расчеты предполагают переход к уравнению в натуральных переменных с использованием соотношений вида (2) для каждой значимой переменной. По такому уравнению можно рассчитать скорость роста эпитаксиальной пленки кремния в любой промежуточной точке для исследуемых диапазонов входных переменных, например для температуры 1225–1275°C, концентрации тетрахлорида кремния в газовом потоке 0,1–0,2 моль/л и т. д. Важно строго придерживаться использованной размерности входных и выходных переменных. Напомним, что полученная статистическая модель эпитаксии пленок кремния может не отражать влияние некоторых выбранных входных переменных, коэффициенты при которых оказались незначимыми. Также не следует забывать, что в рамках моделирования с использованием статистических моделей некорректно проводить экстраполяцию данных за пределы экспериментального поля значений входных переменных.

В данной лабораторной работе не приводится сводная таблица результатов, поскольку результатом моделирования является частный вид уравнения регрессии и несколько значений скорости роста пленки при заданных условиях (прил. Б).

*Вывод* по работе включает полученное уравнение статистической модели в кодированных и натуральных переменных, анализ направления и силы влияния выбранных входных переменных на скорость роста эпитаксиальной пленки, а также результаты расчета скорости роста пленки при заданных условиях.

### ***Контрольные вопросы***

1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей. 2. Алгоритм моделирования с использованием статистических моделей. 3. Содержание основных этапов моделирования с использованием статистических моделей, включая анализ ХТП, матричный эксперимент, расчет коэффициентов регрессионного уравнения, проверку адекватности полученной статистической модели и расчеты с ее использованием. 4. Использование критериев Стьюдента и Фишера. 5. Математический смысл дисперсий воспроизводимости и адекватности.

*Лабораторная работа № 3*  
ИЗУЧЕНИЕ АЛГОРИТМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ХТП  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ  
МОДЕЛИ НА ПРИМЕРЕ ПРОЦЕССА  
ВЫРАЩИВАНИЯ ЛЕГИРОВАННЫХ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ  
КЛАССА  $A^{III}B^V$  МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

---

*Цель:* изучение полного алгоритма моделирования ХТП с использованием физико-химических (или теоретических, или детерминированных) моделей, определение условий выращивания монокристаллического слитка полупроводника с заданными параметрами, включая химический состав, тип проводимости, номинальное удельное электросопротивление и его отклонение по длине слитка.

В качестве *объекта* моделирования в данной работе студентам предлагается процесс выращивания монокристаллических слитков сложных полупроводников методом Чохральского. Этот метод основан на кристаллизации переохлажденной области расплава, которая механически вытягивается из объема расплава в зону с пониженной температурой, при использовании затравки и кристаллодержателя, участвующих одновременно во вращательном и поступательном движении. В настоящее время этот метод является основным промышленным методом получения наиболее крупных монокристаллов полупроводников, а также целого ряда диэлектрических и магнитных материалов, поскольку этот безтигельный метод характеризуется монополюсно высокой производительностью и структурным совершенством кристаллов.

В работе используется *модель* на основе трех основных алгебраических уравнений, описывающих удельное электросопротивление полупроводника (1), распределение примеси по длине слитка, полученного методом с полным расплавлением источника (2), а также коэффициент распределения примеси между расплавом и кристаллом (3):

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = en\mu, \quad (1)$$

где  $e$  – заряд носителя, Кл;  $n$  – концентрация носителей заряда,  $\text{см}^{-3}$ ;  $\mu$  – подвижность носителей заряда,  $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ .

$$C_T = KC_{\text{ж}}^0 (1 - g)^{K-1}, \quad (2)$$

где  $C_T$  – текущая концентрация примеси в кристалле,  $\text{см}^{-3}$ ;  $K$  – эффективный коэффициент распределения примеси;  $C_{\text{ж}}^0$  – исходная концентрация примеси в расплаве,  $\text{см}^{-3}$ ;  $g$  – доля закристаллизовавшегося расплава, равная

$$g = 1 - \frac{V_{\text{ж}}}{V_{\text{ж}}^0},$$

где  $V_{\text{ж}}$  – текущий объем расплава,  $\text{см}^3$ ;  $V_{\text{ж}}^0$  – исходный объем расплава,  $\text{см}^3$ .

$$K = \frac{C_T}{C_{\text{ж}}}. \quad (3)$$

*Алгоритм* моделирования с использованием физико-химических моделей включает семь основных этапов.

1. *Анализ* ХТП, предполагающий выбор входных и выходных переменных, а также условий и целей исследования.

2. *Выдвижение гипотез*, предполагающее выработку физико-химических подходов для описания заданного технологического процесса, включая процессы распределения частиц в аппаратах, теплообмена, массообмена и химические превращения.

3. *Построение модели*, которое осуществляется путем подбора определенных математических уравнений, описывающих протекающие «элементарные» процессы и отражающих математическую связь между входными, выходными переменными, а также параметрами модели.

4. Проверка *адекватности* модели объекту исследования с учетом заданного уровня адекватности модели  $\varepsilon$  (обычно составляет 0,1–0,001) по соотношению

$$\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{рас}} - y_i^{\text{эксп}})^2} \leq \varepsilon. \quad (4)$$

5. Оценка *параметрической чувствительности* адекватной модели с целью выявления параметров модели, которые наиболее сильно влияют на величину выходной переменной.

6. *Расчет* по модели, или *симуляция*, которая предполагает вычисление значений выходной переменной в некотором поле входной переменной с учетом начальных и граничных условий.

7. Оптимизация, предполагающая нахождение условий достижения оптимального уровня выбранного критерия оптимальности.

В качестве основных *исходных данных* в работе выступают следующие характеристики: химический состав и тип проводимости полупроводника, его номинальное удельное электросопротивление с учетом допустимых отклонений по длине слитка. Кроме этого, для расчетов необходимо задаться геометрическими размерами слитка, подобрать легирующую примесь с учетом оптимального коэффициента распределения и обосновать коэффициент избытка расплава в пределах от 1,15 до 2. Для проверки адекватности модели используются экспериментальные данные о распределении примеси по длине кристалла.

*Листинг* расчетных исследований в соответствии с приведенным алгоритмом моделирования при варьировании выбранных параметров и входных переменных включает результаты расчета профилей распределения активной примеси по длине слитка при варьировании исходной концентрации примеси в расплаве  $C_{ж}^0$  с учетом допуска по электросопротивлению. Около десяти профилей  $\rho = f(x)$  размещают в одной координатной плоскости с нанесением двух горизонтальных линий возможных значений электросопротивления с заданным допуском  $\rho_1 = \rho_{ном} + \Delta\rho$  и  $\rho_2 = \rho_{ном} - \Delta\rho$  (прил. В).

В качестве *сводной таблицы* результатов расчетных исследований приводится матрица значений выхода годного по электросопротивлению кристалла и соответствующих значений исходной концентрации примеси в расплаве, соответствующих каждому профилю. Эта зависимость используется для статистической оптимизации величины  $C_{ж}^0$  с целью обеспечения максимального выхода годного кристалла на уровне не менее 60%.

В *выводе* отражаются результаты реализации каждого этапа моделирования процесса выращивания кристалла, включая найденные условия достижения максимального выхода годного кристалла с учетом заданных ограничений.

### ***Контрольные вопросы***

1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей. 2. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических моделей. 3. Содержание основных этапов моделирования с применением детерминированных моделей, включая анализ ХТП, выдвижение гипотез, подбор уравнений модели, проверку адекватности полученной модели экспериментальным данным, оценку параметрической чувствительности адекватной модели, расчеты по модели и оптимизацию процесса. 4. Характеристика основных уравнений модели, описывающей распределение примеси по длине слитка. 5. Характеристика процедуры оптимизации выхода годного кристалла с учетом допуска по электросопротивлению.

# Лабораторная работа № 4

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОФАЗНОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПОТОКА В АППАРАТЕ НАСАДОЧНОГО ТИПА

---

**Цель:** изучение процедуры моделирования процессов распределения частиц технологических потоков в аппаратах, а также исследование гидродинамической структуры потока на примере аппарата насадочного типа с использованием неидеальных гидродинамических моделей.

В качестве *объекта* моделирования студентам в данной работе предлагается процесс распределения частиц однокомпонентного газового потока в аппарате с достаточно высокой степенью заполнения насадкой на уровне 60–80%, что соответствует, например, процессам газожидкостного химического осаждения пленок различной природы.

В работе рассматриваются две неидеальные гидродинамические модели, включая однопараметрическую диффузионную и ячеечную модель на основе дифференциальных уравнений (1) и (2), которые для одномерного случая имеют вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где  $C$  – текущая концентрация компонента в потоке, моль/л;  $t$  – время, с;  $u$  – линейная скорость движения потока, м/с;  $x$  – координата вдоль направления движения потока, м;  $D_L$  – коэффициент продольного перемешивания компонентов в аппарате, (м<sup>2</sup>/с).

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{n}{\tau} (C_{i-1} - C_i), \quad (2)$$

где  $C_i$ ,  $C_{i-1}$  – выходная концентрация компонента в потоке для текущей и предыдущей ячеек, моль/л;  $n$  – количество ячеек в принятой ячеечной модели, которое рассчитывается на основании величины критерия Пекле,  $n = Pe / 2$ ;  $\tau$  – время пребывания частиц в аппарате, с.

Критерий Пекле  $Pe$  используется для оценки гидродинамического состояния потока в аппарате длиной  $L$ :

$$Pe = \frac{uL}{D_L}. \quad (3)$$

Алгоритм моделирования гидродинамики потока в данной работе включает шесть основных этапов.

1. Построение экспериментальной функции отклика  $tC$  для аппарата при импульсном возмущении по заданным экспериментальным значениям.

2. Выбор вида математической модели на основе анализа соотношения размеров аппарата и полученной для него функции отклика.

3. Идентификация параметров выбранной однопараметрической диффузионной модели  $u$  и  $D_L$ , включая расчет критерия Пекле  $Pe$  для оценки гидродинамического состояния потока в аппарате. Расчет критерия Пекле  $Pe$  проводится с использованием числовых характеристик в виде моментов для экспериментальной функции отклика  $tc$ , которая разбивается для расчетов на  $n$  равных интервалов величиной  $t_2$ , и преобразуется в расчетный отклик  $t_1c_1$ . При этом вычисляются сначала размерные моменты  $M_0, M_1, M_2$  по формулам (4):

$$M_0 = \sum_{i=0}^n t_2 \cdot c_{1i}; \quad M_1 = \sum_{i=0}^n t_2 \cdot t_{1i} \cdot c_{1i}; \quad M_2 = \sum_{i=0}^n t_2 \cdot (t_{1i})^2 \cdot c_{1i}, \quad (4)$$

где  $t_2$  – фиксированная величина интервала разбиения экспериментальной функции отклика, с;  $t_{1i}, c_{1i}$  – текущие значения времени и концентрации в данной точке расчетного отклика, с и моль/л, соответственно.

Далее вычисляются приведенные моменты  $M_1^0, M_2^0$ , а также безразмерный момент  $M$  по формулам (7):

$$M_1^0 = \frac{M_1}{M_0}; \quad M_2^0 = \frac{M_2}{M_0}; \quad M = \frac{M_2^0}{(M_1^0)^2}. \quad (7)$$

Расчет критерия Пекле  $Pe$  проводится по соотношению

$$Pe = \frac{2}{M - 1}. \quad (8)$$

Далее с использованием уравнения (3) можно определить величину коэффициента продольного перемешивания компонентов

в аппарате  $D_L$  и окончательно идентифицировать уравнение однопараметрической диффузионной модели для данного случая.

4. Переход к использованию более простой ячеечной модели, для идентификации которой в соответствии с уравнением (2) необходимо определить число ячеек  $n$  в аппарате по соотношению  $n = Pe / 2$ . Точное значение  $n$  является нецелочисленным, например при  $Pe = 6,84$   $n = 3,42$ .

5. Проверка адекватности ячеечной модели, которая осуществляется графическим способом. Для этого проводят предварительный расчет по идентифицированной ячеечной модели для двух целочисленных значений  $n$ , например, при  $n = 3,42$  проводят расчеты для  $n = 3$  и  $n = 4$ . Затем совмещают в одной координатной плоскости заданный экспериментальный отклик и расчетный отклик для последней ячейки при двух значениях  $n$  (прил. Г).

6. Расчет функций отклика аппарата по адекватной ячеечной модели и определение концентрации компонента в потоке на выходе из каждой ячейки для заданных моментов времени.

В качестве *исходных данных* при моделировании гидродинамической структуры потока в аппарате выступают значения длины  $L$  (дм) и диаметра  $d$  (дм) аппарата, расхода жидкофазного потока через аппарат  $G$  (дм<sup>3</sup>/с), коэффициента заполнения аппарата насадкой  $\phi$ , а также исходная концентрация компонента в потоке  $C_0$  (моль/л) и данные экспериментальной функции отклика аппарата в виде набора дискретных данных о зависимости значений выходной концентрации компонента в потоке  $C$  от времени  $t$  при импульсном возмущении (прил. Г).

*Листинг* расчетных исследований в соответствии с приведенным алгоритмом моделирования гидродинамической структуры потока включает графическое изображение заданного экспериментального отклика аппарата, результаты идентификации диффузионной и ячеечной моделей, а также два примера откликов для каждой ячейки, рассчитанных с использованием системы дифференциальных уравнений вида (2), количество которых для каждого случая равно одному из целочисленных значений числа ячеек  $n$  в аппарате.

Вместо *сводной таблицы* результатов расчетных исследований в данной работе приводится ячеечная схема аппарата с указанием значений концентрации компонента в потоке на выходе из каждой ячейки для заданных моментов времени.

*Вывод* по работе содержит идентифицированные уравнения однопараметрической и адекватной ячеечной модели, оценку гидродинамического состояния потока в аппарате с использованием критерия Пекле, а также анализ характера изменения концентрации компонента в аппарате на примере заданных моментов времени.

### **Контрольные вопросы**

1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей.
2. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических моделей.
3. Характеристика диффузионной гидродинамической модели (входные, выходные переменные, параметры и их физический смысл).
4. Характеристика ячеечной гидродинамической модели (входные, выходные переменные, параметры и их физический смысл).
4. Оценка гидродинамического состояния потока по критерию Пекле.
5. Определение количества ячеек при использовании гидродинамической ячеечной модели.
6. Использование ячеечной модели для изучения характера распределения частиц в аппаратах различной конструкции.

# Лабораторная работа № 5

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НА ПРИМЕРЕ ПРОЕКТИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНОЙ ФУТЕРОВКИ ЭЛЕКТРОПЕЧИ

---

**Цель:** изучение приемов моделирования теплообменных процессов с использованием интегрального математического подхода, а также подбор конструктивных параметров многослойной футеровки электропечи для заданного технологического процесса, обеспечивающей достижение безопасной температуры на внешнем слое футеровки, пониженной материалоемкости и повышенной энергоэффективности теплоизоляции.

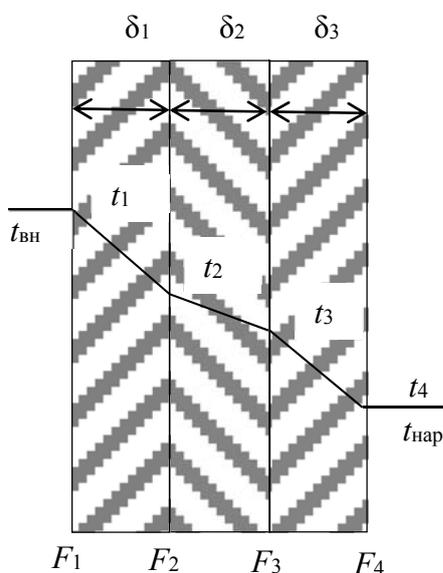


Рис. 1. Схема трехслойной плоской футеровки печи

В качестве объектов моделирования в работе выступает теплообменный процесс потерь энергии через многослойную футеровку электропечи, в которой осуществляется заданный технологический процесс производства материалов и изделий электронной техники, например, процесс спекания ферритовых заготовок, отжиг керамических конденсаторов, окисление или диффузионное легирование кремниевых пластин, эпитаксия полупроводниковых пленок, осаждение диэлектрических слоев.

В исследованиях используется модель на основе алгебраических уравнений, описывающих теплопередачу через плоскую (1) или цилиндрическую (2) стенку:

В исследованиях используется модель на основе алгебраических уравнений, описывающих теплопередачу через плоскую (1) или цилиндрическую (2) стенку:

$$N_{\phi} = \frac{t_{вн} - t_{нар}}{\frac{1}{\alpha_{нар} F_{нар}} + \frac{\delta_1}{\lambda_I F_I} + \frac{\delta_2}{\lambda_{II} F_{II}} + \frac{\delta_3}{\lambda_{III} F_{III}} + \frac{1}{\alpha_{вн} F_{вн}}}, \quad (1)$$

где  $\alpha_{\text{нар}}$  и  $\alpha_{\text{вн}}$  – коэффициенты теплоотдачи для наружного и внутреннего слоев, Вт/(м<sup>2</sup>·К);  $\lambda_j$  – коэффициент теплопроводности  $j$ -того слоя, Вт/(м·К);  $F_{\text{нар}}$ ,  $F_{\text{вн}}$  – площади соответствующих поверхностей, м<sup>2</sup>;  $F_j$  – усредненная площадь  $j$ -того слоя (рассчитывается как среднее геометрическое ограничивающих поверхностей), м<sup>2</sup>;  $\delta_i$  – толщина слоя изоляции, м.

$$N_{\phi} = \frac{\pi(t_{\text{вн}} - t_{\text{нар}})}{\frac{1}{\alpha_{\text{вн}} H_1^* d_1} + \frac{1}{2\lambda_I H_I} \ln \frac{d_2}{d_1} + \frac{1}{2\lambda_{II} H_{II}} \ln \frac{d_3}{d_2}} + \frac{\pi(t_{\text{вн}} - t_{\text{нар}})}{\frac{1}{2\lambda_{III} H_{III}} \ln \frac{d_4}{d_3} + \frac{1}{\alpha_{\text{нар}} H_4^* d_4}}, \quad (2)$$

где  $d_i$  – диаметр  $i$ -той цилиндрической поверхности;  $H_1^*$ ,  $H_4^*$  – высоты  $i$ -тых поверхностей, м;  $H_i$  – усредненная высота  $j$ -того слоя футеровки (рассчитывается как среднее арифметическое высот), м.

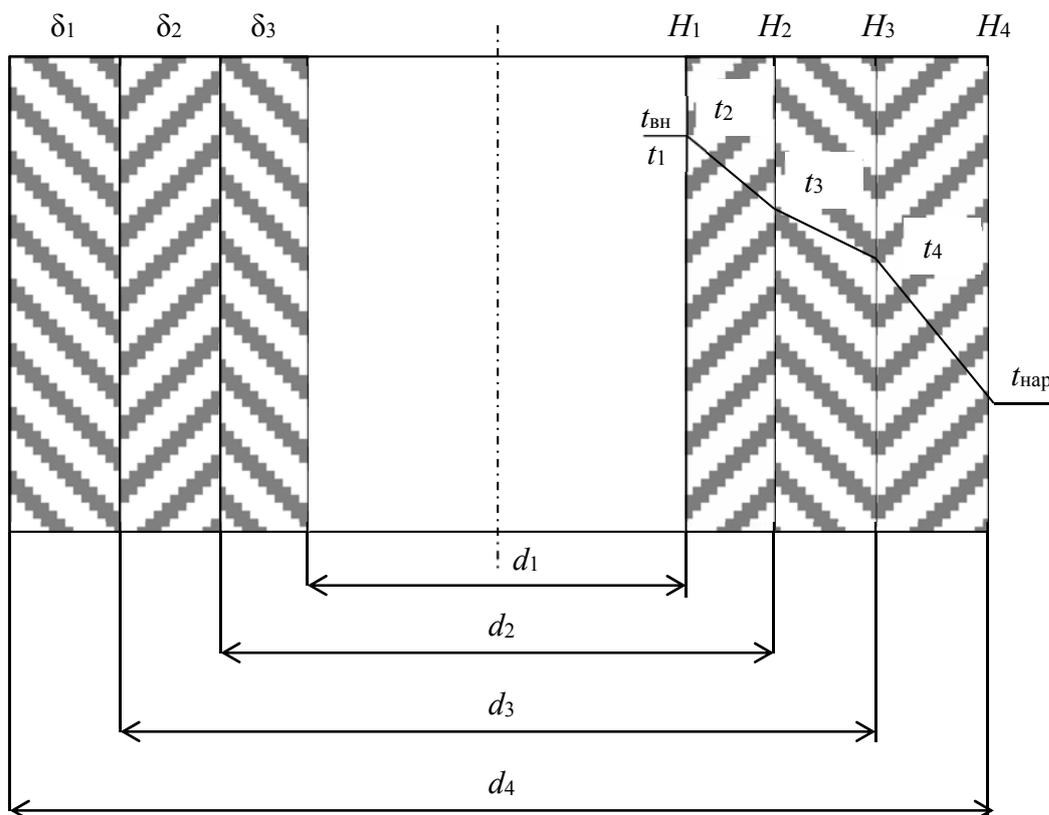


Рис. 2. Схема трехслойной цилиндрической футеровки

При расчете температур в слоях футеровки используют метод последовательных приближений. При этом изначально задают параметры футеровки и температуры из общетехнических соображений, рассчитывают потери  $N_{\phi}$  и далее температуры в слоях футеровки по формулам (3):

$$\begin{aligned}
 t_1 &= t_{\text{вн}} - \frac{N_{\phi}}{\alpha_{\text{вн}} F_1}; & t_1 &= t_{\text{вн}} - \frac{N_{\phi}}{\pi \alpha_{\text{вн}} H_1 d_1}; \\
 t_2 &= t_1 - \frac{N_{\phi} \delta_I}{\lambda_I F_I}; & t_2 &= t_1 - \frac{N_{\phi}}{2\pi \lambda_I H_I} \ln \frac{d_2}{d_1}; \\
 t_3 &= t_2 - \frac{N_{\phi} \delta_{II}}{\lambda_{II} F_{II}}; & t_3 &= t_2 - \frac{N_{\phi}}{2\pi \lambda_{II} H_{II}} \ln \frac{d_3}{d_2}; \\
 t_4 &= t_3 - \frac{N_{\phi} \delta_{III}}{\lambda_{III} F_{III}}; & t_4 &= t_3 - \frac{N_{\phi}}{2\pi \lambda_{III} H_{III}} \ln \frac{d_4}{d_3}; \\
 t_{\text{нар}} &= t_4 - \frac{N_{\phi}}{\alpha_{\text{нар}} F_4}; & t_{\text{нар}} &= t_4 - \frac{N_{\phi}}{\pi \alpha_{\text{нар}} H_4 d_4}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Главным требованием при проверке распределения температур в слоях футеровки является обеспечение безопасной температуры не более  $50^{\circ}\text{C}$  на наружной стенке футеровки.

*Алгоритм* моделирования теплообменных процессов в футеровке включает пять основных этапов.

1. Анализ процесса, выбор материалов футеровки и ее параметров.
2. Выбор уравнений модели с учетом конструктивных особенностей печи заданного процесса.
3. Задание значений температур в слоях футеровки.
4. Расчет тепловых потерь через футеровку  $N_{\phi}$  по уравнениям (1), (2).
5. Проверка значений температур по уравнениям (3).

*Перечень исходных данных* в данной работе включает тип ХТП и рабочую температуру в печи.

*Листинг* расчетных исследований в соответствии с приведенным алгоритмом моделирования содержит не менее трех примеров расчета футеровки при варьировании природы теплоизоляционных материалов, количества и толщины слоев (прил. Д).

*Сводная таблица* результатов расчетных исследований должна

отражать параметры футеровки (природа, количество и толщина слоев), заданные и рассчитанные значения температур, величину тепловых потерь.

В *выводе* приводят анализ исследованных конструкций футеровки рассматриваемой печи и обосновывают выбор варианта, обеспечивающего наиболее полное достижение безопасной температуры на внешнем слое футеровки, пониженной материалоемкости и повышенной энергоэффективности теплоизоляции с указанием принятых параметров футеровки и полученных значений температур.

### ***Контрольные вопросы***

1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей.
2. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических моделей.
3. Механизмы теплообмена и их реализация в промышленных процессах.
4. Интегральный и дифференциальный подход к моделированию теплообменных процессов.
5. Характеристика алгебраической модели исследования теплотерь через футеровку для случаев плоской и цилиндрической стенки (входные, выходные переменные, параметры и их физический смысл).
6. Расчет распределения температур в многослойной футеровке методом последовательных приближений.
7. Способы достижения безопасной температуры на внешнем слое футеровки, пониженной материалоемкости и повышенной энергоэффективности теплоизоляции.

*Лабораторная работа № 6*  
МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССООБМЕННЫХ  
ПРОЦЕССОВ С ИНТЕГРАЛЬНЫМ ПОДХОДОМ  
НА ПРИМЕРЕ ЖИДКОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИИ  
ЛЕГИРОВАННЫХ ПЛЕНОК  $n$ -GaAs

---

*Цель:* изучение приемов моделирования массообменных процессов на примере жидкофазной эпитаксии с использованием интегрального математического подхода, а также обоснование условий роста эпитаксиальных пленок  $n$ -GaAs с применением метода тонкослойного осаждения, позволяющих обеспечить заданное электропроводление полупроводника в пределах пленки.

*Объектом* моделирования в работе является метод Нельсона, который основан на кристаллизации эпитаксиальных пленок из пересыщенных растворов-расплавов при охлаждении исходного насыщенного раствора от начальной температуры  $T_{\max}$  до конечной температуры  $T_{\min}$  с некоторой фиксированной скоростью  $\theta$ , составляющей величину 0,1–1 К/мин. В работе рассматривается вариант метода жидкофазной эпитаксии, основанный на кристаллизации из тонких слоев раствора-расплава, при котором удастся снизить диффузионные ограничения по скорости осаждения, повысить структурное совершенство растущих пленок, более эффективно организовать управление распределением примеси по толщине пленки.

В качестве *модели* метода тонкослойной эпитаксии при выполнении данной работы используются три алгебраических уравнения, а также одно неравенство. Это неравенство описывает условие снятия диффузионных ограничений при кристаллизации из пересыщенных растворов и имеет следующий вид:

$$\frac{D_i t}{h_{\text{сл}}^2} < 1, \quad (1)$$

где  $D_i$  – коэффициент диффузии  $i$ -того компонента в растворе-расплаве,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $t$  – продолжительность роста пленки,  $\text{с}$ ;  $h_{\text{сл}}$  – высота слоя раствора-расплава,  $\text{м}$ .

Минимальную высоту слоя раствора-расплава, достаточную для осаждения пленки заданной толщины  $h_{\text{GaAs}}$ , определяют из массы растворителя  $m_{\text{Ga}}$  с использованием преобразованного выражения (2), что предполагает задание рабочих точек ликвидуса соответствующей системы, в данном случае двухкомпонентной системы Ga – As (прил. Е):

$$h_{\text{GaAs}} = \frac{m_{\text{Ga}} M_{\text{GaAs}}}{\rho_{\text{GaAs}} M_{\text{Ga}} S_{\text{подл}}} \left( \frac{x_{\text{max}}}{1 - 2x_{\text{max}}} - \frac{x_{\text{min}}}{1 - 2x_{\text{min}}} \right), \quad (2)$$

где  $m_{\text{Ga}}$ ,  $M_{\text{Ga}}$  – фактическая и молярная массы растворителя в растворе-расплаве, г и г/моль, соответственно;  $M_{\text{GaAs}}$ ,  $\rho_{\text{GaAs}}$  – молярная масса и плотность вещества эпитаксиальной пленки, г/моль и г/см<sup>3</sup>,  $S_{\text{подл}}$  – площадь поверхности подложки, на которой происходит рост пленки, см<sup>2</sup>;  $x_{\text{max}}$  и  $x_{\text{min}}$  – равновесная растворимость компонента пленки в растворителе, т. е. As в расплаве Ga, мол. доли.

Увеличение толщины пленки  $h$  в методе тонкослойного осаждения от времени  $t$  описывается алгебраическим уравнением вида (3):

$$h(t) = \frac{1}{C_{\text{р-ля}}^0} \frac{\theta}{\alpha} h \left( t - \frac{h_{\text{сл}}^2}{3D} \right), \quad (3)$$

где  $C_{\text{р-ля}}^0$  – исходное содержание растворителя в растворе-расплаве, ат. %;  $\theta$  – скорость охлаждения раствора-расплава, К/с;  $\alpha$  – крутизна ликвидуса фазовой диаграммы соответствующей двухкомпонентной системы растворитель – растворенное вещество, К/ат. %.

Основной задачей работы является расчет концентрационных профилей распределения примеси по толщине пленки  $C_{\text{T}} = f(x)$  с использованием уравнения (4):

$$C_{\text{T}} = \left[ \left( K_0 - \frac{\beta \theta h_{\text{сл}}^2}{3D} \right) C_{\text{ж}} - \frac{\alpha \beta C_{\text{р-ля}} C_{\text{ж}}}{h} x \right] \exp \left( \begin{array}{l} -\frac{1}{h} K_0 x + \frac{\beta \theta h_{\text{сл}}}{3D} x + \\ + \frac{\alpha \beta C_{\text{р-ля}}}{2h^2} x^2 \end{array} \right), \quad (4)$$

где  $K_0$  – исходный коэффициент распределения активной примеси при  $T_{\text{max}}$ ;  $\beta$  – крутизна температурной зависимости коэффициента распределения примеси, К<sup>-1</sup>;  $C_{\text{ж}}$  – концентрация примеси в исходном растворе-расплаве, см<sup>-3</sup>.

*Алгоритм* моделирования процесса жидкофазной тонкослойной эпитаксии легированных пленок  $n$ -GaAs включает пять основных этапов.

1. Анализ процесса и исходных данных, задание дополнительных данных, в частности  $T_{\min}$ , скорости охлаждения раствора-расплава  $\theta$ , диаметра подложки, определение коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta$  с использованием ликвидуса системы Ga–As и температурной зависимости коэффициента распределения примеси (прил. Е).

2. Идентификация модели с помощью расчета высоты слоя раствора-расплава по уравнению (2), проверка выполнения условия тонкослойного осаждения по уравнению (1).

3. Расчет продолжительности и скорости тонкослойного осаждения пленки с использованием уравнения (3).

4. Расчет концентрационных профилей распределения примеси по толщине пленки  $C_T = f(x)$  с использованием уравнения (4) при варьировании температурных условий осаждения, включая  $T_{\min}$  и скорость охлаждения раствора-расплава  $\theta$ .

5. Построение графиков концентрационных профилей распределения примеси по толщине пленки  $C_T = f(x)$  и анализ выполнения требований по удельному электросопротивлению.

В качестве *исходных данных* выступают значения толщины пленки  $h$ , ее номинального удельного электросопротивления и допустимых отклонений  $\rho_{\text{ном}} \pm \Delta\rho$ , природа донорной примеси (Sn, Se, Te) и максимальная температура эпитаксии  $T_{\max}$ .

*Листинг* расчетных исследований в соответствии с приведенным алгоритмом моделирования включает результаты проверки выполнения условий тонкослойного осаждения, график зависимости толщины пленки от времени с указанием уточненного времени эпитаксии (прил. Е), расчеты и графики концентрационных профилей распределения примеси по толщине пленки  $C_T = f(x)$  с указанием линий допустимых значений электросопротивлений.

*Сводная таблица* результатов расчетных исследований содержит условия эпитаксии, включая  $T_{\max}$ ,  $T_{\min}$ ,  $\theta$ , рассчитанные время и скорость осаждения, значения электросопротивления в начале и конце пленки, оценку годности пленки («+» или «-»).

В *выводе* анализируется влияние термических условий на достижение заданных электрофизических показателей пленки и отражаются результаты поиска наиболее технологичных условий выращивания пленки с заданными параметрами.

### ***Контрольные вопросы***

1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей. 2. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических моделей. 3. Примеры массообменных процессов и их использование в производстве электронных приборов. 4. Алгебраические и дифференциальные уравнения для описания массообменных процессов. 5. Основные параметры процесса жидкофазной эпитаксии. 6. Характеристика алгебраической модели исследования жидкофазной эпитаксии легированных пленок в варианте тонкослойного осаждения (входные, выходные переменные, параметры и их физический смысл). 7. Расчет концентрационных профилей распределения примеси по толщине пленки.

# Лабораторная работа № 7

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ МОДЕЛИ НА ПРИМЕРЕ ГИДРИДНО-ХЛОРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ КРЕМНИЯ

---

*Цель:* изучение приемов моделирования химических превращений на примере гидридно-хлоридной эпитаксии нелегированных пленок кремния с использованием дифференциального математического подхода, а также определения условий обеспечения заданной разнотолщинности эпитаксиальных пленок  $\Delta h$  в пределах единичной загрузки вертикального эпитаксиального реактора.

*Объектом* моделирования в данной работе выступает процесс газофазной гидридно-хлоридной эпитаксии кремния, основанной на необратимом восстановлении тетрахлорида кремния водородом в соответствии с суммарным уравнением:



Основными технологическими параметрами этого процесса являются температура роста, состав и расход реакционной газовой смеси, давление, скорость вращения подложкодержателя. Основные показатели процесса – степень превращения исходных реагентов, скорость роста, показатели качества пленки (толщина и ее отклонения, электросопротивление и его отклонения, плотность дислокаций и др.).

*Характеристика модели* в данной работе включает химические, технические и математические аспекты. С химической точки зрения создание модели предполагает принятие допущений о механизме протекания вышеуказанной многоступенчатой реакции. В работе предлагается ограничиться учетом протекания четырех основных стадий:

1) частичного восстановления  $\text{SiCl}_4$



2) диссоциации  $\text{SiHCl}_3$



3) диспропорционирования  $\text{SiCl}_2$



4) восстановления  $\text{SiCl}_2$



С технической точки зрения необходимо принять допущения о характере протекания физико-химических процессов в аппарате, что в данном случае включает:

- 1) изотермичность и стационарность процесса эпитаксии;
- 2) однородность газовых потоков;
- 3) режим идеального вытеснения в аппарате.

С математической точки зрения с учетом принятых химико-технических допущений в качестве основного уравнения модели используются покомпонентные кинетические дифференциальные уравнения, представляющие собой зависимость концентрации данного компонента  $C_i$  от времени  $t$  или от координаты  $x$ . Такое уравнение в приближении реализации гидродинамического режима идеального вытеснения имеет общий вид

$$\frac{dC_i}{dx} = \frac{1}{u} \sum_{j=1}^m (\pm v_{ji} v_j). \quad (6)$$

Его частный вид, например, для дихлорида кремния с учетом уравнений (3)–(5):

$$\frac{dC_{\text{SiCl}_2}}{dx} = \frac{G}{S_p} (+v_2 - v_3 - v_4), \quad (7)$$

где  $G$  – расход газовой смеси через проточный реактор,  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $S_p$  – площадь сечения реактора,  $\text{м}^2$ ;  $v_2, v_3, v_4$  – скорости соответствующих реакций, рассчитываемых по основному постулату химической кинетики общего вида (8).

$$v = k C_A^{\nu_1} C_B^{\nu_2} \dots, \quad (8)$$

где  $k$  – константа скорости данной реакции в соответствующих порядке реакции единицах измерения;  $C_A, C_B$  – концентрации компонентов в химической системе, моль/л;  $\nu_1, \nu_2$  – порядок реакции по веществу А и В соответственно. Частный вид уравнения (18) для реакции (2):

$$v_2 = k_2 C_{\text{SiHCl}_3}. \quad (9)$$

*Алгоритм* моделирования гидридно-хлоридной эпитаксии нелегированных пленок кремния включает пять основных этапов.

1. Расчет конструктивных параметров цилиндрического вертикального эпитаксиального реактора на основании расчета диаметра и высоты цилиндрического подложкодержателя с учетом заданной схемы единичной загрузки, включающей число горизонтальных секций и число пластин в одной секции.

2. Идентификация математической модели, включающей шесть дифференциальных покомпонентных кинетических уравнений типа (6) и (7) по числу веществ, участвующих в реакциях. При этом используется четыре алгебраических уравнения для скоростей реакций вида (8) и (9).

3. Расчет профилей изменения концентрации всех компонентов исследуемой химической системы вдоль подложкодержателя при задании граничных условий в виде концентрации каждого компонента в начале подложкодержателя.

4. Построение и анализ шести графических концентрационных профилей. При этом профили для  $\text{SiCl}_4$  и  $\text{H}_2$  представляются отдельно от других.

5. Расчет толщины эпитаксиальной пленки при варьировании расхода газовой смеси, исходной концентрации исходных реагентов для пластин каждой  $j$ -той секции с учетом средней концентрации  $\text{Si}$  в области секции  $C_j$ , а также его оценочного коэффициента превращения  $K_\alpha$ , который рассчитывается из уравнения (10) при условии достижения для пластин первой секции заданной толщины пленки:

$$h_j = \frac{C_j S_j H_j M_{\text{Si}} K_\alpha}{S_{\text{под}} \rho_{\text{Si}}}, \quad (10)$$

где  $S_j$  и  $H_j$  – площадь сечения реактора и высота для  $j$ -той секции,  $\text{см}^2$  и  $\text{см}$ ;  $M_{\text{Si}}$  и  $\rho_{\text{Si}}$  – молярная масса и плотность кремния,  $\text{г/моль}$  и  $\text{г/см}^3$ ;  $S_{\text{под}}$  – площадь поверхности пластины,  $\text{см}^2$ .

*Перечень исходных данных* включает диаметр пластин, схему их загрузки на подложкодержатель, температуру роста пленки, номинальное значение толщины пленки с учетом допустимой разнотолщинности  $h_{\text{ном}} \pm \Delta h$ .

*Листинг* расчетных исследований гидридно-хлоридной эпитаксии нелегированных пленок кремния включает результаты проектирования подложкодержателя и реактора в виде эскиза, концентрационные

профили для шести компонентов (с указанием средней концентрации  $j$ -той секции для профиля кремния) (прил. Ж) для трех вариантов расчетов при варьировании выбранных параметров и входных переменных.

*Сводная таблица* результатов расчетных исследований отражает условия эпитаксиального роста, толщину пленок по секциям в натуральных единицах (мкм), а также в относительных единицах ( $\pm\%$ ) с учетом номинального заданного значения.

*Вывод* включает анализ влияния исследованных технологических параметров на равномерность роста пленки в вертикальном реакторе, а также отражает предлагаемый режим эпитаксии, обеспечивающий 100%-ный выход годных по толщине пластин.

### **Контрольные вопросы**

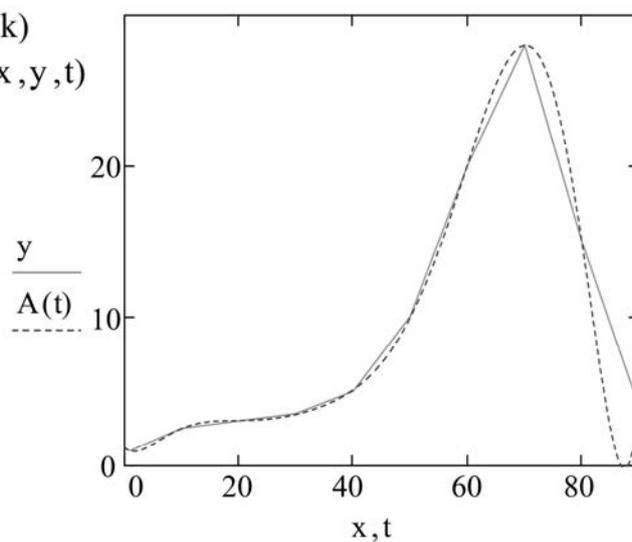
1. Сравнительная характеристика статистических и детерминированных моделей. 2. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических моделей. 3. Примеры химических процессов и их использование в производстве электронных приборов. 4. Алгебраические и дифференциальные уравнения для описания химических превращений. 5. Влияние гидродинамической структуры потоков на протекание химических превращений. 6. Основные параметры и показатели гидридно-хлоридной эпитаксии кремния. 6. Характеристика дифференциально-алгебраической модели исследования газофазной эпитаксии нелегированных пленок кремния (входные, выходные переменные, параметры и их физический смысл).

**Фрагмент листинга статистической оптимизации скорости травления  
пленки SiO<sub>2</sub> в растворе фтороводородной кислоты при комнатной температуре  
(Лабораторная работа № 1)**

| $\omega(\text{HF}) \%$  | скорость травления $V_{\text{тр}}$ , мкм/с   |
|---|--|
| $x :=$  | $y :=$   |
| $\begin{pmatrix} 1 \\ 10 \\ 20 \\ 30 \\ 40 \\ 50 \\ 60 \\ 70 \\ 80 \\ 90 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 \\ 2.5 \\ 3 \\ 3.5 \\ 5 \\ 10 \\ 20 \\ 28 \\ 15 \\ 4 \end{pmatrix}$ |

```

k := 8
S := regress(x,y,k)
A(t) := interp(S,x,y,t)
    
```



Определяем точку начала поиска:

```

x := 70
max := Maximize(A,x)
max = 70.161
A(max) = 27.978
    
```

**Исходные экспериментальные зависимости влияния технологических параметров на скорость эпитаксии кремния**

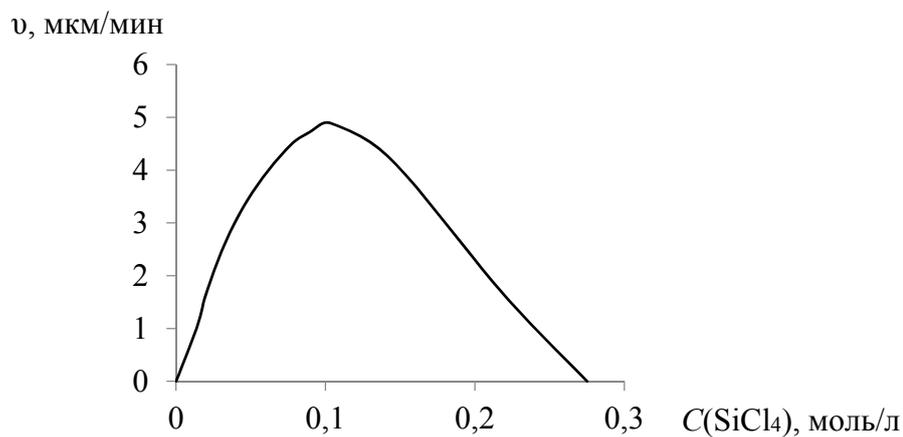


Рис. Б1. Зависимость скорости роста эпитаксиального кремния от концентрации  $\text{SiCl}_4$  при 1170 °С

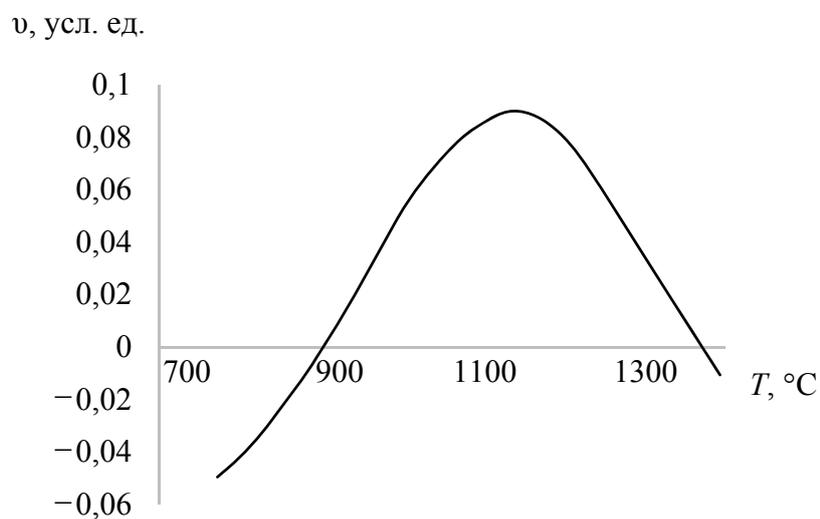


Рис. Б2. Зависимость скорости автоэпитаксиального роста кремния от температуры при осаждении из газовой фазы

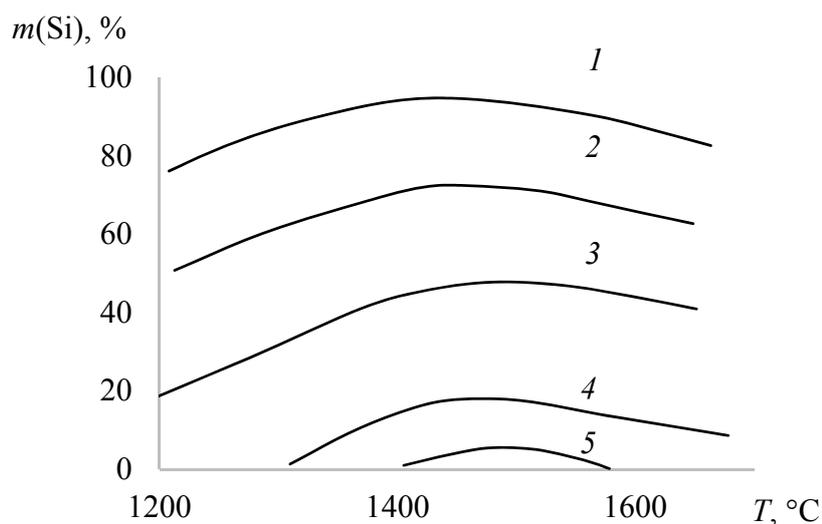


Рис. Б3. Зависимости от температуры выхода кремния при различных состояниях исходной парогазовой смеси  $H_2:SiCl_4$ :  
 1) 200:1; 2) 100:1; 3) 40:1; 4) 10:1; 5) 5:1.

Таблица Б1

**Значения критерия Стьюдента ( $t$ -критерия)**

| $f$ | $\alpha$ |         |         |        |        |         |         |         |
|-----|----------|---------|---------|--------|--------|---------|---------|---------|
|     | 0,80     | 0,90    | 0,95    | 0,98   | 0,99   | 0,995   | 0,998   | 0,999   |
| 1   | 3,0770   | 6,3130  | 12,7060 | 31,820 | 63,656 | 127,656 | 318,306 | 636,619 |
| 2   | 1,8850   | 2,9200  | 4,3020  | 6,964  | 9,924  | 14,089  | 22,327  | 31,599  |
| 3   | 1,6377   | 2,35340 | 3,182   | 4,540  | 5,840  | 7,458   | 10,214  | 12,924  |
| 4   | 1,5332   | 2,13180 | 2,776   | 3,746  | 4,604  | 5,597   | 7,173   | 8,610   |
| 5   | 1,4759   | 2,01500 | 2,570   | 3,649  | 4,0321 | 4,773   | 5,893   | 6,863   |
| 6   | 1,4390   | 1,943   | 2,4460  | 3,1420 | 3,7070 | 4,316   | 5,2070  | 5,958   |
| 7   | 1,4149   | 1,8946  | 2,3646  | 2,998  | 3,4995 | 4,2293  | 4,785   | 5,4079  |
| 8   | 1,3968   | 1,8596  | 2,3060  | 2,8965 | 3,3554 | 3,832   | 4,5008  | 5,0413  |
| 9   | 1,3830   | 1,8331  | 2,2622  | 2,8214 | 3,2498 | 3,6897  | 4,2968  | 4,780   |
| 10  | 1,3720   | 1,8125  | 2,2281  | 2,7638 | 3,1693 | 3,5814  | 4,1437  | 4,5869  |
| 11  | 1,363    | 1,795   | 2,201   | 2,718  | 3,105  | 3,496   | 4,024   | 4,437   |
| 12  | 1,3562   | 1,7823  | 2,1788  | 2,6810 | 3,0845 | 3,4284  | 3,929   | 4,178   |
| 13  | 1,3502   | 1,7709  | 2,1604  | 2,6503 | 3,1123 | 3,3725  | 3,852   | 4,220   |
| 14  | 1,3450   | 1,7613  | 2,1448  | 2,6245 | 2,976  | 3,3257  | 3,787   | 4,140   |
| 15  | 1,3406   | 1,7530  | 2,1314  | 2,6025 | 2,9467 | 3,2860  | 3,732   | 4,072   |
| 16  | 1,3360   | 1,7450  | 2,1190  | 2,5830 | 2,9200 | 3,2520  | 3,6860  | 4,0150  |
| 17  | 1,3334   | 1,7396  | 2,1098  | 2,5668 | 2,8982 | 3,2224  | 3,6458  | 3,965   |
| 18  | 1,3304   | 1,7341  | 2,1009  | 2,5514 | 2,8784 | 3,1966  | 3,6105  | 3,9216  |
| 19  | 1,3277   | 1,7291  | 2,0930  | 2,5395 | 2,8609 | 3,1737  | 3,5794  | 3,8834  |
| 20  | 1,3253   | 1,7247  | 2,08600 | 2,5280 | 2,8453 | 3,1534  | 3,5518  | 3,8495  |

Таблица Б2

Значения критерия Фишера для уровня значимости  $\alpha = 0,95$ 

| $f_2$ | $f_1$ |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|       | 1     | 2     | 3     | 4     | 5     | 6     | 7     | 8     | 9     | 10    | 15    |
| 1     | 161,5 | 199,5 | 215,7 | 224,6 | 230,2 | 234,0 | 236,8 | 238,9 | 240,5 | 241,9 | 246,0 |
| 2     | 18,51 | 19,00 | 19,16 | 19,25 | 19,30 | 19,33 | 19,35 | 19,37 | 19,38 | 19,40 | 19,43 |
| 3     | 10,13 | 9,55  | 9,28  | 9,12  | 9,01  | 8,94  | 8,89  | 8,85  | 8,81  | 8,79  | 8,70  |
| 4     | 7,71  | 6,94  | 6,59  | 6,39  | 6,26  | 6,16  | 6,09  | 6,04  | 6,00  | 5,96  | 5,86  |
| 5     | 6,61  | 5,79  | 5,41  | 5,19  | 5,05  | 4,95  | 4,88  | 4,82  | 4,77  | 4,74  | 4,62  |
| 6     | 5,99  | 5,14  | 4,76  | 4,53  | 4,39  | 4,28  | 4,21  | 4,15  | 4,10  | 4,06  | 3,94  |
| 7     | 5,59  | 4,74  | 4,35  | 4,12  | 3,97  | 3,87  | 3,79  | 3,73  | 3,68  | 3,64  | 3,51  |
| 8     | 5,32  | 4,46  | 4,07  | 3,84  | 3,69  | 3,58  | 3,50  | 3,44  | 3,39  | 3,35  | 3,22  |
| 9     | 5,12  | 4,26  | 3,86  | 3,63  | 3,48  | 3,37  | 3,29  | 3,23  | 3,18  | 3,14  | 3,01  |
| 10    | 4,96  | 4,10  | 3,71  | 3,48  | 3,33  | 3,22  | 3,14  | 3,07  | 3,02  | 2,98  | 2,85  |
| 11    | 4,84  | 3,98  | 3,59  | 3,36  | 3,20  | 3,09  | 3,01  | 2,95  | 2,90  | 2,85  | 2,72  |
| 12    | 4,75  | 3,89  | 3,49  | 3,26  | 3,11  | 3,00  | 2,91  | 2,85  | 2,80  | 2,75  | 2,62  |
| 13    | 4,67  | 3,81  | 3,41  | 3,18  | 3,03  | 2,92  | 2,83  | 2,77  | 2,71  | 2,67  | 2,53  |
| 14    | 4,60  | 3,74  | 3,34  | 3,11  | 2,96  | 2,85  | 2,76  | 2,70  | 2,65  | 2,60  | 2,46  |
| 15    | 4,54  | 3,68  | 3,29  | 3,06  | 2,90  | 2,79  | 2,71  | 2,64  | 2,59  | 2,54  | 2,40  |
| 16    | 4,49  | 3,63  | 3,24  | 3,01  | 2,85  | 2,74  | 2,66  | 2,59  | 2,54  | 2,49  | 2,35  |
| 18    | 4,41  | 3,55  | 3,16  | 2,93  | 2,77  | 2,66  | 2,58  | 2,51  | 2,46  | 2,41  | 2,27  |
| 19    | 4,38  | 3,52  | 3,13  | 2,90  | 2,74  | 2,63  | 2,54  | 2,48  | 2,42  | 2,38  | 2,23  |
| 20    | 4,35  | 3,49  | 3,10  | 2,87  | 2,71  | 2,60  | 2,51  | 2,45  | 2,39  | 2,35  | 2,20  |

*Примечание.*  $f_1$  – число степеней свободы большей дисперсии;  $f_2$  – число степеней свободы меньшей дисперсии.

**Фрагмент листинга моделирования гидридно-хлоридной эпитаксии кремния на основании данных полнофакторного эксперимента (Лабораторная работа № 2)**

$$T_H := 1000 \quad C_H := 0.15 \quad V_H := 120$$

$$\Delta T := 100 \quad \Delta C := 0.05 \quad \Delta V := 80$$

$$N := 2^3 = 8$$

$$b_2 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} (Z_{i,1} \cdot Y_i)}{N} = -0.615$$

$$b_3 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} (Z_{i,2} \cdot Y_i)}{N} = 0.645$$

$$N_{cp} := 5$$

$$f_y := N_{cp} - 1 = 4$$

$$Y_{wcp} := \frac{\sum_{i=0}^{N_{cp}-1} (Y_{w_i})}{5} = 3.878$$

$$S_{2y} := \frac{\sum_{i=0}^{N_{cp}-1} (Y_{w_i} - Y_{wcp})^2}{f_y} = 0.15$$

$$t0 := \frac{(b0 \cdot \sqrt{N})}{\sqrt{S2y}} = 12.315$$

$$t1 := \frac{(b1 \cdot \sqrt{N})}{\sqrt{S2y}} = 3.07$$

$$t2 := \frac{(b2 \cdot \sqrt{N})}{\sqrt{S2y}} = -4.495$$

$$t3 := \frac{(b3 \cdot \sqrt{N})}{\sqrt{S2y}} = 4.714$$

$$t_{\text{табл}} := 2.076$$

$$t0 > t_{\text{табл}} \quad t1 > t_{\text{табл}} \quad t2 < t_{\text{табл}} \quad t3 > t_{\text{табл}}$$

$$i := 0..7$$

$$d := 3$$

$$y_i := b0 + b3 \cdot Z_{i,2} + b1 \cdot Z_{i,0}$$

$$N := 2^3 = 8$$

$$f_{ad} := N - d = 5$$

$$S2ad := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} (Y_i - y_i)^2}{f_{ad}} = 0.741$$

$$F := \frac{S2ad}{S2y} = 4.946$$

$$F_{\text{табл}} := 6.26$$

$$F_{\text{табл}} > F$$

$$T := 1000 \quad V := 120$$

$$y := b0 + b1 \cdot \frac{T - T_H}{\Delta T} + b3 \cdot \frac{V - V_H}{\Delta V} = 1.685$$

$$T := 1050 \quad V := 150$$

$$y := b0 + b1 \cdot \frac{T - T_H}{\Delta T} + b3 \cdot \frac{V - V_H}{\Delta V} = 2.137$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

### Эффективные коэффициенты распределения примесей для основных полупроводниковых материалов

| Примесь | Эффективные коэффициенты распределения примесей |                     |                     |      |                     |                   |                     |                   |       |
|---------|---|---------------------|---------------------|------|---------------------|-------------------|---------------------|-------------------|-------|
|         | Si  | Ge                  | GaAs                | GaSb | GaP                 | InAs              | InSb                | InP               | AlSb  |
| Ag      | –   | –                   | $1 \cdot 10^{-3}$   | –    | –                   | –                 | $4,9 \cdot 10^{-5}$ | –                 | 0,1   |
| Al      | 0,1   | $1,6 \cdot 10^{-3}$ | –                   | –    | –                   | –                 | –                   | –                 | –     |
| As      | 0,04  | 0,07                | –                   | –    | –                   | –                 | 5,4                 | –                 | –     |
| Au      | $3,0 \cdot 10^{-5}$                             | $3,0 \cdot 10^{-5}$ | –                   | –    | –                   | –                 | $1,9 \cdot 10^{-6}$ | –                 | –     |
| Cd      | –   | –                   | 0,02                | –    | –                   | 0,13              | 0,26                | 0,15              | 0,002 |
| Cr      | –   | –                   | 0,07                | –    | $1,0 \cdot 10^{-3}$ | $3 \cdot 10^{-3}$ | –                   | $3 \cdot 10^{-4}$ | –     |
| Cu      | $1,5 \cdot 10^{-5}$                             | $4,0 \cdot 10^{-4}$ | $2 \cdot 10^{-3}$   | –    | $2 \cdot 10^{-3}$   | –                 | $6,6 \cdot 10^{-6}$ | 0,1–0,4           | 0,01  |
| Fe      | –   | –                   | $1,7 \cdot 10^{-3}$ | –    | –                   | –                 | $1 \cdot 10^{-4}$   | –                 | 0,02  |
| Ga      | 0,1   | $4,0 \cdot 10^{-3}$ | –                   | –    | –                   | –                 | –                   | –                 | –     |
| Ge      | –   | –                   | $1,5 \cdot 10^{-2}$ | 0,08 | –                   | 0,07              | $4,5 \cdot 10^{-2}$ | ~0,3              | 0,026 |
| In      | $1,1 \cdot 10^{-3}$                             | $3,0 \cdot 10^{-4}$ | –                   | –    | –                   | –                 | –                   | –                 | –     |
| Mg      | –   | –                   | 0,1                 | –    | 0,15                | 0,7               | –                   | 0,15              | 0,1   |
| Mn      | –   | –                   | 0,02                | –    | 0,015               | 0,07              | $4,5 \cdot 10^{-2}$ | 0,02              | 0,01  |
| P       | 0,12  | 0,04                | –                   | –    | –                   | –                 | 0,16                | –                 | –     |
| Pb      | –   | –                   | $1,0 \cdot 10^{-5}$ | –    | –                   | –                 | 0,16                | –                 | 0,01  |
| S       | –   | –                   | 0,5                 | 0,06 | 0,25                | 0,7               | 0,1                 | 0,47              | –     |
| Sb      | $3,0 \cdot 10^{-3}$                             | $2,0 \cdot 10^{-3}$ | –                   | –    | –                   | –                 | –                   | –                 | –     |
| Se      | –   | –                   | 0,4                 | 0,18 | 0,15                | 0,8               | 0,5–0,2             | 0,6               | –     |
| Si      | –   | –                   | 0,14                | 1,0  | 0,6                 | 0,4               | 0,1                 | 0,55              | 0,045 |
| Sn      | –   | –                   | $5 \cdot 10^{-3}$   | 0,01 | 0,03                | 0,003             | $2,5 \cdot 10^{-3}$ | 0,14              | 0,01  |
| Te      | –   | –                   | $4,6 \cdot 10^{-2}$ | 0,4  | $1,5 \cdot 10^{-2}$ | 0,2               | 0,51–1,00           | 0,4               | 0,32  |
| Zn      | –   | –                   | 0,42                | 0,01 | $1,5 \cdot 10^{-2}$ | 0,77              | 2,3                 | ~1                | 0,02  |

**Фрагмент листинга моделирования и оптимизации процесса  
выращивания легированного полупроводникового слитка  
(Лабораторная работа № 3)**

$$Ct := \frac{1}{p \cdot e \cdot \mu} = 8.013 \times 10^{14}$$

$$Cж1 := \frac{Ct}{K1} = 1.335 \times 10^{15}$$

$$Кизб := 1.5$$

$$g := \frac{1}{Кизб} = 0.667$$

$$g1 := 0, 0.05 .. 0.6$$

$$C1(g1) := K1 \cdot Cж1 \cdot (1 - g1)^{K1-1}$$

$$Мрасп := \frac{3.14 \cdot 10^2 \cdot 30 \cdot 5.775 \cdot 1.5}{4} = 2.04 \times 10^4$$

$$L := 0, 1 .. 1$$

$$Мкр(L) := \frac{3.14 \cdot 10^2 \cdot 5.775 \cdot L}{4}$$

$$g(L) := \frac{Мкр(L)}{Мрасп}$$

$$p1(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{Cж1 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

$$C1 := Cж1 \cdot 0.65 = 8.681 \times 10^{14}$$

$$C2 := Cж1 \cdot 0.75 = 1.002 \times 10^{15}$$

$$p1(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{C1 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

$$p2(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{C2 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

$$C3 := Cж1 \cdot 0.85 = 1.135 \times 10^{15}$$

$$p3(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{C3 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

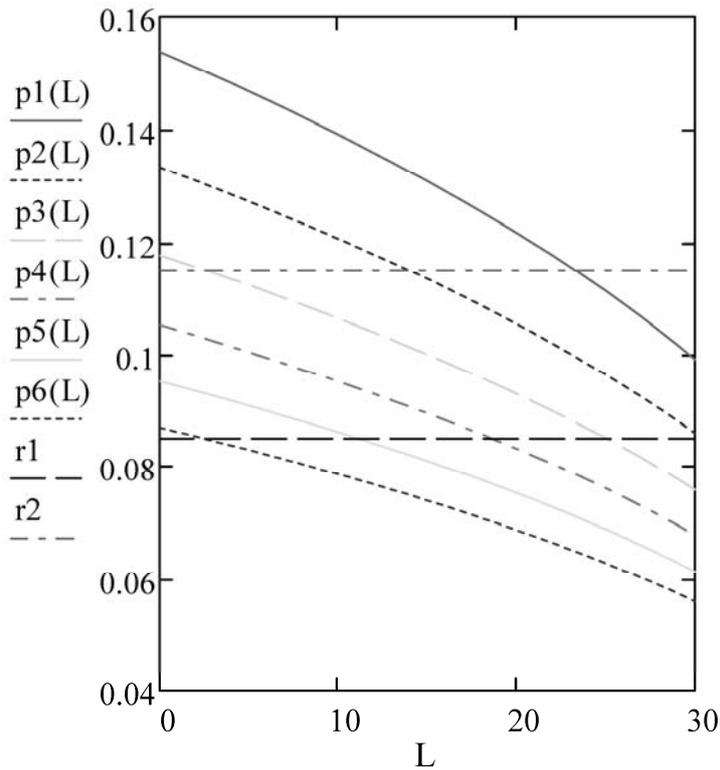
$$C4 := Cж1 \cdot 0.95 = 1.269 \times 10^{15}$$

$$p4(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{C4 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

$$C5 := Cж1 \cdot 1.05 = 1.402 \times 10^{15}$$

$$p5(L) := \frac{(1 - g(L))^{1-K1}}{C5 \cdot K1 \cdot e \cdot \mu}$$

$$C6 := Cж1 \cdot 1.15 = 1.536 \times 10^{15}$$



$$L := \begin{pmatrix} 8 \\ 15 \\ 24 \\ 18 \\ 12 \\ 3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad C := \begin{pmatrix} 8.68 \\ 10.02 \\ 11.35 \\ 12.69 \\ 14.02 \\ 15.36 \\ 16.69 \\ 18.03 \end{pmatrix} \quad P := \frac{L}{30} = \begin{pmatrix} 0.267 \\ 0.5 \\ 0.8 \\ 0.6 \\ 0.4 \\ 0.1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

k := 7

S := regress(P, C, k)

A(t) := interp(S, P, C, t)

t := 0..20

max := Maximize(A, C)

max = 0.739

A(max) = 40.498

## ПРИЛОЖЕНИЕ Г

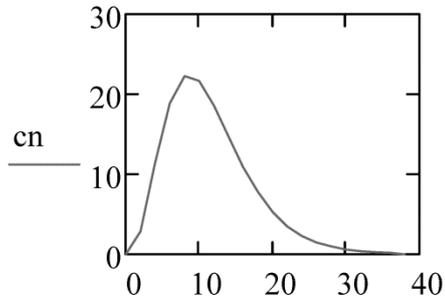
Таблица Г1

### Варианты экспериментальных функций отклика и коэффициента заполнения насадочных аппаратов

| $t, c$    | Варианты |      |       |      |      |      |      |       |      |      |
|-----------|----------|------|-------|------|------|------|------|-------|------|------|
|           | 1        | 2    | 3     | 4    | 5    | 6    | 7    | 8     | 9    | 10   |
| 0         | 0        | 0    | 0     | 0    | 0    | 0    | 0    | 0     | 0    | 0    |
| 1         | 5,4      | 0,3  | 0,1   | 43   | 0,5  | 0,1  | 6,5  | 1,0   | 0,1  | 3,3  |
| 2         | 14,4     | 2,0  | 0,8   | 12,2 | 2,8  | 0,5  | 16,5 | 4,9   | 1,1  | 9,9  |
| 3         | 21,7     | 4,9  | 2,6   | 19,3 | 6,8  | 1,8  | 23,6 | 10,6  | 3,6  | 16,5 |
| 4         | 25,8     | 8,7  | 5,5   | 24,2 | 11,3 | 3,9  | 26,8 | 16,10 | 7,2  | 21,7 |
| 5         | 27,1     | 12,6 | 9,0   | 26,6 | 15,5 | 6,8  | 26,7 | 20,0  | 11,3 | 25,1 |
| 6         | 26,1     | 16,1 | 12,5  | 27,0 | 18,9 | 9,9  | 24,5 | 22,0  | 14,8 | 26,8 |
| 7         | 23,8     | 18,9 | 15,6  | 25,9 | 21,2 | 13,0 | 21,3 | 22,3  | 17,6 | 27,0 |
| 8         | 20,9     | 20,9 | 17,8  | 23,8 | 22,2 | 15,6 | 17,7 | 21,2  | 19,1 | 26,1 |
| 9         | 17,4     | 22,0 | 19,1  | 21,3 | 22,3 | 17,6 | 14,3 | 19,3  | 19,5 | 24,5 |
| 10        | 14,7     | 22,4 | 19,5  | 18,5 | 21,6 | 18,9 | 11,2 | 16,9  | 19,0 | 22,4 |
| 12        | 9,5      | 21,2 | 18,2  | 13,2 | 18,5 | 19,4 | 6,6  | 11,9  | 16,0 | 17,7 |
| 14        | 5,8      | 18,5 | 15,2  | 8,9  | 14,6 | 17,9 | 3,6  | 7,7   | 12,1 | 13,2 |
| 16        | 3,4      | 15,2 | 12,6  | 5,8  | 10,8 | 15,2 | 1,9  | 4,6   | 8,4  | 9,5  |
| 18        | 1,9      | 11,9 | 8,4   | 3,6  | 7,7  | 12,1 | 1,0  | 2,7   | 5,4  | 6,6  |
| 20        | 1,1      | 8,9  | 5,7   | 2,2  | 5,2  | 9,1  | 0,5  | 1,5   | 3,4  | 4,5  |
| 22        | 0,6      | 6,5  | 3,8   | 1,3  | 3,4  | 6,6  | 0,2  | 0,8   | 2,0  | 3,0  |
| 24        | 0,3      | 4,6  | 2,4   | 0,8  | 2,2  | 4,7  | 0,1  | 0,4   | 1,2  | 1,9  |
| 26        | 0,2      | 3,3  | 1,5   | 0,5  | 1,4  | 3,2  | 0    | 0,2   | 0,6  | 1,2  |
| 28        | 0,1      | 2,2  | 0,9   | 0,3  | 0,9  | 2,1  | –    | 0,1   | 0,4  | 0,8  |
| 30        | 0        | 1,5  | 0,5   | 0,2  | 0,5  | 1,4  | –    | 0     | 0,2  | 0,5  |
| 32        | –        | 1,0  | 0,3   | 0,1  | 0,3  | 0,9  | –    | –     | 0,1  | 0,3  |
| 34        | –        | 0,7  | 0,2   | 0    | 0,2  | 0,6  | –    | –     | 0    | 0,2  |
| 36        | –        | 0,4  | 0,1   | –    | 0,1  | 0,4  | –    | –     | –    | 0,1  |
| 38        | –        | 0,3  | 0     | –    | 0    | 0,2  | –    | –     | –    | 0    |
| 40        | –        | 0,2  | –     | –    | –    | 0,1  | –    | –     | –    | –    |
| 42        | –        | 0,1  | –     | –    | –    | 0    | –    | –     | –    | –    |
| 44        | –        | 0    | –     | –    | –    | –    | –    | –     | –    | –    |
| $\varphi$ | 0,77     | 0,6  | 0,625 | 0,74 | 0,66 | 0,6  | 0,8  | 0,73  | 0,67 | 0,7  |

**Фрагмент листинга моделирования гидродинамической  
структуры однофазного потока  
(Лабораторная работа № 4)**

$$t := (tc^T)^{\langle 0 \rangle} \quad cn := (tc^T)^{\langle 1 \rangle}$$



$$t1 := (t1c1^T)^{\langle 0 \rangle} \quad c1 := (t1c1^T)^{\langle 1 \rangle}$$

$$L := 10 \quad v := 0.001$$

$$d := 0.065 \quad \phi := 0.7$$

$$V := \pi \frac{d^2 \cdot L \cdot (1 - \phi)}{4} = 9.955 \times 10^{-3}$$

$$U := \frac{v}{V} = 0.1$$

$$i := 0..40 \quad t2 := 2 \quad n := 14$$

$$M0 := \sum_{i=0}^n (t2 \cdot c1_i) = 285.8 \quad M1 := \sum_{i=0}^n (t2 \cdot t1_i \cdot c1_i) = 3.226 \times 10^3$$

$$M2 := \sum_{i=0}^n [t2 \cdot (t1_i)^2 \cdot c1_i] = 4.511 \times 10^4$$

$$M1m := \frac{M1}{M0} = 11.287 \qquad M2m := \frac{M2}{M0} = 157.843$$

$$M2t := \frac{M2m}{(M1m)^2} = 1.239$$

$$Pe := \frac{2}{(M2t - 1)} = 8.368$$

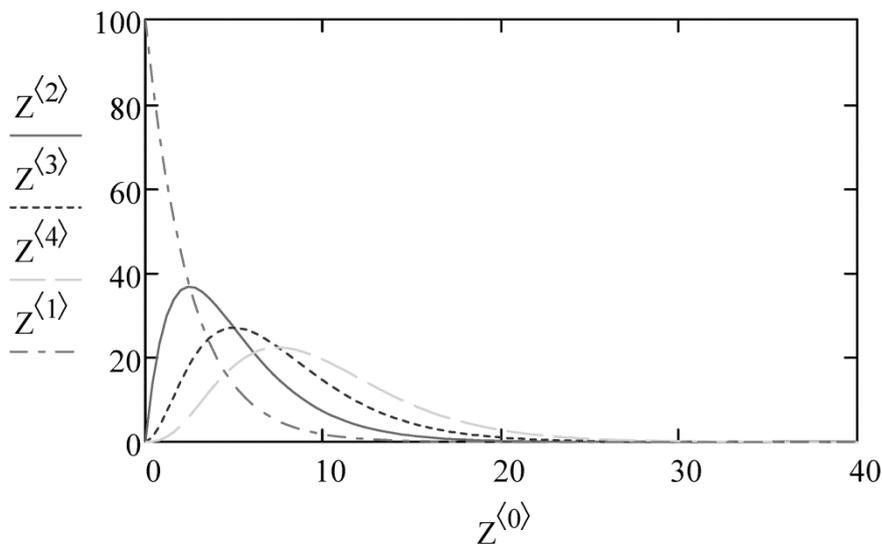
$$DL := U \cdot \frac{L}{Pe} = 0.12 \qquad n := \frac{1}{(M2t - 1)} = 4.184$$

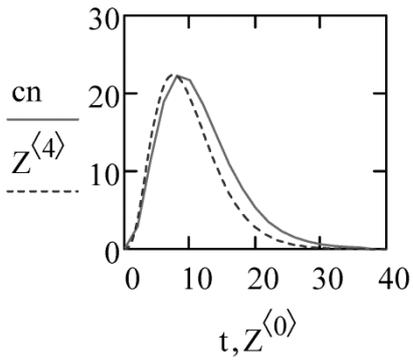
$$n1 := 4 \qquad k := n1 \cdot \frac{v}{V} = 0.402$$

ORIGIN := 0

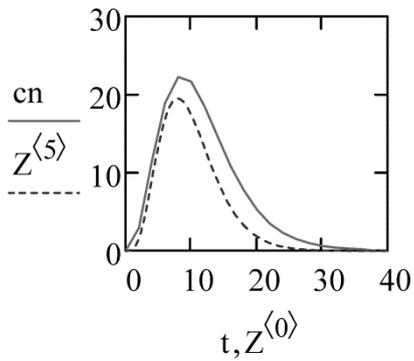
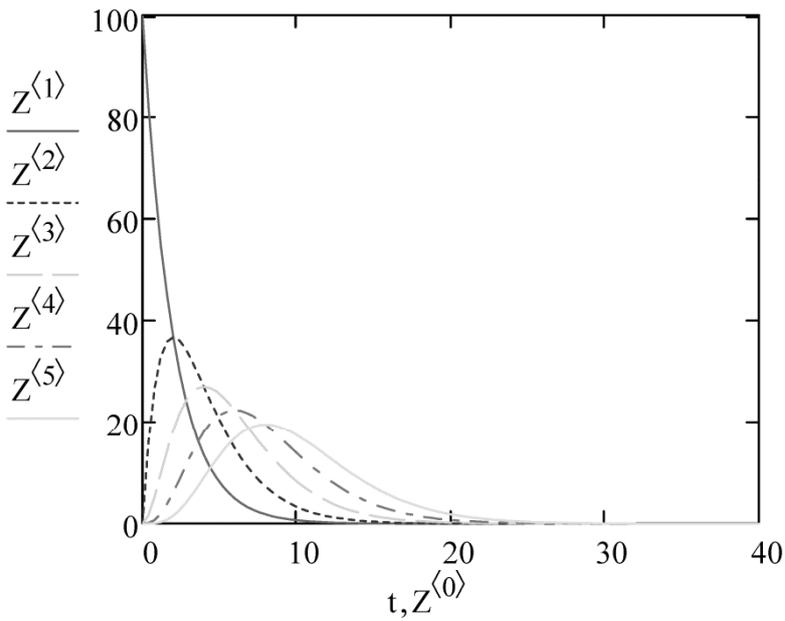
$$c := \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad D(t,c) := \begin{bmatrix} -k \cdot c_0 \\ k \cdot (c_0 - c_1) \\ k \cdot (c_1 - c_2) \\ k \cdot (c_2 - c_3) \end{bmatrix}$$

Z := rkfixed(c, 0, 40, 100, D)





$$\begin{aligned}
 n2 &:= 5 \\
 k &:= n2 \cdot \frac{v}{V} = 0.502 \\
 \text{ORIGIN} &:= 0 \\
 Z &:= \text{rkfixed}(c, 0, 40, 100, D)
 \end{aligned}
 \quad
 c := \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
 \quad
 D(t, c) := \begin{bmatrix} -k \cdot c_0 \\ k \cdot (c_0 - c_1) \\ k \cdot (c_1 - c_2) \\ k \cdot (c_2 - c_3) \\ k \cdot (c_3 - c_4) \end{bmatrix}$$



## ПРИЛОЖЕНИЕ Д

### Теплофизические свойства некоторых огнеупорных и теплоизоляционных материалов

| Изделие                       |       | Плотность, кг/м <sup>3</sup> | Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К) | Рабочая температура, °С | Теплоемкость, кДж/(моль·К)    |
|-------------------------------|-------|------------------------------|--|-------------------------|-------------------------------|
| Алюмохромфос-фатный газобетон | М-600 | 600                          | $0,163 + 2,8 \cdot 10^{-4}t$           | 1450                    | –                             |
|                               | М-400 | 400                          | $0,093 + 3,0 \cdot 10^{-4}t$           | 1400                    | –                             |
| Асбестовый картон             |       | 900                          | $0,16 + 1,7 \cdot 10^{-4}t$            | 600                     | 0,837                         |
| Вермикулит                    |       | 0,150–0,25                   | $0,072 + 2,6 \cdot 10^{-4}t$           | 900–1000                | 1,03                          |
| Вермикулитовые плиты          |       | 350                          | $0,08 + 1,5 \cdot 10^{-4}t$            | 750                     | 1,15                          |
| Высокоглиноземистые           |       | 2500                         | $2,1–6,2 \cdot 10^{-4}t$               | 1900                    | $0,837 + 2,6 \cdot 10^{-4}t$  |
|                               |       | 1330                         | $0,86 + 0,8 \cdot 10^{-4}t$            | 1450                    |                               |
| Диатомитовые                  |       | 1100                         | $0,27 + 2,3 \cdot 10^{-4}t$            | 900                     | 0,83–0,92 <i>t</i>            |
|                               |       | 750                          | $0,17 + 3,5 \cdot 10^{-4}t$            | 900                     |                               |
| Диатомитовые засыпки          |       | 500                          | $0,1 + 2,8 \cdot 10^{-4}t$             | 700                     | 1,0                           |
| Динасовые                     |       | 1900                         | $1,07 + 9,3 \cdot 10^{-4}t$            | 1650–1700               | $0,795 + 33,5 \cdot 10^{-4}t$ |
|                               |       | 1100                         | $0,58 + 4,3 \cdot 10^{-4}t$            | 1500                    |                               |
| Карбидокремниевые             |       | 2350                         | $5,2–1,3 \cdot 10^{-3}t$               | 1400–1450               | $0,96 + 1,4 \cdot 10^{-4}t$   |
| Керамовермикулитовые          |       | 350                          | $0,085 + 2,1 \cdot 10^{-4}t$           | 1000                    | 0,8                           |
| Кирпич пеношамотный           |       | 400                          | $0,10 + 1,45 \cdot 10^{-4}t$           | 1300                    | $0,24 + 2,0 \cdot 10^{-4}t$   |
| Муллитокремнеземистое волокно |       | 130                          | $0,034 + 2,6 \cdot 10^{-4}t$           | 1150                    | 0,94                          |
| Периклазошпинелевые           |       | 3000                         | $2,5–5,8 \cdot 10^{-4}t$               | 1750                    | $0,775 + 3,0 \cdot 10^{-4}t$  |
| Перлитовые                    |       | 230                          | $0,068 + 0,9 \cdot 10^{-4}t$           | 900                     | 0,84                          |
| Полукислый кирпич             |       | 1800                         | $0,85 + 4,0 \cdot 10^{-4}t$            | 1250–1400               | $0,88 + 2,3 \cdot 10^{-4}t$   |
|                               |       |                              | $0,47 + 5,1 \cdot 10^{-4}t$            | 700                     |                               |
| Фосфоперлитовые               |       | 250                          | $0,067 + 1,2 \cdot 10^{-4}t$           | 800                     | –                             |
| Хромомагнезитовые             |       | 2900                         | $2,0–8,5 \cdot 10^{-4}t$               | 1750                    | $0,754 + 1,5 \cdot 10^{-4}t$  |
| Шамотноволоконистые плиты     |       | 350                          | $0,13 + 1,0 \cdot 10^{-4}t$            | 1200                    | $0,058 + 1,7 \cdot 10^{-4}t$  |
| Шамотные                      |       | 1900                         | $1,04 + 1,5 \cdot 10^{-4}t$            | 1350–1500               | $0,837 + 2,6 \cdot 10^{-4}t$  |
|                               |       |                              | $0,7 + 6,4 \cdot 10^{-4}t$             |                         |                               |
|                               |       | 1300                         | $0,61 + 1,8 \cdot 10^{-4}t$            | 1300                    |                               |
|                               |       | 1000                         | $0,28 + 2,3 \cdot 10^{-4}t$            | 1250                    |                               |
|                               |       | 800                          | $0,21 + 4,3 \cdot 10^{-4}t$            | 1200                    |                               |
| Шамотные засыпки              |       | 1000                         | $0,23 + 4,9 \cdot 10^{-4}t$            | 1000                    | 1,17                          |
| Шлаковая вата                 |       | 300                          | $0,065 + 3,5 \cdot 10^{-4}t$           | 700                     | 0,88                          |
|                               |       | 225                          | $0,058 + 1,6 \cdot 10^{-4}t$           | 750                     |                               |

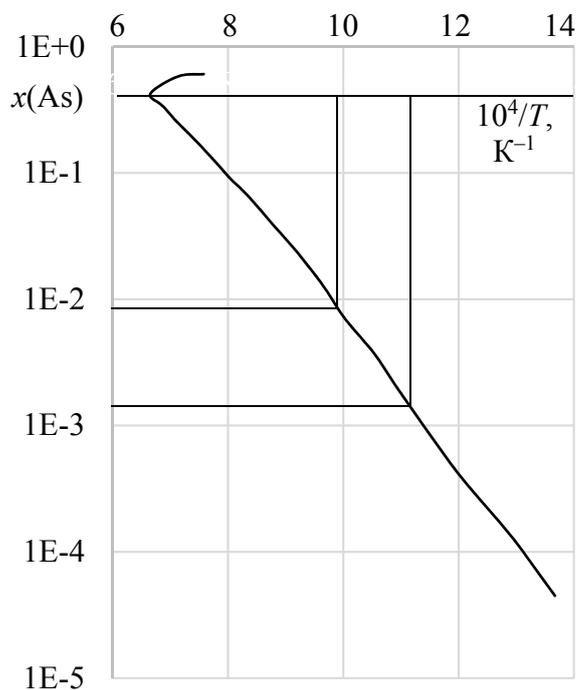


Рис. Е1. Фрагмент ликвидуса системы Ga-As

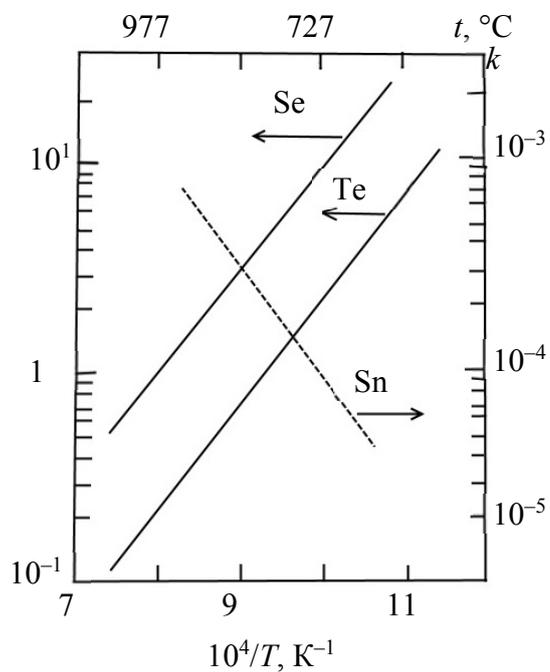


Рис. Е2. Температурные зависимости эффективного коэффициента распределения примесей в эпитаксиальных слоях GaAs

**Фрагмент листинга моделирования процесса жидкофазной эпитаксии  
легированных пленок n-GaAs  
(Лабораторная работа № 6)**

$$D := 2 \cdot 10^{-4} \quad d := 1.2 \cdot 10^{-4}$$

$$\rho := 12 \cdot 10^{-3} \quad \theta := 0.8$$

$$\Delta\rho := 20 \quad h := 0.05$$

$$\Delta T := \frac{1}{10 \cdot 10^{-4}} - \frac{1}{11 \cdot 10^{-4}} = 90.909$$

$$\Delta C := 9 \cdot 10^{-3} - 3 \cdot 10^{-3} = 6 \times 10^{-3}$$

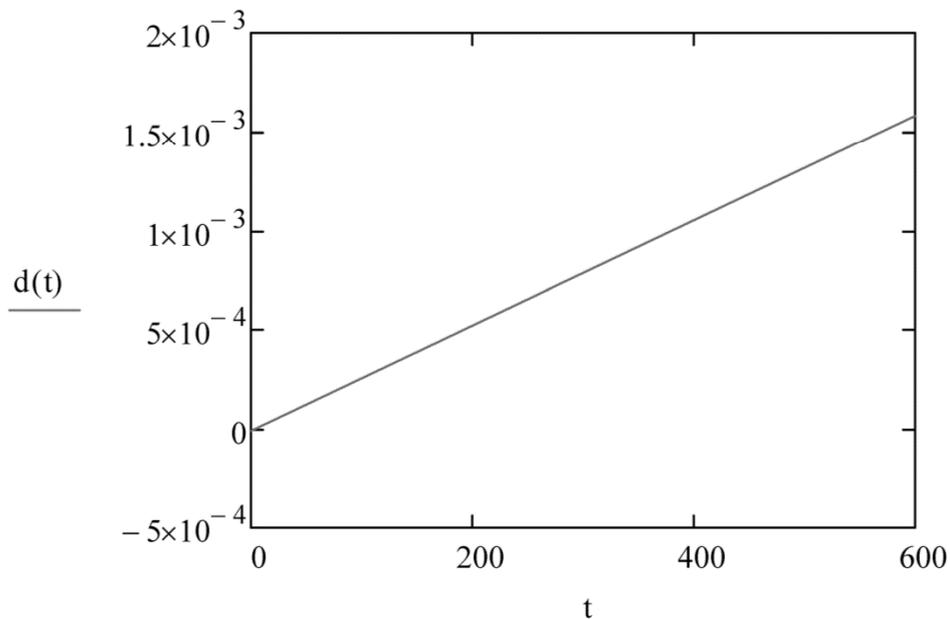
$$\alpha := \frac{\Delta T}{\Delta C}$$

$$C0 := 1 - 6 \cdot 10^{-3} = 0.994$$

$$\alpha = 1.515 \times 10^4$$

$$t := 0, 1 .. 600$$

$$d(t) := \frac{1}{C0} \cdot \frac{\theta}{\alpha} \cdot h \cdot \left( t - \frac{h^2}{3 \cdot D} \right)$$



$$t := 500 \quad d := 1.2 \cdot 10^{-4}$$

$$\frac{D \cdot t}{h^2} = 40 > 1 \quad \mu := 8500$$

$$N(x) := \left[ \left( k_0 - \frac{\beta \cdot \theta \cdot h^2}{3D} \right) N' - \frac{\alpha \cdot \beta \cdot C_0 \cdot N'}{h} \cdot x \right]$$

$$\rho := \frac{1}{e \cdot N' \cdot \mu} \quad e := 1.6 \cdot 10^{-19} \quad k_0 := \frac{n}{N'}$$

$$\exp\left( \frac{-1}{h} \cdot k_0 \cdot x + \frac{\beta \cdot \theta \cdot x \cdot h}{3 \cdot D} + \frac{\alpha \cdot \beta \cdot C_0}{2 \cdot h^2} \cdot x^2 \right)$$

$$k_0 := 30 \quad \rho := 12 \cdot 10^{-3}$$

$$n := \frac{1}{\rho \cdot e \cdot \mu} = 6.127 \times 10^{16}$$

$$N' := \frac{n}{k_0}$$

$$N' = 2.042 \times 10^{15}$$

$$x := 0, 0.5 \cdot 10^{-4} \dots 12 \cdot 10^{-4}$$

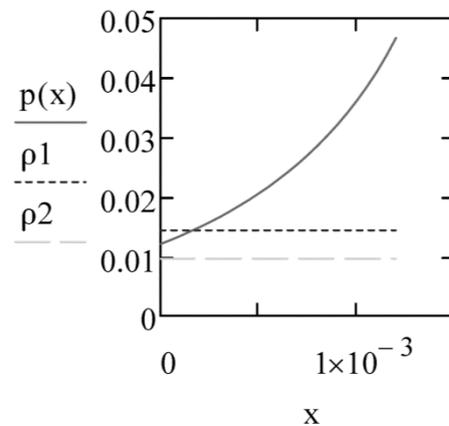
$$\Delta k := 8 - 3.3 = 4.7 \quad \Delta T := 1100 - 1000 = 100$$

$$\beta := \frac{\Delta k}{\Delta T} = 0.047$$

$$p(x) := \frac{1}{\mu \cdot e \cdot N(x)}$$

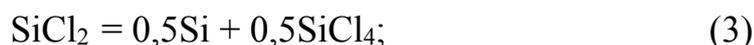
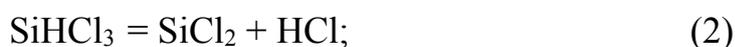
$$\rho_1 := 12 \cdot 10^{-3} \cdot 1.2$$

$$\rho_2 := 12 \cdot 10^{-3} \cdot 0.8$$



**Константы равновесия химических стадий восстановления тетрахлорида кремния с учетом реакций (1) – (4) при различных температурах**

| $T, K$ | $K_{p1}$ для (1) | $K_{p2}$ для (2) | $K_{p3}$ для (3) | $K_{p4}$ для (4) |
|--------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| 1173   | 0,200            | 0,00115          | 71,0             | 1,74             |
| 1373   | 0,457            | 0,025            | 10,0             | 1,2              |
| 1473   | 0,63             | 0,12             | 3,8              | 1,0              |
| 1573   | 0,78             | 0,48             | 1,66             | 0,84             |
| 1673   | 1,0              | 1,67             | 0,657            | 0,72             |



**Фрагмент листинга моделирования химических превращений гидридно-хлоридной эпитаксии кремния (Лабораторная работа № 7)**

$$r := 10 \quad d := 5 \cdot 10^{-3} \quad \Delta := 30\%$$

$$ns := 3 \quad np := 4 \quad T := 1673$$

$$C_{\text{siCl}_4} := 1 \cdot 10^{-4} \quad C_{\text{H}_2} := 1 \cdot 10^{-2}$$

$$G_g := 100$$

$$a := 3 \quad b := 1.5 \quad f := 10 \quad j := 20 \quad k := 40$$

$$K_1 := 1 \quad K_3 := 0.657$$

$$K_2 := 1.67 \quad K_4 := 0.72$$

Определяем размеры аппарата:

$$L := r + b \cdot 2 = 13$$

$$L_{\text{prod1}} := L \cdot ns = 39$$

$$D_{podl} := \frac{r \cdot 4 + a \cdot 4}{3.14} = 16.561$$

$$H_p := L_{podl} + k + j = 99$$

$$D_p := D_{podl} + 2 \cdot f = 36.561$$

$$H := 100$$

$$D := 40$$

$$x := 0..39$$

$$S_p := 3.14 \cdot \frac{D^2}{4} = 1.256 \times 10^3$$

$$S_{podl} := 3.14 \cdot \frac{D_{podl}^2}{4} = 215.287$$

$$S_{sech} := S_p - S_{podl} = 1.041 \times 10^3$$

$$C_1 := 0.0001$$

$$C_4 := 0.00009$$

$$C_2 := 0.01$$

$$C_5 := 0.00006$$

$$C_3 := 0.00007$$

$$C_6 := 9.5 \cdot 10^{-7}$$

$$V_1 := K_1 \cdot C_1 \cdot C_2$$

$$G := 1..100$$

$$V_2 := K_2 \cdot C_3$$

$$V_3 := K_3 \cdot C_5$$

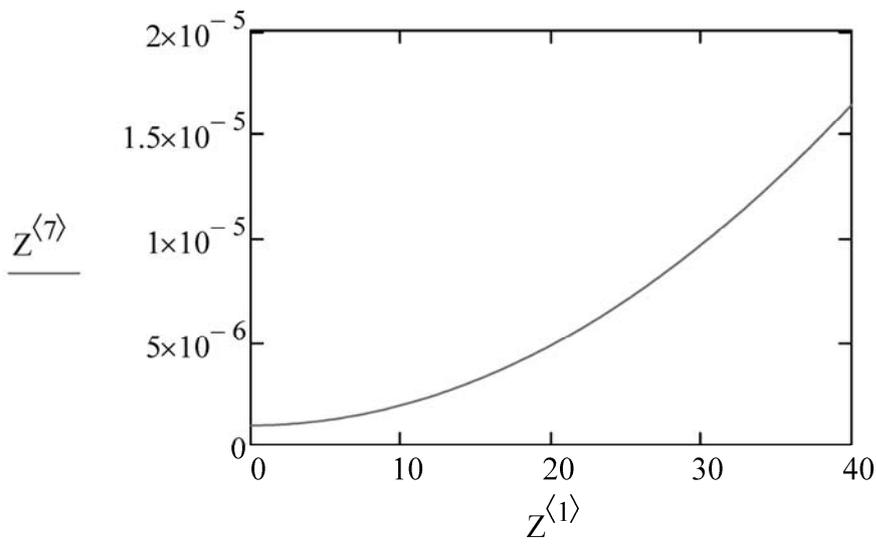
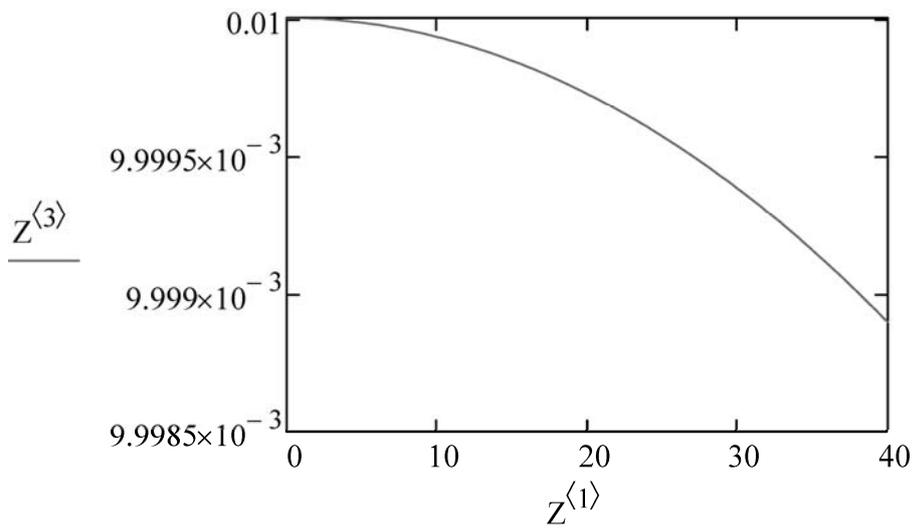
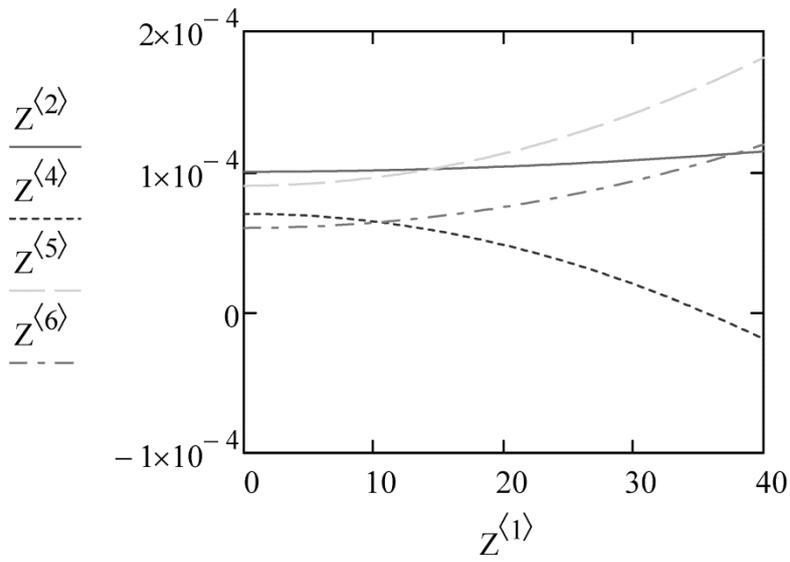
$$V_4 := K_4 \cdot C_2 \cdot C_5$$

$$C_0 := \begin{pmatrix} 0.0001 \\ 0.01 \\ 0.00007 \\ 0.00009 \\ 0.00006 \\ 9.5 \cdot 10^{-7} \end{pmatrix}$$

$$E(G, C) := \begin{bmatrix} (-V_1 + 0.5 \cdot V_3) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \\ (-V_1 - V_4) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \\ (V_1 - V_2) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \\ (V_1 + V_2 + 2 \cdot V_4) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \\ (V_2 - V_3 - V_4) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \\ (0.5 \cdot V_3 + V_4) \cdot \frac{G}{S_{sech}} \end{bmatrix}$$

$$\text{ORIGIN} := 1$$

$Z := \text{rkfixed}(C0, 0, 40, 100, E)$



$$C1cr := 4 \cdot 10^{-6}$$

$$C3cr := 1.5 \cdot 10^{-5} \quad MSi := 28 \quad \rho Si := 2.33$$

$$Vp := \left( 3.14 \cdot \frac{D^2 \cdot H}{4} \right) - \left( 3.14 \cdot \frac{Dpodl^2 \cdot Lpodl}{4} \right) = 1.172 \times 10^5$$

$$m1Si := C1cr \cdot \frac{Vp}{3} \cdot MSi = 4.376 \quad r1 := \frac{m1Si}{\rho Si \cdot 3.14 \cdot r^2} = 5.981 \times 10^{-3}$$

$$m3Si := C3cr \cdot \frac{Vp}{3} \cdot MSi = 16.409 \quad r3 := \frac{m3Si}{\rho Si \cdot 3.14 \cdot r^2} = 0.022$$

$$\Delta 1 := \frac{(r1 - d) \cdot 100\%}{d} = 19.614 \cdot \%$$

$$\Delta 3 := \frac{(r3 - d) \cdot 100\%}{d} = 348.553 \cdot \%$$

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. Богомазова, Н. В. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов отрасли / Н. В. Богомазова. – Минск: БГТУ, 2018. – 85 с.
2. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем: учеб. пособие для вузов / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2004. – 533 с.
3. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учеб. пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высш. шк., 1991. – 399 с.
4. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 415 с.
5. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / А. М. Гумеров [и др.]. – М.: Колос, 2008. – 158 с.
6. Юсевич, А. И. Расчет химико-технологических систем средствами MathCad / А. И. Юсевич. – Минск: БГТУ, 2005. – 100 с.
7. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: практическое руководство / В. А. Холоднов [и др.]. – СПб.: Проффессионал, 2003. – 478 с.
8. Кирьянов, Д. В. Самоучитель MathCad 2001 / Д. В. Кирьянов. – СПб.: БВХ-ПетербургГТУ, 2002. – 541 с.
9. Богомазова, Н. В. Технология полупроводниковых материалов и приборов / Н. В. Богомазова. – Минск: БГТУ, 2015. – 182 с.
10. Мурашкевич, А. Н. Теория и методы выращивания монокристаллов: учеб. пособие для вузов / А. Н. Мурашкевич, И. М. Жарский. – Минск: БГТУ, 2010. – 213 с.
11. Технология изделий интегральной электроники / Л. П. Ануфриев [и др.]; под общ. ред. А. П. Достанко и Л. И. Гурского. – Минск: Амалфея, 2010. – 536 с.
12. Мурашкевич, А. Н. Оборудование производств материалов и изделий электронной техники: учеб. пособие / А. Н. Мурашкевич, И. М. Жарский. – Минск: БГТУ, 2005. – 242 с.

13. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов / под ред. П. Антонетти, Д. Антониадиса, Р. Даттона, У. Оулдхема. – М.: Радио и связь, 1988. – 496 с.

14. Справочник по электротехническим материалам: в 3 т. / под ред. Ю. В. Корицкого, В. В. Пасынкова, Б. М. Тареева. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – Т. 3. – 726 с.

15. Левицкий, И. А. Расчет тепловых процессов, установок и агрегатов керамического производства: учеб. пособие / И. А. Левицкий. – Минск: БГТУ, 2003. – 163 с.

16. Свенчанский, А. Д. Электрические промышленные печи: учебник: в 2 ч. / А. Д. Свенчанский. – М.: Энергия, 1975. – Ч. 1. Электрические печи сопротивления. – 384 с.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

|   |           |
|---|-----------|
| Предисловие .....   | 3         |
| Общие требования к выполнению лабораторных работ.....   | 4         |
| <i>Лабораторная работа № 1. Оптимизация технологических процессов производства изделий электронной техники с использованием эмпирического подхода .....</i>   | <i>6</i>  |
| <i>Лабораторная работа № 2. Моделирование процесса газофазной эпитаксии кремниевых пленок с использованием статистической модели на основании данных полнофакторного эксперимента .....</i>   | <i>9</i>  |
| <i>Лабораторная работа № 3. Изучение алгоритма моделирования ХТП с использованием физико-химической модели на примере процесса выращивания легированных монокристаллов полупроводников класса <math>A^{III}B^V</math> методом Чохральского.....</i> | <i>16</i> |
| <i>Лабораторная работа № 4. Моделирование гидродинамической структуры однофазного технологического потока в аппарате насадочного типа.....</i>  | <i>20</i> |
| <i>Лабораторная работа № 5. Моделирование теплообменных процессов с использованием детерминированной алгебраической модели на примере проектирования многослойной футеровки электропечи .....</i>   | <i>24</i> |
| <i>Лабораторная работа № 6. Моделирование массообменных процессов с интегральным подходом на примере жидкофазной эпитаксии легированных пленок <math>n\text{-GaAs}</math> .....</i>   | <i>28</i> |
| <i>Лабораторная работа № 7. Моделирование химических превращений с использованием дифференциальной детерминированной модели на примере гидридно-хлоридной эпитаксии кремния.....</i>  | <i>32</i> |
| Приложение А .....  | 36        |
|   | 59        |

|                   |    |
|-------------------|----|
| Приложение Б..... | 37 |
| Приложение В..... | 42 |
| Приложение Г..... | 45 |
| Приложение Д..... | 49 |
| Приложение Е..... | 50 |
| Приложение Ж..... | 53 |
| Литература.....   | 57 |

Учебное издание

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Составители: **Богомазова** Наталья Валентиновна  
**Алисиенок** Ольга Александровна

Редактор *Е. И. Гоман*  
Компьютерная верстка *Е. В. Ильченко*  
Дизайн обложки *П. П. Падалец*  
Корректор *Е. И. Гоман*

Подписано в печать 10.05.2019. Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Бумага офсетная. Гарнитура Times New Roman. Печать ризографическая.  
Усл. печ. л. 3,6. Уч.-изд. л. 3,7.  
Тираж 30 экз. Заказ .

Издатель и полиграфическое исполнение:  
УО «Белорусский государственный технологический университет».  
Свидетельство о государственной регистрации издателя,  
изготовителя, распространителя печатных изданий  
№ 1/227 от 20.03.2014.  
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.