Nd:YAGレーザー第4高調波によるシリコンの流水中での加工特性 — 遺伝的アルゴリズムとニューラルネットワークによる 照射条件の推定 —

黒田 孝春¹, 渡部 武弘²

¹木更津工業高等専門学校 機械工学科 (〒292-0041 千葉県木更津市清見台東2-11-1)

²千葉大学 工学部電子機械工学科 (〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-33)

Micromachining Characteristics of Silicon in Flowing Water Using Fourth-Harmonic Pulsed Nd:YAG Laser Beams - Estimation of Irradiated Conditions by Combined Method of GA and NN -

Takaharu KURODA¹ and Takehiro WATANABE²

¹Department of Mechanical Engineering, Kisarazu National College of Technology,
2-11-1 Kiyomidai Higashi, Kisarazu, Chiba 292-0041

²Department of Electronics and Mechanical Engineering, Chiba University, 1-33 Yayoi-cho, Inage-ku, Chiba 263-8522

(Received May 26, 2005)

In this paper, a new hybrid technique for estimation of irradiation parameters is proposed. Micromachining of silicon using the fourth-harmonic wavelength ($\lambda = 266$ nm, $\tau = 6$ ns) of a pulsed Nd:YAG laser beam is investigated. The silicon workpiece is irradiated while under flowing water. Based on their conditions such as the pulse energy, the focal point and the number of irradiated shots, the ablated shape and dimensions of the resulting holes are considered. First, an estimated model of the resulting shapes with the irradiation parameters are constructed by neural network. The relationship between the irradiation parameters and the resulting shapes becomes clear by using the neural network model. Furthermore, a hybrid method of a genetic algorithm and neural network to estimate the irradiation parameters for realization of any required shape is possible.

Key Words: Genetic algorithm, Neural network, Silicon, Estimation of processed shape, Fourth-harmonic pulsed Nd:YAG laser beams

1. はじめに

シリコンは半導体基板材料として広く用いられている。さらにマイクロTAS (Total Analysis Systems) やマイクロマシン材料としても微細加工が求められている。しかし、脆性材料としての加工困難性から、蒸着やエッチングに代表される光露光技術のシリコンプロセスが主流である。シリコンプロセスは加工工程が複雑であり、加工に長時間を要することから、より簡便な三次元加工技術の開発が待たれている。

レーザー加工は非接触で、微小領域にエネルギーを集光し、かつ、短時間での加工が可能となる。これまで、フォトンエネルギーが大きく、短パルスの利点を活かしたレーザーアブレーション加工に関する研究が多く行われていた。特に、Kruusing¹⁾は最近の120以上の文献を紹介している。しかし、これらの研究の内、シリコン加工は静水中のものが主であり、流水雰囲気でのYAGレー

ザーを用いた加工特性やメカニズム解明に関する研究は少ない。

一方、入力変数より出力関数を求めるニューラルネットワーク (NN) や遺伝的アルゴリズム (GA) などの知能的なモデルが提案されている。NNを用いた例には、音響や研削力の信号から研削作業の異常診断の実現²⁾がある。さらに、NNのニューロン数や重み係数などのネットワークパラメータをGAで最適化する例³⁾もある。また、レーザー光の加工条件と発色現象の関係をNNで構築し、それを用いた総当り法の逆解析によって発色を制御する方法⁴⁾の提案などもある。

本研究は、流水中でのシリコンウエハ表面にNd:YAGレーザー第4高調波を照射し、その照射条件と加工形状との関係を実験的に求め⁵⁾、その関係をNNによって学習させた。さらに、学習したNNとGAを適用することによって、目標の加工形状を実現する照射条件を推定する逆解析の手法を提案した。

2. 実験装置と実験条件

Fig. 1に実験で使用した装置の概観を示す。Nd:YAGレーザー発振器はLumonics社製YM-200で、非線形光学素子を用いて発生させた第4高調波($\lambda=266\text{ nm}$, $\tau=6\text{ ns}$)レーザー光を使用した。照射エネルギー強度の調整は入力電圧とアッテネータで調整し、マスクとピンホールによってビーム形状を整形した。更にビーム径を小さくするためにビームエキスパンダーと焦点距離40mmの集光レンズを用いた。ポリイミドフィルムへの大気中での照射実験より得られた焦点位置でのスポット径は約 $25\text{ }\mu\text{m}$ であった。試料は板厚0.6mmのシリコンウエハで、水平に保持した上面へレーザー光を照射した。試料が水平に保持されている容器内の容積は8.0mlであり、粒子状生成物の除去のため約17ml/sの蒸留水を循環供給できる構造とした。集光されたレーザー光は容器の上方より板厚3.0mmの透明な熔融石英ガラス窓と水深3.8mmの蒸留水を透過した後、試料表面に照射される。

石英ガラスと蒸留水の透過率は紫外可視分光光度計による大気中での測定から、波長 $\lambda=266\text{ nm}$ において91%と99%以上であった。照射実験における水中でのターゲット上のレーザー強度はこれらの透過率によって補正した値を示す。照射エネルギーは加工前後においてジュールメータで直接実測した。

実験条件をTable1に示す。照射条件として、単位パルス当たりの照射エネルギー、焦点はずし量と照射パルス

Fig. 1 Schematic illustration of experimental setup for laser micromachining.

Table1 Experimental conditions.

Thickness of T.P. (mm)	0.6
Wavelength (nm)	266
Water flow (ml/s)	17
Pulse duration (nm)	6
Pulse repetition rate (pps)	1,10
Number of pulses	5~200
Pulse energy ($\mu\text{ J/pulses}$)	4.6~29
Focal length (mm)	40
Defocused length (mm)	+0.00~-0.67
Diameter of original beam (mm)	4.2
Diameter of mask (mm)	0.4
Diameter of Pinhole ($\mu\text{ m}$)	200

数を変化させた。ここで、焦点はずし量は石英ガラスと水の屈折率により補正して求めた水中のレーザー焦点位置と試料表面との距離であり、焦点位置を試料表面の下側(内部)をマイナスと定義した。

焦点位置を試料表面に固定したまま、パルスエネルギー $14\text{ }\mu\text{J/P}$ で50パルス照射後のシリコン表面におけるSEM観察画像例をFig. 2に示す。流水中でレーザー照射することによって、シリコン表面にはデブリなどの再付着物がほとんど見られない表面品位の高い加工の実現が確認できる。

加工後の加工径と加工深さはレーザー顕微鏡で観察・計測したが、Fig. 3に照射エネルギーと焦点はずし量をパラメータとし、10パルス照射後に得られた加工形状の結果を示す。ここで、パルスエネルギー毎に、焦点はずし量を $-0.67\sim 0.00\text{ mm}$ の範囲で変化させた。全体的には、焦点はずし量が大きくなるにつれて、加工深さは減少し、加工径が増大する傾向が見られた。同図より、加工径は $25\sim 60\text{ }\mu\text{m}$ 、加工深さでは $1.5\sim 7.5\text{ }\mu\text{m}$ の範囲の形状になっていることがわかる。また、 $E=4.6\text{ }\mu\text{J/P}$ の照射エネルギーでは加工しきい値に近く、加工形状は不安定であった。

Fig. 2 SEM image of the Si after FHG-YAG laser processing in flowing water.

Fig. 3 The processed shape range at 10 pulses irradiation.

3. 加工形状推定NNの構築

3.1 NNの構成

レーザー照射条件の加工形状に関するNNを構築した。Fig. 4に照射条件と加工形状間の入出力の因果関係を反映したNNを示す。入力層のユニット数は、パルス照射エネルギー(X_1)、焦点はずし量(X_2)と照射回数(X_3)の3個、中間層のユニット数(H_M)はM個、出力層のユニット数は推定加工径(Y_1)と推定加工深さ(Y_2)の2個による三層の階層型構造とした。中間層と出力層のユニットには準線形飽和型応答特性を有するシグモイド関数を用いた。

ここで、中間層のユニット数の決定法は、様々な方法が提案されているが決定的な方法は無く、経験的に決定されていることが多い。そこで本研究においては、中間層のユニット数について演算時間と学習誤差の両面から検討した。

以上のNN構成によって、出力層から得られる推定形状(Y_1, Y_2)は式(1)となる。

$$Y_k = f\left(\sum V_{kj} H_j + \beta_k\right) = f\left(\sum V_{kj} f\left(\sum W_{ji} X_i + \alpha_j\right)\right) \quad (1)$$

ここで、 W_{ji} は入力層と中間層の結合係数、 α_j は中間層のオフセット、 V_{kj} は中間層と出力層の結合係数、 β_k は出力層のオフセットであり、傾き u のシグモイド関数は式(2)となる。

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-ux)} \quad (2)$$

NNの学習は、照射実験より得られた加工形状の教師用データ(Z_k)と推定形状の差の二乗和である誤差関数 E が最小化するように結合係数とオフセットを更新した。この更新はバックプロパゲーション法を用いた。

$$E = \frac{1}{2} \left(\sum_p \left(\sum_k (Y_k - Z_k)^2 \right) \right) \quad (3)$$

ここで、 p は学習に用いたパターン数である。

3.2 NNによる学習と加工形状推定の評価

学習パターン60組を用いて、中間層のユニット数を3個から30個まで変化させた時の誤差関数と演算時間の関係をFig. 5に示す。NNは2万回の繰り返し学習としたが、学習後の誤差関数はほぼ一定値に収束した。同図より、中

Fig. 4 Neural network between the Irradiation conditions of laser beam and ablated shape.

Fig. 5 Error function and calculation time vs. number of hidden layer.

間層のユニット数の増加につれて、演算時間は比例的に増加し、誤差関数は累乗関数的に減少し、20個以上ではほぼ一定となることがわかった。以降、学習の中間層として20個のユニット数を用いた。ここで、Celeron(R) 1.70 GHzのMPUのコンピュータでの計算時間と収束した誤差関数の値は、それぞれ約22 sと約0.04 μm^2 とであった。

学習後のNNによって推定された加工形状と教師用データ(実験データ)との比較例として、照射エネルギーに対する加工深さの関係をFig. 6、焦点はずし量と加工深さの関係をFig. 7に示す。図中の各点は実験データ点であり、曲線は推定形状を示す。これらの図より、推定形状は離散的な実験データをほぼ包含し、さらに、照射条件と加工形状の非線形な関係を表現していることがわかる。

4. GAとNNを併用した照射条件の推定

本節では、前節で構築したNNモデルを利用して、目標となる加工形状を実現するための照射条件を求める逆解析の手法を提案する。NNの入出力の関係を単なる代数式として、出力から入力を推定する逆解析を実現した報告⁴⁾がある。この報告では、物理的な因果関係を示す代数方程式を求められない場合には適用できない。

そこで本研究では、入力の照射条件により得られた出力

Fig. 6 Relationship between pulse energy and ablated depth in various defocuses.

Fig. 7 Relationship between defocus and ablated depth in various defocuses.

としての加工形状が決定されるような因果関係を保ちながら、逆解析を可能とする手法としてGAとNNを併用するアルゴリズムを提案する。

GAは、自然界での環境に適応した個体が高い確率で生存する進化の過程にヒントを得た探索法である。したがって、多点探索による最適化手法で、離散的でローカルミニマムの存在する問題に有効であり、パラメータ推定に適切なものといえる。

Fig. 8はGAと学習済みのNNモデルを併用した照射条件推定モデルの概念図である。まず、3つの照射条件がとり得る範囲内で不規則に散らばるN組の初期個体群を乱数的に発生させる。次に、前節で学習済みのNNモデルによって推定されるN組の加工形状を求める。なお、求めるべきパラメータは実数であるから実数型表現の遺伝子を用いた。それらの個体の目標形状に対する適応度としての評価関数を求め、適応度の低いものを淘汰する。適応度の評価には、評価関数があらかじめ定めたしきい値以下のものを淘汰するエリート保存方式を用いた。単純なエ

Fig. 8 Flowchart of the optimization using GA and NN-model.

リート方式ではローカルミニマムに陥る恐れがあるため、突然変異率はある程度高い値にした。また、実数型に適応し易い交叉方法として、両親の平均値を子の値とするブレンド交叉を用いた。N組の個体において、評価関数値が十分に小さくなるまで世代交代を繰り返すことによって、目標形状を実現する照射条件値に収束できる。本アルゴリズムによって、短時間にパラメータが収束させられれば、目標形状を入力とし、照射条件を出力とする逆解析推定が可能となる。

ここで、照射条件の推定精度には適応度を評価する評価関数の定義が重要である。そこで本報では、以下のような2つの評価関数を定義し、比較検討した。まず、推定形状の目標形状からの誤差(加工径の誤差: ΔD , 加工深さの誤差: ΔH)の二次形式(分散型)の評価関数 E_V と一次形式(偏差型)の評価関数 E_S を定義した。

$$E_V = w_1 \Delta D^2 + w_2 \Delta H^2 \quad (4)$$

$$E_S = w_1 \sqrt{\Delta D^2} + w_2 \sqrt{\Delta H^2} \quad (5)$$

ここで、 w_1 と w_2 は加工径と加工深さの重み係数である。具体的なパラメータ推定としては、まず、目標形状(加工径 D_C , 加工深さ H_C)を与え、 $N=400$ 組の初期個体を乱数発生させ、50世代の繰り返し計算を行なった。ここで、初期パラメータは乱数によって発生させられるため、推定パラメータ値は推定毎に異なる。この推定パラメータの変動を比較するため、推定を50回繰り返し、それらの推定における最大値と最小値の差を推定のばらつきとして比較した結果をFig. 9に示す。横軸は重み係数比($w_1=1$ に対する w_2 の比)であり、縦軸は推定加工径と推定加工深さのばらつきを示している。いずれの評価関数においても重み係数比が小さい場合、すなわち、加工径の重みが大きい場合には推定加工径の変動が小さい。逆に、重み係数比が大きく、加工深さの重みが大きい場合には推定加工深さの変動が小さくなる傾向が見られる。さらに、いずれの評価関数においても、ある重み係数の範囲において推定値の変動幅が小さく、パラメータ推定値が安定する範囲があることが分かった。これらの結果より、いずれの評価関数でも照射条件の推定が可能であり、推定形状の変動幅も小さく抑える重み係数が存在することが明らかとなった。実際の推定にあたっては、照射実験から得られている情報として、照射条件の変動に対する加工径の変動感度は加工深さに比べて小さいこと、かつ、加工深さはオーダー的に小さいことを考慮して、相対的に加工深さの推定精度を重視する必要がある。

以上の結果より、パラメータの推定値変動幅が小さく、演算時間が少ないことから、評価関数としては分散型の E_V を使い、重み係数比は加工深さの変動幅が最も小さくなる $w_2/w_1=5$ を用いることとした。

各目標形状に対する評価関数の世代変化をFig. 10に示す。加工径25 μm において加工深さ3 μm と4 μm は20世代程度で評価関数がほぼ0に収束するのにに対し、加工深さが1 μm と6 μm では100世代でも収束せず照射条件の推定が十分

Fig. 9 Comparison of the range of fluctuation with fitness functions. (a) The results of function ES based on deviation. (b) The results of function EV based on variance.

Fig. 10 Generation change of fitness EV for various shapes.

でないことがわかる。ここで、照射条件推定の可否は、NNによる学習に用いた加工可能範囲に関連しているものと思われるが、100世代程度の繰り返しで、推定の可否が判断でき、評価関数の値が $10^{-3} \mu\text{m}^2$ オーダー以下に収束した場合には照射条件の推定が十分であることがわかった。また、500組の個体で100世代の演算に要する時間は約2sであり、短時間で照射条件の推定を実現できた。

目標形状に対する照射条件と加工形状の推定結果例をTable 2に示す。上段の部分は、照射パルス数を10パルスに固定し、目標形状を変化させた時の評価関数、照射条件の推定値とNNから推定される加工形状を示す。下段は、

Table2 The target shapes and estimated results by GA.

D_c μm	H_c μm	E_v μm^2	E $\mu\text{J/P}$	N pulses	def. mm	D_o μm	H_o μm
20	2.0	0.0006	5.12	10	-0.025	20.0	2.02
25	3.0	0.0001	6.88	10	-0.121	24.9	3.01
25	5.0	0.0036	8.30	10	-0.006	25.0	4.98
30	3.0	0.0004	8.25	10	-0.223	30.0	3.00
30	5.0	0.0001	13.47	10	-0.128	30.2	5.07
35	2.0	0.0001	7.48	10	-0.356	35.0	1.96
35	3.0	0.0006	8.86	10	-0.339	34.9	3.00
30	5.0	0.0020	19.00	11	-0.068	30.0	4.92
30	5.0	0.0008	7.50	15	-0.247	30.0	4.98
30	5.0	0.0012	7.60	34	-0.452	30.2	4.98

同一目標形状における同様の推定結果を示している。いずれの結果も評価関数が $10^{-3} \mu\text{m}^2$ 以下であり、推定された照射条件から予測される加工形状と目標形状との差が小さい。さらに、本手法では照射条件によって加工形状が定まる因果関係を維持しているため、同一目標形状に対する複数の照射条件解を得ることができることも明らかとなった。

5. まとめ

Nd:YAGレーザーの第4高調波による流水中でのシリコン加工において、目標形状を実現するための照射条件を推定する逆解析の方法について検討した。その結果、得られた主な結果を以下に示す。

- 1) NNモデルを構築することによって、照射条件から加工形状の推定を可能とし、より広範囲な照射条件における加工形状の推定を可能とした。
- 2) GAと学習済のNNを併用することによって、目標とする加工形状を入力とし、照射条件を出力する方法を提案した。
- 3) 適応度の評価として、分散型と偏差型の評価関数の違いと重み係数比による推定精度を検討し、分散型の評価関数と重み係数比 $w_2/w_1 = 5$ を用いることによって、照射条件値の変動が少なく、短時間の推定を実現できた。
- 4) 100世代程度の繰り返しで、推定の可否が判断でき、評価関数の値が 10^{-3}mm^2 オーダー以下に収束した場合には照射条件の推定が十分であることを確認した。
- 5) 加工プロセスの因果関係を維持した推定手法であるために、同一目標形状を得るための照射条件として複数の解が存在することが確認できた。

参考文献

- 1) A. Kruusing: Optical and Lasers in Eng. **41** (2004) 329.
- 2) J. S. Kwak and M. K. Ha: J. Mater. Processing Techno. **147** (2004) 65.
- 3) K. Wang, H. L. Gelgele, Y. Wang, Q. Yuan, and M. Fang: Int. J. Machine Tools and Manufacture **43** (2003) 995.
- 4) 田辺 郁男, 山口 直也, 水谷 淳之介, 渡辺 哲也, 板垣 薫: 日本機械学会論文集(C) **69** (2003) 2470.
- 5) 黒田 孝春, 渡部 武弘, 松坂 壮太: レーザー研究 **32** (2005) 469.