消耗部材劣化の影響を予測する半導体CMPプロセス制御

玉 置 研 二*・金子 俊 一**

Semiconductor CMP Process Control Predicting Degradation Effect of Consumed Materials

Kenji TAMAKI* and Shun'ichi KANEKO**

This paper describes a methodology to build a virtual metrology (VM) model for semiconductor chemical mechanical polishing (CMP) process control. The VM model predicts the polishing rate based on equipment-derived data as soon as allowed, and immediately applies the results to advanced process control (APC). The proposed methodology uses Markov chain Monte Carlo (MCMC) methods to build an analytical model with many parameters for individual consumed materials from historical data in small quantities. The mutual interference of two kinds of consumed materials: dresser and pad are modeled in a form of multilevel predictive model. The methodology uses MCMC methods again to identify the multilevel predictive model taking into account the assumed operation of an actual manufacturing line, for instance, using preliminary test result, learning a model parameter online, and being affected by metrology lag as disturbance. The simulation results show the APC with the proposed VM model is low sensitivity to metrology lag and high precision on polishing amount control.

Key Words: semiconductor, CMP, APC, predictive control, MCMC

1. はじめに

半導体デバイスは、成膜、CMP (Chemical Mechanical Polishing)、エッチングなどの数百の工程を繰り返して、ウェハ上に回路パターンを形成することにより製造される¹⁾。微細化の進展²⁾に伴い、ウェハ加工工程のばらつきを減らすことが急務になっている。従来は、工程管理部署の専門家がばらつきを調べて製造装置のプロセス条件を変更するSPC (Statistical Process Control)を行っていた³⁾。これに加えて近年は、加工後のウェハ製品の検査履歴データから加工ばらつきを計算して、フィードバックやフィードフォワードにより自動的にプロセス条件を制御するAPC (Advanced Process Control)が用いられるようになった⁴⁾。両者を融合する方法も提案されている⁵⁾。

APCの制御量計算には、ウェハの加工検査履歴データから、装置加工効率の変動に起因するプロセス変動のトレンドを予測するために、EWMA (Exponentially Weighted Moving Average)が一般に用いられる。しかし、CMP⁶⁾のようにプ

ロセス変動が速い工程では、検査データの計測遅延が問題になる。具体的には、半導体製造ラインは、同種の製造装置をグループ化して工程を構成するジョブショップの形態を取り、加工後のウェハを洗浄してロットにまとめてから検査ショップに送り検査を行なうため、検査データの収集に遅延が生じる。装置稼働率を維持するためには、計測遅延の分だけ過去に遡った検査履歴データしか利用できないため、プロセス変動の予測精度が低下する。そこで、検査データより迅速に収集可能な製造装置関連データを検査データの代替補助に用いて、加工結果をモデルから予測する仮想計測 (Virtual Metrology) 技術が注目を集めている^{7)~9)}。プラント制御の分野では、加納がプロセス状態から製品品質を予測するソフトセンサを提案している¹⁰⁾。

製造装置関連データには、温度や圧力などのセンサ計測値の他に、劣化を表わす指標として装置内部でカウントされている消耗部材の保守交換後からの使用時間がある^{9), 11), 12)}。本稿では、消耗部材であるドレッサとパッドの劣化の影響を同時に受けるCMP工程の研磨レートを、これら消耗部材使用時間から連続的に予測するモデルを構築し、研磨量を制御する手法を提案する。提案手法は、予測モデルの形態にマルチレベルモデル¹³⁾を採用し、2種類の消耗部材劣化の干渉に起因する個体間モデルを組み込む。消耗部材の個体数だけ未知パラメータの数が増大するため、従来の最小二乗法 (Least Squares Method) による解法は困難になる。そこで、未知パラメータを条件とした予測誤差の確率分布に関して階層ベイズモデルを構築し、MCMC (Markov chain Monte Carlo) 法^{14), 15)}により事後分布からのサンプリングシミュレーショ

* (株) 日立製作所横浜研究所生産技術研究センタ
横浜市戸塚区吉田町 292

** 北海道大学大学院情報科学研究科
札幌市北区北 14 条西 9 丁目

* Manufacturing Technology Research Center, Yokohama
Research Laboratory, Hitachi, Ltd., 292 Yoshidacho,
Totsuka-ku, Yokohama

** Graduate School of Information Science and Technology,
Hokkaido University, Kita 14 Nishi 9, Kita-ku, Sapporo
(Received September 9, 2011)
(Revised April 4, 2012)

Fig. 1 Schematic flow of CMP process for fabricating an interconnect layer

ンを行ない、その点推定値から個体差パラメータを同定する手法とした。提案手法は、階層ベイズモデルを組み替えることにより、研磨レート変動の説明に必要な十分な個体差パラメータを探索するステップから、実際の製造ラインの運用を考慮した予測モデルを構築するステップまで、同じ手法を適用可能とした。製造ラインからの実データに基づくシミュレーションによって、研磨量制御の精度を評価し、提案手法の有効性を検証した。

2. 半導体 CMP 工程と APC

2.1 半導体 CMP 工程

半導体デバイスの製造工程において、ウェハ上に積層した薄膜を平坦化するために、あるいは溝に嵌め込んだ金属配線を磨き出すために、CMP は重要な役割を果たす。金属配線を形成するダマシン工程における配線の断面の変化のようすを Fig. 1 に示す。絶縁膜にビアと配線溝を食刻した後、tantalum バリア膜、copper 金属膜の順に堆積させる (Fig. 1(a) 参照)。最初に、copper 金属膜を tantalum バリア膜まで研磨する (Fig. 1(b) 参照)。このとき、バリア膜が研磨ストップの役割を果たすため、研磨終点を検出して研磨を制御することができる。つぎに、tantalum バリア膜を研磨し、バリア膜の研磨残りを防ぐために、絶縁膜も一定量研磨する (Fig. 1(c) 参照)。ここでは、研磨終点検出を使えないため、プロセス条件で設定した所定の時間だけ過剰研磨する。この過剰研磨量をシニング量と称する。シニング量が少なくない絶縁信頼性が低くなり、多いと配線抵抗が増すため、シニング量の高精度な制御が必要になる。

CMP 装置の構成を Fig. 2 に示す。研磨ヘッドに吸着保持したウェハを回転テーブル上のパッドに押し付け、スラリー (砥

Fig. 2 Schematic drawing of a CMP equipment

粒を含む研磨剤) を供給しながら、ヘッドとテーブルを回転させることにより研磨を行なう。また、ドレッサを揺動回転させることにより、パッドから目詰まりを起こした砥粒を除去するとともに目立てを行なう。ドレッサとパッドは消耗部材であり、装置保守により交換する。

ドレスによって研磨レートの維持に努めるが、その回復力は消耗部材の劣化に伴い低下する。量産ラインから収集した研磨レート変動の例を Fig. 3 に示す。縦軸の研磨レートは単位時間あたりの膜厚変化量を表わし、測定データに工程管理用の標準化係数 S を乗じることにより相対値に変換して管理している。よってグラフ縦軸の単位は、係数 S で除することにより $\times S^{-1} [\text{nm/sec}]$ としている。以後の議論ではこの単位で統一し、提案手法の相対的精度評価を可能としている。所定の枚数のウェハをまとめたロット単位に研磨を行ない、代表ウェハを抜き出して膜厚変化量を測定し、研磨レートを計算した。研磨レートは品種ごとに異なるため¹²⁾、Fig. 3 は同種のウェハのみ抜き出して研磨レートを示した。 D_i はドレッサの交換点を、 $P_{i,j}$ はパッドの交換点を示す。

ドレッサ交換後から研磨ロット数が増えるに従って研磨レートが低下し、ドレッサ交換によって回復する傾向がわかる。ドレッサの消耗によってパッドの目立て能力が低下することが原因と考えることができる。この傾向は、 D_1 から D_4 の 4 つのドレッサのすべてに認められる。一方、パッド単独の交

Fig. 3 Polishing rate transition of tantalum CMP process

Fig. 4 Polishing rate prediction by conventional methods (◆ predicted rate, ○ measured rate, $L = 5$). (a) Measurement EWMA ($\lambda = 0.5$). (b) Virtual metrology model (regression model, $\lambda = 0.2$)

Fig. 5 Schematic diagram of a proposed APC system with polishing rate predictive model for CMP thinning amount control

換点 $P_{2,2}$ において研磨レートが急低下しているが、他のパッド単独の交換点 $P_{1,2}$, $P_{3,2}$, $P_{4,2}$ では顕著な研磨レート変動は生じていない。すなわち、消耗部材の交換に伴う「個体差」が生じている。このような消耗部材の個体差に起因する研磨レート変動に対応して、研磨レートを精度良く予測するモデルを構築し、研磨量を高精度に制御する方法を提供することが課題である。

2.2 従来方式の EWMA による APC

Fig. 3 の縦軸の研磨レートは、標準研磨時間で研磨したときのシニング量と読み替えることができる。このシニング量のばらつきを低減するためには、研磨レートに基づいて研磨時間を調整すればよい。従来の APC では、研磨レートを推定するために、次式の EWMA による研磨量履歴データの平滑化方式が用いられてきた⁴⁾。

$$\hat{R}(n) = \lambda \cdot R(n-L) + (1-\lambda) \cdot \hat{R}(n-1) \quad (1)$$

ここで、 $\hat{R}$ は研磨レート予測値、 λ ($0 < \lambda < 1$) は学習ゲイン、 n は研磨順のロット番号、 L は計測遅延時間である。次回の研磨時間設定値 $\hat{T}_{polish}$ は、シニング量目標値 V^{ref} から、次式によって設定する。

$$\hat{T}_{polish}(n) = \frac{V^{ref}}{\hat{R}(n)} \quad (2)$$

EWMA による Fig. 3 の研磨レート平滑化推定結果を Fig. 4(a) に示す。学習ゲイン λ は推定誤差を最小にしかつ平滑化能力のある $\lambda = 0.5$ とした。研磨レートの急峻な低下に対して、推定遅れが発生している。特に、パッド交換点 $P_{2,2}$ 後の推定遅れが大きい。一方、Fig. 4(b) は仮想計測モデルによる研磨レート予測結果であり、次節にて説明する。

2.3 仮想計測モデルによる予測型 APC

研磨レートの推定遅れに対応するために、装置関連データから研磨レートを予測する仮想計測モデルを備えた APC システムの構成を Fig. 5 に示す⁹⁾。仮想計測モデルとしての研

磨レート予測モデルには、次式の回帰モデルを用いた。

$$\hat{R}(n) = a_0(n) + a_1 \cdot x_1(n-1) \quad (3)$$

ここで、説明変数 x_1 は装置関連データである。(3) 式の切片 a_0 および係数 a_1 は、研磨レート R と装置関連データ x_1 の履歴データから、最小二乗法によってオフラインであらかじめ定める。さらに切片 a_0 は、プロセスと予測モデルの乖離を補償するために、次式の学習をオンラインで行なう。

$$a_0(n) = a_0(n-L) + \lambda \cdot \Delta a_0(n-L) \quad (4)$$

$$\therefore \Delta a_0(n-L) = R(n-L) - \hat{R}(n-L)$$

(4) 式の切片学習は遅延学習であり、計測遅延 L は制御外乱になる。

仮想計測モデルによる Fig. 3 の研磨レート予測結果を Fig. 4(b) に示す。事前に、各種消耗部材の使用時間や装置状態のセンサ計測値からなる装置関連データの中から研磨レート変動の説明因子の探索を行ない⁹⁾、説明変数 x_1 にはドレッサ使用時間を用いた。ドレッサ使用時間は、Fig. 3 に抜き出した同種のウェハだけでなくすべての研磨ウェハに対して連続してカウントした値である。学習ゲイン λ は予測誤差最小の値を探索し $\lambda = 0.2$ とした。Fig. 4(b) は、モデル作成に利用した全データに対して予測を行なっているため、予測精度の上限としての当て嵌め精度の評価結果となっている。それでも、研磨レートの急峻な低下に対する推定遅れは改善されるが、パッド単独交換点 $P_{2,2}$ 前後で顕著な予測誤差が生じている。パッドの交換が原因で予測誤差が発生したと考えられるが、その他のパッド単独交換点では顕著な予測誤差は見られない。したがって、(3) 式の単回帰モデルを重回帰モデルに拡張し、パッドの使用時間を説明変数に含めても予測精度は改善されない。

3. 消耗部材マルチレベル予測モデル

3.1 消耗部材の個体差説明モデルとその構築法

ドレッサとパッドの 2 つの消耗部材の劣化が相互干渉する現象をモデル化するために、まず、(3) 式の予測モデルを消耗部材ごとの個体差を想定した次式の説明モデルに拡張する。

$$\begin{aligned} \hat{R}(n) &= a_0(i, j) + a_1(i, j) \cdot x_1(n-1), \\ (P_{i,j} \leq n < \min\{P_{i+1,j}, P_{i,j+1}\}) \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 i はドレッサ個体番号、 j はパッド個体番号である。モデルパラメータ a_0 、 a_1 をドレッサごとに切り替える場合の x_1 はドレッサ使用時間であり、パッドごとに切り替える場合はパッド使用時間である。

Fig. 3 の履歴データを消耗部材ごとに層別して細分化するとデータ数は少なくなり、モデルパラメータ a_0 、 a_1 の統計的同定精度は低下する。そこで、 a_0 、 a_1 を確率変数として、MCMC 法^{14), 15)}により事後分布からのサンプリングシミュレーションを行ない、その確率密度分布を評価する。

未知パラメータを条件とした予測誤差の確率分布に関して、次式の階層ベイズモデルを構築する。

$$\pi(\theta | \mathbf{R}, \mathbf{x}_1) \propto f(\mathbf{R}, \mathbf{x}_1 | \theta) \times \pi(\theta) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \therefore \mathbf{R} &= \{ R(1), \dots, R(n), \dots, R(N) \}, \\ \mathbf{x}_1 &= \{ x_1(1), \dots, x_1(n), \dots, x_1(N) \}, \\ \theta &= \{ a_0(1, 1), a_0(1, 2), \dots, a_0(4, 1), a_0(4, 2), \\ &\quad a_1(1, 1), a_1(1, 2), \dots, a_1(4, 1), a_1(4, 2), \\ &\quad \tau_0, \tau_1, \tau_R \} \end{aligned}$$

ここで、左辺の π は未知パラメータ θ の事後分布、右辺の f はデータ尤度関数、右辺の π は事前分布である。おのおのの τ は、以下に説明する分散の逆数、すなわち精度を表わす。

(6) 式のデータ尤度関数 f は、研磨レート説明誤差 ε_R のデータが分散 σ_R^2 の正規分布 N に従うと想定し、次式の同時確率を設定する。

$$f(\mathbf{R}, \mathbf{x}_1 | \theta) = \prod_{n=1}^N \sqrt{\frac{\tau_R}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\tau_R}{2} \varepsilon_R^2(n)\right) \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \therefore \varepsilon_R(n) &= R(n) - \hat{R}(n) \sim N(0, \sigma_R^2), \\ \tau_R &\equiv \frac{1}{\sigma_R^2} \end{aligned}$$

(6) 式の事前分布は、個体差パラメータ相互の独立性を仮定し、精度パラメータとの階層構造から、次式の同時事前分布に分解する。

$$\begin{aligned} \pi(\theta) &= \prod_{(i,j)} \pi(a_0(i, j) | \tau_0) \pi(\tau_0) \\ &\quad \cdot \prod_{(i,j)} \pi(a_1(i, j) | \tau_1) \pi(\tau_1) \cdot \pi(\tau_R) \end{aligned} \quad (8)$$

おのおのの個体差パラメータの従う事前分布は、次式の事前情報をもつ正規分布 N に設定する。

$$\begin{aligned} a_0(i, j) | \tau_0 &\sim N\left(a_{0,LS}, \frac{1}{\tau_0}\right), \\ a_1(i, j) | \tau_1 &\sim N\left(a_{1,LS}, \frac{1}{\tau_1}\right), \\ (i, j) &= (1, 1), (1, 2), (2, 1), \dots, (4, 2) \end{aligned} \quad (9)$$

MCMC 計算の収束を速く安定にするために、最小二乗法を用いて全データから算出した切片 $a_{0,LS}$ および係数 $a_{1,LS}$ を事前情報として平均に設定する。個体差パラメータのばらつきを表わす精度パラメータの従う事前分布は、次式の平坦な無情報ガンマ分布 G に設定する。

$$\begin{aligned} \tau_0 &\sim G(0.01, 0.01), \\ \tau_1 &\sim G(0.01, 0.01) \end{aligned} \quad (10)$$

研磨レート説明誤差 ε_R の精度パラメータの従う事前分布は、次式の事前情報をもつガンマ分布 G に設定する。

Fig. 6 Probability density of model parameters for individual consumed material.
 (a) Intercept $a_0(i, j)$ of regression model (i : dresser number, j : pad number).
 (b) Coefficient $a_1(i, j)$ of regression model

$$\tau_R \sim G\left(\left(\frac{\mu_{G \cdot R}}{\sigma_{G \cdot R}}\right)^2, \frac{\mu_{G \cdot R}}{\sigma_{G \cdot R}^2}\right) \quad (11)$$

$$\therefore \mu_{G \cdot R} = \sigma_{G \cdot R} = \tau_{LS} \equiv \frac{1}{\sigma_{LS}^2}$$

ここで、 $\mu_{G \cdot R}$ はガンマ分布の平均、 $\sigma_{G \cdot R}$ は標準偏差である。これらの値を定める τ_{LS} は、MCMC 計算の収束を速く安定にするために、最小二乗法を用いて全データから算出した誤差分散 σ_{LS}^2 の逆数を事前情報として用いる。

3.2 消耗部材マルチレベル予測モデルとその構築法

(5) 式の消耗部材個体差説明モデルのパラメータ a_0 , a_1 を消耗部材個体ごとに予測するために、パラメータ予測モデルを付加して、次式のマルチレベルモデル¹³⁾の形態に拡張する。

$$\begin{cases} \hat{R}(n) = a_0(n) + a_1(n) \cdot x_1(n-1), \\ \begin{cases} a_0(n) = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_2(n-1) \\ a_1(n) = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_2(n-1) \end{cases} \end{cases} \quad (12)$$

ここで、 x_2 は消耗部材の各個体の状態を表す予測因子である。また、切片パラメータ a_0 については、消耗部材切り替え後のメタパラメータ α_0 に、(4) 式の遅延学習をオンラインで適用する。

(12) 式のマルチレベル予測モデルの未知パラメータ θ についての階層ベイズモデルは次式となる。

$$\pi(\theta | \mathbf{R}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \propto f(\mathbf{R}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \theta) \times \pi(\theta) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \therefore \mathbf{R} &= \{R(1), \dots, R(n), \dots, R(N)\}, \\ \mathbf{x}_1 &= \{x_1(1), \dots, x_1(n), \dots, x_1(N)\}, \\ \mathbf{x}_2 &= \{x_2(1), \dots, x_2(n), \dots, x_2(N)\}, \\ \theta &= (\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1, \lambda, \tau_R) \end{aligned}$$

(12) 式のパラメータ予測モデルのメタパラメータが従う事前分布は、次式の正規分布 N に設定する。

$$\begin{aligned} \alpha_0 &\sim N\left(a_{0 \cdot LS}, \frac{1}{\tau_0}\right), \alpha_1 \sim N\left(0, \frac{1}{0.0001}\right), \\ \beta_0 &\sim N\left(a_{1 \cdot LS}, \frac{1}{\tau_1}\right), \beta_1 \sim N\left(0, \frac{1}{0.0001}\right) \end{aligned} \quad (14)$$

メタ係数 α_1 , β_1 の従う事前分布は、平坦な無情報正規分布

とする。一方、メタ切片 α_0 , β_0 の従う事前分布は、MCMC 計算の収束を速く安定にするために、事前情報を設定する。具体的には、最小二乗法を用いて全データから算出した切片 $a_{0 \cdot LS}$ および係数 $a_{1 \cdot LS}$ を平均に設定する。精度 τ_0 , τ_1 の従う事前分布は、前節の個体差説明モデルの分析結果から設定する。また、学習ゲイン λ の従う事前分布は、($0 < \lambda < 1$) の一様分布 U に設定する。研磨レート予測誤差 τ_R の精度パラメータの従う事前分布は、前節と同様に (11) 式の事前情報をもつガンマ分布 G に設定する。

4. モデル構築シミュレーション実験

4.1 消耗部材の個体差説明モデルの構築実験

Fig. 3 の履歴データから MCMC 法で同定した、(5) 式から (11) 式の消耗部材個体差説明モデルのパラメータ分布を **Fig. 6** に示す。説明変数 x_1 はパッド使用時間とした。それぞれ、(a) に切片 $a_0(i, j)$ の確率密度分布を、(b) に係数 $a_1(i, j)$ の確率密度分布を示す。 i はドレッサ個体番号、 j はパッド個体番号である。なお、MCMC のサンプリング回数は 100,000 から 200,000 回で、収束後の 50,000 点から事後分布を抽出した。収束は、サンプリング径路の目視、および Geweke の方法¹⁶⁾により判定した。Python への実装¹⁷⁾を用いた計算時間は、2.8GHz の PC で約 20~40 分であった。

Fig. 6(b) から、係数 a_1 の確率密度分布は $a_1(2, 2)$ と $a_1(3, 1)$ の間を除いて相互に重なり、パッド個体ごとの分布は分離していない。一方 Fig. 6(a) から、切片 a_0 の確率密度分布が他の個体と分離するパッド個体が $a_0(2, 2)$ を代表として複数存在する。ドレッサ番号 i との関係調べると、 $a_0(i, 1)$ に対して $a_0(i, 2)$ は左方の切片の値が小さくなる方向に移動している。ただし、移動幅はドレッサ番号 i ごとに異なり、 $a_0(2, 2)$ が最も大きく移動している。

Fig. 7 に、消耗部材使用時間に対する研磨レートの推移を消耗部材個体ごとに示す。Fig. 7(a) から、研磨レートはドレッサ使用時間に比例して低下していることがわかる。ただし、ドレッサ番号 $i = 2$ の個体では、ドレッサ使用時間 70 以降に研磨レートが急低下する顕著な跳躍が見られる。Fig. 7(b) から、研磨レートはパッド使用時間に比例して低下している

Fig. 7 Polishing rate transition for processing time for individual consumed material. (a) Processing time for dresser. (b) Processing time for pad

ことがわかる。ただし、その低下率はデータばらつきに対して緩慢であり、Fig. 6(b) の係数 a_1 の確率密度分布の裾が広がる原因になっている。Fig. 7(b) から、パッド使用時間に対する研磨レートの切片は、パッド個体ごとに異なることがわかる。特に、パッド番号 $(i, j) = (2, 2)$ の個体の切片が小さく、Fig. 7(a) のドレッサ番号 $i = 2$ の個体の研磨レートの跳躍、および Fig. 6(a) の切片 a_0 の確率密度分布の左方への移動と対応している。

(5) 式の研磨レート回帰式の切片 a_0 がパッド切り替えによって小さくなるのは、パッドのエージング（初回の目立て）時のドレッサの劣化度合いに原因があると想定できる。これによって、パッド個体ごとに切片が異なる現象も説明できる。

4.2 消耗部材マルチレベル予測モデルの構築実験

前節の消耗部材の個体差説明モデルの構築実験に基づき、実際の製造ラインでの運用を想定して、(12) 式のマルチレベル予測モデルを次式のように設定した。

$$\begin{aligned} \hat{R}(n) &= a_0(n) + a_1(n) \cdot x_1(n-1), \\ \begin{cases} a_0(n) &= R^{TEST}(D_i) \\ a_1(n) &= \beta_0 \end{cases} & \quad (D_i \leq n < \min\{P_{i,2}, D_{i+1}\}), \\ \begin{cases} a_0(n) &= \alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_2(P_{i,j} - 1) \\ a_1(n) &= \beta_0 + \beta_1 \cdot x_2(P_{i,j} - 1) \end{cases} & \quad (P_{i,j} \leq n < \min\{P_{i,j+1}, D_{i+1}\}, j \geq 2) \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、 x_1 はパッド使用時間、 x_2 はドレッサ使用時間である。 $x_2(P_{i,j} - 1)$ はパッド交換直前のドレッサ使用時間を表わす。 $R^{TEST}(D_i)$ は実際の運用を想定して導入したパラメータで、ドレッサ D_i 交換時の先行テスト研磨から実測した研磨レートを表わす。

消耗部材交換条件や切片学習によって予測式の切り替わる(15) 式のモデルのパラメータを、MCMC 法を用いることにより Fig. 3 の履歴データから同定した。代表例として、予測精度 τ_R の事後分布からのサンプリング経路を Fig. 8 に示す。

Fig. 8 MCMC sampling result from posterior distribution of prediction precision. (a) Sampling path. (b) Frequency distribution

独立したサンプルを得るために、10 サンプルごとに抜き取りを行なっている。前節の個体差説明モデル分析結果からの事前情報を(14) 式に設定したことにより、約 7,000 回で収束した。各モデルパラメータの値を収束後のサンプル系列の平均値から同定し、得られた予測モデルを用いて研磨レートを予測した結果を Fig. 9 に示す。Fig. 4(b) に示した従来の予測モデルでは予測できなかったパッド交換点 $P_{2,2}$ 前後を、提案するマルチレベル予測モデルでは予測できている。

4.3 他装置モデルによる制御シミュレーション実験

Fig. 9 は、モデルを作成したデータに対して予測を行なっているため、当て嵌め精度の評価結果となっている。そこで、他の研磨装置を対象に作成したモデルを標的装置に適用し、研磨レート予測精度および研磨量の制御精度を評価した。製造ラインでは、ジョブショップを構成する装置の 1 台をパイロット装置として新製品を流し、順次に他の装置に展開するため、モデルの展開可否は現実には別した評価である。

Fig. 10 に、参照となる装置から収集した研磨レートのデータを示す。Table 1 に、標的装置 (Fig. 3) と参照装置 (Fig. 10) から MCMC 法により同定した (15) 式のマルチレベル予測

Table 1 Model parameters identified from MCMC posterior distributions.
(a) Target CMP equipment. (b) Reference CMP equipment

Parameter	Mean	SD	Confidence interval	
			2.5%	97.5%
τ_R	0.033	0.005	0.030	0.042
α_0	86.1	1.1	85.4	88.2
α_1	-0.43	0.027	-0.45	-0.38
β_0	-0.10	0.03	-0.08	-0.15
β_1	8.9E-04	6.6E-04	4.5E-04	2.2E-03
λ	0.25	0.10	0.18	0.45

Parameter	Mean	SD	Confidence interval	
			2.5%	97.5%
τ_R	0.028	0.003	0.026	0.035
α_0	79.2	1.3	78.3	81.6
α_1	-0.29	0.027	-0.31	-0.23
β_0	-0.13	0.03	-0.11	-0.18
β_1	6.5E-04	6.6E-04	2.1E-04	1.9E-03
λ	0.28	0.08	0.23	0.45

Fig. 9 Polishing rate prediction by MCMC multilevel model (◆ predicted rate, ○ measured rate, $L = 5$)

Fig. 11 Polishing rate prediction by MCMC multilevel model of reference CMP equipment (◆ predicted rate, ○ measured rate, $L = 5$)

Fig. 10 Polishing rate transition of reference CMP equipment

モデルのパラメータを示す。たとえば、Table 1(a) の標的装置と Table 1(b) の参照装置の切片予測モデルのメタパラメータ α_0 , α_1 は、95% 信頼区間が互いに分離していることがわかる。

Fig. 11 に、参照装置のモデル (Table 1(b)) を標的装置に適用した場合の研磨レート予測値を示す。Fig. 9 に示した標的装置のモデル (Table 1(a)) の当て嵌め結果と比較すると、

パッド交換点 $P_{2,2}$ 直後から遅延学習 ($L = 5$) が働くまでの間に予測誤差が発生している。ドレッサ使用時間に対する参照装置のメタ係数 α_1 の絶対値が小さいためである。(13) 式の階層ベイズモデルの枠組みを利用したベイズ学習を消耗部材交換ごとに逐次行なえば、次回からは Fig. 9 と同等の精度の予測を行なえるようになる。

Fig. 12 に、研磨量制御精度のパラメータ感度の評価結果を示す。研磨量制御精度は、狙い値に対する次式の RMS (Root Mean Square) 平均二乗偏差を用いて評価した。

$$\varepsilon_{V-RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \varepsilon_V^2(n)} \quad (16)$$

$$\because \varepsilon_V(n) = V(n) - V^{ref}, V(n) = R(n) \cdot \hat{T}_{polish}(n)$$

2つの評価パラメータの中、EWMA ゲイン λ あるいは学習ゲイン λ は設計パラメータであり、APC 設計の過程で事前に最適値を設定する。一方、計測遅延 L は事前に決定することができないため、APC に対する外乱として作用する。**Table 2** に、RMS 研磨量制御偏差と最大偏差を定量的にまとめる。Fig. 12(a) の EWMA 方式は計測遅延外乱に対する感度が高く、いかなるゲイン λ に対しても制御偏差が拡大している。一方、(b) の最小二乗回帰式による仮想計測モデルでは、ゲイン λ を 0.3 程度以下に設定すれば、計測遅延外乱に対して

Fig. 12 Parameter sensitivity of RMS polishing amount error ($V^{ref} = 70$). (a) Measurement EWMA. (b) Virtual metrology model (regression model). (c) Virtual metrology model (MCMC multilevel model)

Table 2 Polishing amount error ($V^{ref} = 70$, $L = 5$)

Method	RMS	Max
EWMA	8.8 (100%)	30.1 (100%)
VM (LS model)	6.4 (72%)	18.6 (62%)
VM (ML model)	5.3 (60%)	15.6 (52%)

低感度にできる。さらに、(c) のマルチレベルモデルによる仮想計測モデルでは、外乱低感度を維持したままで、制御偏差を RMS で 60%、Max で 52% にまで削減できている。この削減幅は参照装置で作成したモデルを修正することなく適用した段階で達成しており、前述したバイズ学習を消耗部材交換ごとに逐次行なうことにより、さらに削減可能である。

5. おわりに

本稿では、半導体ウェハの CMP プロセスの研磨量ばらつきを低減する高度プロセス制御 (APC) のための仮想計測予測モデル構築手法を提案した。予測モデルは、研磨装置消耗部材の寿命に反映する累積使用時間を説明変数にした回帰式モデルを基本として、パッド交換時のエージング (初回目立て) 状態をドレッサ使用時間から予測するマルチレベルモデルの形態に拡張した。

まず、研磨レートに影響する消耗部材の個体差を説明する大量パラメータモデルを、製造ラインから収集した小量履歴データから MCMC 法を活用して構築可能にした。小量履歴データのばらつきは、確率変数としてのモデルパラメータの分布に反映される。つぎに、研磨レート説明モデルの個体差パラメータの挙動を、分布精度を考慮して分析することにより、消耗部材の相互干渉によるエージング個体差を予測するマルチレベル研磨レート予測モデルの形態を確定した。再度 MCMC 法を活用することにより、予測式の切り替えを伴う研磨制御シミュレーションを MCMC 計算の中で行ない、実ライン運用に則した予測モデルパラメータの同定を可能にした。これにより、先行テスト研磨結果の活用や学習アルゴリ

ズムの組み込みによる効果をモデリング時に考慮することが可能になった。

同定したモデルの精度を研磨量制御シミュレーションによって評価し、参照装置に対して構築したモデルを標的装置に適用した場合でも、計測遅延外乱にロバストな制御系を構築可能なことを確認した。

本稿では、同種のウェハのみ抜き出した層別データを用いて研磨レート予測モデルを構築した。小量生産のウェハ品種に対応するために、種類の異なるウェハの混在データをすべて用いて、ウェハ品種切換え時にも連続して研磨レートを予測することのできるモデルを構築することが今後の課題である。

謝辞 本研究の推進にあたり、半導体 CMP プロセスをご教示頂くとともに討論に参加して頂いたルネサスエレクトロニクス株式会社の土山洋史氏に感謝致します。

参考文献

- 1) M. Quirk and J. Serda: *Semiconductor Manufacturing Technology*, Prentice Hall (2000)
- 2) International technology roadmap for semiconductors, 2010 update, overview, <http://www.itrs.net/Links/2010ITRS/2010Update/ToPost/2010.Update.Overview.pdf> (2010)
- 3) C.J. Spanos: Statistical process control in semiconductor manufacturing, *Proc. IEEE*, **80**-6, 819/830 (1992)
- 4) J. Moyne, E. Castillo and A.M. Hurwitz: *Run-to-Run Control in Semiconductor Manufacturing*, CRC Press (2000)
- 5) 川村, 仁科, 東出, 嶋津: 半導体ウエーハ処理工程における SPC と APC の融合, 品質, **38**-3, 385/393 (2008)
- 6) S.V. Babu, S. Danyluk, M.I. Krishnan and M. Tsujimura: *Chemical-Mechanical Polishing*, Materials Research Society (2000)
- 7) P.H. Chen, S. Wu, J. Lin, F. Ko, H. Lo, J. Wang, C.H. Yu and M.S. Liang: Virtual metrology: A solution for wafer to wafer advanced process control, *Proc. 2005 International Symposium on Semiconductor Manufacturing*, 155/157 (2005)
- 8) A.A. Khan, J.R. Moyne and D.M. Tilbury: An approach for factory-wide control utilizing virtual metrology, *IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing*, **20**-4, 364/375 (2007)

- 9) K. Tamaki, N. Miyashita, H. Tsuchiyama, N. Uchida, M. Aoyagi and H. Oshita: Practical configuration of virtual metrology for Cu-CMP process control, *Proc. AEC/APC Symposium Asia 2007* (2007), Invited to *Proc. 10th European AEC/APC Conference 2010*, 45/50 (2010)
- 10) 加納 学: ソフトセンサーの構築・運用・保守, 計測と制御, **47**-11, 921/926 (2008)
- 11) H. Tsuchiyama and K. Tamaki: FDC and APC system approach to stabilize Cu CMP process in mass production line, *Proc. 2008 International Conference on Solid State Devices and Materials*, C-10-2 (2008)
- 12) N. Miyashita, K. Tamaki, H. Tsuchiyama, N. Uchida, K. Sakai and K. Yamamoto: Compensation of high-speed drift by Cu-CMP APC in continuous input of high-mix products, *Proc. 2010 International Symposium on Semiconductor Manufacturing*, 1/4 (2010)
- 13) A. Gelman and J. Hill: *Data Analysis Using Regression and Multilevel/Hierarchical Models*, Cambridge University Press (2007)
- 14) 久保拓弥: 最近のベイズ理論の進展と応用 [i] 階層ベイズモデルの基礎, 電子情報通信学会誌, **J92**-10, 881/885 (2009)
- 15) W.R. Gilks, S. Richardson and D.J. Spiegelhalter: Introducing markov chain monte carlo, *Markov Chain Monte Carlo in Practice*, 1/19, Chapman & Hall/CRC (1996)
- 16) J. Geweke: Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments, *Bayesian Statistics 4*, 169/193, Oxford University Press (1992)
- 17) A. Patil, D. Huard and C.J. Fonnesebeck: PyMC: Bayesian stochastic modelling in python, *Journal of Statistical Software*, **35**-4, 1/81 (2010)

=====

[著 者 紹 介]

玉 置 研 二 (正会員)

1961 年生. 84 年慶應義塾大学工学部電気工学科卒業. 86 年同大学院工学研究科修了. 同年 (株) 日立製作所入社. 現在, 横浜研究所生産技術研究センタ. 製造プロセス制御, 装置監視技術の研究に従事.

金 子 俊 一

1955 年生. 78 年北海道大学工学部精密工学科卒業. 80 年同大学院工学研究科修了. 東京農工大学工学部助手. 91 年同助教授. 96 年北海道大学工学部助教授. 2004 年同大学院情報科学研究科教授. ロバスト画像処理, ロボットビジョンの研究に従事. 工学博士.

=====