

基于 Logistic 回归的湿法刻蚀腔体气流场参数分析 *

王靖震^{1,2} 刘伟军¹

(¹中国科学院 沈阳自动化研究所 沈阳 110016) (²中国科学院 研究生院 北京 100049)

Analysis of Airflow Parameters of Wet Etching Chamber Based on Logistic Regression Model

WANG Jing-zhen^{1,2} LIU Wei-jun¹

(¹Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Science, Shenyang 110016, China)

(²Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

【摘要】在湿法刻蚀腔体中,为使气流场中的微颗粒物顺畅的流出刻蚀腔体,减小对晶圆片的微粒污染程度,应该避免气流场中产生涡流。针对避免在气流场中产生涡流这一问题,应用 FLUENT 仿真模拟软件,通过使用正交试验设计的方法,得到不同工艺参数情况下的湿法刻蚀腔体气流场分布情况。然后对仿真结果数据进行 Logistic 回归建模。Logistic 回归模型计算结果与仿真结果有较高的一致性。Logistic 回归模型对湿法刻蚀工艺参数的选择具有指导意义。

关键词 Logistic 回归模型 正交试验设计 湿法刻蚀 气流场

【Abstract】In the wet etching chamber, vortex need to be avoided in the airflow field so that the micro-particles in the airflow field can flow smoothly out of the wet etching chamber and then the pollution degree on the wafer surface can be reduced. For the purpose of avoiding the vortex the simulation software FLUNET and the method of orthogonal design of experiment was used to obtain the airflow field distribution of wet etching chamber under different process parameters. Then a Logistic regression model was obtained based on these airflow field simulation data. Test proven that the calculation result of the regression model is consistent with the result of simulation. So the obtained Logistic regression model can help us to select wet etching process parameters as a useful reference.

Key words Logistic Regression Model Orthogonal Design of Experiment Wet Etching Airflow Field

中图分类号:TH16, TN05 文献标识码:A

1 引言

在大规模集成电路制造业中湿法刻蚀工艺是集成电路制造的一个重要的工艺过程。湿法刻蚀的过程中,通过使用特定的溶液与需要被刻蚀的薄膜材料进行化学反应,进而除去没有被光刻胶覆盖区域的薄膜^[1]。与其它刻蚀技术相比,湿法化学刻蚀工艺的缺点主要有各向异性差,工艺控制性差,化学品处理费用高,微颗粒控制差。但其具有的显著优点,包括成本低,速度快,操作简便,对设备要求低,易于实现大批量生产等^[1-5]。湿法刻蚀工艺仍然有着广泛的应用和良好发展前景。对于湿法刻蚀后,晶圆表面上造成的微颗粒污染,目前主要靠刻蚀后的清洗工艺来去除微颗粒,但是微颗粒总是难以去除干净。所以合理选择刻蚀腔体的气流场工艺参数,使气体中微粒和溅出的刻蚀液中的微粒能够随气流顺畅的流出腔体,避免飞溅到晶圆表面,这样可以减少晶圆表面的微颗粒污染程度,有利于下一步的清洗工艺。但目前刻蚀腔体的气流场问题还没有引起足够重视,在生产中也只是简单的通过进气口与出气口的压力差来使微颗粒顺气流从出口流出。当在气流场中,尤其是晶圆片边缘上方存在向上的气体涡流时,微颗粒仍然很容易随气体涡流飞溅到晶圆片表面上,造成晶圆片表面的污染。晶圆片上的微颗粒有可能导致后续工艺失效,甚至引起之后

的接触开路^[6]。因此研究湿法刻蚀腔体内气流场的工艺参数,消除晶圆片边缘上方的气体涡流,用顺畅的气流带走微颗粒来减少晶圆片上的微颗粒污染,将有助于提高湿法刻蚀工艺性能。

工艺参数的选择,通常这意味着要进行许多的实际的物理试验,需要大量的耗费、周期长、成本高。即使是用计算机仿真模拟试验的方法,如果要考虑各个工艺参数之间的搭配和它们之间的相互影响,其需要的计算量也是相当的巨大和惊人。以对某封装工序湿法刻蚀腔体的气流场工艺参数研究为例,利用正交试验设计的方法,对试验先进行规划设计,大幅减少了需要试验的数量。再应用 FLUENT 计算流体力学仿真模拟软件,仿真模拟不同工艺参数条件下的湿法刻蚀腔体气流场情况。然后对试验结果数据采用 SPSS 统计软件进行 Logistic 回归分析。把晶圆片边缘上方是否存在气体涡流作为二分类因变量,把对气流场可能有影响的相关工艺参数作为自变量,建立工艺参数与气流场涡流之间关系的数学模型,并以此数学模型来指导以后的湿法刻蚀腔体工艺参数的选择。

2 湿法刻蚀腔体结构与气流场仿真

腔体是湿法刻蚀腔体和刻蚀后清洗腔体合成后成为一个的共用腔体。如图 1 所示,由于腔体为轴对称结构,这里只显示了一半剖面图。

* 来稿日期:2011-08-15 * 基金项目:国家科技重大专项极大规模集成电路制造装备及成套工艺资助项目(2009ZX02008-003)

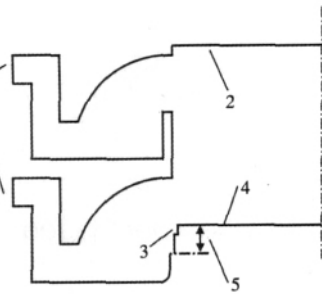


图 1 湿法刻蚀腔体的二维轴对称剖面示意图
1.出口 2.上进气口 3.晶圆下方进气口
4.晶圆片 5.晶圆距离入口高度

腔体上半部分用来进行湿法刻蚀后清洗，腔体下半部分用来进行湿法刻蚀。对于湿法刻蚀工艺来说，可能对刻蚀腔体气流场有影响的工艺参数变量预先估计有： X_1 上进气口与出气口压强差， X_2 晶圆下方进气口风速， X_3 晶圆距离入口高度。 X_1 上进气口与出气口压强差用来促使气流从上至下流动。 X_2 晶圆下进气口风速用来防止晶圆上表面的刻蚀液体流到晶圆背面导致的晶圆背面被腐蚀损伤以及应用伯努利原理来吸附晶圆片。 X_3 晶圆距离入口高度可调，高度的不同可能会对气流场产生不同的影响。根据实际中经验，晶圆距离入口高度在最上和最下位置附近会对气流造成不利影响所以应该避免极限位置。

应用的 FLUENT 软件是目前应用面最广，影响面最大的商业计算流体力学分析软件，其应用的可靠性已经为众多应用所检验。适合作为刻蚀腔体气流场分析研究的仿真模拟工具。应用计算流体力学仿真模拟技术对刻蚀腔体的工艺过程进行仿真，可以比较直观的了解工艺参数对刻蚀腔体气流场的影响情况，并且周期短，成本低。湿法刻蚀腔体有涡流时的气流场分布和湿法刻蚀腔体无涡流时的气流场分布举例，如图 2、图 3 所示。从图 2 可以看出晶圆片边缘上方有明显的涡流，会使晶圆片表面容易受到杂质微颗粒的污染。从图 3 可以看出气流流动明显比较顺畅没有涡流。

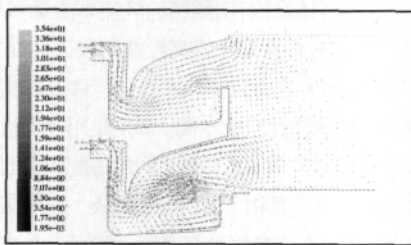


图 2 湿法刻蚀腔体有涡流时的气流场分布

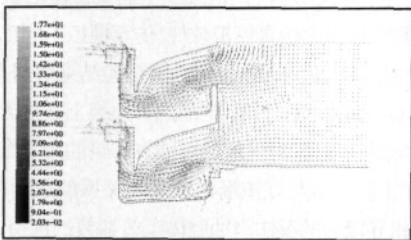


图 3 湿法刻蚀腔体无涡流时的气流场分布

3 Logistic 回归分析与试验设计

3.1 Logistic 回归分析理论

在湿法刻蚀腔体气流场有无涡流与各个工艺参数变量之间

关系的分析中。我们不仅需要了解它们之间定性的关系还需要知道定量的关系。对于定量分析研究，线性回归模型分析是应用最广泛的统计分析方法，但是当因变量是一个二分类变量时线性回归就不适用了^[7]。比如，湿法刻蚀腔体气流场分布无涡流情况(因变量 $y=1$)和有涡流情况(因变量 $y=0$)。此时就要用到非线性回归模型进行分析。通常用到的是 Logistic 回归模型。Logistic 模型的累积分布函数如下：
$$P(y=1|x) = P[\varepsilon \leq (\alpha + \beta x)] = \frac{1}{1 + e^{-(\alpha + \beta x)}} \quad (1)$$

该函数称为 Logistic 函数，具有 S 型的分布。这里 ε 被定义为一列影响事件发生概率的因素的线性函数，即 $\varepsilon = \alpha + \beta x$ (2)

式中： x —自变量， α, β —回归截距和回归系数。将事件发生的条件概率标注为 $P(y=1|x) = P$ ，得到下列 Logistic 回归模型：

$$P = \frac{1}{1 + e^{-(\alpha + \beta x)}} \quad (3)$$

定义不发生事件的条件概率为：

$$1 - P = 1 - \left(\frac{e^{\alpha + \beta x}}{1 + e^{\alpha + \beta x}} \right) = \frac{1}{1 + e^{\alpha + \beta x}} \quad (4)$$

将事件发生概率与事件不发生概率之比取自然对数就能得到如下的线性函数 $\ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = \alpha + \beta x$ (5)

上式将 Logistic 函数做了自然对数转换，记为 $\text{logit}(y)$ 。 $\text{logit}(y)$ 对其参数而言是线性的，并且依赖于 x 的取值。于是可以利用线性回归模型的性质。当有 k 个自变量时，公式可以变为：

$$P = \frac{e^{\alpha + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i}}{1 + e^{\alpha + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i}} = \frac{1}{1 + e^{-(\alpha + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i)}} \quad (6)$$

于是相应的 Logistic 回归模型将有下列式：

$$\ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = \alpha + \sum_{k=1}^k \beta_k x_k \quad (7)$$

3.2 正交试验设计

回归分析是在试验数据的基础上进行的。对于影响湿法刻蚀腔体气流场的三个可能的因素来说，它们有可能单独起作用，也可能相互制约。如果要全面的进行试验，试验数目会非常多。正交试验设计是一种研究多因素多水平的试验设计方法，它是根据正交性按正交表从全面试验中挑选出部分有代表性的点进行试验，这些有代表性的点具备了均匀分散，齐整可比的特点，是一种高效率、快速、经济的实验设计方法。采用三因素二次正交试验设计方法，按正交表格求得二分类因变量 y 在相应自变量 X_1 上进气口与出气口压强差， X_2 下进气口风速， X_3 晶圆距离入口高度取不同值情况下的仿真试验数据。然后对所得试验数据用 Logistic 回归分析方法的求得它们之间的数学模型。经过正交试验设计后，用 Logistic 回归分析方法将会得到的三因素二次模型如下式所示：

$$y = \ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = \beta_0 + \sum_{j=1}^3 \beta_j X_j + \sum_{k=1}^2 \sum_{j=k+1}^3 \beta_{kj} X_k X_j + \sum_{j=1}^3 \beta_{jj} X_j^2 \quad (8)$$

式中 $\beta_0, \beta_j, \beta_{kj}, \beta_{jj}$ —零次、一次、交互和二次项的系数； X_j —各因素的水平值，用 X_{1j} 和 X_{2j} 来表示 X_j 的下限和上限，分别称为因素的下水平、上水平。为了得到二次正交试验设计表，还需要对 X_j 进行编码，即是对 X_j 的试验水平 X_{0j}, X_{1j} 和 X_{2j} 进行正交线性变换。

$$X_{0j} = \frac{1}{2} (X_{1j} + X_{2j}), \quad \Delta_j = \frac{1}{3} (X_{2j} - X_{1j}) \quad (9)(10)$$

式中 $X_{0j} - X_j$ 的基准水平(CK) $\Delta_j - X_j$ 的变化范围。

$$\text{设 } Z_{kj} = \frac{X_{kj} - X_{0j}}{\Delta_j} \quad k=1, 2, 3 \quad j=1, 2, 3 \quad (11)$$

$$Z'_{ij} = Z_{ij} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Z_{ij}^2 \quad (12)$$

$$\text{确定星号臂 } r^2 \text{ 长度 } r^2 = \frac{\sqrt{(m_c + 2p + m_0)m_c} - m_c}{2} = 1.477$$

式中 $r=1.215$ m_0 —各因素都取零水平的中心试验的重复次数, 这里为 1 p —因素个数, 这里为 3 m_c —二水平全因素试验的试验次数为 $2^p=8$ 。

确定湿法刻蚀工艺参数的变化范围, 根据变化范围确定试验点。三因素水平编码表, 如表 1 所示。所得到的二次正交试验设计表, 如表 2 所示。

表 1 三因素水平编码表

水平	因素		
	上进口气与下出口气口压强差 X_1 (Pa)	下进口气口风速 X_2 (m/s)	X_3 晶圆距离入口高度 X_3 (mm)
上星号臂(+1.215)	382.25	21.07	25.29
上水平(+1)	350	20	24
零水平(CK)	200	15	18
下水平(-1)	50	10	12
下星号臂(-1.215)	17.75	8.93	10.71
变化间距 Δ_j	150	5	6

表 2 二次正交试验设计表

试验号	Z_0	Z_1	Z_2	Z_3	Z_1Z_2	Z_1Z_3	Z_2Z_3	Z'_1	Z'_2	Z'_3	y
1	1	1	1	1	1	1	1	0.27	0.27	0.27	1
2	1	1	1	-1	1	-1	-1	0.27	0.27	0.27	1
3	1	1	-1	1	-1	1	-1	0.27	0.27	0.27	1
4	1	1	-1	-1	-1	-1	1	0.27	0.27	0.27	1
5	1	-1	1	1	-1	-1	1	0.27	0.27	0.27	0
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	0.27	0.27	0.27	0
7	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0.27	0.27	0.27	1
8	1	-1	-1	-1	1	1	1	0.27	0.27	0.27	0
9	1	1.215	0	0	0	0	0	0.746	-0.73	-0.73	1
10	1	-1.215	0	0	0	0	0	0.746	-0.73	-0.73	0
11	1	0	1.215	0	0	0	0	-0.73	0.746	-0.73	0
12	1	0	-1.215	0	0	0	0	-0.73	0.746	-0.73	1
13	1	0	0	1.215	0	0	0	-0.73	-0.73	0.746	1
14	1	0	0	-1.215	0	0	0	-0.73	-0.73	0.746	1
15	1	0	0	0	0	0	0	-0.73	-0.73	-0.73	1

4 试验结果分析

4.1 数据的 Logistic 回归分析

针对上述数据, 应用 SPSS 统计软件, 用 Logistic 回归分析的方法进行数据处理, 建立回归模型为下式:

$$y = \ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = 18.455 + 48.57Z_1 - 30.115Z_2 \quad (13)$$

SPSS 统计软件输出的分类表, 如表 3 所示

表 3 分类表

已观测值	已预测		正确百分比
	0.00	1.00	
0.00	4	1	80.0
1.00	0	10	100.0
总计百分比			93.3

根据 SPSS 统计软件输出的 Logistic 回归模型卡方统计性检验, 模型卡方统计检验值 X^2 为 16.322, 对应的显著水平为 Sig.<0.001, 可见 Logistic 回归模型卡方统计性显著, 可以认为所得到的

Logistic 回归模型自变量能对因变量进行很好的解释。将式

(11)和式(12)代入式(13)得到用自变量 X_j 表示的回归方程:

$$y = \ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = 44.04 + 0.3238X_1 - 6.023X_2 \quad (14)$$

$$P = \frac{1}{1 + e^{-((44.04 + 0.3238X_1 - 6.023X_2))}} \quad (15)$$

4.2 Logistic 回归模型验证

为了验证回归模型的有效性, 再进行一次仿真模拟试验, 将仿真模拟结果与回归方程计算结果作对比分析。分别的 X_1 选取为 250Pa 和 X_2 选取为 20m/s, X_3 任意取值, 这里选取为 12mm。代入式得 $P = \frac{1}{1 + e^{-((44.04 + 0.3238 \times 250 - 6.023 \times 20))}} = 98.985\%$

式中 $P=98.985\%$ 说明湿法刻蚀腔体气流场模型无涡流的概率为 98.98%, 应该判断湿法刻蚀腔体气流场无涡流。参数分别取 X_1 为 250Pa 和 X_2 为 20m/s 时, 如图 4 所示。

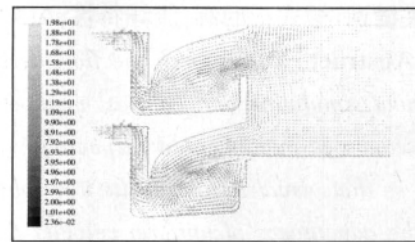


图 4 湿法刻蚀腔体气流场分布仿真验证图

5 结论

(1)由 Logistic 回归模型即式(13), 可以知道湿法刻蚀腔体气流场工艺参数 X_3 即晶圆片距离入口高度对腔体气流场在晶圆片边缘上方是否有气体涡流的影响很小, 可以被忽略。各工艺参数之间的交互作用对腔体气流场在晶圆片边缘上方是否有气体涡流的影响也可以被忽略。(2)由 Logistic 回归模型即式(14), 可以知道湿法刻蚀腔体气流场工艺参数 X_1 即上进口气和出口气口压强差, 和工艺参数 X_2 即下进口气口风速对腔体气流场在晶圆片边缘上方是否有气体涡流有显著影响。具体定量关系如模型式所表达。(3)给出了一种湿法刻蚀腔体气流场分析的新的方法。所建立的 Logistic 回归模型计算结果与仿真结果有较高的一致性, 对湿法刻蚀腔体气流场工艺参数的选择具有一定的指导意义。这一分析方法对集成电路工业的其他类似工艺腔体的气流场分析也有积极的借鉴作用。

参考文献

- [1] 关旭东. 硅集成电路工艺基础[M]. 修订版. 北京: 北京大学出版社, 2005.
- [2] Sarro P, Brida D, Vlist W et al. Effect of surfactant on surface quality of silicon microstructures etched in saturated TMAHW solutions[J]. Sensors and Actuators A: Physical, 2000, 85(1-3): 340-345.
- [3] Sullivan P, Offord B, Aklufi M. Tetra-Methyl Ammonium Hydroxide (TMAH) Preferential Etching for Infrared Pixel Arrays [M]. Citeseer, 2000.
- [4] 罗元, 李向东, 付红桥. MEMS 工艺中 TMAH 湿法刻蚀的研究[J]. 半导体光电, 2003, 24(2): 127-130.
- [5] 孙大伟, 陈波. 单片湿法刻蚀机供酸管路系统设计[J]. 电子工业专用设备, 2009(10): 30-33.
- [6] 张正荣, 詹扬, 汪辉. 一种多晶硅掩膜层湿法去除的改进研究[J]. 半导体技术, 2007, 32(12): 1045-1048.
- [7] 王济川, 郭志刚. Logistic 回归模型——方法与应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.