

流体可視化と機械学習を用いた成膜プロセスの膜厚予測モデル

Model for Prediction of Film Thickness in Deposition Processes Using Fluid Visualization and Machine Learning Techniques

流体可視化で取得したデータから膜厚予測モデルを構築し、膜厚分布を制御して成膜プロセスの安定化に活用

成膜プロセスは、電池や半導体など様々な製品の製造に使用されており、品質向上のために、基板上的膜厚分布をリアルタイムに予測・制御することが重要です。しかし、成膜プロセスは複雑な乱流挙動を伴うので、物理モデルを用いた予測が困難です。そこで、流体可視化と画像処理技術を用いて、乱流速度場と膜厚分布の時系列データを取得し、機械学習で乱流速度場から膜厚分布を高精度かつ高速に予測するディープニューラルネットワーク(DNN)モデルを構築しました。このモデルを用いて、乱流挙動から膜厚分布をリアルタイムに予測し、気流状態にフィードバックすることで膜厚分布を制御します。

背景

基板上に薄膜形成する際に用いられる成膜プロセスでは、薄膜の膜厚分布が製品の特性や歩留まりに影響します。したがって、基板上的膜厚分布をリアルタイムに把握・制御して、薄膜品質を安定化させることが重要です。東芝は、粉体を気流により基板やシートへ輸送し、粒子を堆積させて薄膜を形成する粉体塗布装置を対象に、装置内の気流挙動からリアルタイムに膜厚分布を予測・制御する成膜CPS(サイバーフィジカルシステム)技術⁽¹⁾を開発しています。その実現には、高精度かつ高速な予測モデルが必要ですが、装置内の気流は複雑な乱流挙動を伴うため、物理モデルや線形回帰のような古典的な統計モデルによる予測は困難です。また、数値流体解析(CFD)のような数値シミュレーションは計算時間が長いため、リアルタイム予測が難しくなります。

一方で、時間・空間分解能の高い粒子画像流速計測法(PIV: Particle Image Velocimetry)をはじめ、流体可視化や画像処理技術の進展により、乱流速度場や膜厚分布に関するデジタルデータの取得が可能になりました。また、現在は第3次人工知能ブーム⁽²⁾といわれ、デジタルデータを用いて複雑な現象を高精度かつ高速に予測できる機械学習技術も大きく発展してきました。

ここでは、流体可視化と画像処理により、乱流速度場と基板上的計測点における、成膜プロセス中の噴流による膜

厚の時系列データを取得し、乱流速度場から同時刻における膜厚をリアルタイムに予測する機械学習モデルを構築しました。このモデルで予測した膜厚を気流状態にフィードバックすることで、成膜プロセスを安定化します。

流体可視化による時系列データ取得

PIVと粒子濃度計測を用いて、装置内部の乱流速度場と、基板上的の任意に選んだ三つの計測点に堆積する粒子の膜厚の時系列データを取得しました。

図1に、可視化実験によるデータ取得の概要を示します。ここでは、成膜プロセスを可視化するために、アクリル素材で作成した四角錐形状の透明容器で構成した粉体塗布装置を用いました。また、3台のレーザー光源を用いて容器上部と下部にシート状のレーザー光を照射し、容器上部の乱流速度場と容器下部の粒子濃度場を可視化しました。更に、照射断面の挙動を動画データとして取得するために、照射断面に垂直な方向に高速カメラを設置しました。

このような構成の粉体塗布装置を用いて、導入配管から容器内に粒子を混合した粉体流を流入し、基板上に粒子を成膜する塗布実験を行いました。

取得した動画データから、フレーム間の粒子の移動量を画像処理により求めることで、照射断面の378個の格子点における x 、 y 方向の速度成分の時系列データを格子点ごとに16,000個収集し、乱流速度場のデータとしました。ま

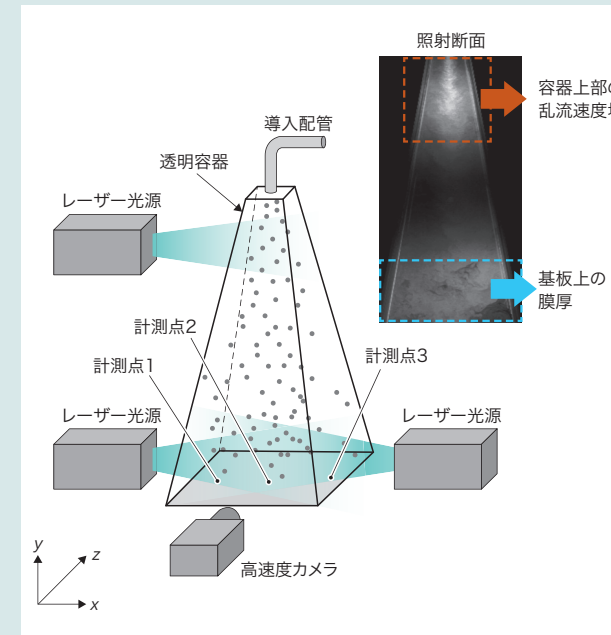


図1. 可視化実験によるデータ取得

透明な粉体装置にレーザーを照射して装置内の乱流挙動を可視化し、画像処理を用いて時系列データを取得します。

た、同一の動画データから、照射断面下部の可視化した粒子濃度場を画像処理により基板上に堆積する粒子の膜厚に変換し、乱流速度場の時刻と同期する膜厚の時系列データとして16,000個収集しました。

機械学習モデル構築

取得した16,000組の時系列データを基に、容器上部の乱流速度場から同時刻における基板上的膜厚を予測する機械学習モデルを構築しました。今回、複雑な現象に対しても適応可能なDNNモデルを採用しました。

図2(a)に示すように、入力層、中間層、出力層から構成されるDNNモデルを用いて、容器上部の乱流速度場の時系列データを入力層、基板上にある三つの計測点での同時刻における膜厚を出力層として、DNNの学習を行い、乱流速度場と膜厚の関係をモデル化しました。

図2(b)に、基板上的の任意に選んだ三つの計測点での膜厚について、実験値と予測値の時系列データを示します。相対誤差1.3%の高い予測精度が得られ、DNNモデルは非線形な挙動を示す膜厚の時系列データをよく再現することを確認しました。また、DNNモデルによる膜厚予測の計算時間は約0.1秒でした。容器上部から基板に粒子が到達するのに要する約5.0秒に対し、この計算時間は気流挙動からリアルタイムに膜厚分布を予測・制御する上で十分短いと言えます。

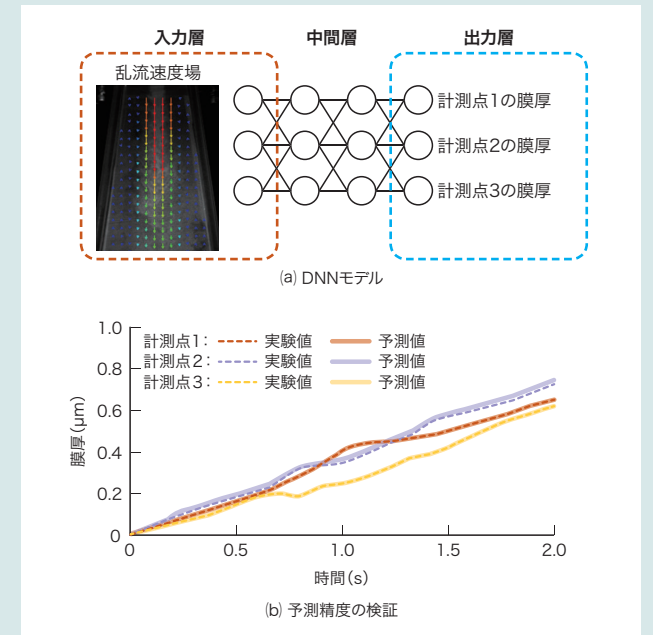


図2. DNNモデルと予測精度検証

DNNモデルにより、乱流速度場から膜厚を相対誤差1.3%で予測できることを確認しました。

今後の展望

構築したDNNモデルを用いて、短時間に高い精度で、膜厚が予測できることを確認しました。リアルタイムに予測した膜厚を気流状態にフィードバックすることで、膜厚分布を制御し、膜の品質向上を図ります。

この機械学習による予測・制御技術は、粉体塗布だけでなく、様々な成膜プロセスにも適用できます。今後は、電池や電子デバイスの製造プロセスに展開し、開発期間の短縮や、試作回数の削減、プロセス安定化・品質向上などに寄与していきます。

文献

- 坂井哲男, 織田達広, CPSを活用した製造プロセスの自律制御システム, 東芝レビュー, 2021, 76, 1, p.24-27. <<https://www.global.toshiba/content/dam/toshiba/jp/technology/corporate/review/2021/01/a07.pdf>>. (参照2023-02-20).
- 独立行政法人情報処理推進機構, AI白書2020, 株式会社角川アスキー総合研究所, 2020, 536p.

古谷 優樹

生産技術センター
製造プロセス・検査技術領域 材料・デバイスプロセス技術研究部
博士(工学) 日本機械学会・可視化情報学会会員