

半导体工艺配方获取方法、系统及半导体工艺设备

技术领域

本发明涉及半导体制造技术领域，更具体地，涉及一种半导体工艺配方获取方法、系统及半导体工艺设备。

背景技术

在微电子制造领域，等离子体刻蚀是器件加工过程中的一项重要工艺过程。例如，在晶体管分立器件中刻蚀出沟槽栅可以抑制器件的短沟道效应、解决沟道电子散射引起的迁移率降低等问题，因此晶体管分立器件正在经历从传统的平面栅向沟槽栅发展的变革，且同时适用于硅基和碳化硅基的金氧半场效晶体管（Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor, MOSFET）器件；又如，通过在晶体管分立器件中刻蚀出超级结，可以有效降低导通电阻和提升器件开关速率，由于采用横向结构的超级结的驱动电流小，市场主流产品采用垂直结构的超级结，工艺技术则由多次外延工艺向深沟槽工艺发展，因而需要使用深硅刻蚀；再如，氮化镓的高电子迁移率晶体管（High Electron Mobility Transistor, HEMT）器件中要实现常关型器件的一个方法是在栅极刻蚀出凹槽（gate recess），通过凹槽改变栅极氮化镓表面态能级，从而实现器件常关。而对于原本就需要沟槽刻蚀的分立器件，也在向高深宽比和高垂直度方向发展，如传统硅电容器件中，沟槽越深则能更加有效地利用器件空间，提升电容值；垂直度越高，则实际器件与理论模型之间就越相符，能更好地满足设计需要；再如，在先进封装中通过刻蚀硅通孔（Through Silicon Vias, TSV）结构可以提升器件性能、降低功耗和减小器件体积。

因此，半导体分立器件与先进封装等领域的发展对深硅刻蚀提出了越来越高的要求。由于硅深微结构具有较大的深宽比和较高的垂直度，传统的湿

法刻蚀很难完成，必须采用干法刻蚀的方法获得。为了获得深度较深、角度垂直的硅微结构，主要采用时间分隔的干法刻蚀工艺，即“Bosch”工艺。该过程使用等离子体诱导氟碳聚合物来提供侧壁钝化保护和氟基等离子体化学反应向下蚀刻硅，其中，侧壁钝化保护（沉积步）和氟基等离子体化学反应（刻蚀步）交替进行。由于“Bosch”工艺采用沉积和刻蚀交替进行的方式，必然会形成扇贝结构，导致侧壁粗糙度大。

一般而言，在深硅结构的顶部的扇贝尺寸最大，且侧壁最粗糙，可见明显的扇贝和横向褶皱。因此，需要想办法减小深硅结构顶部的粗糙度。除了考虑侧壁粗糙度，还经常关注刻蚀形貌（侧壁角度），这是由于深硅结构形成以后，等离子体难以钻入到深硅结构中，刻蚀后的产物也难以从深硅结构中被抽走，往往容易形成上大下小的深硅结构，此时需要通过调节工艺参数来提高等离子体的平均自由程和帮助等离子体向晶圆运动。另外，刻蚀深度、刻蚀速率、对掩膜的选择比等等也是评价深硅刻蚀效果好坏的指标，而要获得好的深硅刻蚀效果，需要对工艺参数进行优化，即调节工艺配方，目前主要由工艺人员逐一手动尝试各种配方，以确定可以满足工艺要求的配方，而这一过程往往是十分复杂低效的，且无法实现自动化。

发明内容

本发明的目的是提出一种半导体工艺配方获取方法、系统及半导体工艺设备，实现根据给定工艺需求自动获取对应的工艺配方，提高工艺配方的获取效率。

为实现上述目的，本发明提出了一种半导体工艺配方获取方法，包括：

向已构建的深度神经网络模型中随机输入工艺需要的一组工艺参数组，获得与所述工艺参数组对应的工艺结果评价指标；其中，所述工艺参数组包括多个工艺参数；所述深度神经网络模型为完成训练的多层深度神经网络，

所述深度神经网络模型包括输入层、至少一个中间层和输出层，所述输入层用于输入所述工艺参数组，所述输出层用于输出与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标；

判断各所述工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度是否符合设定要求；

若是，则使用所述工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方；

否则，根据所述工艺需求，沿所述输出层至所述输入层的方向，基于梯度算法和自洽迭代法，逐层优化各所述中间层中的特征值以及所述输入层中的各所述工艺参数的数值，直至在所述输入层中获得能够使所述深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足所述工艺需求的工艺参数组，并使用满足所述工艺需求的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

可选地，所述深度神经网络模型的构建方法包括：

根据所述工艺参数组所包括的工艺参数的个数以及与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标的个数，确定所述深度神经网络模型的层数及结构；其中，所述中间层的数量为所述工艺参数的个数与所述工艺结果评价指标的个数的差值，所述深度神经网络模型中的每层深度神经网络均包括多个神经元，沿所述输入层至所述输出层的方向，相邻深度神经网络之间依次递减一个神经元，每个神经元均与上一层深度神经网络中的所有神经元连接，每个工艺参数作为所述输入层中一个神经元的输入特征，所述中间层的每个神经元用于对上一层深度神经网络中的所有神经元的输出特征进行运算，所述输出层中每个神经元的输出特征为所述工艺结果评价指标，所述工艺参数组所包括的所述工艺参数的个数大于与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标的个数；

根据所述深度神经网络模型的层数给定所述深度神经网络模型运行的激活函数。

可选地，所述深度神经网络模型的构建方法还包括：

采用工艺数据库作为训练数据，并采用深度学习的方法训练所述深度神经网络模型，所述工艺数据库包括特定工艺的历史工艺参数数据及历史工艺结果数据；

根据所述激活函数的训练结果确定所述深度神经网络模型中每层深度神经网络的权重项和偏置项。

可选地，所述基于梯度算法和自洽迭代法逐层优化各所述中间层中的特征值以及所述输入层中的各工艺参数的数值，包括：

步骤 S1：从所述输出层中找出与所述工艺需求相差程度最大的一个工艺结果评价指标；

步骤 S2：从与所述输出层相邻的中间层中找出与相差程度最大的工艺结果评价指标相关的所述权重项的数值最大的一项工艺参数；

步骤 S3：固定所述权重项的数值最大的一项工艺参数的权重项的数值和所述偏置项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整所述权重项的数值最大的一项工艺参数的特征值，直到所述输出层中相差程度最大工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度符合设定要求；

步骤 S4：若此时其他工艺结果评价指标中存在其他与所述工艺需求的相差程度不符合设定要求的工艺结果评价指标，则重复所述步骤 S1 至所述步骤 S3，直到所述输出层中的所有工艺结果评价指标均符合所述工艺需求，同时确定出所述中间层中每一项工艺参数的特征值；

步骤 S5：基于所述步骤 S4 获得的所述中间层中每一项工艺参数的特征值，沿所述输出层至所述输入层的方向，继续采用梯度算法和自洽迭代法逐层优化其他中间层中每一项工艺参数的特征值以及所述输入层中的工艺参数的数值，直到在所述输入层中获得能够使所述深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足所述工艺需求的工艺参数组。

可选地，在所述步骤 S3 之后，还包括：判断通过所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度是否符合设定要求，若符合，则执行所述步骤 S4；若不符合，则将经过所述步骤 S3 调整优化后获得的所述权重项的数值最大的一项工艺参数固定，并执行以下步骤：

步骤 S6：从与所述输出层相邻的中间层中找出与所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标相关的所述权重项的数值次大的一项工艺参数；

步骤 S7：固定所述权重项的数值次大的一项工艺参数的权重项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整所述权重项的数值次大的一项工艺参数的特征值，直到所述输出层中所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度符合设定要求。

可选地，在所述步骤 S5 之后，还包括：

步骤 S8：若在优化调整与所述工艺结果评价指标相关的所有工艺参数之后，所述输出层中仍存在与所述工艺需求的相差程度不符合设定要求的工艺结果评价指标，则：

选取能够使各工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度的平方和最小的工艺参数组成新的工艺参数组，将所述新的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

可选地，所述梯度算法的计算公式为：

$$x_i = x_i - \theta \times (\partial y / \partial x_i)$$

其中， x_i 为中间层中被调整的工艺参数， y 为被调整的工艺结果评价指标， θ 为调整步长。

可选地，所述相差程度通过以下公式计算：

$$\Delta = |(y - y_{\text{实际}}) / y_{\text{实际}}|$$

其中， Δ 为工艺结果评价指标与设定的工艺需求的相差程度， y 为深度神经网络模型输出的工艺结果评价指标， $y_{\text{实际}}$ 为给定的工艺需求；

所述设定要求为：所述工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度在 0 至 10% 之间。

第二方面，本发明还提出一种半导体工艺配方自动获取系统，包括：

深度神经网络模型，所述深度神经网络模型构为完成训练的多层结构的深度神经网络，所述深度神经网络模型能够基于输入的工艺参数输出与所述工艺参数组对应的准确的工艺结果评价指标；

计算模块，用于执行第一方面所述的半导体工艺配方获取方法。

第三方面，本发明还提出一种半导体工艺设备，包括第二方面所述的半导体工艺配方自动获取系统。

本发明的有益效果在于：

本发明在给定工艺需求的情况下，基于已构建的深度神经网络模型，根据设定的工艺需求，沿输出层至输入层的方向，采用梯度算法和自洽迭代法逐层优化调整各中间层中的特征值及输入层的工艺参数组，直至逆推出能够使深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足工艺需求的工艺参数组，作为实际工艺的工艺配方，相较于现有人工反复调试工艺配方参数的方法，本发明能够根据工艺需求通过深度神经网络模型自动给出符合工艺需求的工艺配方参数，提高了工艺配方的获取效率，并提升刻蚀机的自动化程度。

本发明的系统具有其它的特性和优点，这些特性和优点从并入本文中的附图和随后的具体实施方式中将是显而易见的，或者将在并入本文中的附图和随后的具体实施方式中进行详细陈述，这些附图和具体实施方式共同用于解释本发明的特定原理。

附图说明

通过结合附图对本发明示例性实施例进行更详细的描述，本发明的上述以及其它目的、特征和优势将变得更加明显，在本发明示例性实施例中，相

同的参考标号通常代表相同部件。

图 1 示出了现有技术一的一种应用于光刻机深度神经网络模型的示意图。

图 2 示出了现有技术三的一种预测刻蚀工艺结果的神经网络模型的示意图。

图 3A 示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法的步骤的一种流程图。

图 3B 示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法的步骤的另一种流程图。

图 3C 示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法的步骤的又一种流程图。

图 3D 示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法的一个具体实施例的流程图。

图 4 示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法中的深度神经网络模型的示意图。

图 5 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中的具有 3 微米的特征尺寸刻蚀工艺示意图。

图 6 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中腔压对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 7 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步下电极终末功率对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 8 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步终末时间对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 9 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中沉积步终末时间对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 10 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步 SF6 进气对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 11 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中沉积步 C4F8 进气对槽刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 12 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中槽刻蚀工艺需求的 SEM 图。

图 13 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中腔压对孔刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 14 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步下电极终末功率对孔刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 15 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步终末时间对刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 16 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中沉积步终末时间对孔刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 17 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中刻蚀步 SF6 进气对孔刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 18 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中沉积步 C4F8 进气对孔刻蚀工艺结果评价指标影响示意图。

图 19 示出了本发明一个具体实施例的一种半导体工艺配方获取方法中孔刻蚀工艺需求的 SEM 图。

具体实施方式

现有技术一公开了一种应用于光刻机深度神经网络模型，该深度神经网络模型如图 1 所示。该方案基于完成深度学习的深度神经网络模型能够根据输入模型的光刻工艺参数自动输出光刻工艺结果。

深度神经网络模型为现有技术，具体而言，首先，需要定义模型的激活函数，并对输入层的参数进行线性变换： $y=f(\sum_i w_i x_i+b)$ ，其中 x_i 是输入特征向量 (feature)， w_i 是各个特征值的权重 (weight)， b 是偏置项 (bias)。这是最简单的只有一层神经网络的情况，若存在多层神经网络，则两层模型激活函数转变成 $y=g(\sum_j w_j f(\sum_i w_i x_i+b_1)+b_2)$ ，三层模型激活函数转变成 $y=h(\sum_k w_k g(\sum_j w_j f(\sum_i w_i x_i+b_1)+b_2)+b_3)$ ，以此类推。

然后，根据利用该模型的激活函数得到的输入输出值(x_i, y)与实际的数据集(x_i, y_r)之间的偏差平方和定义目标函数： $J(w_i, b)=(\sum_i w_i x_i+b-y_r)^2$ ，若存在 n 个实际的数据集($x_{i,n}, y_{r,n}$)，则需要对目标函数进行算术平均： $J(w_i, b)=(1/n) \sum_n (\sum_i w_i x_{i,n}+b-y_{r,n})^2$ 。

在神经网络模型中，对数据进行训练是一个重要环节，其主要牵涉参数的优化，目前主流的优化器主要有以下三类：随机梯度下降法、动量随机梯度下降法和 Adam 优化方法等。以随机梯度下降法举例，其算法是： $w_i = w_i - \eta \times [\partial J(w_i, b) / \partial w_i]$ ， $b = b - \eta \times [\partial J(w_i, b) / \partial b]$ 。

即对相关参数进行偏导数计算，并每次根据步长 η 和偏导数的乘积进行移动，最终稳定到目标函数获得最小值，即模型预测的数据与实际值之间的偏差最小。对于有多层神经网络的情况，可以一层一层地反向进行，使得每一层的目标函数均取最小值，即整个模型预测的数据与实际值之间的偏差都最小。

发明人经研究发现：现有技术一存在以下问题：

神经网络模型只提供正向的学习和预测，即只由工艺参数配方正向推导工艺结果，在进行正向推导时，梯度优化算法中的变量是权重值 w_i ，无法实现根据工艺需求获取工艺参数的逆向推导；且不涉及机台自动化。

光刻机对精确度要求较高，且其优化器算法较复杂（而刻蚀机等其他半导体工艺设备对精度要求相对于计算处理速度而言有一定的耐受性）。

现有技术二公开了自洽迭代方法，即在求解超越方程时无法获得解析解而只能得到数值解，在求取数值解的时候采用不断迭代的方法，最终收敛到最优解而形成自洽。

如果方程中的某个算符是未知数的函数，此时也只能采用自洽迭代方法，先给假定的一组未知数的数值，求解出算符，代入原方程得到该未知数的另一组数值解，循环往复，直至假定的未知数的数值和最后计算出的未知数的数值完全一致，即自洽，这一方法在量化计算领域求解哈特里-福克方程时得到了使用。

该方法目前并未应用到神经网络模型中，也并未应用在半导体工艺设备领域中。

现有技术三公开了一种预测刻蚀工艺结果的神经网络模型，如图2所示，发明人经研究发现：该方案仅用一层神经网络模型，属于普通神经网络而非深度神经网络，且只能预测刻蚀工艺结果，不能通过刻蚀工艺结果再反推工艺参数。

本发明可以使用软件算法根据实际工艺需求自动提供进行相关工艺（如干法刻蚀等）时的工艺配方。具体到实际应用，如用户需要得到某种特定刻蚀深度、侧壁角度、侧壁粗糙度、对掩膜选择比的深硅结构，并期望以某一特定刻蚀速率完成，则可以通过本发明方案自动给出相应的工艺参数配方，如腔压、上下电极功率、进气流量和刻蚀时间等。

下面将参照附图更详细地描述本发明。虽然附图中显示了本发明的优选实施例，然而应该理解，可以以各种形式实现本发明而不应被这里阐述的实施例所限制。相反，提供这些实施例是为了使本发明更加透彻和完整，并且能够将本发明的范围完整地传达给本领域的技术人员。

图3A至图3D示出了根据本发明实施例的一种半导体工艺配方获取方法的步骤的几种流程图。请一并参阅图3A至图3D，一种半导体工艺配方获

取方法，包括：

步骤 S101: 向已构建的深度神经网络模型中随机输入工艺需要的一组工艺参数组（包括多个工艺参数），获得与该工艺参数组对应的工艺结果评价指标；

其中，深度神经网络模型为完成训练的多层深度神经网络，该深度神经网络模型包括输入层、至少一个中间层和输出层，输入层用于输入工艺参数组，输出层用于输出与该工艺参数组对应的工艺结果评价指标。也就是说，输入层、至少一个中间层和输出层中的每一者均为一层深度神经网络。

具体地，在上述步骤 S101 之前，首先构建深度神经网络模型，如图 3B 所示，该深度神经网络模型的构建方法包括：

步骤 S201: 根据工艺参数组所包括的工艺参数的个数以及工艺参数组对应的工艺结果评价指标的个数，确定深度神经网络模型的层数及结构；

其中，深度神经网络模型包括输入层、至少一个中间层以及输出层，中间层的数量为工艺参数组中所包括的工艺参数的个数和与该工艺参数组对应的工艺结果评价指标的个数的差值，深度神经网络模型中的每层深度神经网络均包括多个神经元，沿输入层至输出层的方向，相邻深度神经网络之间依次递减一个神经元，每个神经元均与上一层深度神经网络中的所有神经元连接，每个工艺参数作为输入层中一个神经元的输入特征，中间层的每个神经元用于对上一层深度神经网络中的所有神经元的输出特征进行运算，输出层中每个神经元的输出特征为对应的工艺结果评价指标，工艺参数组中所包括的工艺参数的个数大于与该工艺参数组对应的工艺结果评价指标的个数；

步骤 S202: 根据深度神经网络模型的层数给定深度神经网络模型运行的激活函数。

本实施例的深度神经网络模型如图 4 所示。之后，可选的，该深度神经网络模型的构建方法还包括：

步骤 S203: 采用工艺数据库作为训练数据, 并采用深度学习的方法训练深度神经网络模型;

该工艺数据库包括特定工艺的历史工艺参数数据及历史工艺结果数据;

步骤 S204: 根据激活函数的训练结果确定深度神经网络模型中每层深度神经网络的权重项和偏置项, 最终完成深度神经网络模型的构建。

具体实施过程中, 对于刻蚀机等半导体领域加工机台而言, 工艺结果评价指标的个数一般少于工艺参数的个数。因此, 可以在现有技术一公开的神经网络模型构建方法的基础上, 构建本发明的深度神经网络模型:

神经网络模型的层数由输入变量数(工艺参数的个数)与输出变量数(工艺结果评价指标的个数)的差值决定, 每层深度神经网络之间递减一个中间特征变量, 如图 4 所示, 以刻蚀机为例, 若输入的工艺参数组有 6 个工艺参数, 即 6 个变量, 包括: 腔压、上电极功率、下电极功率、SF₆ 流量、O₂ 流量和刻蚀时间, 最终获得的与该工艺参数组对应的工艺结果有 3 个评价指标, 包括刻蚀深度、侧壁角度和刻蚀速率, 则构建一个具有两层中间特征变量的深度神经网络模型(三层深度神经网络)。

将平时所获得的工艺参数与工艺结果的工艺数据库用于模型的深度学习训练, 可以使用与现有技术一相类似的优化算法求得最佳的模型函数 $y=h(\sum_k w_k g(\sum_j w_j f(\sum_i w_i x_i + b_1) + b_2) + b_3)$, 即获得了工艺参数与工艺结果之间的模型关系。

对于实际问题, 在已知工艺结果/工艺需求的情况下, 需要反推出优选的工艺配方, 根据本发明的深度神经网络模型可知, 工艺结果的指标数量少于工艺配方中的工艺参数的个数, 因此该问题等价于求解不定方程, 理论上存在无穷多组解, 因此为实现快速给出最优解, 本发明采用自洽迭代的方法进行最优解的寻找。

步骤 S102: 判断各工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度

是否符合设定要求；

步骤 S103: 若是, 则使用输入的上述工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

具体地, 在步骤 S101 至步骤 S103 中, 先随机给出一组工艺参数组 (包括多个工艺参数 x_i) 作为深度神经网络模型的输入层中各神经元的输入特征, 并将深度神经网络模型输出的层输出的工艺结果评价指标 y 与工艺需求 y 实际进行比对, 如果符合设定要求, 则使用该组工艺参数组进行实际的工艺。

其中, 相差程度通过以下公式计算:

$$\Delta = |(y - y_{\text{实际}}) / y_{\text{实际}}|$$

其中, Δ 为工艺结果评价指标与设定的工艺需求的相差程度, y 为深度神经网络模型输出的工艺结果评价指标, $y_{\text{实际}}$ 为设定的工艺需求;

可选的, 设定要求为: 工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度在 0 至 10% 之间, 优选为 5%。

步骤 S104: 否则, 根据设定的工艺需求, 沿上述输出层至输入层的方向, 基于梯度算法和自洽迭代法, 逐层优化各中间层中的特征值以及输入层中的各工艺参数的数值, 直至在输入层中获得能够使上述深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足对应设定的工艺需求的工艺参数组, 并使用满足上述工艺需求的该工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

具体地, 如图 3C 所示, 基于梯度算法和自洽迭代法逐层优化各上述中间层中的特征值以及上述输入层中的工艺参数值, 包括:

步骤 S301: 从输出层中找出与对应设定的工艺需求相差程度最大的一个工艺结果评价指标;

步骤 S302: 从与输出层相邻的中间层中找出与相差程度最大的工艺结果评价指标相关的权重项的数值最大的一项工艺参数;

步骤 S303: 固定上述权重项的数值最大的一项工艺参数的权重项的数值

和偏置项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整该权重项的数值最大的一项工艺参数的特征值，直到输出层中相差程度最大工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度符合设定要求；

在步骤 S303 之后，还包括：

判断通过步骤 S303 对应调整的工艺结果评价指标与设定的工艺需求的相差程度是否符合设定要求，若符合，则执行步骤 S304；若不符合，则执行步骤 S306；

步骤 S304：若此时其他工艺结果评价指标中存在其他与对应设定的工艺需求的相差程度不符合设定要求的工艺结果评价指标，则重复步骤 S301 至步骤 S303，直到输出层中的所有工艺结果评价指标均符合对应设定的工艺需求，同时确定出中间层中每一项工艺参数的特征值；

步骤 S305：基于步骤 S304 获得的中间层中每一项工艺参数的特征值，沿输出层至输入层的方向，继续采用梯度算法和自洽迭代法逐层优化其他中间层中每一项工艺参数的特征值以及输入层中的工艺参数的数值，直到在输入层中获得能够使深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足对应设定的工艺需求的工艺参数组；

步骤 S306：将经过步骤 S303 调整优化后获得的权重项的数值最大对应的一项工艺参数固定，并执行：从与输出层相邻的中间层中找出与步骤 S303 对应调整的工艺结果评价指标相关的权重项的数值次大的一项工艺参数；

步骤 S307：固定权重项的数值次大的一项工艺参数的权重项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整权重项的数值次大的一项工艺参数的特征值，直到输出层中步骤 S303 对应调整的工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度符合设定要求。

在另一些可选的实施例中，也可以在完成步骤 S303 之后，直接执行步骤 S304，而不对通过步骤 S303 对应调整的工艺结果评价指标与设定的工艺

需求的相差程度是否符合设定要求进行判断，并且省去上述步骤 S306 和步骤 S307。

优选地，在步骤 S305 之后，还可以包括：

步骤 S308：若在优化调整与工艺结果评价指标相关的所有工艺参数之后，输出层中仍存在与对应设定的工艺需求的相差程度不符合设定要求的工艺结果评价指标，则：

选取能够使各工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度的平方和最小的工艺参数组成新的工艺参数组，将该新的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

本实施例中，梯度算法的计算公式为：

$$x_i = x_i - \theta \times (\partial y / \partial x_i)$$

其中， x_i 为中间层中被调整的工艺参数， y 为被调整的工艺结果评价指标， θ 为调整步长。

上述步骤 301 至步骤 308 在具体实施过程中，首先将深度神经网络模型输出层输出的工艺结果评价指标 y 与工艺需求 y 实际进行比对后，如果不符合设定要求，则根据输出的工艺结果评价指标 y 与工艺需求 y 实际之间的相差程度 $\Delta = |(y - y_{\text{实际}}) / y_{\text{实际}}|$ ，找出与设定工艺需求相差程度最大的一个工艺结果评价指标，并根据与该工艺结果评价指标所对应的工艺参数组的权重项的数值 w 的大小，根据梯度算法 $x_i = x_i - \theta \times (\partial y / \partial x_i)$ 调整最大权重项的数值所对应的工艺参数组中某个工艺参数 x_i ，其中 θ 是步长，如此循环往复，直至结果自洽，即达到给定工艺参数根据深度神经网络模型所得的工艺结果与工艺需求接近一致（输出的工艺结果评价指标达到设定的工艺需求的 95% 即可，可在 90% 至 100% 之间取值）。

如果将权重项的数值最大的工艺参数根据梯度算法完全遍历一遍也不能达到工艺需求，则应对经过步骤 303 调整优化后获得的权重项的数值最大

的一项工艺参数固定，并对权重项的数值次大的工艺参数的特征值进行梯度算法优化，以此类推，如果将所有工艺参数完全遍历一遍均不能达到工艺需求，则按工艺结果评价指标 y 与工艺需求 y 实际之间的相差程度 Δ 对所有工艺指标求平方和最小的工艺参数进行实际的工艺，即选取能够使各工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度的平方和最小的一组工艺参数组成新的工艺参数组，将新的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

下面以刻蚀机为例，进一步解释上述自洽迭代法求最优解的过程：

首先随机使用工艺配方中的一组工艺参数组，输入深度神经网络模型后在输出层获得工艺结果，然后在工艺结果中找出与设定工艺需求相差最大的一个工艺结果评价指标，例如，假设侧壁角度相差最大，此时需要查找上一层深度神经网络中与侧壁角度相关最大权重的一项，接下来固定该权重项的数值不变，并按梯度算法去步进调整这个权重项的数值，直至侧壁角度达到要求（如达到设定值的 95%），此时模型输出的其它的工艺结果评价指标可能也发生了变化，如果其他工艺结果评价指标也超出了设定工艺需求，则仍然按上述类似的方法对该工艺结果评价指标进行优化，直至所有的工艺结果评价指标都达到设定工艺需求，同时也获得了与工艺结果评价指标这一组值相邻的一组中间层中的工艺参数的特征值，使用相似的方法对该层中间层中工艺参数的特征值进行优化，以此类推，直至获得图 4 中最左边的输入层即工艺配方中上述工艺参数组的数据。

本发明实施例还提出一种半导体工艺配方自动获取系统，包括：

深度神经网络模型，深度神经网络模型构为完成训练的多层结构的深度神经网络，深度神经网络模型能够基于输入的工艺参数组输出与该工艺参数组对应的准确的工艺结果评价指标；

计算模块，用于执行以上实施例提供的半导体工艺配方获取方法。

本发明还提出一种半导体工艺设备，包括以上实施例的半导体工艺配方

获取系统。

本发明方案可以根据工艺需求自动由软件给出相应的工艺配方，提升刻蚀机的自动化程度。即由原来的工艺工程师根据经验输入工艺参数并反复调试进化到直接输入工艺需求，进而由软件给出相应的工艺配方。

下面通过具体实施例对本发明做进一步的解释说明。

具体实施例

将本发明应用于刻蚀机，具体工艺为实现具有3微米的特征尺寸(Critical dimension)刻蚀工艺。3微米的特征尺寸刻蚀工艺如图5所示。

该刻蚀图形需要使用 Bosch 工艺，因此，工艺参数组中的多个工艺参数 x_i 包括沉积步腔压、沉积步上电极中心功率、沉积步上电极边缘功率、沉积步中心 C4F8 流量、沉积步边缘 C4F8 流量、沉积步起始时间、沉积步起始时间、刻蚀步沉积步腔压、刻蚀步上电极中心功率、刻蚀步上电极边缘功率、刻蚀步下电极起始功率、刻蚀步下电极终末功率、刻蚀步中心 C4F8 流量、刻蚀步边缘 C4F8 流量、刻蚀步起始时间、刻蚀步终末时间；工艺评价指标 y 包括刻蚀深度、上开口尺寸、下开口尺寸、选择比、上部侧壁粗糙度（扇贝尺寸）、下部侧壁粗糙度（扇贝尺寸）等。

以槽刻蚀为例，按图 6-图 11 所示的工艺数据库对上述实施例的深度神经网络模型进行训练。

从图 6-图 11 所示的工艺数据库中训练出模型函数的权重项的数值趋势如下：

腔压对于刻蚀形貌具有较强的相关性，权重项的数值较大，终末下电极（又称偏压，Bias）功率对形貌也具有较强的相关性，权重项的数值较大。

需要说明的是，除了本实施例中自行建立工艺数据库，上述工艺数据库中的工艺趋势也已在各种文献中得以报道，因此通过查阅文献也可以建立相应的工艺数据库。

得到训练好的模型后，再通过递推迭代的方法根据图 12 所示的工艺结果反推出满足工艺需求的工艺配方，如对于刻蚀角度进行反推时，其与刻蚀终末下电极功率和刻蚀终末单步时间均有较大的关系（权重），按本发明方案会同时对该两个工艺参数进行梯度算法优化，最终得到的工艺配方如表 1 所示：

工艺步	气压 (mTorr)	上电极中心功率 (W)	上电极边缘功率 (W)	下电极功率* (W)	中心 SF ₆ 流量 (scm)	边缘 SF ₆ 流量 (scm)	中心 C ₄ F ₈ 流量 (sccm)	边缘 C ₄ F ₈ 流量 (sccm)	单步时间** (s)
沉积步	25	2000	600	1	0	0	350	50	0.8~0.4
刻蚀步	25	2000	600	100~225	150	80	0	0	1.6~2.8

*下电极功率从起始值递增至终末值

**单步时间从起始值递增至终末值

而对于孔刻蚀工艺，其过程类似，建立图 13-图 18 所示的工艺数据库对上述深度神经网络模型进行训练，得到训练好的模型后，再通过递推迭代的方法根据图 19 所示的工艺结果反推出工艺配方，如表 2 所示：

表 2 刻蚀工艺配方

工艺步	气压 (mTorr)	上电极中心功率 (W)	上电极边缘功率 (W)	下电极功率 (W)	中心 SF ₆ 流量 (scm)	边缘 SF ₆ 流量 (scm)	中心 C ₄ F ₈ 流量 (sccm)	边缘 C ₄ F ₈ 流量 (sccm)	单步时间 (s)
沉积步	40	2000	600	1	0	0	180	50	0.8
刻蚀步	40	2000	600	100	300	80	0	0	1.6

综上，使用本发明的方案能够实现在刻蚀机中根据工艺结果自动给出工艺配方，提升机台自动化率。需要说明的是，本发明不仅仅适用于刻蚀机，

针对半导体领域的其它工艺过程也可以适用，例如 PVD、CVD、炉管、清洗机等。

以上已经描述了本发明的各实施例，上述说明是示例性的，并非穷尽性的，并且也不限于所披露的各实施例。在不偏离所说明的各实施例的范围和精神的情况下，对于本技术领域的普通技术人员来说许多修改和变更都是显而易见的。

权 利 要 求 书

1、一种半导体工艺配方获取方法，其特征在于，包括：

- 向已构建的深度学习神经网络模型中随机输入工艺需要的一组工艺参数组，
- 5 获得与所述工艺参数组对应的工艺结果评价指标；其中，所述工艺参数组包括多个工艺参数；所述深度学习神经网络模型为完成训练的多层深度学习神经网络，所述深度学习神经网络模型包括输入层、至少一个中间层和输出层，所述输入层用于输入所述工艺参数组，所述输出层用于输出与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标；
- 10 判断各所述工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度是否符合设定要求；

若是，则使用所述工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方；

- 否则，根据所述工艺需求，沿所述输出层至所述输入层的方向，基于梯度算法和自洽迭代法，逐层优化各所述中间层中的特征值以及所述输入层中的各所述工艺参数的数值，直至在所述输入层中获得能够使所述深度学习神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足所述工艺需求的工艺参数组，并
- 15 使用满足所述工艺需求的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

- 2、根据权利要求1所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，所述深度学习神经网络模型的构建方法包括：
- 20 所述深度学习神经网络模型的构建方法包括：

- 根据所述工艺参数组所包括的工艺参数的个数以及与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标的个数，确定所述深度学习神经网络模型的层数及结构；其中，所述中间层的数量为所述工艺参数的个数与所述工艺结果评价指标的个数的差值，所述深度学习神经网络模型中的每层深度学习神经网络均包括多
- 25 个神经元，沿所述输入层至所述输出层的方向，相邻深度学习神经网络之间依次递减一个神经元，每个神经元均与上一层深度学习神经网络中的所有神经元连接，每个工艺参数作为所述输入层中一个神经元的输入特征，所述中间层的

每个神经元用于对上一层深度神经网络中的所有神经元的输出特征进行运算，所述输出层中每个神经元的输出特征为所述工艺结果评价指标，所述工艺参数组所包括的所述工艺参数的个数大于与所述工艺参数组对应的所述工艺结果评价指标的个数；

- 5 根据所述深度神经网络模型的层数给定所述深度神经网络模型运行的激活函数。

3、根据权利要求2所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，所述深度神经网络模型的构建方法还包括：

- 10 采用工艺数据库作为训练数据，并采用深度学习的方法训练所述深度神经网络模型，所述工艺数据库包括特定工艺的历史工艺参数数据及历史工艺结果数据；

根据所述激活函数的训练结果确定所述深度神经网络模型中每层深度神经网络的权重项和偏置项。

15

4、根据权利要求3所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，所述基于梯度算法和自洽迭代法逐层优化各所述中间层中的特征值以及所述输入层中的各工艺参数的数值，包括：

- 20 步骤S1：从所述输出层中找出与所述工艺需求相差程度最大的一个工艺结果评价指标；

步骤S2：从与所述输出层相邻的中间层中找出与相差程度最大的工艺结果评价指标相关的所述权重项的数值最大的一项工艺参数；

- 25 步骤S3：固定所述权重项的数值最大的一项工艺参数的权重项的数值和所述偏置项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整所述权重项的数值最大的一项工艺参数的特征值，直到所述输出层中相差程度最大工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度符合设定要求；

步骤 S4：若此时其他工艺结果评价指标中存在其他与所述工艺需求的相差程度不符合设定要求的工艺结果评价指标，则重复所述步骤 S1 至所述步骤 S3，直到所述输出层中的所有工艺结果评价指标均符合所述工艺需求，同时确定出所述中间层中每一项工艺参数的特征值；

- 5 步骤 S5：基于所述步骤 S4 获得的所述中间层中每一项工艺参数的特征值，沿所述输出层至所述输入层的方向，继续采用梯度算法和自洽迭代法逐层优化其他中间层中每一项工艺参数的特征值以及所述输入层中的工艺参数的数值，直到在所述输入层中获得能够使所述深度神经网络模型输出的所有工艺结果评价指标均满足所述工艺需求的工艺参数组。

10

5、根据权利要求 4 所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，在所述步骤 S3 之后，还包括：判断通过所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度是否符合设定要求，若符合，则执行所述步骤 S4；若不符合，则将经过所述步骤 S3 调整优化后获得的所述权重项的数值最大的一项工艺参数固定，并执行以下步骤：

15

步骤 S6：从与所述输出层相邻的中间层中找出与所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标相关的所述权重项的数值次大的一项工艺参数；

步骤 S7：固定所述权重项的数值次大的一项工艺参数的权重项的数值不变，采用梯度算法优化步进调整所述权重项的数值次大的一项工艺参数的特征值，直到所述输出层中所述步骤 S3 对应调整的工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度符合设定要求。

20

6、根据权利要求 5 所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，在所述步骤 S5 之后，还包括：

- 25 步骤 S8：若在优化调整与所述工艺结果评价指标相关的所有工艺参数之后，所述输出层中仍存在与所述工艺需求的相差程度不符合设定要求的工

艺结果评价指标，则：

选取能够使各工艺结果评价指标与所述工艺需求的相差程度的平方和最小的工艺参数组成新的工艺参数组，将所述新的工艺参数组作为进行实际工艺的工艺配方。

5

7、根据权利要求 1、4-6 任意一项所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，所述梯度算法的计算公式为：

$$x_i = x_i - \theta \times (\partial y / \partial x_i)$$

其中， x_i 为中间层中被调整的工艺参数， y 为被调整的工艺结果评价指标， θ 为调整步长。

10

8、根据权利要求 1、4-6 任意一项所述的半导体工艺配方获取方法，其特征在于，所述相差程度通过以下公式计算：

$$\Delta = |(y - y_{\text{实际}}) / y_{\text{实际}}|$$

其中， Δ 为工艺结果评价指标与设定的工艺需求的相差程度， y 为深度神经网络模型输出的工艺结果评价指标， $y_{\text{实际}}$ 为给定的工艺需求；

15

所述设定要求为：所述工艺结果评价指标与对应设定的工艺需求的相差程度在 0 至 10% 之间。

20

9、一种半导体工艺配方自动获取系统，其特征在于，包括：

深度神经网络模型，所述深度神经网络模型构为完成训练的多层结构的深度神经网络，所述深度神经网络模型能够基于输入的工艺参数输出与所述工艺参数组对应的准确的工艺结果评价指标；

25

计算模块，用于执行权利要求 1-8 任意一项所述的半导体工艺配方获取方法。

10、一种半导体工艺设备，其特征在于，包括权利要求 9 所述的半导体

工艺配方自动获取系统。