ナノフォーカスX線の単一透過像に基づく

シリコン貫通ビアの三次元形状検査法に関する研究

2019年3月

梅原康敏

首都大学東京

電子回路を形成したシリコンチップを重ねて立体的な配線をすることで実装面積を小さ くするとともに配線の抵抗や浮遊容量を低減した高密度三次元積層半導体の開発・普及に ともない,複数のチップ間をつなぐために銅を充填したシリコン貫通ビアの実用化が進め られた。その製造工程にはエッチング工程,ライナー層/バリアー層/シード層形成や銅 めっき工程が含まれ,そのプロセス条件や製造装置自体の変動に起因する欠陥や小さな空 乏(ボイド)が発生することがある。このボイドは次工程以降で形成される回路の信頼性を 損なうため,工程の早期に発見する必要がある。そのために,プロセス中のシリコンウエ ーハを非破壊で検査が可能な方法に対する要求は強く,しかも短時間のインライン検査が 望まれている。

近年,高出力X線源を用いた Computer tomography (CT)技術によるシステムによって, 微細なシリコン貫通ビア(Through-Silicon Via: TSV)の三次元形状を測定した事例が報告され ている。また、インライン用途向けに展開できる可能性のある汎用型の開放型X線源を進 化させたサブミクロンの分解能を持つナノフォーカスX線顕微鏡システムが開発され、検 査対象となる直径 5 µm 深さ 50 µm の大きさの銅を充填した TSV (Cu-TSV)の外形のみなら ず、そこに内在するボイドも観察できるようになってきた。しかしながら、TSV を形成し た試料を CT スキャンで検査するためには、X線源と被検体の位置・角度を変えながら多く の透過像を撮像することが必要で長い時間を要するとともに、スキャンのための装置の各 運動機構の精度および画像処理の精度が制約となり、サブミクロンレベルの精度を保証し て検査することは容易ではない。また、超音波顕微鏡システムを用いた非破壊での三次元 の形状測定方法も検討が行われているが、現在適用できる超音波発生器の周波数を考慮す ると、その空間分解能は十分とは言えない。

よって1枚のX線透過像をもとに解析を行うことができれば理想的であるが、その方法 論の検討や原理検証や実際の精度評価はこれまで行われていない。 本研究では、逆問題解析の手法を用いて1枚のナノフォーカスX線透過画像を解析する ことでエッチング後の貫通項孔形状、銅めっき工程により銅を充填したシリコン貫通ビア およびその内部ボイド欠陥部分をX線透過像の画像処理手法による特徴量抽出と機械学習 に基づいて認識し、新たに提案する幾何モデルと対応させてX線のシミュレーション画像 の生成と機械学習による寸法形状測定手法によりビアの各部寸法の定量化までを行うこと を目的とする。本論文では試作したナノフォーカスX線顕微鏡システムの透過像から本提 案の方法がウエーハ1枚あたり9点/30分で検査ができ、ビアの製造工程のインライン検査 に適用できる可能性を示した。さらに精度や不確さについての評価を行い、現状の試作機 では若干未達であるも、今後の装置の改良によりビア製造工程で要求される寸法測定誤差 10%程度、測定再現性1%程度で行える可能性を示した。さらに本提案方法の将来のインラ イン検査技術への展開としてプロセスの制御の可能についても示した。 目 次

第1章 緒論	
1.1 本研究の背景	1-1
1.1.1 半導体回路素子の集積化動向	1-1
1.1.2 検査方法への要求と課題	1-6
1.2 本研究の目的	1-15
1.3 本研究の意義	1-19
1.4 本論の構成	1-23
1.5 参考文献	1-25

第2章 X線透過像を用いたシリコン貫通ビアの三次元形状簡易推定方法

2.1 緒言	2-1
2.2 透過像からのビア形状推定の課題	2-6
2.3 形状推定原理と手順	2-8
2.3.1 簡易モデルパラメータ定義	2-8
2.3.2 透過像のシミュレーション	2-9
2.3.3 シミュレーション画像を用いた機械学習	2-16
2.3.4 形状推定対象画像の抽出	2-18
2.4 シミュレーション画像による形状推定の数値実験	2-19
2.4.1 形状モデル定義とパラメータ設定	2-19
2.4.2 シミュレーション画像の生成	2-20
2.4.3 サポートベクタ回帰による機械学習	2-21
2.5 実験結果と検証	2-22
2.6 結言	2-25
2.7 参考文献	2-26
付録 透過像においてエッジ強調される現象の考察	2-28
第3章 三次元形状の測定における不確かさの見積り	
3.1 緒言	3-1
3.2 形状測定方法の課題	3-2
3.3 不確かさの解析と要因分析	3-4
3.3.1 測定システムの構成	3-4
3.3.2 X線透過像からのシリコン貫通ビアの形状測定	3-8
3.3.3 評価パラメータの定義	3-9
3.3.4 形状パラメータ推定の不確かさの要因分析	3-12

3.4 不	3.4 不確かさの見積もり				
3.4.1	3.4.1 標準試料校正とシステム校正時の不確かさ				
3.4.2	システムの構造に依存した不確かさ	3-17			
3.4.3	3.4.3 機械的要因による不確かさ				
3.4.4	3.4.4 ノイズの要因による不確かさ				
3.4.5	アルゴリズムの要因の不確かさ	3-26			
3.4.6	他の要因の不確かさ	3-27			
3.5 不	確かさの評価結果と考察	3-29			
3.5.1	シリコン貫通ビア実サンプル測定における誤差	3-29			
3.5.2	機械的要因の不確かさ評価結果	3-32			
3.5.3 ノイズの要因による不確かさの評価結果		3-37			
3.5.4	アルゴリズム要因による不確かさの評価結果	3-39			
3.5.5	システム全体の不確かさの見積りと改善指針	3-40			
3.6 結		3-45			
3.7 参	考文献	3-47			

4章 銅充填シリコン貫通ビアの非破壊検査

4.1 緒		4-1			
4.2 非	非破壊インライン検査における課題				
4.3 ボ	イド欠陥の分類と形状推定方法	4-3			
4.3.1	欠陥の生成メカニズムと形状の分類および対応	4-3			
4.3.2	X線透過像とFIBによる断面加工によるボイド観察	4-4			
4.3.3	欠陥の分類と形状推定によるプロセス改善の可能性	4-4			
4.3.4	欠陥の認識と特徴量の抽出と分類手順	4-7			
4.3.5	回転対称および回転非対称ボイド欠陥の判別	4-9			
4.3.6	ボイドのモデル定義とシミュレーション	4-10			
4.3.7	回転対称ボイド欠陥の形状および容積推定	4-14			
4.4 評	² 価実験	4-15			
4.4.1	銅充填シリコン貫通ビア試料の作成	4-15			
4.4.2	ナノフォーカスX線によるビア透過像の撮像	4-17			
4.4.3	FIBによる試料の断面加工と断面画像の取得	4-17			
4.4.4	欠陥の認識と分類およびボイド容積推定	4-17			
4.5 評	Z価実験結果	4-18			
4.5.1	試料の観察および分類結果	4-18			
4.5.2	欠陥の認識と分類およびボイド容積推定結果	4-21			
4.5.3	ボイド容積推定結果の検証	4-23			

4.6	結言	4-25
4.7	参考文献	4-26
第5章	: 結論	
5.1	各章のまとめ	5-1
5.2	全体のまとめ	5-2
5.3	今後の研究の方向性	5-3
謝辞		5-8

第1章 緒論

1.1 本研究の背景

1.1.1 半導体回路素子の集積化動向

半導体の回路素子トランジスタの微細化が進み、ムーアの法則に従ったペースで進歩し てきたそのトランジスタの大きさを指標とする設計ルールは、2018 年時点で、最先端の量 産デバイスで 10 nm を切るレベルに到達しつつあり、その勢いは、設計コスト、プロセス コストならびにパッケージングコストの増大を考えると飽和しつつあるといわれている [1,2]。Fig. 1-1 は IEDM2015 で発表された内容であり、半導体のスケーリング則である2年 でトランジスタ数が2倍になるという Moore の法則に対し、近年の DRAM の高密度化は鈍 化しつつある傾向を示すものである。2 年でデバイス面積が半分に縮小していくという Dennard のスケーリング則とあわせて半導体の開発の実態とのずれが 2002 年を過ぎた頃か ら徐々に大きくなっていると言われている。



Moore's Law and DRAM Density Progression

Netlist Blog, Jul 24, 2012

Source: De Dios and Associates

Fig. 1-1 Gap in trend of miniaturization between Moore's Law and actual DRAM density progression [1]

一方で、微細な回路素子を大規模な集積回路として形成したシリコンチップを重ねて、 実装面積を小さくするとともに、チップ間をつなぐシリコン貫通ビアあるいは Through-Silicon-Via (TSV)と呼ばれる。三次元の立体的な配線をすることで、配線の抵抗 や浮遊容量を低減し高速動作・低消費電力を実現する高密度三次元積層半導体の開発・普 及が進んでいる[3]。

最近のマーケット調査から, TSV が使われる領域は以下の Fig. 1-2 に示すようにその成長 率が高く, 先端のモバイル機器やハイパフォーマンスコンピュータ(HPC) などの分野で急 激な広がりを見せつつある。なお, 図中では三次元(3D)のみならず二・五次元(2.5D) と言われる二次元方向の配線と三次元の配線を組み合わせたパッケージを含めている。

積層した集積回路を形成したシリコンチップを三次元に積み上げてワイヤ配線により接続するパッケージ実装から、三次元に積み上げた複数のチップ間を直接つなぐために半導体の微細加工プロセスを応用した銅を充填したシリコン貫通ビア(Cu-TSV)の生成プロセスを導入し、真の三次元の半導体チップ積層のデバイス向けの高密度の配線実装の実用化が進められてきている[5][9]。



3D TSV and 2.5D market forecasts for 2016 - 2022, by end-application

Fig. 1-2 Market trend and forecast of 3D TSV and 2.5 D that includes meaning of combined packages of TSV and TSV interposers [3]

Fig. 1-3 に、二次元集積回路から三次元に TSV を実装することで得られるメリットについ て示す。二次元で形成されたシステムオンチップと呼ばれる大規模な集積回路を、各種の 機能ブロック(数理演算、メモリ、通信、データ制御等)に分けて一チップ上に形成する とチップ面積は大きくなり、機能ブロック間を繋ぐチップ上の数ミリメートルにもおよぶ 長い配線はその配線長による抵抗と浮遊容量による信号遅延、すなわち CR 回路におる電荷 の移動により消費されるエネルギーロスが深刻になってくる。

そこで、各機能ブロックをそれぞれ個別のチップとして重ねて実装し、垂直方向に多く の配線として電源やグランドライン、I/O 信号などのチップ間の信号通信ラインを 30 µm と いうような短い TSV 配線として形成、実装することで、広帯域、低消費電力、高密度実装 という大きなメリットをだすことができるようになる。さらには、チップ間の配線の位置 を調整して設計を行えば、チップの端面にしか展開できないチップ間配線技術よりも、回 路設計の自由度が増し、より高度なシステムを三次元で実装することが可能となる。

この技術に先立ち,空中ワイヤ配線で実装するシステムインパッケージ(SIP)という技術が開発され,実装の容易さから,低コストで三次元の高密度集積回路デバイスチップを 複数実装することで,実用化への技術的な難易度を下げてきていた[6]。しかし,さらなる 低消費電力化,信号ラインの遅延の抑制が必要となってきた。



Fig. 1-3 Innovation of 2D IC to 3D IC with Trough-Silicon-via (TSV) technology [4]

先に述べたように半導体の回路素子の微細化の傾向が飽和傾向にあることから、半導体 デバイスメーカは、さらなる省スペース、省電力型三次元高密度集積実装技術の開発の検 討を進める必要に迫られている。Fig. 1-4 に、この事例として空中配線を行って三次元実装 した半導体チップを重ねたパッケージの構造 (Fig. 1-4 (a)) と、TSV を利用した高密度実装 を実現するパッケージの構造 (Fig. 1-4 (b)) を示す。前者では、簡易な空中配線を行ってい るため、この配線長による、抵抗、インダクタンスならびに浮遊容量による信号伝搬時の遅 延,さらに近傍配線からの信号クロストークが発生する可能性がある。後者においてはチ ップは直接接合されるため、配線長は短く浮遊容量も抑制でき消費電力も低減できる。こ れらの比較から、システムインパッケージの構造では回路配線に自由度は制限されるもの の、過去に培ってきた簡易なワイヤボンディングとチップの三次元方向の接合により実現 が容易であるが今後のデバイスの性能に対して限界があることが想像される。

しかしながら,TSV を実装するにはデバイス上に精密にかつ他の回路素子の特性に影響 を与えずに形成するプロセス,あるいはパッケージを行う際に精密に位置合わせを行い接 合する必要があり,歩留りが低下しがちとなり実装のためのコストが高くなることが予想 される。実際の市場調査では,3D に配置したTSV がハイエンドで使われる High Band width Memory (HBM)と呼ばれる高密度のメモリに対しての需要が大きいものの,その歩留りの悪 さから別の方法も模索されているとの報告がある[4]。また,微細な配線で高い信号品質で の信号伝搬の均一性,高い信頼性も必要なことから,実現するための高度なプロセス制御 のみならず検査技術および実装技術が不可欠となっている。



(b) Scheme of a 3D direct stack package Fig. 1-4 Structure of 3D Package solutions [5][6]

Fig. 1-5 に TSV を生成する上で標準的に行われるプロセスの概要を2種示す。

一つは、Via Middle と呼ばれるプロセスで、Metal Oxide Semiconductor (MOS) のトランジ スタ形成後に配線形成前、あるいは配線形成中に TSV を作り込む方法で、Cu-TSV をつか って広く開発が行われている。しかし、三次元の専用設計が必要となるためその設計コス トは高くなる。また、二つ目として Via Last と呼ばれる方法は、すでにウエーハ上にデバイ ス形成処理工程を終えたものに対して後から作成するため、Cu-TSV 生成のためのプロセス へのハードルが比較的低く、デバイスと配線の製造分業も可能でありコスト面で有利であ るが、将来の微細化についてはボンディングピッチが縮小すると位置合わせ精度を保ちボ ンディングの信頼性を保つことが難しくなってくる問題から、製造への制限があると考え られている。



Monitoring of Etch CD, Depth profile, Cu filling status D. Henry et al, AIDA Meeting, April 2013

Fig. 1-5 Typical process scheme of TSV formation in cases of Via Middle and Via Last [8] *CD: Critical dimension

TSV の主要な製造工程にはエッチング工程, ライナー層/バリアー層/シード層形成や 銅めっき工程などが含まれ, そのプロセス条件や製造装置自体の変動に起因する欠陥や小 さな空乏 (ボイド)が発生することがある。このボイドは次工程以降で形成される回路の信 頼性を損なうため, 欠陥を早期に発見する必要がある。そのために, プロセス中のシリコ ンウエーハを非破壊で検査が可能な方法への要求は高く, しかも, 膨大な数の TSV に対し て短時間のインライン検査が望まれている。

今後,半導体集積回路が,微細化技術の成熟の課題を乗り越え,進化を続けていくには, 三次元実装による省フットプリント,広帯域,低消費電力,異種機能のデバイスの集積化 のメリットを担う三次元半導体の発展には,歩留りを高める検査方法やプロセスへのフィ ードバック,次工程へのプロセスモニタ情報のインプットが行える機能が重要となると考 えられる。

一方, International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS)の 2013 年の発表によれば [10], TSV は今後さらに微細化や狭ピッチが進み,表 1-1 に示すように,2013 年から数年 後の 2015-2018 年には,チップ間接続用の TSV の最少サイズは径が ¢2-3.5 µm, 深さ 30-50 µm と小さくなると予想されている。トランジスタ素子の微細化のトレンドに比べると緩慢で はあるが,三次元デバイスの進化にあわせて製作方法,検査方法も微細化に対応し改善し ていく必要があることが見て取れる。

Global Level 2013-2014 2015-2018 Minimum TSV diameter 4–10 µm 2-3.5 µm Minimum TSV pitch 8–20 µm 4–7 μm Minimum TSV depth 40-100 µm 30–50 µm Maximum TSV aspect ratio 5:1-12:1 12:1-20:1 Bonding overlay accuracy 1.0–1.5 µm 0.5–1.0 μm Minimum contact pitch (thermocompression) 10 µm 5 µm Minimum contact pitch (solder µbump) 20 µm 10 µm

2-5

2 - 8

Table 1-1. Global Interconnect Level 3D-SIC/3D-SOC* Roadmap

引用元: ITRS2013 Edition, Chapter 2.3, page 12, Table INCT7

*SIC: System in package, SOC: System on chip

1.1.2 検査方法への要求と課題

Number of die per stack

前項で述べたように Cu-TSV を歩留り高く製造するには、プロセス中あるいはプロセス後の精密な検査方法が重要である。SEMATECH によれば、Fig. 1-6 に示すように TSV や Cu-TSV を計測、検査を行うには乗り越えなければならない複数の課題がある。すなわち、上の写真に示した TSV の断面 SEM 像から、銅を充填する前のエッチ後の TSV 形状の縦横比は 10 対 1 程度で、開口径 5 µm、深さ 50 µm 程度のものになることが伺えるが、非破壊で光学的手法で計測を行うには、底部からの可視領域の反射光や近赤外線透過光を得て TSV 個別の正確な情報を得るのは容易ではない。また、右下の写真に示した断面研磨による光学顕微鏡像による構造の分析から、銅を充填した Cu-TSV の形状の測定には、物質の透過性から考えて、Si および Cu は紫外、可視光領域で不透明であり、電子ビームによる観察も電子が透過しにくい厚さのため、非破壊で、 φ5 µm×50 µm 程度の大きさの物体の透過観察で

きる方法が必要になると考えられる。



Fig. 1-6 Needs in 3DIC inline measurements for TSV and Cu-TSV [11]

これまでの報告から[8,11-13],非破壊で検査する手法として,以下の4種が候補として挙 げられる。Fig. 1-7 に以下の内容を図示し,説明する。

- (1) X線顕微鏡による透過像観察および Computer tomography (CT)による方法
- (2) 超音波顕微鏡を利用する方法
- (3) 暗視野反射率スペクトル測定による方法
- (4) Near Infrared (NIR) 回折光観察による方法

Challenges of nondestructive inspection



Fig. 1-7 Challenges of nondestructive inspection [11-14]

(1) X線顕微鏡による透過像観察および Computer tomography (CT)による方法

近年,高出力 X 線源を用いた CT 技術によるシステムによって微細な TSV の三次元形状 を測定した事例がいくつか報告されている [11][12]。Fig. 1-8 に Lay Wai Kong [12] らが, TSV を形成したシリコンの個片のサンプルを樹脂で固めて,シリコンの個片部分を 775 µm から 50 µm 程度まで薄化加工したものを用意して,X線顕微鏡装置によりX線透過像を得 て CT による 3D 画像として再構成した結果を示す。

この方法は、高出力の X 線源と高価なコンデンサレンズ、コリメータレンズ、フレネル レンズ、ゼルニケ位相リングを含む X 線光学系を用いることで 50 nm 程度の空間分解能が 実現され、写真のようにどの方向に対しても任意の切断面にて物体を観察できる。そのた め Cu-TSV のプロセス中に発生した Cu 中のボイドの詳細を自在に観察することに成功して いる。さらに、Fig. 1-9 に、Cu-TSV の銅めっきプロセス直後にはボイドが明確に認識できな かったボイドが,225°C あるいは300°C の温度でアニールすると,銅めっき直後の残留 応力が解放されてボイドが発生,拡大することがわかり,このX線顕微鏡によるCTから そのボイドの容積を定量的に推定できることがわかる。このように,X線CTを用いた方法 でCu-TSVの形状やボイドのような欠陥を詳細に観察,検査のために必要な情報を得ること ができる。



Fig. 1-8 Evaluation results of Nano X-ray computer tomography (CT) [12]

	College	OF	NANOSCALE
1.1	SCIENCE	& F	NGINEERING

300C

Total Volume of Void Growth After Annealing

1.5

Single TSVs, Stress free temperature = 150C , Volume = Average of 6 TSVsPost Anneal
TemperatureVolume of Void Before
Annealing(μm³)Volume of Void After
Annealing(μm³)Volume of Void
Growth (μm³)225C0.110.410.3

1.63

0.13



Fig. 1-9 Estimation results of total volume of voids in Cu-TSVs after annealing process [12]

しかしながら、この報告ではハイパワーの X 線源や、高価で高度な技術と精度を必要と する X 線集光レンズ光学系を用いており、また撮像時の signal-to-noise ratio(SNR)を高める ために、完全にサンプルを破壊して行う試料準備作業が必要であるなど、半導体製造工場 で扱える範囲での 300 mm ウエーハ用半導体製造装置等のインライン検査用途にそのまま 導入するのは容易なことではない。さらに、X 線透過像から CT により 3 次元データを再構 築するには、試料を回転させ、たとえば数百から千枚程度の X 線透過像の撮像が必要とな る。すなわち、X 線源と被検体の位置・角度を変えながら多くの透過像を撮像することが必 要で、長い時間を要するとともに、スキャンのための装置の各運動機構の精度および画像 処理の精度が制約となり、サブミクロンレベルの精度を保証して検査することは容易では ない。また、X 線画像からの三次元データの構築のための計算のコストも考慮しなければな らない。

(2) 超音波顕微鏡を利用する方法

超音波顕微鏡システムを用いた非破壊でボイドを含む Cu-TSV の三次元構造の解析の検 討が行われている。Fig. 1-10 にその模式図を示す。高周波パルスを印加してトランスデュー サから 1.2GHz の超音波パルスを純水等の媒体を介して照射し,反射される超音波の解析を することにより 3 次元情報を得るシステムである。



(a) Working principle of the acoustic GHz-microscope



(b) Cross-sectional views through acoustic defocus scans [11]Fig. 1-10 Scanning acoustic microscope (SAM)

近年, Brand[13]らにより, 超音波の周波数がこれまでの 400 MHz 程度の周波数から 1.2 GHz まで高めたことで,空間分解能が大きく高められることが示された。また, 非破壊で 観察できる特徴を生かして Cu-TSV の中のボイドの観察の試みを行っている。 超音波撮像による方法でも、先の X 線 CT のように自在に断面像をとることが可能であ るが、その実質の空間分解能をこれまでの数 10 μm から数 μm 程度以下まで高めたものの、 1 μm 程度以下のサイズのボイドを検出するには、その空間分解能はまだ十分とは言えない。

(3) 暗視野反射率スペクトル測定

この方法は以下の3つの方法を組み合わせている。

- 1. エッチング後の TSV に,直上から白色光を当て,暗視野で反射光のスペクトルから TSV の内部の壁面の形状を推定する方法
- 2. 直上からの試料の光学顕微鏡観察画像から,画像処理により TSV の開口部の円と しての形状測定を行う方法
- 3. 1.と合わせて分光干渉法により TSV の表面と底部の高さの違いを TSV の深さとして 測定する方法

Fig. 1-11 にこの方法論を模式図で示す。すなわち,中央に TSV のプロファイルの模式図, 左上には直上から撮像した TSV の開口部の画像,左下は分光干渉プローブによる TSV の表 面と底部とのギャップの差の測定,右側には直上から照射した白色光を導入し,TSV の内 部壁面で散乱した反射光を暗視野で取得する。そのスペクトルを測定することで,TSV の 形状をモデル化しその反射スペクトルをシミュレーション,フィッティングする手法によ り形状を推定するというものである。

Graves-Abe [14]らによれば、計測光学系と高速で動作する精密ステージを用いることで、 エッチング直後のシリコンウエーハ上に形成された TSV の開口部の径(Top CD), TSV の 深さ(Via Depth), TSV の形状プロファイル(Via Profile)を高速に取得し、プロセス管理 に重要な、底部の壁の傾斜角度(Bottom CD, Bottom curvature, Side Wall Angle (SWA))を含 めた、計測パラメータを取得できると報告している。

しかしながら、この方法はエッチングの TSV の形状推定に適用できるが、銅を充填した Cu-TSV は検査することができない。

本論文の目的はエッチング直後の形状の推定,検査のみならず,ボイドを含む Cu-TSV の ボイド形状推定,検査を含むものである



Fig.1-11 TSV metrology using spectral reflectometry with combination of optical imaging processing [14]

(4) Near Infrared (NIR) 回折光観察による方法

Fig. 1-12 に NIR による回折光を観察する方法を示す。凹面鏡を 2 枚配置して試料を傾斜 させながら,近赤外光源から光を凹面鏡-ウエーハ試料背面一凹面鏡とつないで,回折光 を CCD カメラでとらえるというものである。さらに Fig. 1-13 の原理図に示されるように Si ウエーハが近赤外光を透過することから,背面からの光が Si とビア中の空気の屈折率の 違いを利用し,反射回折する原理によって実現される計測方法が提案されている。

このNIR 反射分光スペクトル装置は、以下のコンポーネントから構成されている。

1. テレセントリック光源(Concave mirror 利用)

2. ウエーハの傾斜ステージ

3. 反射光学系による集光と CCD イメージセンサ(回折像の取得)

これらのコンポーネントにより, ウエーハ傾斜ステージを動かしてスキャンすることで, Fig. 1-14 のような回折像を得る。

この方法は広いウエーハのエリアを高速でスキャンできるため、非破壊で検査ができ、 スループットは高く、またウエーハの面内の不均一性も測定することが可能である。しか しながら、原理上 Cu は近赤外光を通さないため、銅めっき後に Cu-TSV に内在するボイド の検査をすることができない。そのためこの方法では、対象とするプロセスの検査工程を 限定する必要がある。



Fig. 1-12 Optical configuration for TSV array inspection by utilizing diffracted light. [15,16]

Wafer front side Silicon Wafer back side

Illumination NIR light

Fig. 1-13 Concept of diffraction inspection from wafer back side [15]



Fig. 1-14 Diffraction image of a wafer with TSVs formed on the surface with variations of their sizes [15, 16]

1.2 本研究の目的

前項までに述べた方法に対して,近年インライン用途向けに展開できる可能性のある, 汎用型の開放型 X 線源を進化させてサブミクロンの分解能を持つナノフォーカス X 線顕微 鏡システムが開発され,検査対象となる TSV の形状の観察ができるようになってきた。Fig. 1-15 に, NEDO の報告におけるナノフォーカス X 線顕微鏡の研究の内容を示す [17]。Fig. 1-15 (a) の右の写真に示したダイヤモンド基板中に, �0.5 µm 以下の径で,深さ 2 µm 以下程 度の微細な W のテーパー状の柱を形成したものを X 線源のターゲットとする。さらに汎用 的に使われる開放型 X 線発生管を利用して,高真空に保たれたカソードから 30~70 keV 程 度の加速電圧で, �1 µm 程度の径の電子ビームを照射することで 1 µm 以下の小さな X 線点 源を形成することが可能であることを示したものである。Fig. 1-15 (b) は試作したシステム の外観写真を示す。X 線を発生させるターゲット部分,通常は Be 基板に W 膜を蒸着した ものを使用するが,これをダイヤモンド基板に置き換えて X 線点源を設ける。この X 線源 を利用して X 線顕微鏡を構成し撮像条件を調整することで, Fig. 1-16 にみられるような透 過画像が得られている。



(a) Scheme of basic principle of nano-focus microscope



(b) System view of proto-type nano-focus microscope [17] **Fig. 1-15** Features of the Nano-focus X-ray microscope system



Top and tilted views of as-etched TSVs by using nano-focus X-ray microscope [18]

Fig. 1-16 Features of the Nano-focus X-ray microscope system

本研究は、高い空間分解能をもつナノフォーカス X 線顕微鏡を用いて、エッチング直後の TSV から銅めっき処理をおこなって生成された Cu-TSV の形状推定、ボイドの形状推定 ならびに欠陥であるボイドの分類、定量的な形状推定までを行うことを考える。

ところで,先に述べた X 線 CT 法によれば多数の透過像を撮像することで TSV や Cu-TSV の形状やボイドの形状を三次元データに再構成することで推定を行えるものであった。た とえば、回転時の X 線の十分な透過量を得るために、10mm 角程度の大きさの個片状にし た試料を、4 µm 程度の空間分解能の透過像を 900 枚程度撮像ならびに、三次元データを再 構成の演算を行うのに 16 時間程度かかることがある。半導体プロセス中のインライン用途 を考えると、その手間とスループットの問題から、にわかに、半導体製造装置に付属した 検査装置として使うのは無理があると考えられる。

本論文は、以下の4点を達成することを目指すことを目的とする。(1)一枚のナノフォーカス X線透過画像を撮像し、エッチング後のTSVの形状、銅めっき工程により生成した Cu-TSV および その内部ボイド欠陥部分を、画像処理ならびに機械学習に基づいて認識し形状推定する方法を提案 する。本方法は、逆問題の解決法にみられる方法論をビアのX線透過像からの形状推定問題に展開 しようとするものである [19-21]。この手法で被検体の寸法の定量化をまでを行うことで検証を行 い。さらに、その手法の精度や不確かさについての分析と、将来のプロセス制御への展開の可能性 を示す。一枚の透過像であれば、要求される空間分解能がサブミクロンレベルであっても、数分程 度以内の時間で撮像ならびに推定が完了することが期待できる。(2)ナノフォーカスX線顕微鏡 システムを試作し、デバイス間の接続配線に使われるビアを非破壊でインライン検査する方法を開 発する。(3)試作したシステムが測定装置としての精度、誤差要因を見積もり、ビア寸法形状測 定の妥当性を検証する。(4)本提案の方法を銅めっき工程のビアの空乏欠陥検査へ適用し、その 有意性を確認する。

表1-2にこれまで述べた方法と本研究の方法について、ビアの形状測定を含むインライン検査を 行う上で要求される達成基準を示し、それぞれの基準の項目に対する満足度について比較した内容 を示す。X線を用いた方法以外では少なくとも2つ以上の評価項目を満足しない。またX線CTで はコスト/スループットの項目以外は満たしている。そこで本研究は汎用的に使われる低コストで利 用できる開放型X線管を用いたナノフォーカスX線顕微鏡システムを試作して、X線CTの課題を 解決することを目的とするものである。

しかしながら、本研究の方法論の短所として検査の前の機械学習に多くの計算リソースを割かれ てしまうことがあげられる。2章で詳しく説明する機械学習の処理においては、単一のモデルでも、 学習データが多くなるとシミュレーションや最適化処理に多くの時間を取られ、通常のデスクトッ プコンピュータでは数週間かかることがある。一方、いったん学習を終えてしまえば学習後の実際 の認識や形状推定は例えば1秒程度以内の計算処理で済むことが経験として得られているため、運 用上は大きな問題とはならないと考えられる。さらに、昨今の GPU やマルチコアの CPU 等を搭載 した高速処理が可能なコンピュータの登場で計算能力が大いに改善することが期待されるため、事 前学習の処理の問題は程なく解決するものと考えられる。

項目	要求水準	X線 CT	超音波 顕微鏡	暗視野白色 分光干渉法	背面NIR 回折像によ る解析	本論文 の方法
ビア寸法形 状推定	ビアサイズに対し 誤差 <10% 再現性 < 1 %	0	×	0	0	Ο
銅めっき後 ビア寸法形 状推定	ビアサイズに対し 誤差 <10% 再現性 <1%	0	\bigtriangleup	×	×	Ο
空乏寸法形 状推定	ビア容量10%程度 以下を認識	0	\bigtriangleup	×	×	Ο
分解能	0.1µm程度以下	0	×	0	0	Ο
コスト/ス ループット	撮像,計算時間込 1ウエーハ 9点/30分	×	×	0	0	Ο

表 1-2 各検査方法の項目別比較

ビアのターゲット寸法: 直径 5 µm 深さ 50 µm

1.3 本研究の意義

Fig. 1-17 に本研究の工学的位置付けを示す。すなわち、これまでのプロセスの検査手法の 開発や実用化が行われてきた X 線を用いた手法と本研究が検討する方法論の位置づけを図 にまとめたものである。

右上の X 線 CT 法による方法で得られる TSV などの物体の形状に関する情報量は大変大 きなもので,多数の透過画像を用いて精緻な三次元データを得ることができ,各種用途に 活用できる道がひらけている。この付加価値は非常に高いと考えられる。近年の X 線 CT 装置の技術の進歩は著しく,医療検査,分析関係のみならず特に電子部品関連,自動車産 業などの工業分野で非破壊で部品や組み立てたコンポーネント等のリバースエンジニアリ ングや欠陥検査,組み上げ時の調整の不整合の検出,製造品質のトラッキング等の目的で も使用されるケースが多くなってきている[22-32]。X 線装置の産業用途への応用の期待は 年々高まってきている。

X線CT法が製品品質管理に使われている事例として,Fig.1-18に島津製作所の製品なら びにアプリケーション紹介サイトで厚かれている内容を示す。自動車に使われるアルミダ イキャスト部材の中に存在する鋳巣の存在する場所およびその欠陥の大きさの分布の解析 を行っている。この事例のように,X線CTを用いることで,未知の欠陥部分を3Dデータ の解析を行うことで精緻な欠陥分析,ならびに製造へのフィードバック,次工程への情報伝 達が可能となる。

しかしながら,上述の産業用途,とくに非破壊検査で使われる X 線源は,実用的には 4 µm 程度と,数ミクロンの分解能までのものが多く,その領域では X 線源のパワーも担保され, X 線カメラの感度が十分に見合うものであるが,それ以下のサブミクロンレベルの微細な構 造をもつ物体の検査を行うには現状では X 線源の発生可能なフォトン量の問題, X 線像の 感度,スループット,データ量ならびにコストの面で CT を行うには不利であると考えられ る。

また, Fig. 1-17 に示す従来法である X 線ラミノグラフィ法は, CT の欠点である多数の画 像を必要とせず, X 線の透過経路が大きくならないように撮像時に X 線源と試料との位置 関係に制限を入れるなどして改善を図った方法である。しかし, X 線 CT ならびにラミノグ ラフィにおいては, X 線源の単色性や異種材料起因によるアーティファクトと呼ばれる虚像 が発生することがある。

一方,前項までに述べたように,汎用的なX線源を利用したナノフォーカスX線顕微鏡 を1枚の透過像からインライン検査用途に展開する方法論の議論を行うことは大いに価値 があると考える。何故なら,インライン検査においてはスループットが重要で,さらに統 計的な処理により,プロセスのトレンドの変化の早期検知,ならびにその変化に対して, 関連する製造プロセスに対するフィードバックや,次工程へのプロセス情報のインプット を行いデバイスの生産効率を高める可能性を有するからである。

インライン検査の効率を高めるために,生産品のウエーハ上に専用の検査領域を設けて 検査をしやすくするアプローチも考えられる。ビアの検査しやすくするためのデバイス設 計としてビア検査専用の TEG (Test Element Group) と呼ばれる領域をウエーハ上の量産チ ップを分離するスクライブライン上や量産チップ領域以外の場所に確保し,ウエーハ面内 のばらつきのモニタを行う方法も行われる [33]。



本研究の位置付け:インライン検査

Fig. 1-17 本研究の位置付け



(a) VR 像







Fig. 1-19 は以上の本研究の意義を図にまとめたものである。すなわち,非破壊でウエーハ のビアをナノフォーカス X 線顕微鏡で傾斜透過像を撮像し,高分解能高コントラスト像を 取得する。そしてモデル化手法を開拓し,一枚の X 線透過像から回転対称ビアの形状を推 定する。この問題解決には先に述べた機械学習を用いた逆問題解析手法を用いる。このこ とで表 1-1 に示すコスト/スループット要求を満たす (X 線撮像時間ならびに計算時間を含 む 9 点/30 分程度) で形状検査を可能にするシステムを構築することでインライン検査に供 する技術とすることができると考えられる。

本研究提案のビアの検査方法

- 非破壊でウエハ上のビアをナノフォーカスX線顕微鏡で傾斜透過像を撮像 高分解能、高コントラスト像を取得
- モデル化手法を開拓し一枚の透過像から欠陥分類、回転対称のビアの形状を推定
- 機械学習を用いた逆問題解析手法を適用し、高速なデータ処理により 高いスループットでプロセス後のプロファイルを測定



Fig. 1-19 本研究の意義

1.4 本論文の構成

本論文の構成と流れを Fig. 1-20 に示す。

第1章は緒論であり、本研究の背景、シリコン貫通ビアの検査に対する要求と、現在までに行われてきた方法論と課題を述べ、本研究方法論との課題の比較ならびに本研究の優位点を示し、本研究の目的、工学的な位置付けを示している。

第2章は本研究が提案する一枚の透過画像からシリコン貫通ビアの形状を推定する方法 論を詳細に論じ、計算実験上でその推定精度を見積もっており、その精度はシリコン貫通 ビアの径方向では画像のピクセル分解能 0.1 μm よりも高いことを示す。

第3章は評価を行ったX線顕微鏡システムの構成ならびに、シリコン貫通ビアの形状を 測定するためのシステムの校正方法、測定時の不確かさの要因分析を行い、個別要因によ る不確かさの寄与の大きさについて示す。将来的には、校正方法の見直し、装置起因の電 気ノイズを低減することで改善できることを示す。

第4章は銅を充填したシリコン貫通ビアの銅の中の空乏欠陥の分類,その空乏の容量推 定方法についての詳細な議論と妥当性検証について述べる。

第5章は本論文の全体のまとめと今後の展望について述べている。提案した方法をイン ライン検査に適用できるとした場合に,関連する製造プロセスの歩留りの改善につながる プロセスの異常検出と異常の分類,ならびに定量的なシリコン貫通ビア,銅充填したビア の形状パラメータの推定を行うことで,プロセス制御に繋がる高スループットと高機能を 同時に実現するインライン検査への適用の可能性を述べる。



Fig. 1-20 本論文の構成

1.4 参考文献

[1] <u>http://semicon.jeita.or.jp/STRJ/STRJ/2015/2015 08 Tokubetsu v2.pdf</u> (2018/12/10 閲覧)

[2] IEEE SPECTRUM の URL "Transistors Could Stop Shrinking in 2021" 2016/9/2 記事更新 <u>https://spectrum.ieee.org/semiconductors/devices/transistors-could-stop-shrinking-in-2021</u> (2017/10/20 閲覧)

[3] E. Jollvet,:"3D TSV and 2.5D Business Update-Market and Technology Trends 2017", Market & Technology report, Yole development i-Micronews Jun. 2017

- [4] 青柳昌宏,居村史人,加藤史樹,菊池克弥,渡辺直也,鈴木源史,仲川博,岡田義邦, 横島時彦,山地泰弘,根本俊介,Bui Thanh Tung, Melamed Samson: "3 次元 IC 積層実装 技術の実用化への取り組み - 基盤技術から実用技術へどのようにしてステップアップ するのか?",Synthesiology, 9,1 (2016) 1-14
- [5] ATHENIS_3D プロジェクトの URL http://www.athenis3d.eu/technology.php (2017/8/20 現在)
- [6] SHARP 電子デバイス/ディスプレイ
 <u>http://www.sharp.co.jp/products/device/lineup/selection/lsi/package/index_1.html</u>
 (2018/8/15 現在)
- [7] 後藤弘茂: "DDR4 と併存する広帯域ワイドインターフェイスメモリ技術", PC Watch http://pc.watch.impress.co.jp/img/pcw/docs/531/800/html/06.jpg.html (2018/7/16 閲覧)
- [8] A. Berthelot, R. Cuchet, G. Simon, Y. Lamy, P. Leduc, J. Charbonnier,: "TSV vertical based interconnections, overview, state of the art", CEA-Minatec, AIDA meeting, April (2013)
- [9] 福島誉史, 李康旭, 田中徹, 小柳光正: "半導体ウエーハへの三次元配線加工: TSV と狭 ピッチ電極を中心に", 表面技術, 67, 8 (2016) 414-420
- [10] ITRS2013 Edition, Chapter 2.3, page 12, Table INCT7
- [11] V.H. Vartanian, R.A. Allen, L. Smith, K. Hummler, S. Olson, B.C. Sapp: "Metrology needs for through-silicon via fabrication", J Micro/Nanolith MEMS MOEMS, 13, 1; (2014) 011206 1-9.
- [12] L. Kong, J. R. Lloyd, A. Rudack, K. Yeap, E. Zshech, M Liehr, A. Diebold: "Visualizing and identifying the mechanism of stress assisted void growth in through silicon vias (TSV) by X-ray microscopy and finite element modeling", in SEMATECH 2011 Workshop on 3D Interconnect Metrology, 2011
- [13] S. Brand, T. Appenroth, F. Naumann, W. Steller, M. Jürgen, P. Czurratis: "Acoustic GHz-Microscopy and its Potential Application in 3D-Integration Technologies", Electronic

Components & Technology Conference, (2015) 46-53

- [14] T. Graves-Abe, C. Collins, D. Moore, M. Farooq, R. Hannon, G. Barak, E. Dotan, A. Aloni, A. Belleli, M. Rybski, J Petrucci: "Novel Method for TSV Profile Metrology Using Spectral Reflectometry", SEMATECH Workshop on 3D Interconnect Metrology, July 2012 <u>http://www.sematech.org/meetings/archives/3d/10277/pres/2-TSV%20Spectral%20Reflectomet</u> <u>ry%20IBM%20Nova%20Lam%20-%20Public%20Version.pdf</u>
- [15] Y. Fujimori, T. Tsuto, T. Inoue, K. Suwa, K. Okamoto: "New methodology for through silicon via array macroinspection", Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS, (2017) 013013-2-9
- [16] T. Tsuto, Y. Fujimori, H. Tsukamoto, K. Suwa, K. Okamoto: "Advanced Through-Silicon Via Inspection for 3D Integration", Transaction of The Japan Institute of Electronics Packaging, 6, 1 (2013) 13-17
- [17] NEDO報告: 平成21年度~平成23年度成果報告書 ナノテク・先端部材実用化研究開発 ナノ領域の非破壊・三次元計測を実現する次世代X線管の研究開発, (2012) 2012000000877
- [18] Y. Umehara, W. Jin: "Unique nondestructive inline metrology of TSVs by X-ray with model based library method", Proc. Interconnect Technology Conference (IITC/AMC), (2014) 233-236
- [19] 小島史男:"逆問題解析の最新動向",日本 AEM 学会誌, 11,2 (2003) 66-72
- [20] 小島史男, 久保田直行, 谷口勝久: "簡略化ファジィ推論を用いた原子炉蒸気細管内の き裂深さ推定に関する計算手法", 日本機械学会論文集 C編, **65**, 637(1999)3614-3620
- [21] M. Prato, L. Zanni:"Inverse problems in machine learning: An application to brain activity interpretation", J. Physics Conference Series, Vol. 135, No. 1:012085, (2008)
- [22] 島津製作所:マイクロフォーカス X 線 CT システム紹介 URL (2018/7/16 閲覧) http://www.an.shimadzu.co.jp/ndi/products/x_ryct/smx_225ct_fpd_hr07.htm
- [23] YXLON 社 X 線検査装置紹介サイト <u>https://www.yxlon.co.jp/application/automotive</u> (2019/1/7 閲覧)
- [24] SAKI コーポレーション

X線検査装置紹介サイト<u>http://www.sakicorp.com/product/3DAXI.html</u> (2018/7/16閲覧)

- [25] 三和田靖彦: "X線CTによる形状計測とボリュームモデリングの現状と課題",精密 工学会誌, 82, 6, (2016) 497-501
- [26] 石井博之,岡田貴弘,三和田靖彦: "X線 CT を活用した3次元形状計測",精密工学会 1-26

誌, 69, 4 (2003) 473-476

- [27] 藤本弘之,佐藤理,佐藤真,岸武人: "X線CT装置の精度評価法標準化と高度化",精 密工学会誌,82,6(2016) 502-505
- [28] W. Sun, S.B. Brown and R.K. Leach: "An overview of industrial X-ray computed tomography", NPL Report ENG 32 (2012) ISSN 1754-2987
- [29] P. Menegazzi: "X-ray CT-Scan Digitizing for the Inspection and Computational Analysis of Complex Engine Parts", 1998 SAE 980307.
- [30] S.H. Dropps: "Reverse Engineering Using X-Ray Scan Technique", 1998 SAE 980307
- [31] T. Fujimiro, H. Suzuki: "Surface extraction from multi-material CT data", 9th international conference on computer aided design and computer graphics, Hong Kong Dec. (2005)
- [32] M. H. Shammaa, Y. Ohtake ,H. Suzuki: "Segmentation of multi-material CT data of mechanical parts for extracting boundary surfaces", Computer Aided Design, 42 (2010) 118-128
- [33] ザイキューブ社 URL <u>http://www.zy-cube.com/japan/business/business.html</u> (2018/12/17 閲覧)

第2章 X線透過像を用いたシリコン貫通ビアの

三次元形状簡易推定方法

2.1 緒言

三次元積層半導体チップの需要増に伴ってシリコン半導体の貫通ビア(TSV, through-silicon via) が多く用いられ[1],その製造工程における非破壊検査に対する要求も厳しいものとなっている [2][3]。

Fig. 2-1 は TSV の模式図を示す。理想的には、直径 10 µm 以下、ビアのピッチ 50 µm 以下の円 柱上の微細孔を設けた後に、銅のめっきを行って電極とするが、エッチング処理の穴開けの段階 での形状は、テーパ部などを含む複雑な形状となることがあり、エッチング後、引き続き行われ るめっき工程では、この形状が引き金となり、めっきされた銅のなかに空洞が発生しやすくなる などの欠陥発生が問題となる。実際の製造工程において、これらの寸法管理や欠陥の検出が併せ て求められている。さらに詳しくは、エッチ直後のビアの形状において管理すべき項目として、 ビアの開口径や深さ、ビアの壁面のウエーハ面に対する傾斜角度、ボーイングやネッキングと言 われるビアの深さ方向の膨らみやくびれがある。また、銅を充填後の TSV においては、集積回路 の信号伝送ラインとして、その信頼性に影響する銅の柱状部分の中に、空洞欠陥が存在すること があり、この空洞の検査においては、非破壊でサブミクロン以下の分解能が得られる測定系が必 要となる。



Fig. 2-1 Necessity of TSVs' three-dimensional profile measurement

第1章においても述べたが、近年X線CT技術を用いた装置によってTSVの三次元形状を測定する ことが可能になってきているものの[4][5][6]、検査に長い時間を要するとともに、CTスキャンの ための各運動機構および画像処理の精度を考えると、サブミクロンレベルの測定精度を保証する ことは容易でない。また、ナノフォーカスX線装置などサブミクロンの画像分解能の性能をもつ 観察システムでは、電子ビームからX線フォトンの変換効率が著しく低い(40 keVで0.3%程度) ことから、利用できるX線光子の量が少なくノイズレベルを抑えるには画像取得時にカメラの露 光時間や画像の積算回数を増やすなどの工夫が必要である。このことは、検査のためのスループ ットに影響を与えることが想定される。そこで一枚の透過画像を基にした高速・高精度な検査が 実現可能になれば、検査の処理効率が大幅に改善され製造工程に組込むことも可能と考えられる。 本章では、ナノフォーカスX線装置システムを試作し、一枚のTSVのX線透過画像から機械学習 を用いて、前章でも述べた所謂逆問題を解く手法で簡易三次元形状推定を行う方法を提案し評価 を行うものである。Fig.2-2 に評価に用いるナノフォーカスX線装置システム素に

示す。試作機は、温湿度等の環境変化や振動等にして安定な石定盤を基材とした精密ステージを 利用し、サブミクロン以下の撮像位置制御が可能な装置としている。詳しくは第3章にて述べる。



Fig. 2-2 ナノフォーカスX線装置システム試作機

Fig. 2-3に本論文で提案するTSVの形状推定方法の概略を示す。

- (1) TSV形状のモデル化: 同じプロセス条件で生成したTSV断面画像から簡易的に幾何学的形状 を定義し、学習用パラメータを抽出
- (2) X線透過像のシミュレーション: モデル化で定義したパラメータをもとに生成した機械学習 用のシミュレーション画像データファイルからなるライブラリを形成
- (3) 変換関数: 機械学習および透過画像から形状推定値への変換関数の生成
- (4) 実画像の切り出し: 生成した変換関数への入力となる画像を抽出
- (5) TSV形状の推定値の算出:実画像を入力とし、生成した変換関数から直接推定値を得る処理 となる。詳細は後述する。


Fig. 2-3 Schematic of simple TSVs' three-dimensional profile measurement

X線透過像からTSVの形状を推定するためには、多くの課題を解決する必要がある。

- 計算時間:エッチングによる仕上がり形状は単純な円筒形ではなくテーパを継いだような 複雑な形状となる [7]。多くのパラメータを用いた表わす形状でモデル化すれば精度は増す と考えられるが、それに伴って計算時間は長くなる
- (2) エッジ強調画像: X 線源の寸法を小さくしたナノフォーカス X 線が開発されて解像度は向上したものの,露光量の減少に伴って画質が低下しやすいことに加え,従来の線源での画像に比べ輪郭が強調される特徴があるため、シミュレーション画像を生成する際に、この現象に合致したエッジ強調処理が必要
- (3) 学習の収束性: データサイズの大きな画像データによる機械学習の収束性が不明
- (4) 形状推定の精度, ロバスト性: 実現できる分解能, 最終精度, ノイズに対するロバスト性な どが不明

といった課題がある。

X線透過画像を用いたインラインでのTSVリアルタイム検査を最終目的とし、本章では上記の (1) 形状モデル化, (2) ナノフォーカスX線透過画像のシミュレーション, (3) 機械学習の収束性 の検証までを行う。

2.2 透過像からのビア形状計測の課題

金属が充填されていないTSVのX線透過画像は、めっき後の像に比べてコントラストが弱い。 また、高分解能の画像を得るには、より絞られたX線源が必要であるが、得られるX線フォトン 数は少なくなる。高いSignal to noise ratio (*SNR*)の画像を得るには、高出力のX線源および微小な点 源に電子ビームを収束させる光学系を構築しなければならない。しかし、分解能と*SNR*はトレー ドオフの関係にあり、ナノフォーカスX線像のプロファイルは位相コントラスト[7][8]、量子ノイ ズやショットノイズによりエッジ認識が困難なケースが多く、形状推定の際の問題となりやすい。

X線CT法においては、多くのX線透過像から物体像のエッジを通常は段差の高さの中点をとる 半価幅中点法に従って閾値を設定し、物体の境界の判別を適切に行うことで、三次元データを再 構築しているが、サブミクロン領域ではエッジが強調された画像の影響、X線源のPoint spread function (PSF)[9]の大きさや形状の影響により、真のエッジを高精度で決定することは容易ではな い。よって、ソフトウェア処理の適切性が重要となる。

X線透過像にみられるエッジの影響について,容易に判別しうる事例として, φ5 μm×50 μmの 銅を充填したTSVを試作したナノフォーカスX線顕微鏡[10](同図(a))と市販の高分解能X線顕微 鏡(同図(b))で撮影した透過像とラインプロファイルの比較結果をFig.2-4に示す。Fig.2-4 (a)で は前述のエッジ強調の影響を受けてラインプロファイルに特徴がみられる。Fig.2-4 (b)ではエッ ジ強調の影響はないもののエッジの判別にはある程度の誤差を伴うことが想像され,形状推定を 高い再現性で行うには工夫が必要となる。

2-6



Fig. 2-4 Comparison of (a) the copper filled TSV image by the nano-focus X-ray source with a line profile of the image and (b) the images and its line profile same way by the conventional high-resolution X-ray source

銅の中ではX線減衰率は高いので、コントラストが強く、判断しやすい画像となっている。後述するシリコンウエーハ上にエッチングプロセス処理を行った直後のTSVはシリコンと空気の X線吸収率の差が小さいためFig. 2-4の場合よりも判断が難しくなる。

これまでに行われた研究事例から、2次元投影されたプロジェクション像であるX線透過像に対 して、その像の特徴点を画像処理により抽出して、投影画面上の座標系から全体空間上の座標系 に逆写像変換を行うことで、対象物体の形状を推定する方法が考えられる [11]、サブミクロン領 域をみるような X線像では、ガウシアンノイズやインパルス性のノイズを除去したうえで幾何学 形状を推定するため、透過像の前処理の推定精度への影響は避けられない。本研究では簡易なモ デル化を行い投影変換したプロジェクション像を学習することで、幾何学パラメータを高い再現 性で推定する方法を提案する。

2.3 形状推定原理と手順

2.3.1 物体形状の簡易モデルパラメータ定義

Fig. 2-5に、本研究で提案する形状推定のためのモデル化の流れを示す。まず、TSVの深さ方向のプロファイルをこの図に示すような簡易なモデルで定義する。TSVのSiエッチングプロセスで形成される形状の変動の実態に合わせつつ単純なモデルとした。

具体的には、テーパ形状となる図中のHI部分、プラズマ中のラジカル種挙動に依存する、ボ ーイングといわれる柱部分の膨らみが生じる同HI-2境界部分、テーパやノッチ形状、オーバエッ チを含む同H2-3境界や、同H4部分を定義することで形状の特徴を反映する[12][13]、さらに、扱 うTSVが柱状の回転対称体であるため、回転の中心軸を設定し、深さ方向で変曲点となるHI-4の 境界部分を計測点として、その部分の中心軸を通る直径のパラメータCDI-4、およびその径間を 深さ方向の高さのパラメータHI-4と定義すると、プロセス結果の特徴を8パラメータで分かりや すくできると考えられる。

また、TSVの形状の異常・正常の基準については、デバイス構造からくる要求に違いがあるが、 この基準を適切に設定することで品質管理に適用できると思われる。

2.3.2 透過像のシミュレーション

つづいて、定義したパラメータをもとに機械学習のためのシミュレーション画像のライブラリ を構築する。Fig. 2-5の左側に、上記内容のパラメータ設定から割り付けまでの流れとパラメータ の実際の割り付け、同図の右側に三次元のデータとして便宜的に使用するボクセルモデルデータ の構造イメージを示す。

まず、モデル化したパラメータの中心値と変動幅を決め、シミュレーションを行うためのデー タの範囲を決定する。これらは実際のプロセス実験の範囲で見られた変動の大きさに合わせて10 -20%程度とした。この範囲であれば現実的な量のシミュレーションとなり、機械学習用データ を構築しやすい。

次に、機械学習を、8個のパラメータに関する機械学習を均一に行うために、一様分布乱数を パラメータ次元分大量に発生させて、その中からランダムにサンプリングを行い、機械学習のた めのシミュレーション画像のパラメータを指定したセット数分(1セットは1画像分の8個分の パラメータとする)抽出する。これは、機械学習のデータを均一に割り付けることにより、学習 の偏りを防ぐ狙いがある。本研究では、後述のように200~4000セット分形状パラメータのデータ を用いたが、このデータ数、すなわち割り付けの総数をデータセット数として定義する。

さらに生成した乱数データをパラメータ定義幅に割り付ける。単純には、0~1間で生成された乱数を、パラメータ定義範囲内にはいるように範囲の幅と乱数の値の積をとり、範囲の最小値分の オフセット値を加算する。

透過像のシミュレーションには、その元となるボクセルデータと呼ばれるTSVをモデル化した、 三次元のデータを作成するが、その分解能の単位に合わせたデータとするために、割り付けた データを整数化する。この方法で生成した8次元の整数値ベクトルが教師データとなり、これを 元に、8パラメータを持つTSVのモデル立体形状を含むボクセルデータを生成する。

2-9



Fig. 2-5 Generation of parameters for simulated X-ray projection images

次に、ボクセルデータに基づくシミュレーション透過像の計算方法をFig. 2-6で説明する。これ は物体座標の投影面への座標変換を示したものである。なお、説明を簡単にするため、物体の形 状を円錐形として表現した。まずはX線源の座標、モデル化したパラメータから生成した被推定 対象の物体の座標、像が投影されるプロジェクションスクリーン上の位置座標の取り扱いについ て説明する。

すなわち,形状推定対象の物体のパラメータから生成したボクセルデータを物体の方向に合わ せて任意に設定されるローカル座標上で定義し,その物体をプロジェクションスクリーン上に写 して,その上から眺める位置にあるX線源の位置を原点に,視点座標とワールド座標の原点を定 義する。

視点座標の原点からの,X線の放射による物体の投影画像生成による,プロジェクションスク リーン上の像の位置座標を算出するために,座標系間の変換として,3次元アフィン変換を適用 し,ローカル座標からワールド座標に,さらにワールド座標から視点座標系変換を行い,最後に 射影座標系への変換を行うことで,ローカル座標で定義された物体のボクセルデータを射影座標 上に関連付けることができる。この変換は以下の式(2-1)~(2-3)により行われる。

$$P_W = Q_W \cdot P_L \tag{2-1}$$

$$P_V = Q_V \cdot P_W \tag{2-2}$$

$$\begin{bmatrix} x_p \\ y_p \end{bmatrix} = \frac{F}{z_v} \cdot \begin{bmatrix} x_v \\ y_v \end{bmatrix}$$
(2-3)

ただし,式(2-1),(2-2)において P_L , P_W , P_V は3次元同次座標上のベクトルで表わされ,それぞれ ローカル座標,ワールド座標ベクトル,視点座標ベクトル, Q_W , Q_V はそれぞれローカル座標か らワールド座標系,ワールド座標から視点座標への3次元アフィン変換マトリックスを示す。ま た x_p , y_p , x_v , x_v , z_v は,それぞれ物体が投影されたプロジェクションスクリーン上,視点座 標系の座標,またFは、X線源とプロジェクションスクリーン面との距離である。



Fig. 2-6 Coordinate transformation of geometrical parameters of a sample object

さらに、X線が物体を透過し、投影面に到達するまでにSiなどの材料により吸収され、投影面上 にコントラスト像を生成するために、式(2-4)に従って減衰量を計算する。

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu t} \tag{2-4}$$

ここで, *I*, *I*₀はそれぞれ物体面に照射されるX線強度および物体を透過して減衰したX線の強度である。また, *t*はX線が透過する材料の厚さ, *µ*は減衰率を示す。 透過する物体が複数の材料を含む場合は, 透過するX線の方向に沿って積算された厚さの分に依

存し、かつその順番に依存して減衰量が決定されることになるため、以下の式(2-5)によって各投 影座標上の点のX線強度を計算することができる。

$$I = I_0 \prod_{i}^{n} e^{-\mu_i t_i} \frac{e^{-\mu_i t_i}}{d_{oi}^2}$$
(2-5)

ここで、Iは投影面状のX線強度、IoはX線源位置での強度、µiは物質iの減衰率、tiは同じX線透過 方向の物質iの厚さ、doiはX線源から物質iのX線源投影像側の面までの距離である。この計算を投 影面の画素ごとに行い、吸収減衰コントラスト像を生成する。また、前述のようにナノフォーカ スX線源では画像内の物体のエッジが強調されることがある。従来のX線源から得られる画像よ りもエッジ位置が強調されることから、形状推定時にノイズに対するロバスト性が得られること が期待される[14]。

本章で使用したナノフォーカスX線顕微鏡の透過像でみられるエッジ強調の影響について, Fig. 2-7に示す方法で推定した。まず,X線像の解像度を評価するため,0.4µmの幅のラインパター ンのある日本検査機器工業会規格JIMAチャートのX線透過像を撮像した(Fig. 2-7(a)) [15]。次に, そのラインプロファイル中のステップ部分からLine spread function (LSF) [16]を抽出し,カーブフ ィッティングを行い X線源のPSF起因の透過像に畳み込まれるフィルタ関数を推定した。この結 果から,理想のJIMAチャートのプロファイルにラプラシアン - ガウシアンフィルタが畳み込まれ た画像と同等になることが示される。 この結果から、本研究で用いたナノフォーカスX線源により得られるエッジ強調された透過像 は、このフィルタを模した処理を行うことでシミュレーションにより正確に再現できる。前述し た通常X線源を用いる場合よりも、本研究で使用するナノフォーカスX線源の方が分解能が高く、 さらに透過像中の物体のエッジが強調されることで、形状推定精度が高められる効果が期待でき る。



Fig. 2-7 Principle of extraction of line spread function (LSF), (a) JIMA chart image with lines and spaces of 0.4μm taken by the nano-focus X-ray source that has a W pillar with a size of 1 μm in this case, (b) its line plot, (c) enlarged view of LSF, (d) curve fitting result of LSF as a model of Laplacian of Gaussian function

透過像のシミュレーションにおいて、吸収減衰画像およびそのエッジ強調処理画像、すなわち Fig. 2-7で推定したフィルタを模したラプラシアンフィルタ処理を行った画像を組み合わせた結 果をFig. 2-8に示す。この透過像はSiのエッチング直後のCuを含まない場合のTSVである。この2 つのシミュレーション画像に対する重みづけ係数として、それぞれWa、Wpを定義し、その係数 と画像データの積をとり、固定したDCオフセット値を加算し、近似画像を作成する。Wa、Wp は実画像のエッジ強調されたプロファイルに合わせて、もっとも近いプロファイルになるように 調整する。

この調整のために、あらかじめ、 W_a/W_pの比率を変えたシミュレーション画像とラインプロファ イルの比較を行い、実際の透過像のプロファイルに近い係数の比率を、目視で判断し選択した。 その比較画像をFig. 2-9に示す。実画像に近いプロファイルが得られている。



Fig. 2-8 Schematic of simulated X-ray projection images generation of TSVs



Fig. 2-9 Simulated images and cross sectional profiles with variant W_a/W_p ratios

2.3.3 シミュレーション画像を用いた機械学習

次に, Fig. 2-10に示したように機械学習のアルゴリズムとしてサポートベクタ回帰すなわち Support vector regression (SVR)を適用し,あらかじめ作成した8次元パラメータとシミュレーショ ン画像との関係を学習して,入力画像データから形状パラメータに直接変換する変換関数を生成 する[17][19]。この変換関数は以下の式(2-6)で表される。

$$y_{meas} = \sum_{i=1}^{s} v_i K(x_i, x_{realdat}) + b$$
(2-6)

ここで、それぞれ ymeasはTSVの形状パラメータCD1-4, H1-4の値のベクトル、 viは中間層と出 カ相関の重みづけ係数、 Kはカーネル関数、 xi は機械学習で使われる画像の1次元のサポートベ クタ、 xrealdatは形状推定時の入力実画像の1次元のサポートベクタ、 bはSVR学習課程で決定さ れる定数項ベクトルである。



Fig. 2-10 A schema of machine learning of support vector regression of simulated X-ray projection images of TSVs

この変換関数を生成するには、まず、先に構築したシミュレーションの透過像の画像データを まとめたライブラリから、各画像をそれぞれ二次元の配列から一次元の配列に変換し、サポート ベクタを作成する。そしてこのサポートベクタを入力データとして計算を行う。

このサポートベクタを割り付けた画像のデータから,式(2-6)のカーネル関数と呼ばれる写像関数を定義して機械学習を行い,後述する重み付け係数の最適化を行うことで,実画像の2次元データを同様に,1次元に変換して生成したサポートベクタデータから,8次元の形状パラメータを 直接導出する変換関数を生成することができる。

2.3.4 形状推定対象画像の抽出

実画像から目的のTSV部分の画像を適切に抽出し、変換関数の入力とする処理を行う必要がある。実際のX線画像からターゲットのTSV部分の画像の抽出を行った事例をFig. 2-11に示す。

ここでは、(a)実際のTSV画像サンプル、(b)正規化相互相関マッチングを行った際のマッチング スコアのマップ、(c)シミュレーションで作成したテンプレート画像、(d)抽出した画像をそれぞれ 示した。このターゲットとなるTSV部分の画像抽出は、シミュレーション画像中の物体像と、テ ンプレートマッチングにより位置合わせすることで、投影時のX線源位置と物体との位置関係が、 実画像とシミュレーション画像でほぼ同じになる。

またここでは、物体の実画像中の位置は中央部付近にあるという条件を限定したサーチを行う。 ディテクタ側のカメラのインパルス性のノイズや、ガウシアンノイズも見られているため、実画 像に対し、あらかじめメディアンフィルタによるノイズ低減処理を行うことで、ノイズ起因の位 置誤差を低減することができる。(c)(d)の画像左側部分の円形部の位置は、概ね大きくとも2~3 ピ クセル以内の誤差で同じ位置にあることわかった。画像の画素分解能は0.1 µm/ピクセルである。 このことから、画素サイズレベルでの高い精度の形状推定ができることが期待できる。



(a)A searched matched image

(b)Matching score map



(c)A simulated template image (d)An extracted real imageFig. 2-11 Example results of template matching of a real X-ray image

2.4 シミュレーション画像による形状推定の数値実験

2.4.1 形状モデル定義とパラメータ設定

TSVのモデル化パラメータは、X線像観察用以外に、同様なエッチングプロセスでSiウエーハ上 に形成したTSVを集束イオンビーム(FIB)で断面加工し、走査型電子顕微鏡 (SEM) で寸法計測 を行い、学習用パラメータの中央値として利用した。計算に使用したパラメータや座標値を表2-1 に示す。

X-ray atten	0.993								
X-ray sourc	(0, 0,	0)							
Center of T	(67.2, (), 500)							
Center of P	(0, 0,	32500)							
Parameter	Median	Range	Parameter	Median	Range				
CD1	8.0	2.0	H1	23.5	1.0				
CD2	8.0	2.0	H2	56.5	3.0				
CD3	5.6	1.5	H3	5.0	1.0				
CD4	5.0	1.5	H4	0.6	0.5				
$Depth^{**} = H1 + H2 + H3 + H4$									

Table 2-1 Conditions for numerical experiments

*All samples used for experiments were as-etched ones. So the constant only for Si was picked up. ** Targeted depth was 90μm. But for the modeled sample it resulted in a depth of less than 90 μm.

想定される装置上のX線源,物体,投影面の位置関係については,Fig.2-6に示したとおりであ る。ローカル座標系,ワールド座標系,点座標系は計算を簡単にするために平行移動のみとし, X線源をワールド座標系,視点座標系の同一原点とした。またTSVのあるSiウエーハ上の平面は 投影面と平行であると仮定した。TSVの回転軸とSiウエーハ上面の交点であるTSVのローカル座 標の原点とのX線源との角度はX,Y平面上は0度,Z軸となす角度αを実際の装置を想定し,12.7 度と設定してシミュレーション画像を計算する。

機械学習用の教師データである8次元の形状パラメータについては、前述のように、一様分布乱 数発生器を用いて生成し、表2-1で定義した寸法パラメータの定義範囲 (Range) に、均一に分散 するようにデータを作成する。ランダムに抽出した学習用画像セットは200~4000個分のデータセ ットを用意した。

2.4.2 シミュレーション画像の生成

シミュレーション画像の元となるボクセルデータは、抽出したパラメータを整数化したものを ベースに、ボクセルサイズが800×800×1000となるように作成した。このボクセルサイズの物体 に対して、表2-1の座標パラメータをもとに投影面に座標変換を行い、式(2-5)を適用しながら画 像輝度値Iの値を算出する。

透過減衰画像とエッジ強調画像の重み付け係数Wa,Wpは,前述したFig. 2-9のラインプロファイルの目視の比較より,その比が0.2/0.8となるように決定し画像シミュレーションを行なった。

投影された画像から*CD1*の直径をもつ円の中心点となる位置が、画像データ上で同じ配置にな るように、あらかじめ用意した400×200ピクセルサイズのテンプレート画像を用い、正規化相互 相関マッチングにより、透過像をシミュレーションした直後のサイズの大きな画像データから、 400×200のサイズの学習用画像データを抽出した。この処理により、抽出した画像中の物体の配 置が同じ位置に保持される。

得られた画像は16 bit分解能画像データとなるようにライブラリデータとして保存し、先に述べた8次元の形状パラメータとともに、機械学習時に使用した。これらはコンピュータのメモリ容量と計算量を考慮して、データサイズをできるだけ小さくするために行ったものである。

2.4.3 サポートベクタ回帰による機械学習

前項で生成した8次元データの整数値とした教師データと,200-4000のデータセット数分のシミ ュレーション画像の輝度値の2次元データを,前述したように,1次元ベクトルのサポートベクタ に変換し,SVRのトレーニング関数に学習データとして入力した。カーネル関数は,非線形な問 題を扱い場合に標準的に使われる,Radial basis function (RBF)を採用する。また,SVR内部処 理として,コストパラメータや損失関数のイプシロンと呼ばれる値は,グリッドサーチ法により 決定し,さらにSVRの処理関数に組み込まれているマージン最大化と呼ばれる最適化処理により [17][18]重みづけ係数値を決定し,変換関数を生成した。これらの処理は,SVRの機械学習におい ては汎用的に使われている手法である。

学習度合の指標を得るため、学習用以外のシミュレーション画像データを同じパラメータの範囲の500個のデータセット分生成し、学習用に生成したデータセット数に対する画像のパラメータ値と測定値の差分の標準偏差値(STD)を計算し、学習の収束度合を調べた。

2.5 実験結果と検証

実験結果として、これまで述べた方法論であるSVR機械学習の収束性と誤差評価を示す。 Fig. 2-12は、寸法パラメータCD1-4、H1-4について学習用データセットの数と推定再現精度の関係のプロットを示す。

このプロットより、データセットの数が大きくなるにつれて、カーブは収束していくことがみ られる。適用したSVRによる機械学習は、1セット160kバイト以上あるシミュレーション画像の ような大きなデータをひとつのサポートベクタとして4000に及ぶデータセットを入力しても、明 らかに学習は収束し、推定再現精度の指標としてのSTD値が改善する傾向があることがわかる。 同図より、回転対称体としてのTSVの形状の直径パラメータであるCD1-4については、この学習 により画像のピクセル分解能を0.1µmを超える推定再現性を得られることが判明した。

また,深さ方向のパラメータである*H1-4*においても,0.2 μm以下の再現性が得られている。この収束性の評価に用いた*STD*値は,被推定対象であるシミュレーションで生成した形状パラメータに対する推定誤差Root mean square error (*RMSE*)と同等であるため,想定される推定誤差もそのまま同じ値で扱うことができる。



Fig. 2-12 Simulated standard deviation vs number of datasets for machine learning

表2-2に4000データセットを学習した時のシミュレーション画像に対する推定誤差RMSE値の一

覧を示す。

ITEM	CD1	CD2	CD3	CD4	
RMSE	0.009	0.009	0.010	0.021	
ITEM	H1	H2	H3	H4	Depth
RMSE	0.102	0.169	0.128	0.038	0.037

Table 2-2 RMSE of estimation results of geometric parameters

* All units in µm. All results estimated by transfer function formed by machine learning of 4000 datasets.

*RMSE*値が*CD1-4* においては0.01 µm以下になるものもあり、パラメータの中央値の8 µmに対して、また同様に、実験のプロセスのターゲット深さ90 µm程度の値に対しても、*H1-4、DepthのRMSE* 値は1%以下であり、インライン検査として十分な推定誤差といえる。 このCD1-4とH1-4のSTD値の違いの原因については, Fig. 2-4の座標系の位置関係において, 投影面に対する角度の違いが影響していると考えられる。すなわちH1-4がCD1-4より誤差が大きいのは, X線源から見た傾斜角度が大きく, 画像上はその寸法は圧縮された状態となるためと考えられる。12.7度の傾斜は, 深さ方向は画像として22.5%に圧縮されたものとなるのに対し, CD1-4はほぼ100%であり, 誤差が異なるのは避けられない。

2.6 結言

本研究では、シリコン基板に形成したthrough-silicon via (TSV)の形状をナノフォーカスX線透過 像から推定する方法論を提案し、インライン検査への適用する際の理論的な妥当性を検証するこ とを目的とし、シミュレーションによる数値実験を実施した。これにより結果は以下のようにま とめられる。

- TSV 形状パラメータを、その生成プロセス処理の特徴を反映した8次元のパラメータを持つ簡 易モデルを定義することにより、本提案方法でのシミュレーション画像による評価にて、再 現性の高い形状推定を行えることを示した。
- (2)使用したナノフォーカスX線顕微鏡の0.4 µm ラインパターンを含むJIMA チャートを、使用したX線源のPoint spread function (PSF)の解析結果から、エッジ強調画像されたTSVのX線 透過像の精密なシミュレーションを行う方法論を述べ、実画像に近いプロファイルのエッジ強調がみられる画像を再現できることを示した。
- (3) 8 次元のパラメータでモデル化したシミュレーション画像を機械学習した結果,学習は明らか に収束し,形状推定誤差は,対象の物体の大きさ \$ 8 µm × 90 µm 程度のサンプルに対して,0.1 µm 画素ピッチの画像から,直径パラメータ *CD1-4* については *RMSE* 値で 0.1 µm 以下,深さパ ラメータ *H1-4* においても同様に 0.2 µm 以下と,インライン検査で必要な推定精度や再現性が 期待できることを示した。

しかし、冒頭述べたように、方法論についてはまとめたが、ナノフォーカスX線透過像は分解 能が高いものの、ショットノイズやガウシアンノイズが多く、SN比の低い実画像を用いて形状推 定した場合についての誤差検証はできておらず、ノイズに対するロバスト性評価や過学習による リスクを含め、本方法論の推定誤差ならびに再現性検証を行う必要がある。

2.7 参考文献

- [1] D. Henry: "TSV vertical based interconnections, overview, state of the art", AIDA Meeting, April (2013)
- [2] V. Vartanian, R. A. Allen, L. Smith, K. Hummler, S. Olson, and B. Sapp: "Metrology needs for through-silicon via fabrication", J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS, 13,1 (2014) 011206_1-9
- [3] Y. Umehara, W. Jin: "Unique nondestructive inline metrology of TSVs by X-ray with model based library method", Proc. Interconnect Technology Conference (IITC/AMC), (2014) 233-236
- [4] 石井博行,岡田貴弘,三和田靖彦: "X線CTを活用した3次元形状計測",精密工学会誌, 69,
 4 (2003) 473-476
- [5] 開本亮,塩田忠広,岸武人,大西修平: "マイクロフォーカス X 線 CT 技術と半導体検査への 応用",電子情報通信学会技術研究報告,CPM,電子部品・材料 103(34),(2003) 55-58
- [6] 高堂積,有田宏志,大野恭秀: "X線 CT装置による樹脂封止 IC のワイヤ流れ形状計測",電子 情報通信学会論文誌 C, Vol. J84-C, No.5 (2001) 400-404
- [7] S. Zabler, T. Ebensperger, C. Fella, R. Hanke: "High-resolution X-ray imaging for lab-based materials research", Conference on Industrial Computed Tomography (ICT), Wels, Austria, 19-21 (2012) 117-127
- [8] 百瀬敦: "X線位相イメージングとX線位相CT",精密工学会誌, 82,68 (2016) 513-517
- [9] K. Sarat: "Deconvolution of the point spread function of an x-ray image intensifier", (1994).Retrospective Thesis and Dissertations. Paper 231
- [10] 浜松ホトニクス,東京エレクトロン: NEDO 成果報告, 管理番号 2012000000877 (2012)
- [11] 諸貫 信行, 内山 賢治, 菊地 吉史: "画像処理による微小物体の三次元運動計測", 精密工
 学会誌, 67,9 (2001) 1502-1506
- [12] T. C. Tsai, W. C. Tsao, W. Lin. C. E. Hsu, C. L. Lin, C. M. Hsu, J. F. Lin, C.C. Huang, J.Y. Wu: "CMP process development for the via-middle 3D TSV applications at 28nm technology node", Microelectronic Engineering, 92 (2012) 29-33

- [13] S. Toyoda, A. Shibata, M. Harada, T. Murayama, T. Sakuishi, M. Hatanaka, Y. Morikawa, K. Suu: "TSV Process Solution for 3D-IC", IEEE 3DIC Jan. 31- Feb. 2, Osaka, Japan (2012)
- [14] A. Ishisaka, H. Ohara, C. Honda: "Theoretical Analysis of Phase Contrast Imaging for Mammography", Konica Minolta Technology Report, 2, (2005) 31-36
- [15] 日塔 光一, 宮部 圭介, 中山 邦彦: "X 線カラ—I.I.を用いたナノ検査技術", 東芝レビュー, 63, 2 (2008) 15-18
- [16] S. Zabler, T. Ebensperger, C. Fella, R. Hanke: "High-resolution X-ray imaging for lab-based materials research", Conference on Industrial Computed Tomography (ICT), Wels, Austria, 19-21 (2012), 117-127
- [17] B. Scholkopf, A. J. Smola, R. C. Williamson, P. L. Bartlett: "New support vector algorithms", Neural Computation, 12 (2000) 1207-1245
- [18] C-W. Hsu, C-C. Chang, C-J. Lin: "A Practical Guide to Support Vector Classification", Technical report, Department of Computer Science and Information Engineering, National Taiwan University (2003) 1-12
- [19] C. C. Chang, C. J. Lin: "LIBSVM: a library for support vector machines", ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, (2011) 2:27:1-27:27
- [20] <u>http://henke.lbl.gov/optical_constants/atten2.html</u> (2019/1/7 閲覧)
- [21] <u>https://www.cstl.nist.gov/div837/837.02/epq/dtsa2/index.html</u> (2018/5/31閲覧)
- [22] 牛山善太, 草川徹:"シミュレーション光学",東海大学出版部 第4章 (2003)131-187
- [23] <u>http://academic.mu.edu/phys/matthysd/web226/Lab02.htm</u> (2018/6/1閲覧)

付録

透過像においてエッジ強調される現象の考察

X線顕微鏡システムによる透過画像は、X線光源(点源)の大きさにより、その分解能と ぼけ具合が決定される。X線透過像を得る顕微鏡光学系において、Point spread function (PSF) を解析することで、本来見えるべき物体の形状に、ぼけ関数として、真の透過画像にコン ボリューションによりたたみこまれる関数処理により、実際の透過画像をシミュレーショ ンし、本章で提案をおこなっている透過画像の再現精度を高めることが可能となる。

本付録では、X線光源のPSFのモデルを定義し、本章のFig. 2-6 にも示したが、JIMAチャ ートを用いたX線透過画像のプロファイルの解析から、Line spread function (LSF)の抽出を経 て、カーブフィッティングによるPSFの推定を行い、エッジが強調される透過画像のシミュ レーションによる再現を試みて、その検証を行なった。

1. X線源のWターゲット形状

Fig. a-1 に、ナノフォーカスX線源による透過画像取得実験に用いたX線発生源となるW のターゲット部の断面像と、X線顕微鏡システムの模式図を示す。このWのターゲット部 は、ダイヤモンド基板に Focus ion beam (FIB) により穴あけ加工を行い、引き続きW(CO)。 ガスをイオンビームアシストにより、穴の中にWのデポを行って形成したものである。こ のターゲットを開放型X線源の開放部に設置し、収束した電子ビームを、上方からこのく さび上のWの柱状のターゲットに照射することで、X線を発生させることが可能となる。

このWのターゲットに対して加速された電子がFig. a-2 に示すように、一部の電子は反射 電子や2次電子としてX線管側に戻るが、一部はWターゲットの中に打ち込まれ、Wから制 動放射X線や特性X線として顕微鏡システム内へ放射される。この際に、電子は散乱され一 部はWターゲットの外に飛び出し、ダイヤモンド基板にも広がる。このとき炭素元素由来の X線フォトンも発生する。この電子が拡散する範囲は一次側の電子の加速電圧で決定され、 本研究での条件では、Fig. a-2 に示すように2 µm の長さのWターゲットでは、柱状のWの 深部まで到達しないことが考えられる。そこで、X線放射のシミュレーションを行った結果 を第2項で示す。



Fig. a-1 Cross-sectional SEM view of a W-pillar used as a nano-target X-ray point source



Fig. a-2 Scheme of the electron scattering region near around the W-pillar

2. モンテカルロシミュレーションによる光源形状の推定

本項では、電子の挙動に対して、モンテカルロシミュレーションを行うことで、Fig. a-3 に示した柱状のWターゲットモデルに対して発生されるX線の強度分布、ならびにスペク トルを再現する[第2章参照文献21]。



Fig. a-3 Simplified model of the W pillar target

Fig. a-4 にそのシミュレーション結果を示す。

下側のスペクトルは,発生する制動放射を含むWの特性X線のスペクトルを示している。 左上の図にはWターゲットへの加速電子照射により,シミュレーションのスペクトル上に ピークとして存在する,比較的強度の強い特性X線(WL2-M2)の発光領域を茶色で示し ている。また右上の図には電子の軌道の変化と主たる発光箇所を緑色で示している。この 結果から発生するX線フォトンは,主としてWのターゲットの一部の領域から放射され, その領域はWターゲットの形状に倣った円柱形状に近いと考えられる。またその深さは約 1 um 程度とみられ,Wターゲットの最深部までは到達していない。



Fig. a-4 Simulation results of emission of X-ray by accelerated electron with 40 KeV

3. Point spread function (PSF) の推定

前項で示したシミュレーションによるX線源の形状から推察されるのは、円筒型に近い形 状の点源である。実形状は、先細りのくさびの形状であるが、矩形形状に近いと考えられ る。このことから、ステップ形状のパターンの画像があれば、PSFのプロファイルが、その 像に畳み込まれるため、JIMAチャートからPSFのプロファイルを抽出して検証することを 考える。

実画像からPSFの情報を得るために、まずは、ステップ形状のプロファイルをedge spread function (ESF) として畳み込まれたPSFのプロファイルを、1次元ライン方向に展開したと 考えられるline spread function (LSF)として抽出することを考える。

Fig. a-5 は, ステップ (STEP) 関数, ESFならびにLSFを距離xに対してプロットし, その 関係を示したものである。ここで

STEP(x) = 1 $(x \ge 0)$

 $STEP(x) = 0 \qquad (x < 0)$

と定義し、JIMAチャートのようなエッジ像の強度分布であるESF(x)は、STEP関数とLSFの畳 み込みで表現され以下の式(a-1)のようになる。

$$\mathrm{ESF}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} STEP(x) LSF(x - x_k) d_{x_k} \tag{a-1}$$

xi=x-xk とおけば、参考文献[22]の方法に従ってその式(a-1)の変形を行うと、

$$LSF(x) = \frac{d(ESF(x))}{dx}$$
(a-2)

と表すことができる。すなわち, ESFの変化分からLSFを抽出することが可能となる。 このことは, 第2章のFig. 2-6 (c) に示した内容と合致する。



Fig. a-5 STEP function, ESF and LSF



再揭 **Fig. 2-6** Principle of extraction of line spread function (LSF), (a) a JIMA chart image with lines and spaces of 0.4µm taken by the nano-focus X-ray source that has a W pillar with a size of 1 µm in this case, (b) its line plot, (c) an enlarged view of LSF, (d) a curve fitting result of LSF as a model of Laplacian of Gaussian function

一方,先のモンテカルロシミュレーションにて,X線の発光源の形状が見えているが,Fig. a-6 のようにその形状を近似し,数学的にあるべきプロファイルの計算を試みる。すなわち, 発光源は、もし均一なWの膜であれば、ガウス分布に従った発光源とみなし、その分布は、 Fig. a-6 に示すようにガウス分布した形状が、円柱状の関数で切り取られるとするモデルを 考える。

まず、矩形関数(RECT(x))とX線光学系の照度分布をG(x)としてガウス分布に近い関数 と定義し、このRECT(x)で切り取られる部分を、発光源の形状であるPSF(x)とするモデルを 当てはめてみることができると考える。ここでRECT(x)は、変換式を作成しやすいように (-ω/2, ω/2)の範囲で定義すると、

 $\operatorname{RECT}(x/\omega) = 1$ $(|x/\omega| \le 0.5)$

 $\operatorname{RECT}(x/\omega) = 0 \qquad (|x/\omega| > 0.5)$

と表現できる。またそのフーリエ変換は、関数のフーリエ変換をF[]で表すと、

$$\mathbf{F}[\operatorname{RECT}(x)] = |\omega|\operatorname{sinc}(v)$$

(a-3)

一方, G(x)を便宜的に単純なガウシアン関数で表すと,

$$\mathbf{G}(x) = e^{-ax^2}$$

そのフーリエ変換は,

$$\mathbf{F}[\mathbf{G}(x)] = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\left(\frac{v^2}{4a}\right)} \tag{a-4}$$

となる。

X線の点光源のPSFが、G(x)とRECT(x)の積のインパルス応答で表されるとすると。

$$PSF(v) = \mathbf{F}[RECT(x) G(x)] = \mathbf{F}[RECT(x)] \mathbf{F}[G(x)]$$
(a-5)

したがって,

$$PSF(v) = \mathbf{F}[RECT(x) G(x)] = |\omega| \operatorname{sinc}(v) \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\left(\frac{v^2}{4a}\right)}$$
(a-6)

となる。Fig. a-7 に上述の計算式のシミュレーションした結果と,同時にFig. 2-6 で抽出したPSFのプロットにフィッティングさせた結果も合わせて示す。



Fig. a-6 Simplified model of PSF

このことより, Fig. a-6 で仮定したモデルとの整合性がみられる。



Fig. a-7 Plots of Fourier transformed function described in eq. (a-4), (a-6)

4. エッジ強調される現象のシミュレーション画像による検証

実際の生成したシミュレーション画像のエッジ強調処理では,sinc関数のテーラー展開で 近似した後の第2項までの関数の類似性から,ほぼ同様のプロファイルが得られるLaplacian of Gaussian フィルタ[第2章参照文献23]を代用し, 畳み込み演算処理としてエッジ強調画像 を生成するために用いた。Fig. a-8 にその結果を示す。

このシミュレーションで得られた結果は、先のFig. 2-6 との整合性がみられており、透過 画像のエッジが強調される現象は、前述したナノフォーカスX線源の柱状形状のWのPSFの モデルを設定することで、実際に近い状況を再現ができると考えられる。



Simulated enhanced edge profile of the JIMA chart

Fig. a-8 Convolution result of simulated JIMA chart image

第3章 三次元形状測定における不確かさの見積もり

3.1 緒言

第1章でも述べたが、高密度で三次元積層構造の電子回路デバイスを構築する上で標 準的に使われる φ5 μm×50 μm 程度の大きさのシリコン貫通ビア(through-silicon via: TSV) を、その製造工程において要求される仕様の寸法を満足しているかを判断し、すみやか に対処を、行い現工程の歩留りを改善するには、非破壊でその形状測定や欠陥検出など のインライン検査を行うことが要求される [1-5]。この要求を満たす方法としては、ナノ フォーカス X 線透過画像取得による非破壊検査方法が有力候補として挙げられる [6] 。 Fig. 3-1 に本論文を通して紹介しているナノフォーカス X 線装置システムによる TSV の X 線透過像の特徴の1 例を示す。この画像は、右側の図に示すように φ 10 μm×90 μm の大きさのものを示している。この画像から, X 線画像特有のインパルス性のノイズお よびガウシアンノイズが存在して、必ずしも画像の Signal-to-noise ratio (SNR)が良好とは 言えないものの,使用した X 線波長の領域において基板の Si と空気の X 線吸収係数の 差が小さいにも関わらず[7],Siと空気の境界部分に明確なコントラストが得られること を示している。本研究で用いたナノフォーカス X 線源の特徴として,この X 線源を用い て撮像を行った際に、観察対象の物体部分の材料と周辺の材料の境界部分を強調して写 し出す効果があることを前章で述べた。このことはノイズの影響が懸念されるにも拘わ らず、画像からの TSV の寸法形状測定の高い精度、再現性を得るには有利に作用する可 能性があるものと期待される。ナノフォーカス X 線検査システムがビアの寸法測定を行 うインライン検査手法として成り立つには、ビアの大きさに対し10%程度以下の精度と 1%以下の測定再現性が要求される。標準で使われる φ5 μm x 50μm の大きさのビアにお いては直径に対し 0.5 µm 以下の精度, 0.05 µm 以下の再現性となる. この測定精度と再 現性が要求される評価を行うには、サブミクロンレベルでの位置決め再現精度を実現す るステージシステムを備える精密な機構を構築する必要がある。本研究では、高速で位

3-1

置決めを行える精密ステージを備えた X 線顕微鏡システムを試作し,検査手法としての 可能性の評価を行うことを目的とする。



(b) As-etched TSV views with X-ray microscope **Fig. 3-1** Through-silicon vias

3.2 形状測定方法の課題

寸法形状測定方法の要求をみたすかどうかを評価判断するには、以下のような課題に対処する 必要がある。

(1)ナノフォーカスX線顕微鏡を利用した測定システム全体としての不確かさは、これまでは要因分析ならびに見積もられていない

(2)不確かさの定式化がおこなわれていない

(3)サブミクロンレベルの物体を測定する上での校正方法が明確でない

(4)不確かさの要因について定量的な解析が行われていない

半導体デバイスの検査システムへの適用を考慮すると、まずは、単に形状推定にとどま らず、校正方法の手順を確立することで、形状の測定法として使えるようにする必要があ る。さらに、測定システムとしての信頼性を確認するため、形状測定誤差に影響を与える 要因について解析し、それぞれの要因について寄与の度合の大きさ明らかにして、測定誤 差の改善を図る必要がある。

具体的には、校正用のグリッドパターンである標準デバイスを用いて、走査型電子顕微 鏡(SEM)およびX線透過像によるキャリブレーションを行い、既知の試料を用いて測定を 試みることでシステム全体の測定の不確かさを要因分析することを考える。

本章では、以下の4項目に注力する。

(1)システムの不確かさの解析と要因の分析を行う

- (2)形状推定誤差について標準偏差(STD)値のみならず,平均2乗誤差(RMSE)およびシ ステム全体で分析した要因についての合成不確かさ,および拡張不確かさを分析し定 式化する
- (3)X線顕微鏡システムを測定ツールとするための校正方法を明らかにする
- (4)不確かさに影響のある要因について、定量的な解析を行う
3.3 不確かさの解析と要因分析

3.3.1 測定システムの構成

形状推定の不確かさの分析の前に,不確かさに影響を与えると思われる電気や機械の基 幹コンポーネントを含むシステムの全体構成および仕様を明確にしておく必要がある。

Fig. 3-2に使用した測定システムの詳細なステージ構造と,撮像系の模式図を示す。このシステムの主たる特徴は以下の通りである。

- (1)ステージシステムの全体のメカ的な精度を担保するため,Fig. 3-2 (a)に示すような含 水率が低く,経時変化に対して形状が安定なグラナイト材を加工して構築した石定盤 ステージ上に,ガントリー型の構造でZ軸を配置し,その上にX線源を置いてくさび 型クロスローラガイドステージにより上下駆動を行う。石定盤ステージは, XYステ ージとして,複数のリニアガイド,リニアアクチュエータを配備し,XY軸方向の精密 位置決め駆動を行う。また,表面にTSVを生成したシリコンウエーハ試料をチャック して,Fig. 3-2 (a)に示すX線を透過できるように穴あきの微動ステージを設置する。ま たX線カメラは,ボールねじ駆動の1軸精密ステージ上に装着し,X線源とカメラ面の 傾斜角度を決定できるように駆動操作を行う構造とする。
- (2)ナノフォーカスX線源の発光源として, Fig. 3-2 (b)にみられるような, ф0.5 µm×2 µm 深さの大きさの柱状構造をしたタングステン(W)の微細なロッドを,ダイヤモンド基板 上部に形成する。この基板を開放型X線源のターゲットとして装着し,40keVの電圧で 加速して電子ビームを照射し,ナノフォーカスX線光源を生成する。これにより,サ ブミクロンの分解能のX線透過像が得られる。このWのロッドの大きさ,形状により, X線のプロジェクション像の分解能が決定され,本実験で用いられたターゲットでは, 前章でも述べたが,その値は0.25 µmと見積もられている。[8]
- (3) 40keVに加速した電子ビームのビームは、このターゲット上にその径が0.8 µmとなる ように調整され照射される。この電子ビームの照射位置は、X線管に付加されている ターゲットへの吸収電子モニタにより、0.1 µm以下の精度で制御される。

(4)X線透過画像の拡大倍率は,幾何学的に(*d_{s-c}+d_{x-s}*)/*d_{x-s}*で表される。ここで*d_{s-c}と<i>d_{x-s}*はそれぞれ,試料とX線カメラ間の距離,X線源と試料間の距離である。またX線管は Z軸精密ステージで駆動され,このZ軸の駆動により*d_{x-s}*の値をを決定する。

(5)床からの振動は除振パッドにより排除される。また測定環境下での音によるX線源等 のチャンバへの振動は、防音対策を施した環境を用意することで同様に排除される。 (6)電子ビーム管を含むシステム全体の環境温度は23.5±0.5℃にチラーおよび温度コント ローラを用いて制御され、システム全体の熱ドリフトを極力低減する設計としている。 表3-1に精密ステージを含む機械コンポーネントの分解能および位置再現性を示す。分解 能のパラメータの値はステージの仕様から引用し、位置再現性の値は、光学顕微鏡カメラ を組み合わせて、X線源と同じZ軸に取り付け、位置決め補正要のグリッド基準パターン を持つウエーハ試料を用い、光学顕微鏡にて、手元で開発を行った試作ソフトウエアシス テムにより、アライメントの繰り返し位置決め精度を評価し得た値である。



(a) Detail of the applied positioning system of the nano-focus X-ray microscope with a feedback control



Fig. 3-2 Schematic of the applied stage system of the nano-focus X-ray microscope

Component	X axis	Y axis	Z axis	Tilt axis
Resolution	0.01 µm	0.01 µm	0.1 μm	0.0006 degree ^b
Repeatability	$<\pm 1 \ \mu m^a$	$<\pm1~\mu m^a$	$<\pm 0.5~\mu m^a$	±0.001 degree ^b

Table 3-1 Estimated positioning resolution and repeatability

^a Repeatability was evaluated as alignment errors by edge detection by optical microscope images.

 $^{\rm b}$ On the condition of magnification $\times 65$. The values of repeatability are expressed as expanded uncertainty.

3.3.2 X線投影像からのシリコン貫通ビアの形状の推定

本論文提案のMBL法をFig. 3-3に示す。

(手順1)TSV形状のモデル化

あらかじめSiウエーハ上に形成したTSVの実サンプルの断面観察のためにフォーカスイ オンビーム (FIB) により断面加工を行い Cross-sectional scanning electron microscope (X-SEM) 法によりTSVの形状を測定する。そして,TSVの幾何学的なパラメータを,円 錐台の組み合わせた回転対称体の単純な三次元のモデルとして定義する。このモデルの構 造はTSV生成のプロセスの特徴を反映したものである。プロファイル全体は異なる直径の 円錐台を組み合わせたもので,またその直径の値を定義した位置に高さのパラメータを同 様に定義したものである。

(手順2) TSV画像のシミュレーションと画像データライブラリの生成

先のTSVの幾何学モデルとして定義された形状パラメータのデータベースを作成する ために、教師データとしての形状パラメータを定義した範囲の中で一様乱数を8パラメー タ分生成して割り当てる。

TSVの透過像は、Fig. 3-2 (b) に示したX線源とTSVの位置関係に従って、第2章のFig.2-6 で示された方法と同じ変換式により座標変換後式 (2-5) により計算される。また第2章に述べた用いたナノフォーカスX線源の特徴であるエッジ強調効果をLaplacian of Gaussioan フィルタを適用して組み込む[9]。この一連の作業により大量のシミュレーション画像のデータライブラリを構築する。

(手順3)機械学習

サポートベクタ回帰(Support vector regression (SVR))アルゴリズムを用い,シミュレー ションに用いた形状の教師データと生成した画像データから生成したサポートベクタデ ータを用いて,教師あり機械学習を行う[10,11].

Fig. 3-3は,機械学習の詳細な手順を示す。先に示したシミュレーションデータライブラ リ画像から1次元配列のベクトルを生成し、サポートベクタとして使用する。さらに、目 的の画像データを1ステップでTSVの幾何データに変換する変換関数をサポートベクタ マシンの回帰計算の結果として生成する。実際のTSVのこれらの形状パラメータはこの変 換関数により推定計算を行う。

(手順4) 推定対象のTSV画像の抽出

実際のTSVのX線透過像はナノフォーカスX線顕微鏡で撮像するが,その空間分解能は 前章に述べたように0.25 μmと見積もられている。そして対象のTSVのX線透過像を0.1 μm の画像ピクセル分解能で撮像し,画像処理の技術によりTSVが存在する付近の,400×200 の画像サイズのデータを切り出す。

(手順5) 推定結果の表示

推定計算により得られるTSV形状の幾何学パラメータは、先にSVRで生成した変換関数 を用いて入力とした実際のX線透過像データから変換されて得られる。



Fig. 3-3 Detailed scheme of the supervised machine learning and support vector regression (SVR)

3.3.3 評価パラメータの定義

MBL法による不確かさはX-SEMによる測定値とMBL法による推定値の差による評価を

行うことで得られると考える。そのため,再現性と不確かさはそれそれ標準偏差 (STD) および平均二乗誤差 (RMSE) として扱い,式(3-1)と(3-2)でそれぞれ定義する。

ここで、nはシミュレーションあるいは実画像にもちいたTSVの形状パラメータの全体の数である。*x_{si} と x_{ti}* は、それぞれシミュレーション画像、ならびに実画像の形状パラメータである。*x_{ei}* はMBL法の計算方法のスキームで説明した変換関数で計算して得られた推定値である。

$$STD = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i}^{n} (x_{si} - x_{ei})^2},$$
(3-1)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i}^{n} (x_{ti} - x_{ei})^2},$$
(3-2)

さらにX線透過像のSignal-to-noise ratio (SNR)は式(3-3)ならびに(3-4)で定義され、これにより電気的要因から発生するノイズの影響の大きさを計算する。

$$SNR = \frac{S}{N_{dev}}$$
(3-3)

$$N_{dev} = \sqrt{\frac{1}{nm} \sum_{i,j}^{n,m} |I_{i,j} - I_k|^2},$$
(3-4)

ここで,信号レベルSは,Fig. 3-4に示したX線画像の黄色の線で示した位置のプロファイルの赤い線で示した平坦部の平均値,またN_{dev}は,Fig. 3-4に示したTSV像が存在しない画像の背景領域のノイズ部分で,黄色の矩形で示された領域の平均値である。*I_i, とI_k*は,それぞれグレイスケールでのピクセルの輝度と,Fig. 3-4中に示したようなX線画像上の黄色で選択された矩形領域(*n×m*)のグレイスケールのピクセル輝度の平均値である。



Fig. 3-4 Definition of SNR. Signal S is determined from a line-profile with step-changes along the line shown in the image. N_{dev} values of the images were calculated in accordance with Eq. (3-4) as the internal region of the rectangle

3.3.4 形状パラメータ推定の不確かさの要因分析

モデル定義したTSVの幾何学パラメータの推定の不確かさに影響する要因を列挙して 分析をする。Fig.3-5はその不確かさの要因を図で示したものである。主な要因は以下の5 種あると考え,不確かさの詳細は以下の通りである。

(1) 校正方法による要因

i. SEM用の標準試料を用いて、X線装置システムを校正する際の不確かさ

ii. FIBによる校正対称のビアの断面加工の再現性、および、

Cross-sectional SEM (X-SEM)による撮像と計測に関連した不確かさ

- (2) 精密ステージを含む機械的運動の不確かさ
- (3) X線カメラ画像中のノイズに対する電気的な要因による不確かさ

そして,

(4) TSV形状のモデリングや機械学習の方法論に関連した推定アルゴリズムに起因する不 確かさ

である。

不確かさはシステムのコンポーネントの不確かさの積みあげで,最終のMBL法による誤 差,測定再現性はこのシステム全体の不確かさに影響されるもので,その不確かさの構成 の見積もりの情報が得られれば個別の改善要因を抽出することが可能となり,将来的な測 定精度の改善につなげることができると考えられる。



Fig. 3-5 Uncertainty budget of estimation by the proposed MBL method

この要因の定義により、合成標準不確かさucは式(3-5)で表される[12,13]

$$u_{c} = \sqrt{\frac{(\sum c_{calb1}^{2} u_{calb1}^{2}) + (\sum c_{calb2}^{2} u_{calb2}^{2}) + (\sum c_{mi}^{2} u_{mi}^{2}) + (\sum c_{ei}^{2} u_{ei}^{2}) + (\sum c_{al}^{2} u_{al}^{2})}}_{(3-5)}$$

式 (3.5) において*ccalb1*, *ccalb2*,*cmi*, *cei* および *ccal* はそれぞれ,キャリブレーション的,機 械的,電気的,アルゴリズムなりびに計算的,キャリブレーション的要因の感度係数であ る。

さらに拡張不確かさUは文献[12]の定義に従い式(3-6)で示される。

またそのカバレッジ係数を k=2 とした。

 $U = k u_c \tag{3-6}$

それぞれの標準不確かさであるucalb1, ucalb2, umi, uei と ual は, 式 (3-2)で定義されたRMSE

として計算する。いくつかの不確かさは、もともとステージの位置決め誤差やMBL法を 用いた場合の、形状パラメータの長さの推定誤差としてとらえている。それは合成標準不 確かさの感度係数をできるだけ1として扱えるようにするため、パラメータを形状プロフ ァイル測定値として使われる長さの単位となるように計算している。

本研究において議論できるように、不確かさの見積もりのすべての原因について、後述 する表 3-3に*CD*と*H*に分けてリストを作成している。

しかしながら,いつくかの要因の不確かさについては残念ながら,経験によって決めて いる部分がある。なぜなら,これらの要因と自由度の度合の分析の難しさがあるためであ る。不確かさの見積もり方法は若干の任意性が含まれることがありうるが実態に即したも のとして見積もりを行った。

3.4. 不確かさの見積もり

3.4.1 標準試料校正とシステム校正時の不確かさ

Fig. 3-6に、校正時の手順と校正に用いたTSVの既知試料の表面のSEM像を示す。この試料は、SEMATECH設計のマスクを使ってパターンを形成した。そのピッチ精度は高いため、校正されたSEMデータからX線顕微鏡システムの校正に使えると考える。本論文では、 測定を行うX線顕微鏡システムとしての校正方法は次の4つのステップで行う。

- (1) 校正データ付きのグリッドパターンによりSEMを校正する。この校正により拡大倍 率の不確かさを明確にする
- (2) TSV試料のビアのピッチ測定をこの校正されたSEMで行い既知試料とし、この既知 試料の不確かさの見積りを行う
- (3) この既知のTSV試料の穴のピッチをX線顕微鏡システムで測定を行う
- (4) この顕微鏡システムのパラメータの校正を行い、X線カメラ面に対する傾斜角度の 不確かさ、X線と試料との距離、顕微鏡としての拡大倍率の不確かさの見積りを行う

また、システムの校正後、一旦、校正に用いた試料の一部を加工し、以下のステップで TSVプロファイル形状の校正を行う。またFig. 3-7 にTSV形状撮像のためのFIB加工と X-SEM観察の手順を示す。

- (1) 不要な加工によるダメージを抑制するために、TSV試料上にカーボンの堆積を行う
- (2) FIB加工によりTSVの断面を露出させる
- (3) 校正されたSEMにより形状パラメータの測定を行う
- (4) 本研究提案のMBL法による測定値との相関をとり補正を行う



Fig. 3-6 Calibration procedure of the microscope system and a surface view of the known TSV sample



Fig. 3-7 Typical scheme of cross-sectioning process by combination of carbon deposition and FIB etching to minimize over-etching during the process

3.4.2 システムの構造に依存した不確かさ

機械的構造に依存した不確かさとは、具体的には、本研究提案のMBL法によるTSV形状 測定において以下の3点を指すものとする。

(1) MBL法にてTSVの形状を測定する際にカメラステージを移動することでX線管の中 心軸に対してX線カメラ面を傾斜させて撮像を行うが、その傾斜角度の設定不確かさ

(2) Z軸の駆動により決定されTSV形状測定に影響する拡大倍率の不確かさ

(3) X,Y軸方向の機械的誤差起因のTSV形状測定に影響する不確かさ

(1) については、カメラステージを駆動した際に、測定のターゲットとなるTSVに傾斜 角度を設定し、その設定角度にどれだけ正確に設定できているかを調べることが必要とな る。Fig. 3-8に傾斜角度0度を設定した場合に、その設定した状態がどれだけの不確かさが あるかを調べた事例を示す。上側の図は、40 µmのピッチで並んでいるTSVの穴を上方か ら見た透過像である。もし中心のTSVにX線源の軸が0度となっていれば、そのTSV画像の 中心を通るコントラストのラインプロファイルから、下左図の対象のプロファイルが得ら れるが、合致していない場合、例えば下右図のように0.02度ずれると非対称のプロファイ ルとなる。カメラステージの分解能は高く、この角度値よりも細かい動作が可能であるも のの画像上で認識できる分解能は0.01度程度である。



Line profiles of the center TSV with near-zero tilt angles

Fig. 3-8 Estimation of uncertainty of tilt angle

そこで,傾斜角度の不確かさは以下の式で定義をする。合成標準不確かさuc,ならびに 拡張不確かさUはそれぞれ式(3-7)(3-8)で表わされる。

$$u_c^2 = u_p^2 + u_t^2 \tag{3-7}$$

 $U = 2u_c$ (3-8) ここで、 u_{p, u_t} はそれぞれ画像上で認識しうる傾斜角度の不確かさ、および表3-1で示し たカメラステージの分解能から得た傾斜角度の不確かさの値であり、それぞれ0.01度、

0.001度とした。その結果、傾斜角の拡張不確かさUは0.02度と計算される。

前記(2)(3) について, Fig. 3-9にTSVの径方向の形状パラメータ*CD1-4*, 深さ方向*H1-4の* 不確か*さ*に与えるZ軸ならびにX, Y軸の因子を示す。



Fig.3-9 Factors affecting on uncertainty

(2)の拡大倍率Mに関しては、以下の式(3-9)で表される。

 $M = (d_{s-c} + d_{x-s})/d_{x-s}$ (3-9)

ここで, *d_{xs}*, *d_{se}*は, それぞれステージ平面あるいはカメラ面に対してX線源から垂直に おろした線上でのX線源点源と試料との距離,ならびに試料とカメラ面との距離である。 *d_{se}*は設計上あらかじめ決められた値に固定されている。Z軸を動かすことで*d_{xs}*は変化し, 倍率*M*を決定することとなる。本研究では,画像の計算のしやすさを考慮し,Z軸は既知 試料であるTSVの穴のピッチ距離が40 μmであるため,カメラ画素のピッチ6.5 μmに対し て,X線透過画像上の画素ピッチが0.1 μmになるように調整する。すなわち*M*を65にな るようにZ軸位置を合わす。*dx*-sの値は発光源がダイヤモンド基板中にあるために,直接 高精度でその位置を決定する外部の計測系が使えない。そのため,既知試料であるTSV の穴のピッチは校正値と不確かさの値をもつため,*dx*-sの値はこの既知試料のX線透過画 像から決定する。すなわち式(3-10)により算出する。

$$d_{x-s} = d_{s-c} l_{ps}/(l_{pc} - l_{ps})$$
(3-10)

ここで, *l_{ps}*, *l_{pc}* はそれぞれ既知試料のTSV穴の物理的なピッチサイズ,ならびにカメラ 面上に投影された情報から得たピッチサイズである。この物理的なピッチサイズ*l_{ps}*につ いて,校正されたSEMによる測定からその不確かさを見積もると,以下の式(3-11)により ピッチサイズの合成標準不確かさを表すことができる。

 $u_{c-p}^2 = u_{calib-p}^2 + u_{meas-p}^2$ (3-11) ここで、 u_{c-p} , $u_{calib-p}$, u_{meas-p} は、それぞれ TSV 既知試料の穴のピッチサイズの合成標準不 確かさ、SEM 校正用グリッド試料の不確かさ、校正された SEM による TSV 既知試料の 穴のピッチサイズ測定時の 10 回測定時の標準偏差である。これにより、TSV 既知試料の 穴のピッチサイズは、式(3-7)の計算と同様に、 $l_{ps} = 40.01 \pm 0.084 \ \mu m$ と拡張不確かさの 値を得る。

ー方,カメラ面上に投影された TSV の穴のピッチサイズである l_{pc} は,カメラの物理的な画素ピッチを 6.5 µm,拡大倍率を 65 とし,さらにデジタル画像上の画素ピッチを 0.1 µm として,TSV の穴の画像上のピッチを 40 µm として合わせるため,画像上では不連続の値を扱うために,便宜的に不確かさガイド [11]のタイプ B の評価で不確かさを見積もると, $u_{pc} = \frac{1}{\sqrt{3}} \times 0.1$ µm = 0.058 µm (u_{pc} :カメラ面上の位置の標準偏差)とおくことができるとする。

すなわちカメラ面上での合成不確かさは、式(3-12)で表すことができる。

 $u_{c-pl}^2 = u_{c-p}^2 + u_{pc}^2$ (3-12) ここで u_{c-pl} は画像上でみた既知 TSV 試料のピッチの合成標準不確かさとなる。 これより拡張不確かさを使って、画像上でのピッチ長さは、40.01±0.102 μ m となる。 以上から、 d_{x-s} について、標準不確かさ u_{dx-s} は以下式(3-13)のように、パラメータ l_{ps} 、 l_{pc} に依存するため感度係数 c_{lps} 、 c_{lpc} を導入し計算される。

 $u_{dx-s}^2 = (c_{lps}u_{c-p})^2 + (c_{lpc}u_{c-pl})^2$

(3-13)

ここで, c_{lps} , c_{lpc} は以下のように d_{x-s} のそれぞれ l_{ps} , l_{pc} についての偏微分として表わされる。 $c_{lps} = \frac{\partial d_{x-s}}{\partial l_{ns}}$, $c_{lpc} = \frac{\partial d_{x-s}}{\partial l_{nc}}$

さらに拡張不確かさを,式(3-7)にならい, dx-s について不確かさを含めた値として,

 $d_{x-s} = 1.954 \pm 0.007 \text{ mm}$ と見積もることができる。

また, 拡大倍率Mは, 以上の計算を踏まえて,

 $M = (d_{x-s} + d_{s-c})/d_{x-s}$ であるから,同様に計算し $M = 65 \pm 0.23$ となる。

前の(3)のX,Y軸方向の機械的誤差起因がTSV形状測定に影響する不確かさについて,*CD* 値に対してX,Y軸の変動 Δx , Δy は,原理的に誤差を与えないためZ軸方向の変化が*CD*値 に影響を与えるケースを式 (3-14) にて表す。一方,*H*に対してはX,Y,Z軸の変動, Δx , Δy , Δz ならびに,傾斜角度の変動 Δt が影響を与える。 ΔH に対して,それぞれの変動の ファクタの影響は下記の式 (3-15~3-19) で表すことができる。

$$\Delta CDpz = (1/M) CD ((dx-s+ds-c+\Delta z)/(dx-s+\Delta z)-(dx-s+ds-c)/dx-s)$$
(3-14)

 $\Delta Hpz = (1/M) (1/tan(TA)) H ((dx-s+ds-c+\Delta z)/(dx-s+\Delta z)-(dx-s+ds-c)/dx-s) (3-15)$

$$\Delta Hpx = (1/M) (1/tan(TA)) \Delta x ((ds - c/dx - s) - (ds - c - H)/(dx - s + H))$$
(3-16)

$$\Delta Hpy = (1/M) \ (1/tan(TA)) \ \Delta y \ ((ds - c/dx - s) - (ds - c - H)/(dx - s + H))$$
(3-17)

$$\Delta Hpt = \Delta T (1/M) (1/tan(TA)) ((ds - c/dx - s) - (ds - c - H)/(dx - s + H))$$
(3-18)

$$\Delta T = dx - s \left(tan(TA + \Delta t) - tan(TA) \right)$$
(3-19)

ここで, TA は, TSV観察時のX線源光軸と光源からターゲットのTSVの傾き角度で, 固定値 TA=12.70度とおく。表 3-2 にX線顕微鏡の撮像条件とともに, 校正方法から導 いたX線装置システムの構造起因の拡張不確かさを示す。

Table 3-2 Condition of X-ray imaging experiments

Items	Items Condition		
	Resolution 250 nm ^a	-	
	Tilt angle 12.70 deg.	±0.02 deg.	
	Camera pixel size 6.5	_	
	μm×6.5 μm		
V-montimeding	Magnification ×65	±0.23	
A-ray imaging	$d_{s \cdot c}$ designed as 125.105	±2 μm.	
	mm.		
	d_{x-s} determined from	$\pm 7~\mu m$	
	image of TSVs 1.954 mm		
	Acquisition time >100 s	-	
SEM	Magnification ×1500	-	
	Calibrated by the TSV	±84 nm	
measurement	sample		
X-ray	Calibration TSV sample		
measurement	40 µm pitch	± 102 IIII	

^aPhysical resolution of the X-ray microscope was determined by imaging of a JIMA-chart device with a line-and-space of $0.4 \mu m$.

3.4.3 機械的要因による不確かさ

本項では,機械的要因による不確かさとして,X線透過像を用いたXY高精度ステージによる (1)ターゲット位置のアライメントの再現性や(2)経時システムドリフトを調べることで機械的要 因による不確かさの評価を行う。

(1)ステージのアライメント再現性

本評価には, XY ステージ上に設置した試料プレート上に装着したシリコンの小片試料を用い て評価を行う。

Fig. 3-10 (a)に評価に用いた冶具として使用するベースプレート(ベースプレートと呼ぶ) の主要なレイアウト図を示す。エッジマーク(システム上の便宜上のマーク)として開け た丸い穴,およびシリコンの個片試料を取り付け,X線が透過しやすくするために正方形 の穴開け加工したベースプレートを,試料フォルダとしてXYステージ上に設置して,評 価に用いた。これらは,X線源と試料またX線シンチレーションカメラ間に,とくに金属 材料のようなX線を吸収する材料がない条件で直接,X線透過像を撮像可能である。

ステージ上のエッジマークの一つと個片試料上のTSVの一つをXY座標値をXYステージ

位置の再現性の評価に用いた。この座標値はこのXYステージのエンコーダから得られた データをもとに移動量を計算することで得る。

Fig. 3-10 (b)に詳細な評価スキームを示す。まず,最初のステップで,XY位置を¢500 µm の径を持つエッジマークをステージ上で探索し,X線顕微鏡像上で位置決めを手動で行い, その座標位置をエンコーダ値から取得し登録する。この場合のエッジマーク位置の値の精 度は問わず,単にX,Y,Z軸を動かして再現性を評価するために,単に便宜的なマーク位 置として用いる。



(b) Evaluation scheme

Fig.3-10 (a) Top schematic view of the sample base plate on the XY stage with coupon samples attached. The XY stage travels along the arrow with distance D_x , D_y of ~150 mm for evaluation of repeatability of the stages. (b) An evaluation scheme of repeatability of the stages

2番目のステップとして、再現性の評価に用いる目的の TSV の X と Y の座標位置を、 エッジマークと同様に、その TSV の存在する領域を探索して決定する。繰り返しの動作 として、エッジマーク位置 (*xe*, *ye*) および目的の TSV の座標位置 (*x*, *y*) 間を探索した後、 その差をΔx、Δy として算出する。この差の値を 0.05 μmステップの範囲の区切りで、そ の区切りのなかに到達した回数を度数分布として表し、そのグラフのガウシアン曲線の フィッティングからそのδ値を、実際のアライメント時の不確かさの評価値として用い た。

カメラ傾斜ステージにつては、一軸の高分解能ステージを適用し、高い精度で傾斜、 撮像し、X線透過像の取得を実現する。

傾斜角度 0 度のシステムの原点は、サンプルの角度と X 線源位置およびカメラの配置 により決定されるが、前述したように画像上で TSV 試料を用いて角度の再現性を<±0.02 度で認識することが可能である。さらに、カメラ傾斜ステージの位置再現性誤差は<± 2 μm で 12.70 度の傾斜角度を<±0.001 度の誤差で実現することができる。

他の機械的な要因として、ステージ動作のヨーイング、ピッチングやローリングが考 慮されるべきであるが、他の評価実験からその大きさは、それぞれ<±0.002度、<±0.003 度および <±0.003 度と見積もられているため傾斜方向への影響は 12.70 度の傾斜角と比 較し小さくため無視しうる。X,Y 軸方向ついては、 TSV 物体透過画像の TSV の長手方 向が見える方向に対してその水平面内の角度変化として小さく寸法形状測定への影響は 無視する。

(2)経時システムドリフト影響評価

前述の試料プレートを用いて,X線撮像を行う目標のTSV 像を経時トラッキングする ことで評価を行う。X線装置を設置した室温 23.5±0.5 度の環境下で,約 400 秒ごと画像 上のTSV 位置を画像テンプレートマッチング法により,そのドリフトした画像のXY座 標位置を記録する。尚,装置を評価する前に,装置を組み立て立ち上げを行う際に,不 要な組み上げ時の部材の温度差起因の応力発生を防ぐため,あらかじめ 23.5±0.5 度の環 境下で部材を放置し、また組み立ても同じ環境下で行った。

3.4.4 ノイズ要因による不確かさ

ノイズ要因の評価に際し,異なる分布値の白色ガウシアンノイズを用いたシミュレー ション画像を生成し,その SNR 値を1から10の範囲で設定し,MBL 法のノイズに対す るロバスト性の評価を行った。

それぞれの SNR の範囲で, 画像のエッジ強調される特徴をもつシミュレーション画像 を生成し, それぞれの SNR 値で 10 セット分を生成して評価に用いる。この画像のエッ ジ強調の特徴は, 参照論文, ならびに第2章の付録にて議論されている内容である[14]。 また, これらの SNR 値は式(3-3), (3-4)に従って決定する。以下の補足説明図にそのシミ ュレーション画像の一部の事例を示す。Fig. 3-11 に示したように SNR 値が 9.7 から 2.0 に変化するにつれて, SNR 定義した位置でのラインプロファイルを比較するとその変化 が大きくみられる。その下の欄に深さ方向についてサーフェスプロファイルを取ったも のであるが, こちらの図からはノイズ量が多くなってもエッジ付近の変化は大きく残っ ていることが見て取れる。完全にノイズに埋まってしまっている訳ではない。



Fig.3-11 Simulated X-ray images with added noises

3.4.5 アルゴリズムの要因の不確かさ

アルゴリズム要因による発生する不確かさについては,前章でも述べたが,後述のFig. 3-16 で示す学習曲線から推定する。

3.4.6 他の要因の不確かさ

W の柱状のターゲットに照射する電子ビームの磁界変動や熱的ドリフトの起因による 照射位置の変動は,X線源の移動が発生するため透過像にX,Y軸方向や傾斜角度変動と 同様な影響を与える。そこで,Fig.3-12 に示す電子ビーム位置の位置制御を導入した。 内製した電子ビーム位置制御システムを用いて,手元で開発したファームウエアにより, 制御システム上可能な<0.02 µm の変動となるように制御を行った。ビーム位置の変動量 のモニタリングはWターゲット部分を,電子ビームの走査を行いWターゲット部分に 吸収される電流量のモニタ信号の変化からビームの制御位置判断を行った。



Fig.3-12 X-ray e-beam source positioning control

X線源の電子ビームの変動で生じるX線点源位置の変動は考慮するが、しかしながらこの変動起因による試料方向の傾斜角度の変動は<0.0006度であり、X線カメラ傾斜角度に対して著しく小さく抑えることができるためにこの電子ビーム変動起因の影響は無視できる。

他の要因として考えられる,最適化計算方法を含む計算方法起因の要因はアルゴリズ ム要因に含められるとする。そのため独立して扱わない。 またキャリブレーションの要因の中には, Fig. 3-7 に示したように, FIB による TSV 開 ロ部の壁面に対する余分なオーバーエッチングの影響を最小限にするため, カーボンを 蒸着したのちに FIB にて断面加工を行なうが, その際の加工精度とこの加工精度が影響 を与える測定再現性を含むと考えられる。

この加工プロセスの特徴的な面を考慮すると, FIB による断面加工の標準不確かさは経 験上 0.5µm 程度となると考えられる。なぜならば,カーボン層を生成することでビア穴 を TSV の径の中心において, Fig. 3-13 に示すように,精度良く断面を切り出すことが難 しくなり,経験的にこの程度のものと考えている。



Machined surface

Fig. 3-13 Uncertainties of position of machined surface caused by sample setup conditions

SEM はラインのエッジのような幾何学的なパラメータの測定においては、大変高い繰り返し再現性が得られる[15]。本章では、商用の測長用の SEM で校正用の標準試料の測定を行った。1500 倍の倍率にて、SEM の測定再現性として測定対象物体の<1%の±0.045 µm の値が得られているので、この値を拡張不確かさとして標準不確かさをこの半分の0.0225 µm とし TSV の標準試料の校正時にこの標準不確かさが組み込まれるとする。

3.5 不確かさの評価結果と考察

3.5.1 シリコン貫通ビア実サンプル測定における誤差

実験評価に用いたサンプルは3種類のドライエッチングのプロセス条件で生成したTSV を用いた[5]。それぞれ目標のTSVの開口部の径10 μmならびに深さは50,75,90 μmの3水 準である。ドライエッチング装置は東京エレクトロン社製TactrasTM FAVIASを使用した。

Fig. 3-14に, X線透過像からX-SEMにて測定値に対して推定したすべてのCD1-4 値なら びにH1-4 値の合わせて推定した結果を同じグラフ上にプロットにて示す。これらの値は 観察した透過像に対して10回繰り返しで,観測した結果にて推定した値の平均値をとった ものである。とくにH1-4 値については,広範囲にデータは散在しているが決定係数は 0.996となり良好な値であった。

Fig. 3-15 に同様にX-SEMで測定した値に対するMBL法で推定した*CD1-4, H1-4*と同じデ ータから*RMSE*値と*STD*値を計算しプロットしたものを示す。*CD1-4のSTD*値についてそ の平均は0.08 μmと小さく形状推定の再現性が高いことが伺える。これに対し, *H1-4のSTD* 値は0.56 μmと*CD1-4*と比較して大きい。一方, *RMSE*値については, 平均値としてみると *CD1-4*とH1-4についてはそれぞれ0.81と0.95 μmとほぼ同等のレベルとなった。

この結果から,*STD*値が小さいことからMBL法の再現性は高いと考えられる。しかしながら,*RMSE*値を考慮するといくつかの分類された要因,すなわち,Fig.3-5に示した不確かさの分析により分解した要因が反映されていると考えられる誤差がある。

H1-4のSTD値はCD1-4のものよりも大きい。この当た値はシミュレーションの評価結果 とも一致する。H1-4 の形状データは、CD1-4の形状データよりも大きいがピクセルあた りの長さに換算するとピクセル数は少ない。これはX線透過像が、表 3-2に示したように X線と試料面が、12.70度の傾斜角度で投影されたものであるからその分解能は約1/4程度 以下となるためと考えられる。すなわち、このSTD値が大きいのはこの割り当てられた画 素数の違いによることを反映していると考える。また、明らかにH1-4 のプロファイルの STD値とRMSE値はノイズの影響を受け、Fig.3-16 に示した学習曲線の値よりも大きなも のとなっている。

再度まとめると、すべての*CD1-4*値と*H1-4値*のそれぞれの*STD*値と*RMSE*値の平均値は、 それぞれ0.08、0.81、0.56ならびに0.95 μmであり、これらの*RMSE*値は、MBL法による計 測システムの全体の誤差の大きさを反映していると考えられる。



Fig. 3-14 Correlation plots between results of *CD1-4*s and *H1-4s* measurement by X-SEM and estimation by the MBL method



Fig. 3-15 RMSE and STD values of estimated CDs and Hs by the MBL method against measured values by X-SEM that were calculated using Eq. (3-1) and (3-2). Mean value of the STDs and RMSEs are 0.08 and 0.81 µm for the CDs and 0.56 and 0.95 µm for the Hs respectively

3.5.2 機械的要因の不確かさの評価結果

(1) ステージの位置決め再現性評価

Fig. 3-16に XY ステージシステムの位置再現性の評価結果について示す。

ターゲットの TSV とステージ上の目印であるターゲットマークの位置を交互に移動し, これを 15 回繰り返して,X線透過像と画像テンプレートマッチング法により,画像上で の TSV の位置アライメント時の誤差を測定した。縦軸はXとY軸の位置決め誤差の相 対的な頻度分布を示した。この誤差は,誤差値のステップが0.05 µm となるように誤差 値を丸めたものである。同じ誤差値の積算した数が相対頻度として規格化され,この相対的 な頻度分布がX軸とY軸それぞれの位置決め再現性に対してプロットしたものが,Fig.3-15 の グラフに示されている。さらに,それらのグラフに対して,ガウシアン関数を用いてフィッテ ィングを行い,その標準偏差(STD)値を得た。その結果は,X軸Y軸に対して,それぞれ0.07 µm と0.04 µm であった。この両方のSTD 値は0.1 µm 以下であり,このことは標準偏差値がX 線透過像の画像のピクセル分解能よりも小さい値となっている。この値は,正規化相互 相関による画像テンプレートマッチング画像処理とXY軸の直角度の補正により実現す ることができたと考える。

傾斜カメラステージは、試料をおいたステージのX軸と同じ方向に前後に動かすが、バック ラッシュの影響を軽減するため、傾斜角度を変更時に、ステージが逆方向に戻る際は、一旦原 点寄りのステージ位置を戻し、同じ軸方向に動くようにステージ動作方向を走査した。傾斜カ メラステージの分解能は理論的には 0.0006 度あり、その角度の再現性表 3-1 に示したよ うに±0.001 度であった。

ステージ誤差に対する熱的ドリフトの影響は,ステージの頻繁な位置補正により軽減 するように調整した。また,TSV の探索やステージ位置決めには,装置環境温度を 23.5±0.5 ℃に制御した条件で,標準のグリッドパターン付きのウエーハを用いて補正を 行うシステムソフトウエアを用いて行った。

なお, XYZ 軸ならびにカメラ傾斜ステージの機械システム全体は同じ温度環境下で組 み立てられ,ステージ制御パラメータを調整した。その理由は,使用しているいくつか の材料の加工による応力や膨張係数の違いから生じるずれを緩和するためであり,あら かじめ同じ温度環境条件下においてシーズニングを行うことで,影響を最少限に抑えた。

システムに使用されている材料の熱膨張係数を考慮すると、Si ウエハのような、Si 材料の標準の熱膨張係数は、文献[16]に測定事例があるが、7次多項式から近似されて得られるような 2.578(<±0.028)×10⁶ /K という値は、研究で使用したステージシステムにおいて石定盤グラナイ ト材(熱膨張率 5.3×10⁶)を使用しており、局所的な温度差が生じた場合は全体で最大数 µmの 熱膨張の差の影響が起こりうるが、後述のように温度制御された環境下では、経時ドリフトと して得た結果からは測定の不確かさにはほとんど影響を及ぼさない結果となった。



(b) Repeated Y-axis positioning error



(c) Plots of repeated alignment error of XY precision stage

Fig. 3-16 Repeated X, Y positioning errors of target X, Y position using X-ray images. Red circular marks are observed data and gray dotted lines are the fitted Gaussian curves. (a) For X axis, calculated $\sigma = \sim 0.07 \ \mu m$ (b) For Y axis, calculated $\sigma = \sim 0.05 \ \mu m$ (c) all X, Y-axis alignment error data are plotted in one graph

MBL 法による形状推定に影響しうる機械的な要因の標準不確かさは,ステージ位置決め制御やグリッドの歪を補正するシステムソフトを用いたシステムのX軸とY軸の位置 決め誤差として,X線の画像上のアライメントの位置再現性により表現しうると考えら れる。その値について,X,Y軸それぞれの繰り返し位置再現性の頻度分布値を規格化 しカーブフィッティングを行うことで 0.07 μm, 0.05 μm というσ値が得られた。

それらの不確かさは TSV の *CD1-4* である径方向のプロファイルの方向と同じであれば, *CD1-4* の推定値に影響を与えるものは,あまり大きなものではない。なぜならば,試料 ステージとカメラステージ面が平行であるため,Z 軸方向や傾斜方向の変動がない限り は,その測定値に,幾何学的に影響しないと考えられるからである。また,*H1-4* の推定 値については MBL 法による推定値の不確かさは,表 3-3 に示したように,X 軸について 0.01 µm,Y 軸については 0.01 µm となり試作したシステムの機械的な不確かさはビアの 形状測定にはほとんど影響せず無視しうるという結果となった。

(2) 経時ドリフト影響評価

Fig. 3-17 に 300 秒ごとに 100 秒の露光時間で画像を取得し,その変化をテンプレート マッチングで移動量をトラッキングした結果を示す。X,Y 軸方向への平均ドリフト量は, $\Delta x = 0.21 \mu m$, $\Delta y = 0.11 \mu m$ となりシステムで TSV 画像にアライメントする際の位置再 現性は,前述のように $\Delta x = 0.07 \mu m$, $\Delta y = 0.05 \mu m$ であるので,このドリフト量は,長 い露光時間に対し,若干の画像のボケを促進するが,インライン検査の運用を考慮する と,画像によるアライメント操作により解消できるものであり、無視しうるとする。



Fig. 3-17 Stage drift with elapsed time by the template image tracking

3.5.3 ノイズの要因による不確かさの評価結果

Fig. 3-18 に,異なった SNR 値でのシミュレーション画像から CD1-4 および H1-4 の形 状パラメータを推定した結果の RMSE 値を SNR 値に対してプロットしたものを示す。 すべてのパラメータの RMSE 値が概ね, SNR>6 の領域で一定であることが認められる。 また SNR \leq 6 の領域では,このシミュレーション実験の条件下において,この領域では, いくつかのグラフは変動があるものの, SNR 値の増加とともにそれらの RMSE 値は減少 する傾向にある。

CD1-4 ならびに H1-4 について, こららの定義したパラメータの取る値の範囲を考慮す ると, 推定について期待される信頼性で再現性が満足されるのは SNR 値が4を少し下回 るところまでである。この理由は, 多くの場合に定義されたモデルの計算範囲は CD1-4 について1 µm 程度, そして, H1-4 については, モデル定義した 10%程度の範囲として いるため, SNR<4 の領域では, 誤差がこの定義した範囲を上回るためである。

CD1-4 の場合については MBL 法は, *SNR*<2 の領域においても適用可能であった。また, *CD1-4* の *RMSE* 値のすべての値は,定義した範囲よりも狭い範囲にあった[6]。このことから,推定した *CD1-4* の値の結果は,評価をおこなった *SNR* 値の範囲の全域で,信頼性のあるものと考えられる。

しかしながら H1-4 については,実験を行った環境下では SNR<2 の領域では,信頼性 を欠く部分がある。この範囲では,定義した範囲を超えている部分があるためである。

3-37



(a) *RMSEs* of estimated values *CD1-4s*



(b) RMSEs of estimated values of H1-4s

Fig. 3-18 RMSEs of estimated parameters for simulated images vs. SNR

with variant noise level (continued)

3.5.4 アルゴリズム要因による不確かさの評価結果

Fig. 3-19 に,前章でも示した TSV の形状の推定の学習曲線を示す。また,それぞれの 線は CD 値や H 値について推定したパラメータの STD 値を示している。明らかに,4000 枚以上の画像データの領域では,すべてのパラメータは収束する傾向にあり STD 値は概 ね 0.1 μm 以下となっている。すなわち,MBL 法で生成した変換関数を実画像へ適用す ることによって,CD1-4,H1-4 の推定値の STD 値は最適化アルゴリズムを適用すること で,画像にノイズのない場合において<0.2 μm になることが分かった。



Fig. 3-19 Learning curves defined as a relationship between number of learning data and standard deviation in estimation
3.5.5 システム全体の不確かさの見積りと改善指針

それぞれのセクションの要因について推定した個別の標準不確かさならびに合成標準 不確かさ,拡張不確かさについて TSV の大きさ φ10 μm×90 μm, SNR 値が 2.2 の条件(あ らかじめ X 線画像から式 (3-3) に従い算出)において,式 (3-5),(3-6) に従い計算結 果を表 3-3 にまとめた。また Fig.3-19 に内容を見やすくするために図示したものである。

すべての値は *CD1-4* と *H1-4* の値と同じディメンジョンの誤差に変換しているため, 感度係数 *Cxi* はすべて便宜上1とした。

以下4つ要因について議論を整理した。

- (1)機械的な要因による標準不確かさは, Fig. 3-17 に示したようなステージ位置決め時 の位置再現性の誤差によるものと考えた。X と Y 軸の動作時の再現性における標準不 確かさは,あまり大きな要因ではないことが分かった。このことは,高精度ステージ が,適用した環境下で正確に動作した結果であるといえる。また,Z 軸の動作の標準 不確かさは,GUM の Type B 評価に則り誘導した値は 0.29 µmであるが,ビア測定に おいて CD 値と H 値に対して不確かさの寄与は無視しうるほど小さい。
- (2)電気的な要因による標準不確かさは Fig. 3-16 に示したようにシミュレーション結果 から推定されたものである。低 SNR 値の領域で変動があるが,平均値は CD1-4 値に 対しては 0.12 µm (最悪値 0.22 µm), H1-4 値に対しては, 0.81 µm (最悪値 1.0 µm)で あった。電気的な要因は不確かさは,全体の不確かさのなかでも大きなもののひとつ である。ノイズはガウシアン型のものを用いてシミュレーションを行った。しかしな がら,実際の X 線透過像では,インパルスノイズによる影響は大きい。これらのノイ ズは,電気的な回路ノイズやカメラ素子の感度の不均一性などによるもののにみなら ず,装置外からの放射線などの外的要因もあると想定される。

商用のナノフォーカス X 線顕微鏡システムでは、わずかな量の X 線フォトンしか 撮像に利用できないという問題を抱えている。

使用した装置の条件では、X線フォトンは径0.5 µmのX線点源から、電子ビームの

エネルギーを、わずか 0.3%程度の効率で X 線のエネルギの変換をおこなっている。 もし、より多くの積算回数の X 線画像取得が可能であれば、透過画像中のノイズは低 減されるものである。しかしながら、積算時間を増やすなどの X 線画像取得時の SNR の改善を行うと機械システムの経時ドリフトにより分解能が低下するというトレー ドオフの問題が想定される。そのため X 線フォトン数を増やすために、X 線源をハイ パワーのものにする必要がある。

- (3)アルゴリズム起因による不確かさは Fig.3-16 に示した学習曲線から得た。*CD1-4*の 不確かさは 0.05 µm, *H1-4* については 0.13 µm であった。シミュレーションの不確か さは TSV のモデルを定義した 0.1 µm のボクセルの分解能からくるものとした。一方 モデリング時の不確かさ,(すなわち *CD1-4*, *H1-4*の定義時の幾何学的な配置の不 確かさ)は明確でない部分があり,便宜的にアルゴリズムの不確かさに含めた。
- (4)FIB によるキャリブレーションのための断面加工における標準不確かさは、用いた FIB 装置では、先に述べたように経験的に 0.5 μm程度あると考えている。これは、大 きな誤差要因の一つであると考えられる。FIB の断面加工の前に、過剰なエッチング を防ぐために、あらかじめカーボン層のデポをおこなった。しかしながら、カーボン 蒸着プロセスでは、TSV の表面の形状の特徴を覆ってしまい、FIB のビーム位置の設 定誤差や加工誤差を大きくしてしまうトレードオフがあると考える。

キャリブレーションの要因は、大変重要なパラメータであり、このことが、形状測 定時の精度を決める大きな要因のひとつとなる。そのためこの方法の改良が必要であ る。

表 3-3 にまとめた総合の結果から,以下のことが考えられる。*CD1-4 と H1-4* の推 定値の *RMSE* 値の平均とこの評価で得られた合成標準不確かさを比較すると,それぞ れ 0.81, 0.95 μm ならびに, 0.54, 0.98 μm であり,これらは概ね同じレベルのもので あると考えられる。システム全体の合成標準不確かさ値は,エッチング後の径 5 μm 深さ 50 μm 程度の大きさのビアの寸法を測定を想定すると誤差要求 10%ならびに測 定再現性1%としては若干未達である。しかし,実際のX線透過画像からMBL法で 測定した値のSTD値は良好であるため,後述する測定システムの改良を加えて測定試 料数を増やしてさらなる評価を行い測定再現性をが十分に満たせるものかを判断す る必要がある。

a	Standard Un-	Converted standard uncertainty µm			
Source	certainty	CD1-4	H1-4		
Calibration of system factors					
grid Std sample <i>u_{calsys1}</i>	0.05µm	0.05	0.05		
SEM calibration $u_{calsys2}$	0.084µm	0.084	0.084		
Magnification <i>u</i> _{calsys3}	0.23	0.04	0.16		
Calibration of sample factors					
FIB machining <i>u</i> _{cals1}	0.50 µm	0.50	0.50		
XSEM measurement u_{cals2}	0.10 µm	0.10	0.10		
Calibration combined st	andard uncertainty	0.52	0.54		
Mechanical factors					
Repeatability of X alignment	0.07 µm	NA	0.01		
Ropostability of V alignment					
	0.05 µm	NA	0.01		
Repeatability of Z					
positioning u_{m^3}	0.29 µm	0.001	0.06		
Tilt angle of X-ray source to	0.012				
sample plane u_{m4}	deg.	NA	0.08		
System drift X axis u_{m5x}	0. 07 um	NA	0.01		
System drift Y axis $u_{m\bar{a}y}$	0. 05 um	NA	0.01		
Mechanical combined standard uncertainty		0.001	0.11		
Electrical factors					
Shot and circuit noise u_{eI}	Averaged values 0.12µm and 0.81µm for <i>CDs</i> and <i>Hs</i>	0.12	0.81		
E-beam position fluctuation u_{e2}	0.02 μm	NA	0.01		
Electric combined sta	ndard uncertainty	0.12	0.81		
Algorithmic factors					
Modeling	-	not clear	not clear		
Learning u_{a1}	0.05 μm	0.05	0.13		
Simulation u_{a2}	0.05 µm	0.05	0.05		
algorithmic combined standard uncertainty		0.07	0.14		
Total combined standard uncertainty		0.54	0.99		
Total expanded uncertainty		1.08	1.98		
Mean value of RMSEs		0.81	0.95		
Mean value of STDs		0.08	0.56		

 Table 3-3 Estimated uncertainties in the case of SNR 2.2

まとめとして,この章の解析的なアプローチにより,それぞれの大きな要因の合成標 準不確かさや拡張不確かさへの寄与度を推定した。

またシステムの改善すべき誤差要因を明確にすることができたと考える。

この研究で得られた結果として,幾何学的なパラメータの推定における精度と再現性 の不確かさの改良に関わる重要な部分は,キャリブレーション方法の改良,そして電気 的なノイズの低減が重要であることを示した。



Fig. 3-19 Results of analysis of uncertainties of Table 3-3

3.6 結言

本研究において提案した MBL 法について,その不確かさの要因について解析評価し, 以下の結論を得た。

- (1)ナノフォーカス X 線顕微鏡システム試作機で撮像した TSV の透過像に対し適用した 本論文提案の MBL 法の TSV 形状推定時の合成標準不確かさ,ならびに拡張不確かさ の値について計算を行い,X線の画像取得時の SNR が 2.2 の場合の条件下で,推定誤 差の RMSE 値と比較評価した。その結果, φ10 µm × 90 µm の大きさの TSV の場合につ いて,合成標準不確かさ,拡張不確かさ,RMSE 値は,定義した TSV の径のパラメー タ CD と H のについて,それぞれ,0.54,0.98,1.08,1.96,0.81 および 0.95 µm であった。 その大きさは同等レベルであると考えられる。またこの値は,径5 µm 深さ 50 µm 程 度のビアを想定するとインライン検査の要求仕様の測定する物体の 10%の誤差,およ び 1%の測定再現性については若干未達な部分はあるものの,今後の装置システムの 改良により将来満足することが期待できる範囲と考える。
- (2)システム全体の誤差要因を分析し、要因のブレークダウンを行い、不確かさのバジェ ットを作成した。機械、電気、アルゴリズム、計算方法、キャリブレーションの要因 の分類を行い、いくつかの要因については他の要因で代用するものの、そこに含めて 検討を行った。
- (3)このバジェットに基づき,不確かさや個別の誤差に影響を与える要因の寄与度について定 量的な解析を行い,推定対象のTSVの形状の推定誤差として計算し評価をおこなった。その 結果,キャリブレーションおよびの電気ノイズ要因が重要な部分を占めることが示さ れた。また X 線の実画像,すなわち SNR が 2.2 の条件下で得られた画像から得た形状 推定値の RMSE 値の平均値は,この不確かさの定量的解析と概ね一致していることが 分かった。今後の測定システムとしての改善には,校正試料加工方法を含めた校正方 法の改良,フォトン数を増やして SNR を向上させるために X 線源のパワーを大きくす

ることが効果があると考えられる。

(4)ノイズに対する、本論文提案の MBL 法を担うシステムのロバスト性は、画像のシミュレーションならびに、MBL 法を実際の画像に適用して得られた測定値から評価を行ない確認された。その結果、CD 値においては、SNR が 2.2 程度でも、STD 値の平均が 0.1 µm 程度として再現性のよい測定が期待できることを示した。

本章にて使用したシステムにおいて, MBL 法による形状測定の精度と再現性を最大化するに は、キャリブレーション方法、電気ノイズの低減が必要であることが見いだされ、今後の設計 改善に役立つと考える。

3.7 参考文献

- [1] N. Yasui, M. Isawa, T. Shismoto, K. Sekiguchi, M. Tanaka, M. Osaki, C. Shishido, N. Hasegawa, S. Cheng: "Applidation of model-based library approach to photoresist pattern shape measurement in advanced lithography", Preceedings, vol. 7638, Metrology, Inspection, and Proecss Control for Microlithogapy XXIV;763820 (2010), SPIE Advanced Lithography, 2010, San Jose, California, US
- [2] V. Vartanian, R. Allen, L. Smith L, K. Hummler, S. Olson, B. Sapp: "Metrology needs for through-silicon via fabrication", J Micro/Nanolith MEMS MOEMS 2014;13(1); 011206 1-9
- [3] M. Feser, J. Gelb, H. Chang, H. Cui, F. Duewer, S. Lau, A. Tkachuk, W. Yun: "Sub-micron resolution CT for failure analysis and process development", Measurement Science and Technology 19, 9 (2008) 094001 1-8
- [4] Hamamatsu Photonics K.K., Tokyo Electron Ltd. NEDO reports 2012. No. 2012000000877 (in Japanese)
- [5] Bruker micro CT SkyScan2011 x-ray nanotomograph product description webpage, http://bruker-microct.com/products/2011.htm accessed in May 3 2017
- [6] Y. Umehara, W. Jin: "Unique nondestructive inline metrology of TSVs by X-ray with model based library method", Proc Interconnect Technology Conference (IITC/AMC), San Jose (2014) 233-236
- [7] X-ray Mass Attenauation Coefficients, NIST Standard Reference Database 126 http://www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients (2018/9/22 閲覧)
- [8] Y. Umehara, N. Moronuki: "Simple 3D Measurement of Through-Silicon Vias by Analyzing Projection Images of Nano-Focus X-ray Microscope - Principle and evaluation of error –", Journal of the Japan Society for Precision Engineering; 82, 10 (2016) 901-906 (in Japanese)
- [9] S. Zabler, T. Ebensperger, C. Fella, R. Hanke: "High-resolution X-ray imaging for lab-based materials research", Conference on Industrial Computed Tomography (ICT), Wels, Austria. 2012; 19-21;117-127
- [10] B. Schölkopf, A. Smola, R. Williamson, P. Bartlett: "New support vector algorithms", Neural Computation, 12 (2000) 1207-1245
- [11] C. Chang, C. Lin: "LIBSVM: a library for support vector machines", ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology (2011) 2:27:1-27:27
- [12] R. E. Figliola, D. E. Beasley: "Theory and design for mechanical measurements", John Wiley, (2006) 161-200
- [13] JCGM 100:2008, Evaluation of measurement data- Guide to the expression of uncertainty in measurement,2008
- [14] Y. Umehara, N. Moronuki: "A simple 3D profile estimation of through-silicon vias (TSVs) based on

an X-ray projection image and its robustness evaluation", Proc International Conference on Precision Engineering (ICPE) 2016. A316-8186

- [15] 堀口睦乃,小池洋一; "SEM による測長", CREATIVE, 5 (2004) 61-66
- [16] NMIJ, QMC TE02A; certificated sample is shown at the URL

https://www.nmij.jp/service/P/else/seiseki/seiseki_RM1101.pdf (2018/6/18 閲覧)

第4章 銅充填シリコン貫通ビアの非破壊検査

4.1 緒言

第1章で詳しく述べたが、シリコンチップ面積を増やさずに高密度化、省電力を狙う高密度三次元積層半導体の普及にともない、複数のチップ間をつなぐために銅を充填したシリコン貫通ビア(Cu-TSV)の研究開発が行われ、実用化されてきた[1]。 その製造工程においては、めっき浴条件などの変動から、デバイス形成時に配線の抵抗値に影響を与える欠陥や小さな空乏(ボイド)が発生することがある[2]。 このボイド発生は、次工程以降で形成される回路の信頼性を大きく損なうこととなる。欠陥を早期に発見するために非破壊で検査方法への要求は高く、製造工程の処理と同期するインライン検査が望まれる[3]。

4.2 非破壊インライン検査における課題

銅めっき充填工程への非破壊でのインライン検査に対する要求として標準の銅を充填し た Cu-TSV の大きさ直径 5 μm 深さ 50μm への対応として, 銅めっき工程にて発生した内在 する空乏欠陥に対して非破壊で認識分類し、配線の品質管理項目として空乏欠陥の発生頻 度、大きさを測定したいという要求が存在する。空乏欠陥があるからといって必ずしもそ の Cu-TSV はデバイスに使えなくなるというわけではなく, 設計の冗長度を鑑みある程度の 空乏欠陥が存在したままの市中にでまわっているデバイスは存在するものと思われる。し かし,品質管理要求としては、グローバル配線としての RC 時定数の大きさによる信号遅れ が発生する要因となるため無欠陥に近い状態が要求される。 そこで, X 線により非破壊でビ アの形状、空乏結果を観察し抜き取りで品質管理を行うことがおこなわれるようになって きている。しかし,本論文でもたびたび議論してきたように X 線 CT 装置でコストとスル ープットを満たす使い方は空間分解能を数ミクロンレベルの分解能で扱えるのみであるの で, 縮小化がつづく Cu-TSV 中の空乏欠陥への要求も高くなっている。 そこで高い分解能が 得られるナノフォーカス X 線源を用いて高いスループットの得られる一枚の透過像から, Cu-TSV の中のボイド形状の分類やボイド容積の推定方法についての詳細な議論は十分に 行なわれていなかった。ナノフォーカス X 線顕微鏡を用いて推定が行えれば,発生原因解 析と定量的なプロセスへのフィードバックのための情報として、短時間でのインライン検 査への適用の可能性が高くなると考えられる[4-12]。

しかしながら,X線透過像から不定形であると考えられる欠陥の分類と形状を推定するためには、いくつかの課題を解決する必要がある。(1) Cu-TSV 中に生成されたボイド部分は 銅の中の空隙であり、銅とシリコン境界部分に比べ相対的にコントラストが弱く、定量的 な解析のために適切にボイド部分を認識し抽出する方法が必要、(2) 不定形のボイドの形状 を、分類や推定のためどうモデル化すべきかが不明、(3) その分類認識の再現性や推定精度 が不明であることの課題がある。

本章では上記の課題に対して(1) Cu-TSV の X 線透過像からのボイド部分の抽出方法の検討, (2) ボイド形状推定のためのモデル化の方法論の検討,および(3) 推定精度に関する評価までを行い,プロセス制御の可能性について議論を行う。

4.3. ボイド欠陥の分類と形状推定方法

4.3.1 欠陥の生成メカニズムと形状の分類および対応

Moffat[13]らやJin[14]らによれば、ボイドの発生を抑制し均一な銅めっきをTSV に充填す るために、めっき浴中に抑制剤、加速剤、レベリング剤と呼ばれる添加物を配合し、電解 析出の電流密度や電流パルス波形等の印加条件を調整することにより、TSV の底部から井 戸に水が満たされるように銅が析出するBottom-up-fillingというプロセスが行えるようにな ってきている。 生成モデルはTSV 内の加速剤の拡散による効果と考えられている。

しかしながら、ある条件下では充填された Cu 中に多様な形態のボイドが発生することが 報告されている。長井ら[2]は、添加剤や電析条件以外にも電析時のめっき浴中の撹拌条件 がボイド発生に影響することについて指摘している。同様に他の要因が原因となる場合も 見られる[15][16]。

これまで報告された内容では,総じてこれらの条件で発生するボイドの形状の多くは, ほぼ回転対称体に近いものであった。

一方,前述した銅めっき処理中にボイドが発生する原因以外にも,めっきの前工程であ るバリアー層/ライナー層/シード層,すなわち SiO2 や SiNx などの絶縁層を成膜し TiN や TaN などの金属化合物薄膜を形成後に,Cu の薄膜の成膜時の条件により,ボイドが発生 することが報告されている[15]。 その原因は主として,Physical Vapor deposition(PVD)法な どによる Cu のシード層成膜時の TSV 内壁部への被覆率が不十分な場合や,あるいはシー ド層形成後の表面に酸化膜等が生成し,濡れ性が悪化した場合にボイドが発生することが 考えられる。

表 4-1 は、本論文で扱うボイドについて形状分類と予想される原因および回転体としての対称性を便宜上まとめたものである。分類はAからHまでの8種類としている。

A は、エッチング後の TSV の濡れ性不足やシード層の被覆が不十分などの理由により、 TSV 底部にボイドが発生するケースである。また B から G は、銅めっき処理中の浴の撹拌 状態、印加電流の制御や電極設置条件の適否、添加剤の配合の適否や濃度の変化などの要 因の組み合わせにより発生すると考えられるが、多様な形態が存在する。H は、完全に不定 形で、となりあう Cu-TSV においてもその中にあるボイドは同じ形ではなく、どれもほぼ回 転非対称の不定形であることを示すものとして分類する。

4-3

4.3.2 X線透過像とFIBによる断面加工によるボイド観察

Cu-TSV 試料の調整方法や,X線透過像の撮像方法および FIB による断面加工条件の詳細 は、後述の実験方法の項にて述べるが、本研究で行うボイド形状の分類とボイド形状の推 定には、ナノフォーカスX線透過像のみならず FIB の断面加工による観察が必須と考える。 X線透過像では、加工された断面表面の形状から得られる情報だけではなく、その表面下の 情報も得られる。

本論文では、ボイドの詳細な形状については、Cu-TSVの中心軸を通るように FIB による 断面加工を Cu-TSV の外側から少しずつ削りこむ作業と観察をステップごとに行い、その断 面に現れた最大の大きさのボイドを走査型イオン顕微鏡(SIM)画像から推定し評価に用いる。

4.3.3 欠陥の分類と形状推定によるプロセス改善の可能性

ナノフォーカス X 線像から Cu-TSV のボイドの欠陥検出と認識分類を行い, さらにその ボイド形状が回転対称体である場合には, その Cu-TSV 本体部分とボイド部分の形状推定を 行うことで定性的な欠陥分類を行うのみならず, 欠陥の発生原因やめっき条件のミスマッ チとの関連性を定量的に解析し, プロセスの改善や制御につなげることが考えられる。

Cu-TSV 中のボイド欠陥の分類と形状推定,およびその分類や推定結果をもとにプロセス を改善するための手順を Fig. 4-1 (a) に示す。この図における重要なステップは,(1) 一枚の X 線透過像からのボイド欠陥の認識,(2) ボイド欠陥分類およびその形状特徴から発生原因 との定量的な関連付け,(3) ボイドが回転対称であればその幾何学パラメータの推定,(4) 関 連するプロセスへの欠陥検出と分類情報の発報,ならびにフィードバックや次工程への事 前情報の提供である。なお,関連するプロセスとは,前述の事例の銅めっき中のボイド形状 が,非対称のものとなる欠陥の原因となった Cu のシード層の形成プロセスを含む。このプ ロセスで TSV 内の底面や壁面に均一に成膜されなかった場合に後工程のめっき工程でボイ ドが発生すると考えられる。

Fig. 4-1 (b) にボイド欠陥分類に必要な具体的な特徴量の抽出と機械学習による分類, さらに経験から得られた知識データと欠陥発生原因, プロセスの改善手段を関連付ける手順を示す。まず, (1) Step1 ボイドの対称性について調べ, 特徴量をもとに *k*-NN で対称, 非対称を分類。(2) Step2 ボイドが対称形であればその特徴から, 表 4-1 の内容に分類を行う。もし, 非対称形であれば, (1)で得た特徴のパラメータのみで, 欠陥発生原因のナレッジデー

4-4

タから製造工程改善のアクションに進む。具体的には欠陥の原因となったライナー層,バ リアー層,シード層生成工程の改善である。(3) Step3 対称形で分類されたボイド欠陥に対 し,モデル定義を行い定量的な寸法推定,容量推定を行う。(4) Step4 これまでの,定性的 分類結果,定量的寸法推定結果から,これまでの経験知と照らしあわせ製造工程の改善の アクションを行う。あるいは未知の欠陥であれば,ナレッジデータに登録し,新たに原因 とさらには改善の方法の関係付けの調査を行う。ボイドの位置や容積などの定量的なパラ メータを扱うことで,プロセス制御に必要な制御量も統計的な関係式として求めておくこ とで制御性を高めることが期待できる。このようにプロセスを監視,制御することで Cu-TSV 生産の歩留り,欠陥低減のための改善に寄与できるものと考える。

Image	Туре	Explanation	Expected causes	Sym- metric
	А	A Void around bottom part of the Cu-TSV	Lack of wettability/inconsistent coverage of seed layer	Yes
0	В	Rounded void near the top or middle of the Cu-TSV	Voids are supposed to be generated by combination	Yes
\bigcirc	С	A large void /a large seam void	of the factors 13.and imbalances of them in the Cu plating bath.	Yes
$\mathbf{\overline{\mathbf{b}}}$	D	A cone with circular truncate cone void	1.Problems in the condition of agitation	Yes
	Е	A small cone void	2.Mismatches in the applied current density and its control	Yes
0	F	A small void at the bottom	3.Imbalance in the amount of additives such as suppressor, accelerator and	Yes
♀ 0	G	Number of Voids >1 Including seam voids	leveling agents or so	Yes
	Н	Voids that propagated from the wall of the via Variation in its shape	Defects in Liner/Seed layer	No

Table 4-1 Conventionally defined list of classified defects in Cu-TSVs



(a) Scheme of process control based on inline inspection of Cu-TSV voids.



(b) Detailed scheme of classification of voids and linkage of causes and action for improvement of processes
Fig. 4-1 Scheme of process control based on inline inspection and detailed scheme of classification

4.3.4 欠陥の認識と特徴量の抽出と分類手順

詳しい X 線透過像の撮像条件は実験方法の項で述べるが、Cu-TSV 中のボイド部分の輝度 は画像中の明暗の中間値をもつため、ボイドが小さい場合には、背景の銅の部分とボイド の部分との区別が難しい場合がある。Fig. 4-2 と Fig. 4-3 に、それぞれ実際に撮像された X 線画像を用いてボイド部分の抽出手順の説明と、ボイドの特徴量の定義を示す。

Fig. 4-2 において,以下の手順で処理を行う。

手順(1) 本研究で扱う X 線透過画像はカメラ量子ノイズ起因のインパルスノイズを含み, またコントラストが低いため,メディアンフィルタを適用した後,コントラスト強調処理 を行う。

手順(2) ボイド部分の中間のグレー値と Cu の境界領域を明確にし,2 値化後に塊として 判別できるようにするために,ガウスラプラシアンフィルタ(LoG)を適用する[17]。 こ のLoG フィルタは一般的には式 (4-1) で表すことができる。

$$LoG(x, y, \sigma) = \frac{x^2 + y^2 - 2\sigma^2}{\pi\sigma^4} \exp(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2})$$
(4-1)

ここで *x*, *y* は画像ピクセル位置の座標, σ は標準偏差値であり,画像のノイズの量やコントラストに合わせて調整するパラメータである。実際の画像処理においては,試行錯誤を繰り返しながら設定した。

手順(3) 2 値化処理のあとのラベリング処理で Cu-TSV 本体部分およびボイド部分の境界 を設定し、それぞれの部分について楕円体近似をすることで、Fig. 4-3 に示したパラメータ を抽出する。パラメータの内容は画像処理では一般的に使われるものである。すなわち、 Cu-TSV 本体部分とボイド部分の領域を楕円体とみなし、その傾斜角度、重心位置座標、認 識した領域の周長、真円度、領域の面積、認識されたボイドの数などである。この中で、 領域面積および、各座標 X, Y 値については、Cu-TSV 本体部の外寸に対して正規化した値 を用いる。

抽出した特徴量パラメータと分類項目を関連付ける機械学習に k-Nearest Neighbor(k-NN) アルゴリズムを用いる[18]。欠陥発生原因とその形状については複雑なプロセス要因が絡み 合ったものもあり単純な議論ができない場合もあるが,本論文で分類に用いた Table 4-1 は, これまで報告された論文や,本論文の実験による経験からの情報をもとに便宜上作成した ものである。新たな分類事例や知見が増えれば追加修正することも可能である。 機械学習は教師有り学習で、これまでのプロセス実験で経験したサンプル、およびシミ ュレーション画像サンプルを人間が見て分類判断し教師データとすることでデータベース を作成し、特徴量と分類した内容を関連つける機械学習を行う。本論文では、これまで観 測されたボイド欠陥を円錐や円錐台、楕円球等を組み合わせてモデル化し、シミュレーショ ン画像を生成し、データベースを拡充することで認識率を向上させている。



Fig. 4-2 Extraction steps of void from an X-ray image of Cu-TSVs



Fig. 4-3 Definition of features of Cu-TSV

4.3.5 回転対称および回転非対称ボイド欠陥の判別

表 4-1 の対称性の欄にあるようにボイドが回転対称あるいは非対称であるかの判別を行う方法を示す。

先に述べた Fig. 4-3 の特徴量パラメータ値から, Cu-TSV の対称軸とボイドの対称軸の角 度ずれ量,ボイド領域の重心位置の Cu-TSV の対称軸からのずれ量,周長と面積との関係な どの特徴量を定量化し,教師あり機械学習を行い,回転対称と回転非対称の判別を行う。 とくに,X線撮像時のX線源と試料との傾斜角度(後述の Fig. 4-6 で定義)の条件が2つ以 上ある場合,特に真上からと Table 4-2 にあるX線撮像時の条件の範囲の傾斜角度での情報 を確認することで確実な判別が行える。

4.3.6 ボイドのモデル定義とシミュレーション

銅めっき工程にて発生するボイドについて、回転対称体である場合には、Fig. 4-4 に示す 便宜的に一般化した方法で汎用的なモデル定義を行う。すなわち、回転対称である Cu-TSV の中心軸の深さに沿った方向を δ , z 軸, Si 表面の位置にある原点のまわりに, r, x, y 軸, 回転角 θ を軸の回転方向に定義し、さらに座標変換を写像 f で定義すると、式 (4-2) に示す ように、この Cu-TSV を 3 次元でボイド内部の点を両方の座標系で表すことができる。

ここに P は δ , r, θ 軸で決定されるボイド内部の点の座標の集合, P_i は個別の点, Dvはボ イドの存在する領域を示し、また V は X 線投影像を生成する際に必要となる写像すなわち 座標変換後の点の位置を示す。

さらに、回転対称のボイドの深さ方向の形状を,δの関数として回転軸に対して,r軸方向のそれぞれのボイドの半径方向の大きさを表す関数*Pr_i(δ)*を定義する。

 $f: P \to V, \quad \{f(P_i) | P_i \in Dv\}, \quad P_i(\delta, r, \theta) \to V_i(x_i, y_i, z_i)$ (4-2)

なお座標系の変換は以下の式(4-3)で記述できる。

 $x = r\cos\theta, \ y = r\sin\theta, \ z = \delta \tag{4-3}$

X 線透過像のシミュレーションを行うには、さらに X 線源位置を考慮した写像投影などの座標変換処理が必要であるが[10]、後述するように別論文で示した処理を適用することができる。

一方、Cu-TSV 中の全ボイド容積 V_{total} は、回転対称体の単純な積分式の和として、以下の 式(4-4)で表すことができる。 $P_{ri}(\delta)$ は前述のボイドの半径方向の大きさを定義した関数で、 δ_{i_s} 、 δ_{i_e} はそれぞれ回転体の積分値を算出する際の積分区間の開始位置、終了位置の座標を表し ている。

$$V_{total} = \sum_{i=0}^{n} \int_{\delta_{i_s}}^{\delta_{i_e}} \pi P r_i^2(\delta) d\delta$$
(4-4)

さらに詳細には、ボイド形状の特徴に合わせて Fig. 4-5 に示す個別の表 4-1 の A-G に対応 したモデルを定義する。すなわち、B、G でみられる泡状のボイドは回転楕円体として、そ れ以外の欠陥については、円錐や円錐台の形状を組み合わせた、簡便な構造の回転対称体 として扱う。これらの定義を元に回転対称ボイドのモデル化と透過像のシミュレーション を行う。

4-10



Fig. 4-4 Model of profile of voids in Cu-TSV



Fig. 4-5 Modeling samples of the void type A-G

Cu-TSV本体部分およびボイド部分の外形の線は、実際はゆるやかな曲線であるが、本論 文ではモデル化する際に形状線の変化点をパラメータとしてとして扱い易い寸法取得位置 に指定した。

詳細な手順は述べないが手順(5)以外は第2章で詳しく述べた内容と同じであり、その 内容を Fig. 4-6 に示す。すなわち、

手順(1) パラメータの中心値と定義幅を設定する。この中心値は FIB の断面加工の情報からえられた形状情報の平均の値を採用する。また定義幅は,経験上その中心値の 10~20%程度としている。

手順(2) モデル定義した N 個のパラメータについて, N 次の一様分布乱数を発生し学習用 教師データを生成する,このパラメータ数は個別のモデルに対して調整する。一様分布乱 数を学習データとして利用する理由は,取り扱う N 個のパラメータ範囲で各パラメータが 疑似的に独立変数として扱える学習データを生成できるようにするためである[11]。

手順(3) 画像化のための手順(2)で生成したデータの整数化を行う。

手順(4) 整数化したモデルデータから 3 次元の回転対称体であるボイドを含む Cu-TSV ボ クセルデータを生成する。ボクセルデータの1単位の大きさは 0.1 µm×0.1 µm×0.1 µm とし た。

手順(5) ボクセルデータから X 線透過像のシミュレーション画像を生成する。このとき X 線透過減衰率をボクセル1個の大きさに合わせた厚み 0.1 µm として,構成する各物質につ いてそれぞれ Cu: 0.0435 %および Si: 0.0016 %とし,またボイド中を空気が埋めていると仮 定して Air: 0 %として計算する。

この方法により生成した画像を、定性的なボイド欠陥分類や、定量的な形状推定の機械 学習や評価に使用する。また、本論文で用いたシミュレーション像は、ナノフォーカス X 線透過像で特徴的に発生する画像中の物体のエッジが強調される効果を盛り込んでいる [11][19][20]。

4-12



Fig. 4-6 Simulation scheme of X-ray transmitting image using Cu-TSV model

4.3.7 回転対称ボイド欠陥の形状および容積推定

銅めっき前の TSV の形状推定を著者らが提案した方法, すなわち, TSV 形状のモデル化 と形状シミュレーションおよび機械学習による形状推定を行う Model based library 法(以下 MBL で示す)という方法論を応用し,回転対称のボイドがある Cu-TSV の形状推定を行う。 その模式図を Fig. 4-7 に示す[11]。すなわち,これまで述べた Cu-TSV およびボイドの形状 のモデル定義を行い,N 次元の乱数行列として発生させた形状パラメータを教師データとし て,前項で述べた手順で生成した Cu-TSV のシミュレーション画像を学習データとして機械 学習を行う。学習アルゴリズムには Support vector regression(SVR)法を用いるが[21][22],シ ミュレーションで生成した 2 次元の画像データを SVR で取り扱うには,輝度の 2 次元配列 である画像データを 1 次元の配列に変換して Support vector とする。画像データが m×n の 配列であると仮定すると,配列変換は式(4-5)で表すことができる。ここで *I*_{1d}, *I*_{2d} はそれぞれ 画像輝度データの 1 次元配列, 2 次元配列を表す。

 $I_{1d}(j+k \times m) = I_{2d}(j,k)$ $n \ge j \ge l, m \ge k \ge l$ (4-5)

さらに、SVRにより形状パラメータを直接推定する変換関数を生成して、実画像について形状パラメータの数値をこの変換関数により推定値を得る。

また、この変換関数より得たパラメータを元に、ボイドを含む Cu-TSV 全体およびボイドの容積の推定を行う。



Fig. 4-7 Generation of transfer function for estimation of TSV profile parameters with a symmetric

void

4.4 評価実験

4.4.1 銅充填シリコン貫通ビア試料の作成

表 4-2 に試料の作成条件を示す。Si ウエーハ上にレジストを塗布した後, SEMATECH が 提供する TSV 評価用の φ5 μm マスクパターンを露光機で形成し,非ボッシュプロセスによ るディープエッチング処理[10]を TSV の深さが 50 μm になるように生成条件を調整した。 引き続いて,絶縁層形成,ライナー層の形成に続き,PVD による Cu シード層形成の後,Si ウエーハを個片状に分割し,各個片について銅めっき浴条件を調整してボイドが発生する 条件でめっき処理をおこなった。

また, Cu シード層の被覆率が低くなるように PVD のプロセス条件を調整した回転非対称 のボイドを含む Cu-TSV 試料も別途作成した。

Item	Content		
Sample preparation	A Si wafer with a diameter of 300 mm was deep etched with a mask.		
	Coupon samples were prepared and subsequently processed as below after		
	the etching		
Formation of TSVs	Mask: SEMATECH test pattern of $\phi 5 \ \mu m$ for TSVs was applied ^{*1}		
	Deep etch: Non-Bosch process by Etcher: Tactras TM FAVIAS of Tokyo		
	Electron Ltd		
	Barrier/Liner/Cu seed layers: Formed by applying CVD and PVD process		
	Copper filling: Copper electrodeposition under control of applied current		
	density, additives and agitation condition as a bottom-up-filling process		
Cu-TSV's target size	5μm×50μm (aspect ratio 1:10)		
X-ray projection	Acceleration voltage 40 keV		
imaging condition	Resolution of X-ray source 0.25 μ m ^{*2}		
	Tilted angle 0, 12.7 \sim 30 degrees ^{*3}		
	Camera pixel size 6.5 µm/pixel		
	Distance between X-ray source and sample 1.95 mm		
	Distance between sample and camera 125.1 mm		
FIB processing	A Cu-TSV near the target Cu-TSV was marked by FIB (SII Nano		
condition	Technology Inc. SMI3050R) processing in advance. And after X-ray		
	imaging the target Cu-TSV was cross-sectioned with a current density of		
	10 A/cm ³ during FIB etching and viewed by SIM imaging mode.		
	For the purpose of estimation of volume of voids the target Cu-TSV was		
	cross-sectioned with and viewed by SIM and repeated stepwise every		
	etching of $\sim 0.55 \mu\text{m}$ thickness.		

 Table 4-2 Condition of experiments: sample preparation, X-ray Imaging and FIB processing

*¹ It has variety of pattern layouts of TSVs. A top view of 6×6 matrix case of $\phi 5 \mu m$ holes is shown below. Another type of layout is also included in the TSV samples.



 \ast2 Resolution of the X-ray microscope was determined by imaging of a JIMA-chart with a line-and-space of 0.4 $\mu m[11].$

*³ The tilt angle was defined as shown in Fig. 4-6.

4.4.2 ナノフォーカス X 線によるビア透過像の撮像

ボイドを含む Cu-TSV の個片試料をナノフォーカス X 線顕微鏡のステージに取り付け, X 線源と試料面との傾斜角度を設定して表 4-2 に示した X 線透過像撮像条件で,透過像を取 得した。MBL 法による形状推定には,この傾斜角度を 12.7°に設定して撮像を行った。本 実験の X 線顕微鏡の調整がベストの条件で 0.25 µm 程度であることをあらかじめ 0.4 µm の JIMA チャートパターンにて確認を行った。

4.4.3 FIB による試料の断面加工と断面画像の取得

X 線透過像でみる Cu-TSV と同じ場所を FIB で削って観察するため、それぞれの個片試料 に、あらかじめ FIB で削ったマークをつけておき、X 線透過像の撮像を行った場所を Secondary ion microscope (SIM)像から探しだし、表 4-2 に示した条件で、試料の断面加工を 行なった。引き続いて SIM 像による断面観察像の取得を行う。試料を直径方向に約 0.55 μm ずつの厚みを削りだし、このステップの操作を繰り返し行い連続した SIM 画像を得た。

4.4.4 欠陥の認識と分類およびボイド容積推定

すでに示した A から G に便宜上分類したボイドを含んだ Cu-TSV のモデル定義をもとに, 記述のシミュレーション方法で生成したボイドを含む画像をそれぞれ 30 個生成し, この画 像から人間が認識して A から G に分類した結果を教師データとして, 生成したシミュレー ション画像からボイド特徴量を抽出し, 教師あり機械学習を K-NN アルゴリズムを用いて 行う。この機械学習により生成した判別器を用いて実際の試料の X 線透過画像からボイド の分類の評価を行う。

さらに A から G のボイドのモデル定義に基づき, FIB にて推定を行う対象の近傍の Cu-TSV の断面像を撮像し, その SIM 像からモデルの中心値のバラメータを抽出する。この パラメータを使用して, すでに述べた MBL 法による機械学習を行い, 変換関数を生成する。 さらに実際の画像から形状パラメータを推定して, その推定値からボイドの容積の推定を 行う。

4 - 17

4.5 評価実験結果

4.5.1 試料の観察および分類結果

本実験で作成した試料は、結果として表 4-1 分類の B, D, E, F および H に分類した内容のもののみであった。前述の D, E と H に目視で分類されたケースについて Fig. 4-8 に FIB による断面画像ならびに X 線透過像の結果をまとめて示した。

Fig. 4-8 (a) に回転対称でその径の大きさが Cu-TSV の径そのものの半分程度と視認でき る比較的大きなボイドが存在する D に分類される試料についての結果を, Fig. 4-8 (b)に回転 対称の小さなボイドが存在する E に分類される試料の結果を, Fig. 4-8 (c)(d)には,回転非対 称のボイドがある H に分類される結果をその模式図を含めて,それぞれ示した。

Fig. 4-8 (a)(b) の FIB の断面加工後の画像から,このタイプのボイドはそれぞれ円錐および円錐台を組み合わせた形状と単純な円錐型のものであり,その位置は Cu-TSV 円柱部分のほぼ芯の部分に位置していると考えられる。また,これらのX線透過像から隣り合う Cu-TSV も同じように中心軸上に欠陥が位置していることが容易に推察できる。Fig. 4-8 (a) の試料を上から観察した X 線像からも容易に判断できた。

一方 Fig. 4-8 (c) で示した Cu-TSV 中のボイドは, 断面加工後の画像から, 隣り合う Cu-TSV で別の構造であることが伺える。さらに Fig. 4-8(d)の X 線透過像から隣り合う3 個の Cu-TSV の中のボイドはまったく別の形状であり, 断面像から推定される単純な構造ではなく, Fig. 4-8(c)の模式図のように断面の表面化にある構造は Cu-TSV の外形と違い回転非対称で, バリエーションが豊富な特異なものであることがわかる。

この試料は、Cu シード層形成時に膜の被覆率に欠陥のある成膜が行われた結果、透過像の中のそれぞれの Cu-TSV に固有の形状のボイド発生し、壁面の違った部位、方向に成長したものを捉えているものと考えられる。

4-18



(a) Symmetric voids type D



with a void of type E

(b) Symmetric voids type E

Fig. 4-8 Cross-sectional SIM view and transmitted X-ray images of classified voids in Cu-TSVs (a) D, (b) E



Cross-sectional image



Sketch of TSV and voids

(c) Asymmetric voids type H



An asymmetric void propagated from the wall

(d) X-ray image of asymmetric voids type H Fig. 4-8 Cross-sectional SIM view and transmitted X-ray images of classified voids in Cu-TSVs (c)(d) H as defined in Table 4-1. (Continued)

4.5.2 欠陥の認識と分類およびボイド容積推定結果

4.3.4 に示した方法で生成した判別器により実際のX線透過像から分類を行った結果を表 4-3 に示した。この評価のサンプル数で交差検定損失を推定[23]したところ,94%の正解率の評価結果を得た。

同時に,前述の MBL 法により Cu-TSV 中のボイドの位置,容積および TSV に対する容積 %を推定した結果もあわせて表 4-3 に示した。



Table 4-3 Classified defects and estimated geometrical parameters of voids

これらの結果から本論文の提案の方法により,実験の試料の分類数は5個であるものの, 回転対称性を含めて,高い認識率で分類が行われ,回転対称のボイド形状および容積%が 0.02~12.4%と幅広い範囲で推定値を得られることが示された。

また, Table 4-3 の No.4 の推定事例について, パラメータの詳細を Fig. 4-9 に示す。

Fig. 4-9 の Cu-TSV 断面像は形状推定を行った Cu-TSV の近傍にあるもので,この断面画像から,形状シミュレーションを行うために必要なパラメータのデータの抽出を行った結果も表に示した。この計算で用いた独立した形状パラメータの数は 10 であるが,そのうちボイドに関わるものは 5 個と半分を占める。この断面画像からこのパラメータの量で十分に形状の表現ができていると考えられる。この容積の推定値の精度を検討するために,次



項にてさらに FIB を用いた手法で Type.D のサンプルについて検証を行なった。

Fig. 4-9 Model definition of a Cu-TSV with a symmetric void by assigning parameters listed in the

table

4.5.3 ボイド容積推定結果の検証

Table 4-3 の No.4 のサンプルについて, FIB による断面加工と SIM 像観察による断面形状 の測定(X-SEM: Cross-sectional SEM)を行ってボイド容積の計算を行い,本論文で提案する推 定値との比較を行った。Fig. 4-10 (a) は, 0.55 µm ステップで FIB 加工した断面を観察した 結果を示す。これらの画像の中からボイド断面積が最大となるものを選び,その幅に対応 する回転対称形状からボイド容積を計算した。

Fig. 4-10 (b) 左上は断面観察像からボイド各部の寸法を測定するとともに, MBL 法による推定値を対応させたグラフを示す。横軸は実測した値,縦軸は本論文で推定した値を示し、プロット上の点は TSV のいずれかの直径 (*CD*s) あるいは高さ (*H*s) を示す。直径と高さを同じグラフにプロットした意図は,絶対値の大小によらず実測値と推定値が対応することを示すことであり,推定値は実測値よりやや小さいものの,良く対応していることがわかる。

同図にはボイド容積の比較結果も示している。同図右には透過像とこれに対応したモデ ルを示しており、回転対称形として容積の計算を行った。同図左下にはこれらの対応表を 示し、実断面を観察した結果(X-SEM)の絶対精度について議論は残るものの、提案する MBL 法は X-SEM のデータから算出された値と同程度の値が得られたことがわかる。しか し、TSV 容積全体に対する割合としては誤差3%程度で推定できたことから、将来のプロセ ス制御応用への可能性が十分期待できると考えられる。



(a)



(b)

Fig. 4-10 Correspondence of estimation and experimental results. (a) Cross-sectional observation (XSEC) of TSV. (b) Coincidence of dimensions and voids volume

4.6 結言

ナノフォーカス X 線透過像に基づき,シリコン基板に形成した Cu-TSV 中のボイド欠陥 の分類とボイド形状を推定する方法論を提案した。結果は以下のようにまとめられる。

(1) 透過像の画像処理を工夫することでボイド欠陥の認識と抽出を行えることを示した。

- (2) ボイドを回転対称および回転非対称に分類し、回転対称なものについてモデル定義を行ってシミュレーション画像を生成し、これらと形状パラメータによる教師学習を適用することで、ボイドの分類と形状推定、ならびに容積の推定が行えることを示した。使用した試料では、推定容積率%は0.02~12.4%の範囲であった。
- (3) FIB による断面観察を行って推定精度の検証をしたところ、その容積に対する比率としての推定誤差は Cu-TSV の全容積に対して3%程度であった。

以上より、本方法は銅めっき工程ならびに関連する工程のボイドを低減するプロセス制 御への適用が期待できると考えられる。今後、試料数を増やして推定精度の再現性の評価 誤差の評価や改善についてさらに調査および議論を深める必要がある。

また、スループットに関わる検査時間について明確にすると、標準の TSV の銅めっき充 填プロセスは1ロット 25 枚 30 分程度で生産される。そこで、インライン検査として X 線 による検査を行う時間コストは1ロットから1枚ウエーハを抜き取り9点/30 分程度の時間 で行える。ウエーハ1枚の測定の内訳として、X 線透過像撮像 150 秒×9=22.5 分、ステー ジ位置決め時間は 2 秒/点以下、データ計算時間、分類および寸法形状測定時間合わせて1 秒であるため1ウエーハの処理時間は 30 分であれば問題なく処理可能である。

4.7 参考文献

- S. Kumar: "3DIC and 2.5D TSV Interconnect for advanced packaging: 2016 business update," Yole development Market & Technology report, (2016), September
- [2] M. Nagai, Y. Tmari, S. Yasuda, M. Shimoyama, N. Saito, F. Kuriyama: "Copper Electroplating of High Aspect Ratio Through-silicon Via for 3D Packaging using an UFP Tool," Ebara annual technical report, No. 230 (2011) 7-13
- [3] V. Vartanial, R. A. Allen, L. Smith, K. Hummler, S. Olson, B. Sapp: "Metrology needs for though-silicon via fabrication," J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS. 13(1), (2014) 011206
- [4] L. W. Kong, P. Krueger, E. Zchech, A. C. Rudack, S. Arkalgud, A. C. Diebold.: "Sub-imaging Techniques for 3D-Interconnects On Bonded Wafer Pairs," 11th International Workshop on Stress-Induced Phenomena in Metallization, (2010) 221-228
- [5] M. Murugesan, H. Kino, H. Nohira, J. C. Bea, A. Horibe, F. Yamada, C. Miyazaki, H. Kobayashi, T. Fukushima, T. Tanaka, M. Koyanagi: "Wafer thinning, bonding, and interconnects induced local strain/stress in 3D-LSIs with fine-pitch high-density microbumps and through-Si vias," Electron Devices Meeting (IEDM), IEEE Int., (2010) 2.3.1-2.3.4
- [6] 石井博行, 岡田貴弘, 三和田靖彦: "X線 CT を活用した3次元形状計測,"精密工学会誌, Vol.69, No.4, (2003) 473-476
- [7] 開本亮, 塩田忠広, 岸武人, 大西修平: "マイクロフォーカスX線CT技術と半導体検査への応用,"電子情報通信学会技術研究報告, CPM,電子部品・材料 103, 34, (2003), pp.55-58,
- [8] 高堂 積,有田 宏志,大野 恭秀: "X線 CT 装置による樹脂封止 IC のワイヤ流れ形状 計測,"電子情報通信学会論文誌 C, Vol.J84-C, No.5,(2001) 400-404
- [9] A. Phommahaxay, I. D. Wolf, P. Hoffrogge, S. Brand, P. Czurratis, H. Philipsen, Y. Civale, K. Vandersmissen, S. Halder, G. Beyer, B. Swinnen, A. Miller, E. Beyne : "High Frequency Scanning Acoustic Microscopy Applied to 3D Integrated Process: Void Detection in Through Silicon Vias," IEEE Electronic Components & Technology Conference (ECTC) ,(2013) 227-231
- [10] Y. Umehara, W. Jin: "Unique nondestructive inline metrology of TSVs by X-ray with model based library method," IEEE International Interconnect Technology Conference (IITC/AMC), (2014) 233-236
- [11] 梅原康敏, 諸貫信行: "ナノフォーカス X 線透過像を用いた Through-Silicon Via の三次

元形状簡易推定方法,"精密工学会誌,82,10,(2016)901-906

- [12] Y. Umehara, N. Moronuki: "Nondestructive inspection and inline estimation of profiles of copper-filled through-silicon vias with voids by a nano-focus X-ray microscope," 2016 IEEE international Interconnect Technology Conference/Advanced Metallization Conference (IITC/AMC), (2016) 77-79
- [13] S. Jin, G. Wang, B. Yoo.: "Through-Silicon-Via (TSV) Filling by Electrodeposition of Cu with Pulse Current at Ultra-Short Duty Cycle," Journal of the Electrochemical Society, 160 (12) (2013) D3300-D3305
- [14] T. P. Moffat, D. Josell: "Extreme Bottom-Up Superfilling of Through-Silicon-Vias by Damascene Processing: Suppressor Disruption, Positive Feedback and Turing Patterns," Journal of the Electrochemical Society, 159 (4) (2012) D208-D216
- [15] R. Beica, C. Sharbono, T. Ritzdorf: "Through silicon via copper electrodeposition for 3D integration," Proc. Electronic Components and Technology Conference, (2008) 577-583
- [16] M. J. Wolf, T. Dretschkow, B. Wunderle, N. Jürgensen, G. Engelmann, O. Ehrmann, A. Uhlig, B. Michel, H. Reichi: "High aspect ratio TSV copper filing with different seed layers," Electronic Component s and Technology Conference, (2008) 563-570
- [17] H. Kong, H. C. Akakin, S. E. Sarma: "A Generalized Laplacian of Gaussian Filter for Blob Detection and Its Applications," IEEE Transaction on Cybernetics, Volume: 43, Issue: 6, (2013) 1719-1733
- [18] J. Kim, B. Kim, S. Savarese: "Comparing Image Classification Methods: K-Nearest-Neighbor and Support-Vector-Machines," Applied Mathematics in Electrical and Computer Engineering, (2012) 133-138
- [19] S. Zabler, T. Ebensperger, C. Fella, R. Hanke: "High-resolution X-ray imaging for lab-based materials research," Conference on Industrial Computed Tomography (ICT), 19-21, (2012) 117-127
- [20] A. Ishisaka, H. Ohara, C. Honda et al.: "Theoretical Analysis of Phase Contrast Imaging for Mammography," Konica Minolta Technology Report, 2, (2005) 31-36
- [21] B. Scholkopf, A. J. Smola, R. C. Williamson, R. L. Bartlett: "New support vector algorithms," Neural Computation, 12, (2000) 1207-1245
- [22] C. Chang, C. Lin, LIBSVM: "A library for support vector machines," ACM Transactions on
Intelligent Systems and Technology, (2011), 2:27:1-27:27

[23] T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman: "The Elements of Statistical Learning," New York: Springer, 2001

第5章 結論

5.1 各章のまとめ

Mooreの法則やDennardのスケーリング法則によって成長してきたビジネスモデルがもは や、その設備投資の巨大化と素子の微細化の限界から、そのシナリオ通りに立ち行かなく なる局面が近づいていると言われている。しかしながら、今後も半導体製造メーカは、 Extreme ultraviolet (EUV)光源を利用したリソグラフィ装置を多数導入する10 nm以降のノー ドのプロセスにおいて微細化の進化を続け、回路素子の構造自体も変化を遂げ三次元構造 となっていく。またトランジスタのゲートのターゲット長さが7、5、3 nmである微細化ノ ードにおいても、微細化傾向はやや緩慢となるが、さらに進むと考えられる。そのような 状況下において、半導体の回路素子の微細化と異なる方向で、半導体デバイスの小型化、 高集積化、省消費電力化用途において、三次元積層デバイスの市場での価値、重要性はま すます高まっている。MPU、3DNANDメモリやFPGA、GPUなどの大規模な集積回路のデバ イスチップ間の信号遅延の解消や帯域幅の拡大、高速無線通信に不可欠な、アナログデバ イスチップの結合などの要求に対してますます答えていく必要があるためである。

このような三次元積層デバイスにおいて必須の技術となるTSVについては、開発・普及は ある程度進んだものの、信号配線すなわちI/Oラインの多チャンネル化、電源の分散、排熱 の分散などの性能も積層デバイス全体で最適化設計されることが期待されることになり、 その開発、製造の難易度は上がり、積層される各デバイスの歩留りを改善していくことは、 大変重要な課題である。本論文では、TSVの製造歩留まりに寄与できる可能性のある検査技 術の提案を行った。

第1章では、研究の背景である三次元半導体におけるビア配線生成のためのシリコン貫通ビア、 すなわちThrough-silicon-via (TSV)のプロセスと、これまで行われてきたTSV、銅を充填したTSV (Cu-TSV)検査法における課題を解説し、本研究で扱う方法の有用性を述べ、本研究の目的、意義 ならびに工学的位置付けを示した。

第2章では、Cu-TSVの検査に先立ち、エッチング直後のTSVの寸法を定量化する方法論を述べる とともに、計算実験による妥当性を検証した。すなわち、エッチング後のTSVの形状を円筒および テーパが直列に接続したモデルで近似し、これを透過するX線像の模擬画像を計算で求め、これら を教師データとして学習したシステムで実画像を解析した。撮像に使用したナノフォーカスX線像 の光学分解能が0.25 μm程度であるのに対し、0.1 μm以下程度の再現性で形状パラメータの推定を行 えることを示した.

第3章では、ナノフォーカスX線を用いた本推定法の精度、不確かさに関する分析について述べた。

キャリブレーションに関する誤差要因,機械的な誤差要因,電気的な誤差要因やアルゴリズムに起 因する誤差要因などの複数の系統について要因分析を行った。サブミクロンの精度が期待できるも のの,キャリブレーション法や電気ノイズに課題があること示した。

第4章は透過像による寸法推定法を銅めっき後のCu-TSVのボイド欠陥に発展させた結果を述べた。Cu-TSV中に生成したボイド事例から欠陥形状を分類定義し、プロセス上の欠陥発生要因と関連付けを行った。続いて、ボイド形状が回転対称の場合について2章の方法を応用してボイド形状のモデル化を行い、ボイド欠陥の特徴量を定量化できることを示した。インライン検査で欠陥発生の原因となるプロセスの課題を見出すことができればプロセス改善や制御に応用展開できる可能性も期待できる。

なお、インライン検査を行う際にはプロセスのスピードにあわせたスループットが必要となる。 第4章で述べた貫通ビアの銅充填プロセスは、1回のめっき処理に約30分程度である。現状のナノフ オーカスX線装置の撮像時間は1点あたり100秒程度かかるが、面内分布を調べるためにウエーハあ たり9点程度の観察を行うには、製造ロットから抜き取りで検査を行えば時間的には十分に満たせ る可能性があるということができる。

5.2 全体のまとめ

本研究では、ターゲットである直径5 µm 深さ50 µmのビアに対し、10%の誤差、1%以下 の再現性が得られる寸法測定性能の要求に対し、その課題解決に向けて(1)ナノフォーカ スX線顕微鏡による透過像をもとに一枚の画像から逆問題解析手法により効率的に検査を 行う。(2)ナノフォーカスX線顕微鏡システム試作し、インライン検査に用いる方法を開 発する。(3)試作したシステムのビア形状の寸法測定の不確かさについての妥当性を示す。

(4) 実用可能性として、銅めっきプロセス後のビアの銅に内在する空乏欠陥の寸法形状測 定に使える可能性について示すことを目的とし、(1)の提案を行った。(2)についてタ ーゲットのビアよりもやや大きな試料ではあったが、直径10 µm 深さ90 µmのビアについて 要求を満たすレベルにあり、将来的には直径5 µm 深さ50 µmに対して装置の改善を行うこ とで、対応できる可能性を示した。(4)実際の銅めっきビア試料について適用し空乏欠陥 の大きさを推定する等、実用の可能性を示した。さらに将来的には、次の目標として微細 化のつづくビアに対して直径2 µm 深さ20 µmに対応できる方法にチャレンジしていくこと 考えたい。

5.3 今後の研究の方向性

本項では、これまでに得られた成果をさらに発展させていくための、今後の研究の方向 性についてまとめる。Fig. 5-1にその方向性について簡単に示した。本論で得られた成果す なわちシミュレーション、逆問題解析手法を応用した非破壊で行える計測技術、画像処理 技術を応用した欠陥抽出、分類方法の開発により、半導体プロセス工程の歩留り改善への 貢献の道が開けると考える。インライン検査システムを考慮するとプロセス装置の装置状 態モニタとくみあわせたプロセスの結果予測、推定技術への展開や、後述するような複数 の工程にまたがる半導体製造工程の異常検出や装置間差補正、プロセス制御技術に応用が 可能であると考える。

本研究で得られた成果

 ・ 被検査物体のモデル化手法とシミュレーション、ビア形状推定技術 逆問題解析手法の展開

• X線透過像画像からの欠陥抽出、分類方法の実現

半導体プロセス工程の歩留り改善への貢献

- ビア形状推定結果と製造プロセス中の装置状態モニタと組み合わせ たプロセス結果予測、推定技術への展開
- 複数にまたがる半導体製造工程の異常検出や装置間差補正、プロセス制御への応用

Fig. 5-1 今後の研究の方向性

ナノフォーカスX線システムをインライン検査システムとしてその運用を想定してまとめてみると, Fig. 5-2に示した内容となる。

具体的にはナノフォーカスX線システムをインライン検査システムとして扱うことの可 能性の高い直径5 µm深さ50 µmの大きさの標準Cu-TSVを対象とし、1枚のX線透過像から画 像処理と特徴抽出を行う。あらかじめ分類定義しておいた学習器により分類する。MBL法 では対象物体の形状を定量的に推定しようとするもので回転対称であれば寸法形状を行う というような分岐を含む多彩な処理が可能で、分類のあとに最適な機能処理を組み込んで おくことで、効率的で多彩な有用な運用を盛り込むことができる。この事例では空乏欠陥 の回転対称/非対称の分類後に、もし回転対称であればモデル定義により機械学習による推 定を行うことで定量的な半導体プロセス工程の歩留り改善やプロセス後の面内均一性やプロセス間差などの評価,ならびに品質管理情報と扱うことができる。また回転非対称であっても欠陥の分類情報としてナレッジデータベースとくみあわせて異常の原因究明調査に展開ができる。



X線透過像によるインライン検査案

Fig. 5-2 MBL法のTSV製造工程をまたがったインライン検査の仕組みへの展開案

Fig. 5-3 は、この方法をより具体的な半導体製造工程のエッチング装置にインライン検査 装置として適用する案を示す。この図では標準的な装置構成のエッチングを示す。Front opening unified pod (FOUP)に格納された300mmウエーハを装置のLoad lock module (LLM)を 介して、真空状態にあるTransfer module (TM)モジュールロードする。さらにProcess module (PM)中でエッチング処理を行ったあとに、TM→LLMを経由してX線装置モジュールに受け 渡しウエーハ面内を例えば9点程度の測定を行う運用となる。ビア形成時のプロセス条件に も依存するが、1ウエーハあたりの処理時間が20~30分程度であれば、現状のX線装置シス テムの感度でもエッチングのプロセス運用に重大な遅延を与えることなく測定できる可能 性がある。エッチング装置上にインラインモジュールとして設置することが可能であれば、 プロセス後すぐにエッチング後の状態がみることができ、不具合がもし発生すれば、後工 程に深刻なダメージを与えないで早期にプロセス条件の改良、調整が可能なシステムとな る。これまで実際には搭載しての実験評価を行っていないがスループットを満たせること が期待できる。



Application concept as an inline monitor tool of TSV Depth profile for UD etcher

Fig. 5-3 X線検査モジュールのエッチング装置への実装案事例

さらに製造工程をまたがった運用に展開した考えをFig. 5-4に示す。エッチング工程や銅 めっき工程のみならず,ライナー層/バリアー層/シード層の形成工程への異常時の情報をイ ンライン検査の段階で早期に改善指示を行う処理,CMP工程へのめっき工程の状態の情報 を送りプロセスに変化があればその対処をあらかじめ促すことも可能である。



将来のTSV作成工程フローとプロセス制御案

Fig. 5-4 複数の関連プロセス工程にまたがる検査

このような成果がさらにどのように発展していくかについてその方向性をまとめてみた。 具体的には、インライン検査で製造工程のワークの出来ばえデータを得る逆問題解析手法を活用 して得る推定結果、すなわち正常、異常や定量的なビアなどのターゲットデバイスの寸法形状や欠 陥情報と、プロセス装置状態モニタセンサ、たとえばエッチング工程のプラズマパワーのモニタや In-situの分光スペクトルのようなリアルタイムモニタセンサ等と組み合わせたプロセス結果予測、 推定技術への展開である。さらには、この予測の流れより、本提案の方法論で得られるデータから、 関連する複数の工程での欠陥の検出と分類: Fault Detection and Classification (FDC)やプロセス変動の フィードバックを行う制御: Advanced Process Control (APC)、ならびに、装置、コンポーネント間 のプロセス変動差分の抑制制御: Advanced Equipment Control (AEC)への応用、実現である。

半導体のプロセス工程において、プロセスの再現性、面内分布均一性、面間均一性を高め、デバ イスの歩留りを高めることは、これまでの半導体の歴史の中でいつの時代にも要求されてきたこと であるが、半導体装置に連結して、非破壊かつインラインで検査することが可能になれば、処理ウ エーハごとあるいはロット単位のプロセスにおいても、抜き取り検査において、前述のFDCと呼ば れる連続したウエーハプロセス途中で異常を発見し、すみやかにその装置でもプロセスを止め、ス クラップウエーハの産出を最低減に抑制することが期待できる。

CMP: Chemical mechanical polishing

これまで行われてきたインライン検査のプロセス結果の評価として, 膜厚測定, Critical Dimension (CD)測定, そり測定, 光学顕微鏡等を使う外観検査やパーティクルの検査などがあげられるが, サ ブミクロンの領域で, 半導体デバイスの表面でなく非破壊で高アスペクト比のデバイスの深部をみ る検査方法はあまり多くはない。透過性の高いX線源を用いて非破壊でサブミクロンの分解能で外 観検査ができるとなれば, CADなどの設計情報と合わせて, ウエーハ上やデバイス上の位置情報を 付加することで, どの部位がプロセス条件に影響しやすいかなどという情報が得られるなど, その 用途は広がっていくものと考えられる。

本論文提案のMBL法を用いて、定量性の高い形状推定値やボイド欠陥の分類とその定量化が行え るようになると、ウエーハごとの変動、プロセス処理ごとの変動、装置モジュールごとの変動なら びに装置ごと(めっき装置であればめっき浴も含めて)の変動を、プロセス結果評価値情報である 数値化された測定値として取得し、装置のプロセスモジュールごとにプロセス変動をモニタする情 報としてトラッキングすることが可能となり、各装置プロセスモジュールの状態変動とプロセス結 果評価値との相関から、あらかじめ予測によるプロセス条件を決定する装置間差解消制御や歩留ま り向上のためのプロセス制御に繋げることが期待される。

また,形状や欠陥の検査が定量的に行えることから複数のプロセスにまたがって,プロセス結果 をモニタリングすることが可能であることから,その複数の工程のそれぞれの装置に対してフィー ドバックや次工程へのプロセス結果情報のインプットによる事前対応ができることが期待できる。 これらのことからインライン検査システムを入口として,大変大きな量のデータを扱うこととなる が,今後はより多くの同様なインライン検査装置が増え緻密な品質管理,生産管理が進んでいくこ とを思ってやまない。

5.4 謝辞

本論文をまとめるにあたり,論文審査員主査としてご指導を賜りました首都大学東京大 学院システムデザイン研究科教授 諸貫信行様に謹んで感謝申し上げます。また論文審査 委員としてご指導いただいた首都大学東京大学院教授 久保田直行様,准教授 菅原宏治 様,中央大学理工研究科教授 梅田和昇様,ならびに,諸先生方のご支援ご協力に深謝い たします。

サンプル作成でご協力いただいたSEMATECHと TEL NEXXのDr. Daniel Goodmanおよび, FIB断面加工, SEM観察, ナノフォーカスX線装置で撮像,ならびにご議論頂いた東京エレ クトロン(株)門沢克治氏,山西良樹氏,吉田英樹氏,波岡一郎氏,元東京エレクトロン (株)井上雅司氏,西崎俊彦氏,杉本直三氏,および大麻隆彦氏に心より感謝申し上げま す。特に半導体製造装置および半導体製造工場での運用を考慮し,本研究成果の応用展開 についてご議論いただいた波岡氏との議論から,多くの知見,アイデアをいただいたこと について深く感謝申し上げます。

社会人でありながら大学での研究活動に携わることになりまして,快く承諾いただいた 東京エレクトロン株式会社顧問田原計志氏,論文作成ならびに対外発表時の知財,法務審 査に関しましてご協力いただいた法務,知財,管理部の方々には,大変なお手数とお時間 を頂き,誠にありがとうございます。深く感謝申し上げます。

6年半の長きにわたり、社会人博士課程の学生として、諸貫先生の研究室にお世話になり、 先生からの暖かいご指導と、研究内容に対する忌憚のないご指摘をいただきました。研究 が遅々として進まない状況においても、我慢強く対応していただき心より感謝申し上げま す。

また,諸貫研究室に在籍された学生の皆様,日頃より,私事,会社業務と学業のバラン スで悩む中で,研究室の交流会等に参加頻度が少ない中でも,分け隔てなく,研究に関し ましてご支援いただきましたこと深く感謝申し上げます。

最後に,社会人の業務と学生の両方の立場を顧慮し,日々の生活の中で,勉学のための 時間を持てるように支援してくれた妻,ならびに家族に感謝します。

5-8