인과적 추론을 활용한 반도체 식각 공정에서의 고장 해석

Interpreting Faults in Semiconductor Etching Processes Using Causal Inference

Yonsei University
23-1 STA4118 CAUSAL INFERENCE

2019147019 산업공학과 강세정

목 차

1. 서론

- 1.1 배경 및 주제 선정 이유
- 1.2 연구 목표

2. 반도체 식각 공정 개요

- 2.1 반도체 식각 공정의 기본 원리
- 2.2 반도체 식각 공정에서의 고장 해석의 중요성

3. 연구 방법론

- 3.1 데이터 수집 및 연구 대상 선정
- 3.2 데이터셋 설명

4. 실험 및 결과 해석

- 4.1 실험 설계 및 구현
- 4.2 실험 결과 해석

5. 결론

- 5.1 연구 결론 및 의의
- 5.2 한계 및 향후 연구 방향

6. 참고문헌

1. 서론

1.1 배경 및 주제 선정 이유

반도체 식각 공정은 현대 반도체 제조 과정에서 중요한 단계 중 하나이다. 이 공정은 반도체 웨이퍼에서 원하는 패턴을 형성하기 위해 불필요한 물질을 제거하는 과정을 포함한다. 그러나 반도체 식각 공정에서는 때때로 고장이 발생하고, 이는 제조 과정의 비효율성, 생산량의 감소, 제품 품질의 하락과 같은 심각한 문제를 야기할 수 있다. 따라서 이러한 고장을 신속하게 탐지하고 해석하는 것은 제조와 생산관리에 근간을 둔 산업공학 분야에서 매우 중요한 역할을 한다.

이 연구를 통해 인과적 추론을 활용하여 반도체 식각 공정에서의 고장을 해석해보고자 했다. 기존의 고장 진단 방법은 주로 통계적인 패턴 인식이나 머신러닝, 딥러닝 기법에 의존하고 있다. 그러나 이러한 방법은 고장의 원인과 결과 사이의 인과 관계를 명확하게 파악하기 어렵다. 반면, 인과적 추론은 원인과 결과 사이의 인과 관계를 추정하고 원인에 따른 결과를 정확히 예측하는데 도움을 줄 수 있기 때문에 이를 주제로 선정하게 되었다.

1.2 연구 목표

이 연구는 인과적 추론을 반도체 식각 공정의 고장 해석에 적용하여 고장의 원인을 파악하고 예방 조치를 취할 수 있는 정보를 제공하는 것을 목표로 한다. 이를 통해 반도체 제조업체는 식각 공정의 안정성과 효율성을 향상시킬 수 있으며, 생산량의 증가와 제품 품질의 향상을 이룰수 있다.

2. 반도체 식각 공정 개요

2.1 반도체 식각 공정의 기본 원리

반도체 식각 공정은 반도체 웨이퍼에서 원하는 패턴을 형성하기 위해 불필요한 물질을 제거하는 과정으로, 다양한 반도체 재료를 이용하여 반도체 웨이퍼의 표면을 정밀하게 가공하는 기술적인 단계이다. 이 공정은 주로 습식 식각과 건식 식각 두 가지 방법으로 구분된다. 습식 식각은 액체 식각 용액을 사용하여 화학적인 반응에 의해 식각하는 방법이다. 주로 표면 연마, 세척, 큰 패턴 제작 등에 적합하다. 반면 건식 식각은 이온 충돌에 의한 물리적 작용 또는 플라즈마에서 생성된 화학적 반응물질에 의한 식각이다. 건식 식각은 다시 물리적·화학적 식각으로 나뉘는데, 물리적 식각은 이온 충돌 등을 통해 작용하며, 화학적 식각은 플라즈마에서 생성된 반응물질과 표면의 화학적인 반응을 통해 작용한다.

특히, 연구에서 활용한 데이터인 이온 밀링은 건식 식각 중 물리적 식각으로, 이온 빔을 사용하여 반도체 표면을 가공하고 제거하는 과정이다. 이온 충돌에 의해 원자나 분자를 저촉시키는 방식으로 작동하며, 물리적인 선택적 제거와 정밀성을 제공한다. 이온 밀링은 공정 측면에서 많은 장점이 있어 자주 사용되지만, 장비의 복잡성이 높으며 이온이 충돌하는 과정에서 열이 발생하여 기기와 웨이퍼에 손상이나 변형이 발생할 수 있다. 따라서 이온 밀링 기기의 고장을 해석하고 방지하는 것은 중요하며 필수적인 사안이다.

2.2 반도체 식각 공정에서의 고장 해석의 중요성

고장을 해석하는 것은 산업공학 분야 중 생산 관리와 품질 관리에서 매우 중요한 역할을 한다. 생산 관리 측면에서는 고장 해석을 통해 비정상적인 상황에 적절한 조치를 취함으로써 생산라인의 효율성을 향상시키고 생산량의 감소나 공정 지연을 방지할 수 있다. 품질 관리측면에서도 고장 원인을 인과적으로 해석하고 식별함으로써 제품의 품질 결함을 줄이고 불량률을 최소화할 수 있다. 이는 고객 만족도와 제품 신뢰성 향상에 직결된다.

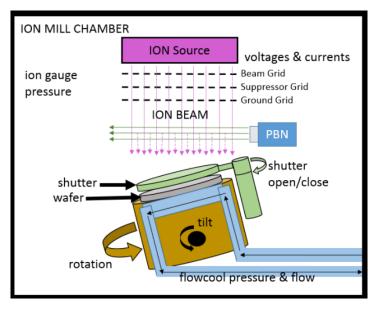
3. 연구 방법론

3.1 데이터 수집 및 연구 대상 선정

Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society 에서 개최한 PHM Data Challenge 2018의 데이터를 사용했다. 이 대회는 웨이퍼 제조 공정에서 사용되는 이온 밀링 식각 기기의 고장을 분석하는 것을 목표로 한 대회이다. 이 대회의 목표는 다양한 이온 밀링 식각 기기에서 수집된 시계열 센서 데이터를 사용하여 고장 진단, 그리고 다음 고장까지 남은 시간을 예측하는 모델을 구축하는 것이었다.



위 사진과 같은 이온 밀링 식각 기기는 총 20 개의 장치로 구성되어 있다. 그러나 이 연구에서는 장치 간의 인과관계를 다루는 대신, 단일 장치 내에서의 데이터를 조사했다. 이는 장치 간의 시간적 순서가 일정하지 않기 때문에 인과관계를 판별하기 위한 기본 가정이 지켜지지 않기 때문이다. 웨이퍼들은 모두 동일한 순서로 20 개의 장치를 거치지 않고, 각 웨이퍼마다 다른 순서로 장치들을 거치게 된다. 예를 들어, 어떤 웨이퍼는 장치 3, 5, 1 순서로 처리되고, 다른 웨이퍼는 장치 1, 5, 20, 14 순서로 처리되는 식이다. 이에 따라, 가장 많은 고장이 발생하는 "03 M02" 장치 내부 데이터만을 사용하여 해당 장치의 고장을 분석하기로 결정했다.



위 사진은 03_M02 장치의 공정을 도식화한 것이다. 이를 참고하여 공정과 고장을 설명하면 다음과 같다:

이온은 특정 전압과 전류로 설정된 빔, 서프레서, 그라운드 그리드를 통과하여 전기장에서 가속되어 웨이퍼 표면에 도달하는 이온 빔이 된다. 이 과정에서 PBN(입자 빔 중화기) 제어시스템을 통해 이온이 조절된다.

빔 그리드, 서프레서 그리드, 그라운드 그리드는 이 과정에서 중요한 역할을 한다. "빔 그리드"는 전기장을 이용하여 생성된 이온을 가속시킨다. "서프레서 그리드"는 이온 전류를 조절하고 제어한다. "그라운드 그리드"는 전기적인 기준점을 제공하여 시스템 내의 전기장을 안정화시킨다. 이렇게 세 그리드와 PBN을 지나 웨이퍼 표면에 도달한 이온은 재료를 제거하는 역할을 한다. 이 과정이 03_M02 장치 내에서 일어나는 식각 공정이다.

웨이퍼는 flowcool 이라는 헬륨/물 시스템을 통해 냉각된다. flowcool 시스템은 지정된 유량으로 헬륨 가스와 물을 웨이퍼 뒤로 통과시키고, 진공 챔버에서 flowcool 가스가 분리되는 방식으로 작동한다.

이 식각 장치에서의 고장은 주로 이 flowcool 시스템에서 발생한다. flowcool 의 압력이 너무 낮거나 높은 경우, 누설이 발생하는 경우 등을 고장으로 판단한다. 이러한 고장으로 인해 03_M02 장치의 작동에 문제가 발생할 수 있는 것이다.

3.2 데이터셋 설명

제공된 데이터는 시계열 센서 측정값과 고장 정보로 구성되어 있다. 센서 데이터에는 시간, 웨이퍼 ID, 도구 설정, 센서 측정값이 포함되었다.

변수명(자료형) 설명

 time(숫자)
 특정 이벤트가 측정된 시간

 Lot(범주형)
 웨이퍼의 ID 또는 식별자

recipe(범주) 웨이퍼 처리에 사용되는 장치의 세팅 종류

IONGAUGEPRESSURE(숫자) 진공 상태일 때 주 프로세스 챔버의 압력 판독값

ETCHBEAMVOLTAGE(숫자) 그리드 어셈블리의 빔 플레이트에 적용되는 전압 전위

ETCHBEAMCURRENT(숫자) 빔 그리드에 영향을 미치는 이온 전류

ETCHSUPPRESSORVOLTAGE(숫자) 그리드 어셈블리의 서프레서 플레이트에 적용되는 전압 전위

ETCHSUPPRESSORCURRENT(숫자) 서프레서 그리드 플레이트에 영향을 미치는 이온 전류

FLOWCOOLFLOWRATE(숫자) flowcool 회로를 통과하는 헬륨의 유량 FLOWCOOLPRESSURE(숫자) flowcool 회로에서 발생하는 헬륨 압력

ETCHGASCHANNEL1READBACK(숫 진공 챔버의 소스 어셈블리로 아르곤이 흐르는 속도

ETCHPBNGASREADBACK(숫자) 챔버의 PBN 어셈블리로 아르곤이 흐르는 속도 ACTUALSTEPDURATION(숫자) 프로세스의 특정 단계에 대한 실제 지속 시간

 time
 Lot
 recipe
 IONAUME PRESSURE
 ETCHBEAMVOLTAGE
 ETCHSLAPPRESSORVOLTAGE
 ETCHSLAPPRESSORVOLTAGE
 FLORICOLEFIORRENT
 FLORICOLEFIORRENT

3284910	640	249	0.736929	1.495827	1.202133	0.082573	1.117291	0.524923	0.156790	0.916290	0.583332	1.772975
3284922	640	249	0.736929	1.495734	1.221191	0.082525	1.168377	0.532370	0.156790	0.921578	0.585093	1.772975
3285284	640	249	0.736929	1.496934	1.297824	0.082935	1.195538	0.532370	0.158282	0.923003	0.598239	0.043003
3285290	640	249	0.736929	0.692071	-1.272960	-0.298339	-1.388613	-1.877711	-0.403402	0.195215	0.438203	0.043003
3293776	2350	251	0.338364	-0.059999	0.141640	0.930314	0.423285	0.534088	0.174706	0.370601	0.593765	-0.307797
3293788	2350	251	0.434780	-0.059816	0.134255	0.930133	0.440477	0.533085	0.174706	0.369176	0.588752	-0.307797
3293852	2350	251	0.434780	-0.059261	0.131235	0.930133	0.429515	0.530509	0.176564	0.369176	0.594714	-0.673014
3293854	2350	251	0.434780	-0.059723	0.147832	0.929952	0.413816	0.530509	0.176564	0.366527	0.594714	-0.673014

고장은 별도의 파일에 표시되었으며 발생 시간과 어느 유형의 고장인지가 명시되었다.

변수명(자료형) 설명

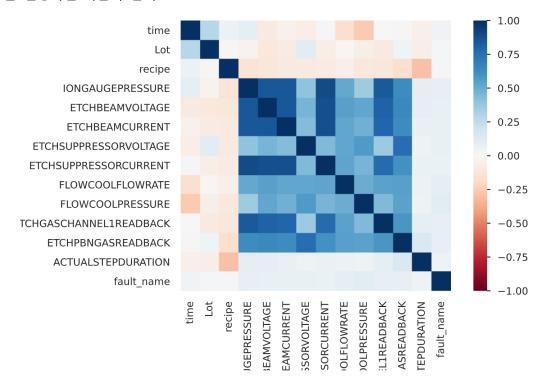
time(숫자) 특정 이벤트가 측정된 시간

fault name(범주형) 장치에서 발생한 고장 유형

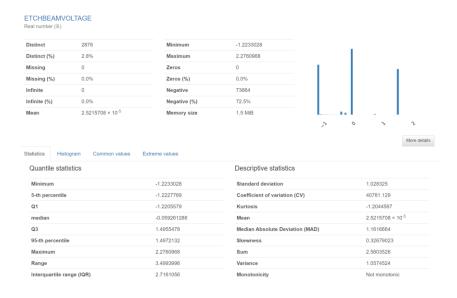
time	fault_name
3326152	FlowCool Pressure Dropped Below Limit
3780688	FlowCool Pressure Dropped Below Limit
3961378	FlowCool Pressure Dropped Below Limit
4528896	FlowCool Pressure Dropped Below Limit
4528896	FlowCool Pressure Dropped Below Limit

FlowCool 압력이 제한 아래로 떨어지는 경우, FlowCool 압력이 너무 높아지는 경우, FlowCool 누설과 같은 세 가지 고장 유형이 있다. 모두 FLOWCOOLPRESSURE 로부터 얻어진다.

추가적인 전처리는 결측치는 없었기에 결측 처리는 수행하지 않았고, 센서 데이터와 고장 데이터를 매칭시키기 위해 고장 데이터의 time 열을 알맞게 처리했다. 이렇게 결합한 데이터셋의 EDA를 진행하면 다음과 같다.



추가로, 각 요인별 분포와 기초통계량, 최빈값, interaction 등을 확인하고 싶다면 함께 첨부한 EDA_PandasProfiling.html 파일을 참고하길 바란다. 확인할 수 있는 하나의 예시로 ETCHBEAMVOLTAGE 의 기초통계량은 아래와 같다.



4. 실험 및 결과 해석

4.1 실험 설계 및 구현

03_M02 장치의 공정에서 알 수 있듯, 이온은 빔 그리드, 서프레서 그리드, 그라운드 그리드와 PBN 을 거쳐 식각을 진행하게 되고, 이 과정들이 고장의 기준이 되는 flowcool 의 압력에 영향을 미친다고 알고 있다. 따라서 장치의 고장이 발생할 경우 각 그리드와 PBN 을 점검하고, 필요에 따라 교체해야 한다. 이 부품들이 다른 셔터, 웨이퍼 고정 장치 등에 비해 높은 가격을 가지는 만큼, 이들 사이의 인과 관계를 파악한다면 모든 부품을 교체하는 것이 아니라 근원이 되는 부품만을 교체함으로써 유지보수를 용이하게 할 수 있으리라 기대했다. 이에 따라 이 과정에 주목했고, 각 과정의 센서 값을 순서에 맞게 exposure, mediator 로서 인과 관계 모델을 구축해보았다.

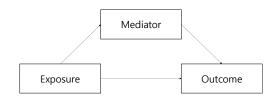
활용한 센서 값을 순서에 맞게 기술하면 다음과 같다.

- **빔 그리드** : ETCHBEAMVOLTAGE (전압), ETCHBEAMCURRENT (전류)

 단, EDA 에서 확인했듯 빔 그리드의 전압과 전류 센서는 그 상관관계가 매우 높으므로 더 중요하게 여겨지는 전압만을 사용했다.
- **서프레서 그리드**: ETCHSUPPRESSOVOLTAGE (전압), ETCHSUPPRESSOCURRENT (전류)
- 그라운드 그리드 : 센서 측정값 없음
- PBN: ETCHPBNGASREADBACK(PBN 챔버에서 아르곤의 유속)

- Flowcool : FLOWCOOLPRESSURE(압력)

즉, 다음 표와 같이 exposure, mediator, outcome 을 구성하여 각 결과를 확인했다.



실험	1	2	3	4	5			
Evposuro	빔 그리드	빔 그리드	빔 그리드	서프레서 그리드	서프레서 그리드			
Exposure	8 445	급 그니드	8 445	– 전압	- 전류			
Madiator	서프레서 그리드	서프레서 그리드	PBN	PBN	PBN			
Mediator	- 전압	– 전류	PDIN	PDIN				
Outcome	Flowcool							

추가로, 기존의 머신러닝 / 딥러닝 방식과 비교해보기 위해 Decision tree 를 같은 데이터셋에 적용해보았다. Decision tree 는 다른 머신러닝 및 딥러닝 모델과 비교했을 때 해석이 용이하다는 많은 장점을 가지고 있다. 이러한 가독성, 규칙 해석, 변수 중요도 측정 등에서 강점을 보이는 Decision tree 와 비교하여 causal mediation analysis 의 차별점을 살펴보았다.

4.2 실험 결과 해석

각 실험에서 causal mediation analysis 를 진행하고, 추가로 sensitivity analysis 를 진행한 구체적인 수치적 결과는 "부록"을 참고하길 바란다. 특히, sensitivity analysis 결과를 통해 03_M02 장치내에서의 유의미한 인과 관계는 다음과 같이 존재함을 확인할 수 있다.



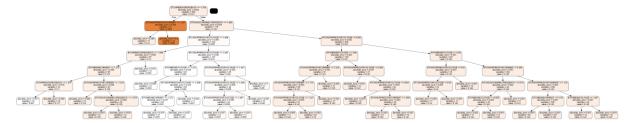
특히, 빔 그리드 – PBN – Flowcool (0.6569), 빔 그리드 – 서프레서 그리드 – Flowcool (0.5067), 서프레서 그리드 – PBN – Flowcool (0.1874) 순으로 Mediatied Effect 의 Proportion 이 크다. 추가로, exposure 과 outcome 에 영향을 미칠 수 있는 confounder 로서 recipe(웨이퍼 처리에

사용되는 장치의 세팅 종류 : 범주형 변수)를 적용할 수 있다. 장치를 어떻게 세팅하는지에 따라 각 그리드와 PBN 에서의 전압, 전류, 유속, 압력이 달라질 수 있기 때문이다.

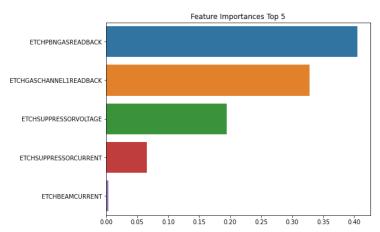
그런데, Prop. of variance of unmeasured confounder 을 살펴보면, 0.71%, 0.44%, 0.2%로 total variance 중에 unmeasured confounder를 넣으면 해당 비율만큼 더 설명할 수 있다. 즉, 이 세팅에 따라 장치에서의 식각 과정은 큰 영향을 받지 않음을 알 수 있다.

나아가, 머신러닝, 딥러닝을 활용하여 주로 식각 공정의 고장을 해석하는 방식 중 가장 해석이용이한 Decision tree 를 03_M02 장치 데이터에 적용해보았다.

자세히 설명하진 않겠지만, GreedSearch 방식을 통해 최적의 max_depth, min_samples_leaf, criterion 파라미터를 찾은 결과 MSE 가 0.004 로 고장의 기준이 되는 FLOWCOOLPRESSURE 를 아주 우수하게 예측할 수 있다. 구한 Decision tree 는 아래와 같다.



특히, FLOWCOOLPRESSURE 의 해석에 영향을 미친 요인을 아래와 같이 추출할 수 있다. causal mediation analysis 에 사용한 요인만 살펴보자면, PBN, 서프레서 그리드, 빔 그리드 순으로 큰 영향을 미쳤다.



그러나, 이 결과는 해당 모델에서의 중요도를 나타낼 뿐, 이로부터 실제 식각 장비 고장을 해석하고 유지보수를 위한 의사결정을 내릴 수 없다. 이를테면, 03_M02 장치에서 고장이 감지되었을 때, 빔 그리드와 PBN 에서 이상이 생겼을 경우 Decision tree 에서 더 중요한 요인이었다는 이유로 PBN 을 우선적으로 교체해야 하는 것은 타당하지 않다. 이와 달리, 앞선 causal mediation analysis 는 도출해낸 mediation effect 를 고려해보면 빔 그리드를 우선적으로 교체해본 후 장비의 고장률이 감소하는지 지켜보자는 의사결정을 타당하게 내릴 수 있다.

5. 결론

5.1 연구 결론 및 의의

이 연구에서는 식각 과정 중 03_M02 장치 고장의 부품 간 인과 관계를 조사하고 해석하기 위해 causal mediation analysis 와 Decision tree 를 적용했다.

Decision tree 는 FLOWCOOLPRESSURE 예측에 우수한 성능을 보였으며, causal mediation analysis 에서는 식각 과정에서, 구체적으로는 빔 그리드 – PBN – Flowcool, 빔 그리드 – 서프레서 그리드 – Flowcool, 서프레서 그리드 – PBN – Flowcool 과정에서 mediation effect 를 확인할 수 있었다.

실험 결과를 종합해 보면, causal mediation analysis 는 중재 효과를 고려하여 근원이 되는 부품을 파악할 수 있었다. 따라서, 이 연구는 03_M02 장치의 식각 과정에서의 인과 관계를 이해하고 유지보수를 위한 의사결정을 내리는 데에 도움을 줄 수 있는 중요한 결과를 제공하였다. 이를 토대로 실제 공정에서의 고장 예측과 조치를 적절히 수행함으로써 장치의 안정성과 신뢰성을 향상시킬 수 있을 것으로 기대된다.

5.2 한계와 향후 연구 방향

이 연구에서 얻은 결과는 20 개의 장치 중 하나의 장치 내의 부품에 대한 것으로 한정된다. 장치별로 다른 결과를 얻을 수 있다. 또한, 서로 다른 장치 간의 고장 역시 causal mediation analysis 를 적용할 수 있다. 웨이퍼가 어느 장치에서 어느 장치로 이동하는 지에 대한 데이터를 추가로 수집할 수 있다면 부품의 경우와 마찬가지로 고장 해석을 통해 근원이 되는 장치를 찾는 등 발전된 유지보수가 가능하다.

6. 참고문헌

Vukovi'c, M.; Thalmann, S. Causal Discovery in Manufacturing: A Structured Literature Review. J. Manuf. Mater. Process. 2022, 6, 10. https://doi.org/10.3390/ jmmp6010010

"An Introduction to Ion Beam Etching", azom.com, last motified Oct 16. 2013, 2013, https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=7533

부록

