



北京大学

# 硕士研究生学位论文

题目： 基于动态线性模型的  
半导体制造过程研究

姓 名： 柳 涛

学 号： 1201214351

院 系： 工学院

专 业： 管理科学与工程

研究方向： 运筹工程

导师姓名： 张玺 特聘研究员

二〇一五 年 六 月



***Condition Detection of the  
Semiconductor Manufacturing Process  
Based on Dynamic Linear Model***

Dissertation Submitted to  
**Peking University**

**In partial fulfillment of the requirements for the degree of  
Master of Management**

By  
**Tao Liu, Master Candidate  
(Management Science and Engineering)**

Dissertation Supervisor: **Xi Zhang, Assistant Professor**

Department of Industrial Engineering and Management

College of Engineering

Peking University

June 2015, Beijing



# 版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则，引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。





## 摘 要

化学机械平坦化 (Chemical Mechanical Planarization, CMP) 是目前在半导体制造工艺中最为有效并广泛使用的平坦化技术之一, 可以实现晶片表面的全局平坦化。当前针对 CMP 工艺过程的研究中, 一个重要的研究方向是 CMP 抛光过程状态的检测, 例如抛光垫表面状态和磨损程度的检测等。在 CMP 过程中, 随着抛光次数的增多以及持续的修整打磨, 抛光垫表面状态将会持续退化并导致抛光性能逐渐降低, 进而影响抛光效果。如果能够有效地检测抛光垫的表面状态和磨损程度, 以做到及时修整, 并在抛光垫达到临界寿命时进行更换, 可以避免造成晶片抛光过程中的质量缺陷和材料浪费, 达到节约制造成本的目的。

本文考虑 CMP 过程中的热量守恒关系, 通过综合分析其中的机械摩擦作用和热量传导机制, 提出基于热量守恒的 CMP 过程动态线性模型。首先, 通过热量守恒关系建立线性的静态热量流动模型, 利用 CMP 设备参数和过程变量如摩擦因数等预测抛光垫表面的温度分布状况; 然后, 考虑 CMP 过程中热量守恒模型参数的动态变化, 引入动态线性模型对静态的模型进行扩展, 得到能够反映过程状态变化的动态模型; 最后, 利用 Kalman 滤波器方法对动态线性模型中的状态变量进行估计, 以实现抛光过程状态的检测。

通过仿真分析和试验设计的对比结果, 证实了本文提出的热量守恒模型在进行抛光垫表面温度分布预测中的有效性。此外, 仿真分析中, 我们利用仿真数据验证了 Kalman 滤波器方法在进行动态线性模型状态变量估计中的有效作用。最后, 利用试验设计中获得的实际数据进行模型状态变量估计的结果表明, 提出的模型不仅能很好地检测 CMP 过程中抛光垫的表面状态和变化趋势, 也能够有效地检测抛光垫的磨损程度。

关键词: 化学机械抛光, 动态线性模型, 过程状态检测





# Condition Detection of the Semiconductor Manufacturing Process Based on Dynamic Linear Model

Tao Liu (Management Science and Engineering)

Directed by Xi Zhang, Assistant Professor

## ABSTRACT

Chemical mechanical planarization (CMP) has been recognized to be one of the most effective and widely used planarization techniques in semiconductor manufacturing which can achieve global planarization of the wafer surface. An important research area of the chemical mechanical planarization technique is detecting of the polishing pad condition and degradation level. Continual polishing of wafers and getting conditioned will lead to irreversible deterioration and wear of the polishing pad, which will greatly affect the CMP performance. It can help avoid wafer surface defects and save material costs by effectively detecting the pad condition and determine when the pad should be conditioned or replaced.

A thermal flow based dynamic linear model is proposed in this paper, which considers both mechanical polishing and heat conduction mechanisms in the CMP process. First, a linear thermal model based on heat conservation is developed to capture the temperature profile of the polishing pad surface by kinetic parameters. Then, the dynamic linear model is introduced by considering the dynamic changes of the thermal model parameters during the CMP process. At last, Kalman filter method is used to estimate the state variables in the proposed dynamic linear model, so as to detect the process condition change and pad degradation level.

Simulation and experimental results showed that the thermal model can well characterize the temperature distribution of the polishing pad surface. Besides, Kalman filter method was proved to be performing well in estimating the state variables of the dynamic linear model. Moreover, the proposed heat flow based dynamic linear model was effective in detecting the CMP process condition change with the experimental data, both in detecting pad condition change and degradation level.

**KEY WORDS:** Chemical mechanical planarization, Dynamic linear model, Process condition detection



# 目 录

<b>第一章 绪论</b>	<b>1</b>
1.1 论文研究的背景	1
1.1.1 半导体制造技术的发展	2
1.1.2 半导体制造中的 CMP 技术	3
1.2 CMP 的原理和技术	6
1.2.1 CMP 的基本原理	6
1.2.2 CMP 的组成部分和关键技术	7
1.3 CMP 的研究现状与趋势	10
1.4 本文研究的内容和目的	11
<b>第二章 影响化学机械抛光的关键因素和过程变量</b>	<b>13</b>
2.1 抛光机特性对 CMP 过程的影响	13
2.2 晶片磨料特性对 CMP 过程的影响	14
2.2.1 氧化硅抛光	14
2.2.2 金属抛光	15
2.3 抛光垫特性对 CMP 过程的影响	16
2.3.1 抛光垫材料属性	16
2.3.2 抛光垫表面特性	17
2.3.3 抛光垫的磨损和修整	17
2.4 抛光液特性对 CMP 过程的影响	18
2.4.1 抛光液的化学性质	18
2.4.2 抛光液中固体颗粒的性质	19
2.5 影响 CMP 的关键过程变量	20
2.5.1 摩擦因数	20
2.5.2 温度	20
2.5.3 声发射信号	22
小结	23
<b>第三章 化学机械抛光过程的动态线性模型建模</b>	<b>24</b>
3.1 热量守恒模型	24
3.1.1 机械摩擦作用产生的热量	24

3.1.2 化学反应中的吸、放热分析 .....	26
3.1.3 热量传递和消耗 .....	26
3.1.4 热量守恒 .....	27
3.2 CMP 过程中的动态线性模型 .....	27
3.2.1 状态空间模型 .....	28
3.2.2 动态线性模型 .....	29
3.2.3 动态线性模型的参数估计 .....	32
3.2.4 Kalman 滤波器求解状态空间模型 .....	33
小结 .....	35
<b>第四章 试验设计和仿真分析 .....</b>	<b>37</b>
4.1 试验设计 .....	37
4.2 CMP 热量守恒模型的仿真分析 .....	40
小结 .....	44
<b>第五章 基于动态线性模型的抛光过程状态检测 .....</b>	<b>45</b>
5.1 动态线性模型状态变量估计的仿真验证 .....	45
5.2 CMP 动态线性模型用于试验数据 .....	47
5.3 结果分析和讨论 .....	49
小结 .....	50
<b>结论与展望 .....</b>	<b>51</b>
<b>参考文献 .....</b>	<b>53</b>
<b>附录 A Kalman 滤波方法的证明 .....</b>	<b>59</b>
<b>附录 B Kalman 平滑方法的证明 .....</b>	<b>61</b>
<b>致 谢 .....</b>	<b>63</b>
<b>北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明 .....</b>	<b>65</b>

## 第一章 绪论

### 1.1 论文研究的背景

20 世纪见证了人类社会从机械工业技术时代到半导体电子工业技术时代的飞跃进步。高保真的数字音乐播放器取代了传统的留声机、磁带播放机；大容量闪存、硬盘等淘汰了磁盘、磁带等小规模存储介质；传统的机械传动汽车也引入了丰富的电子系统进行控制，甚至实现了无人驾驶。进入 21 世纪以来，半导体电子工业技术更是迎来了迅猛的发展，个人电脑主频从 MHz 发展到 GHz；存储介质容量从 KB 到现在动辄以 TB 量级计算；数字制式手机取代了笨拙的模拟制式手提电话，而且体积越来越小、功能越来越丰富、操作越来越智能化。人类社会的各个方面几乎已经离不开丰富多样的电子产品，而这一切丰富物质产品背后的基础，是一场由电子技术引起的持续革命，半导体产业则已经成为这一场技术革命的中心<sup>[1]</sup>。

在其诞生的半个多世纪以来，半导体产业经历了前所未有的发展。2011 年，半导体器件行业产值突破 3000 亿美元大关，而涉及的半导体设备和材料行业产值也达到前所未有的 910 亿美元，并且根据市场预期半导体产业将会继续保持高速增长（图 1.1）。

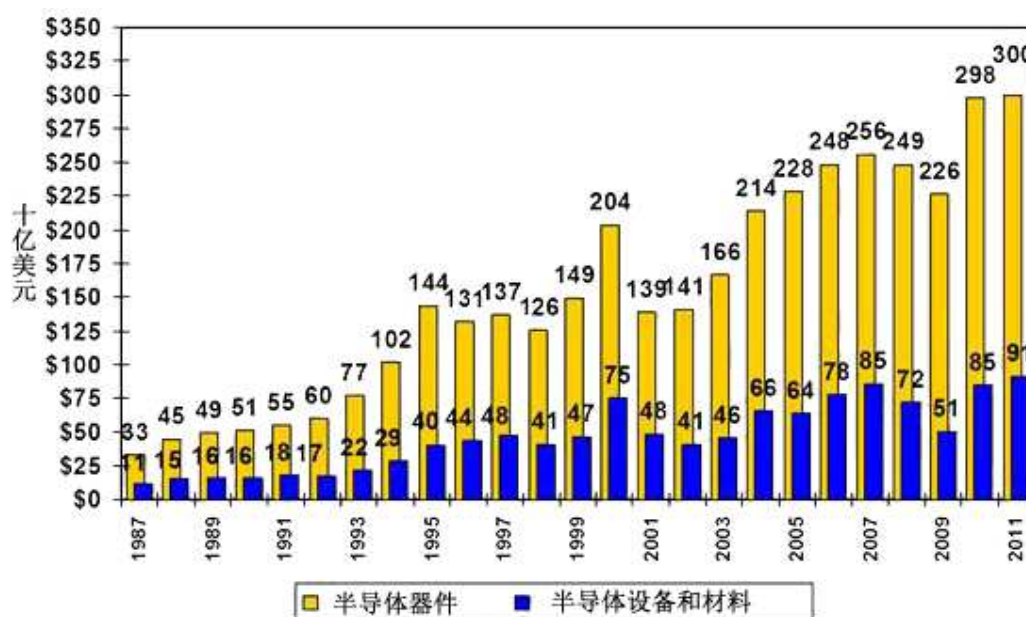


图 1.1 半导体产业规模与发展<sup>[2]</sup>

自 2011 年发布第 12 个五年经济发展计划以来，中国政府一直提供各项优惠政策措施促进半导体产业的发展。为了加快行业整合，中国国务院出台了一套“国家半导体产业发展指导原则”，其中确定了 2015 年、2020 年和 2030 年的集成电路（Integrated Circuit, IC）产业发展目标。为了实现这些目标，中国中央政府将设立 1200 亿人民币（约合 193.2 亿美元）的国家产业投资基金，以资助先进半导体制造工艺的研究和实施，以及在 IC 行业内的兼并和收购<sup>[3,4]</sup>。

### 1.1.1 半导体制造技术的发展

1947 年 12 月，第一块晶体管（transistor）在贝尔实验室诞生，从此人类步入了飞速发展的电子时代。1958 年 8 月，另一个重大的里程碑出现了，那就是德州仪器制成了人类历史上的第一片集成电路。随着半个多世纪的发展，集成电路产品越来越表现出微型化、高速化、智能化的趋势，摩尔定律<sup>[5]</sup>的瓶颈似乎仍然没有到来。

集成电路芯片的发展趋势是集成度越来越高，这主要表现在：

1. 作为基底材料的硅晶片越来越大。为了增大晶片利用率和生产效率，从历史上的 100mm 晶圆片，到目前广泛使用的 200mm、300mm 晶圆片，以及即将规模化采用的 450mm 甚至 675mm 晶圆片<sup>[6,7]</sup>，硅晶片尺寸的不断增大。这对加工过程的均匀性和一致性提出了非常高的要求。
2. 光刻线宽尺寸越来越小。光刻是芯片制造中最关键的制造工艺之一，光刻线宽尺寸决定了晶片上半导体器件的集成程度。几十年来，光刻线宽的尺寸已经由微米级发展到了纳米级，目前 20nm 的光刻工艺已经投入使用并实现量产。
3. 晶片横向电路布局越来越密集。在半导体制造过程中，所有的元器件都需要通过光刻工艺将电路结构印制在晶圆片上，随着光刻尺寸的不断减小，器件的布局也随之越来越密集。
4. 纵向互联金属层越来越多。多层金属技术的出现使得电路可以在不同的互联金属层上进行图形布局和制作，从而大大提高集成程度，但也随之对互联金属层之间的电路通断性带来了严重的挑战。

这些技术的发展对半导体集成电路的加工和制造工艺过程提出了越来越严苛的要求。其中，硅晶片表面的平整程度就是一项非常重要的技术标准<sup>[8]</sup>。不平整的晶片表面形貌将导致制造过程中的一系列问题，其中最严重的是无法在晶片表面进行图形制作，因为图形制作受到光刻过程中的透镜焦距深度的限制，而且平整的晶片表面形貌也是确保互联的金属层之间电路通断性的关键。晶片表面平

整性这一要求，限制了半导体制造工艺中集成度的进一步提升。

### 1.1.2 半导体制造中的 CMP 技术

针对集成电路芯片集成度越来越高带来的晶片表面不平整问题，可以使用平坦化方法进行晶片表面的平整。通过填充低的部分，或去掉高的部分进行平坦化是两种进行晶片表面平坦化的常用方法，可以使晶片拥有平滑的表面，以顺利进行下一步加工。在实际的平坦化工艺中，材料去除的平坦化方法可以去除晶片表面不希望留存的杂质材料，从而提高器件的成品率。

根据晶片表面平坦化尺度的不同，可以分为多种平坦化处理方式。在晶片上，我们可以进行局部平坦化，它们只对一个芯片附近剧烈起伏的点起作用，也可以对包含所有集成电路芯片的晶片表面进行全局平坦化（图 1.2）。

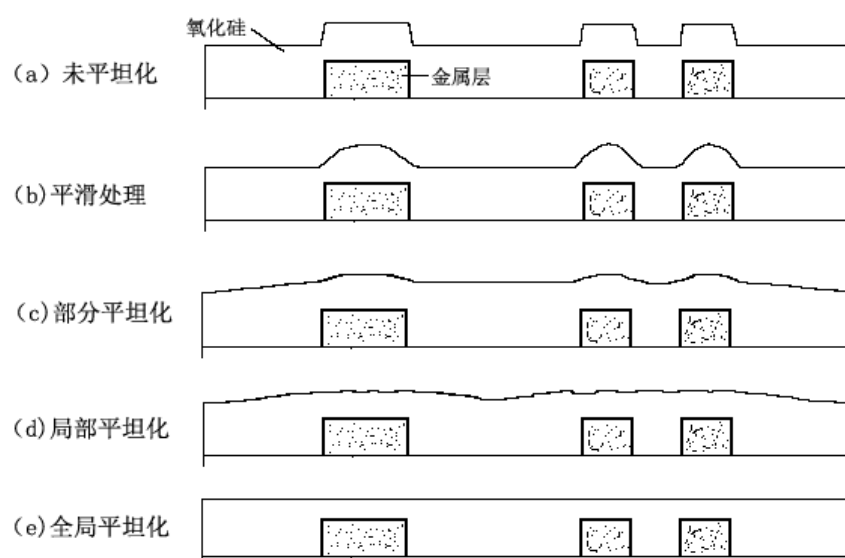
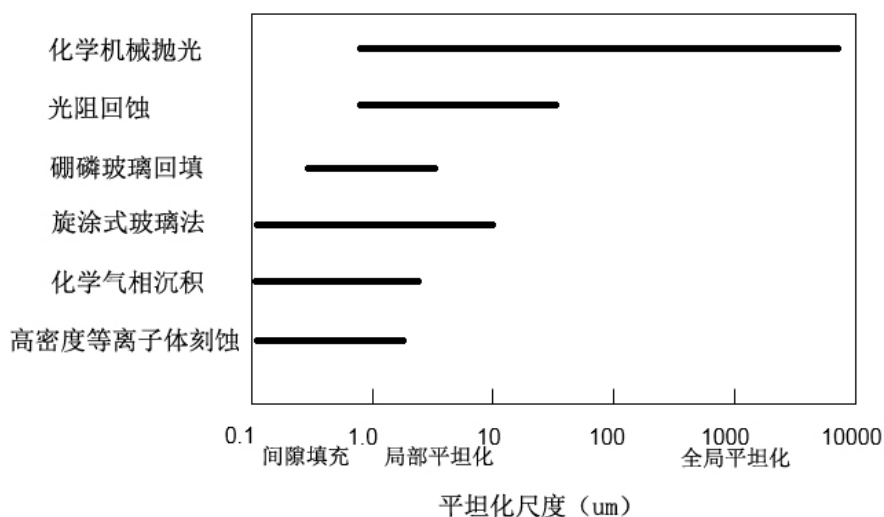


图 1.2 平坦化的定性说明

目前已经开发了多种平坦化技术来减小由制造工艺导致的晶圆片表面不平整问题。但传统的平坦化方法如光阻回蚀、玻璃回填、旋涂式玻璃法等<sup>[8]</sup>只能做到晶片局部平坦化或部分平坦化，而无法做到全局平坦化。20 世纪 80 年代后期，IBM 发展了化学机械平坦化（Chemical Mechanical Planarization, CMP）技术，并将其应用于半导体制造工艺中对硅晶片的平坦化。目前，CMP 技术已经成为半导体晶片制造工艺中唯一的可以提供晶片表面全局平坦化的工艺技术<sup>[1]</sup>（图 1.3）。

图 1.3 平坦化技术对比<sup>[1]</sup>

相对于其他平坦化技术，CMP 技术具有许多优点（表 1.1），这些优点使得 CMP 技术区别于不能进行全局平坦化、而只是平滑晶片局部表面起伏的传统平坦化技术，从而成为高密度半导体制造中平坦化的标准，在甚大规模集成电路（ULSI）的芯片生产工艺中有着不可替代的作用（图 1.4）。

表 1.1 CMP 技术的优点

优点	说明
1.平坦化	能够获得全局平坦化
2.不同材料的平坦化	各种各样的晶片表面都能平坦化
3.较小的表面起伏	能达到较小表面起伏，使得在制造中可以采用更严格的设计规则、更多的互联层
4.制作金属图形	提供制作金属图形的一种方法，如大马士革工艺 <sup>[9]</sup> 中，不需要对难以刻蚀的金属和合金等离子体刻蚀
5.减少缺陷	CMP 能够通过减薄表层材料去除晶片表面缺陷



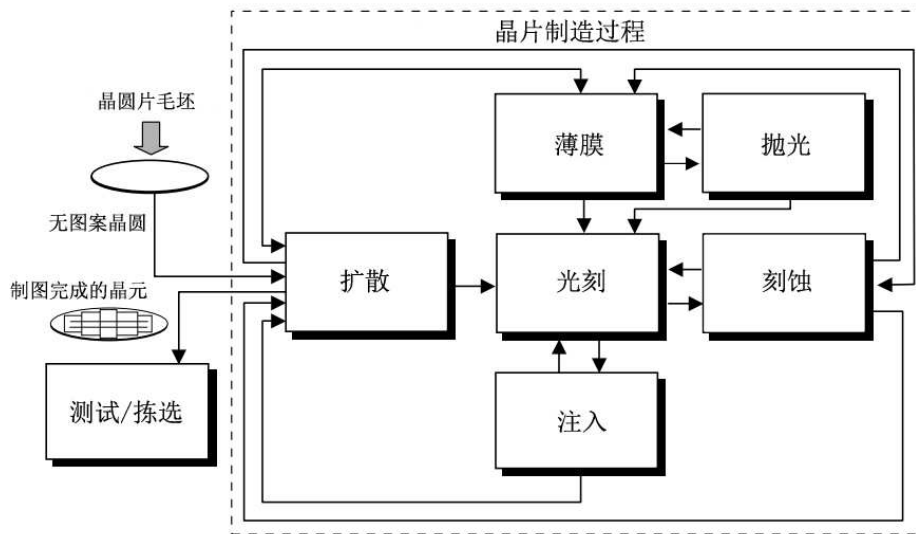


图 1.4 芯片制造工艺流程

然而，CMP 技术的采用也存在许多困难和缺点（表 1.2）。目前，针对 CMP 过程面对的这些困难和缺点，有大量的相关研究，试图通过对 CMP 抛光过程和机理的分析，实现有效的过程检测和诊断，以达到优化工艺参数，提高产品质量，并节约成本的目的。

表 1.2 CMP 技术的缺点

缺点	说明
1.工艺变量控制	CMP 技术对工艺变量控制相对较差，并且工艺窗口较窄
2.引入新的缺陷	CMP 技术引入新的缺陷，例如晶片表面凹陷、划伤等将影响芯片的成品率
3.配套工艺技术	CMP 技术需要开发额外的技术来进行工艺控制和测量，例如 CMP 的终点检测、抛光垫状态检测等技术
4.昂贵的设备和耗材费用	CMP 设备需要昂贵的设备和耗材如抛光垫、抛光液等。设备的维护和耗材的更替需要花费大量的费用

由于 CMP 技术已经成为对于集成金属和介质层，以及双大马士革工艺互联等先进半导体制造工艺中不可缺少的关键技术，对 CMP 的工艺过程进行有效控制是非常重要的。本文针对 CMP 工艺过程中配套检测技术的不足，提出了一种

新的抛光垫表面状态检测方法,通过对抛光垫表面状态的检测来及时修整和适时更换抛光垫,以达到降低芯片表面缺陷,提高材料利用率的目的。

## 1.2 CMP 的原理和技术

图 1.5 所示为从半导体制造过程中的其他环节独立出来的典型 CMP 工艺流程。抛光液在浆液处理中心进行调配和混合后,被输送到 CMP 机器。那些未进入 CMP 机器的抛光液通过内循环系统返回浆液处理中心,经过 CMP 过程参与作用的抛光液将通过废料处理系统进行回收和处理。从前序工艺进入的晶片被装载到 CMP 设备,在那里经过抛光和清洗,然后通过 CMP 清洁站进行干燥处理并送入下一工序。当前技术条件下,对于逻辑和存储器件的半导体制造,通常需要进行多重 CMP 工艺以达到所需的多层互连密度。

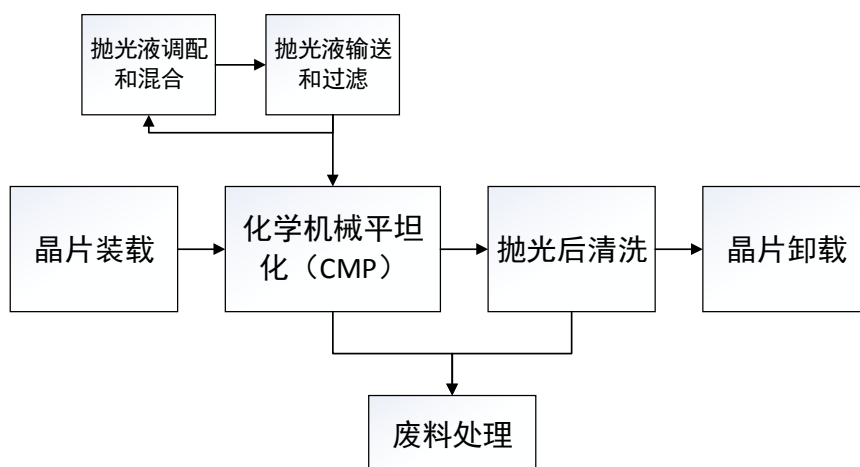


图 1.5 CMP 工艺流程图

### 1.2.1 CMP 的基本原理

图 1.6 为 CMP 工艺的示意图。抛光垫被固定在抛光台上,半导体晶片被固定在抛光头上,CMP 设备对抛光头施加向下的压力,使得待抛光的晶片表面朝下紧贴在抛光垫上,并通过抛光头和抛光垫的相对运动的接触面摩擦来抛光晶片表面。与此同时,通过向抛光垫表面输送化学(酸/碱、氧化剂等)和物理(研磨颗粒)性质活泼的抛光液来促进晶片表面抛光过程的进行。

目前文献普遍认为,有两种机理可以解释 CMP 技术是如何进行晶片表面平坦化的:(1) 晶片表面材料与抛光液中的化学成分发生反应,形成一层相对容易除去的表面层,(2) 在抛光头的压力下,该表面层通过晶片、抛光垫以及研磨颗粒三者组成的摩擦系统被机械的磨去。因此,通过 CMP 工艺进行晶片表面平坦

化时，需要考虑化学反应和机械摩擦的协同作用。

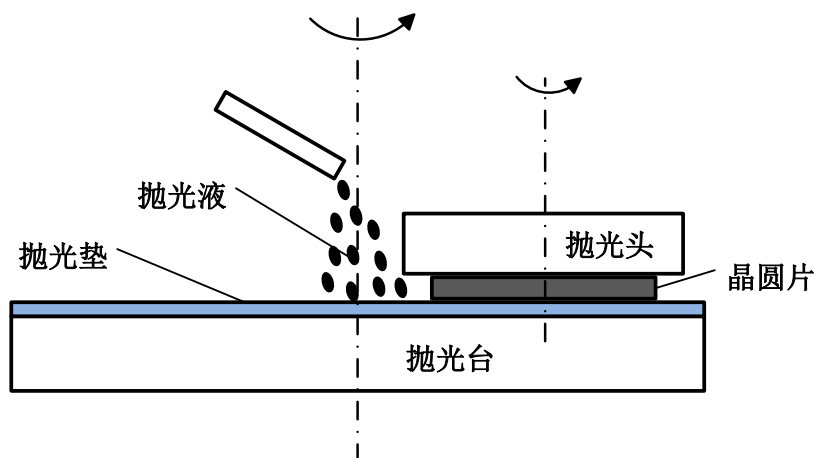


图 1.6 CMP 工艺示意图

通常可以用平整度（planarity）和均匀性（uniformity）两个概念来描述 CMP 的作用。其中，平整度是指局部范围内晶片表面的起伏变化，而均匀性是指晶片表面全局的厚度变化。随着晶圆尺寸的增加，器件尺寸的缩小，以及工艺要求变得越来越严格，抛光后的晶片表面均匀性和材料去除速率（Material Removal Rate, MRR）的提高得到越来越多的重视。不同的 CMP 工艺试图通过对抛光液化学性质，抛光头和抛光台的相对转速，抛光头上施加的压力和抛光垫特性等参数进行优化调整和组合来达到在材料去除速率和全局/局部平坦化之间的平衡<sup>[10-12]</sup>。

### 1.2.2 CMP 的组成部分和关键技术

CMP 设备通常包含三个关键组成部分：抛光机、抛光垫和抛光液，其中抛光垫和抛光液作为 CMP 过程中的消耗性材料，需要经常进行更换以保证稳定的抛光速率和产品质量。下面我们分别介绍这三个组成部分以及它们在 CMP 过程中的重要作用。

#### 抛光机

CMP 抛光机是通过把抛光垫安装在转盘的表面来进行平坦化的。为了提高抛光效率，大多数抛光机（图 1.7）通常具有多个抛光头。在抛光的时候，每个抛光头上装有一个晶片，通过对抛光头施加向下的压力，利用抛光台和抛光头的相对运动和摩擦作用去除晶片表面材料。

图 1.7 CMP 设备<sup>[13]</sup>

在 CMP 技术发展初期，常常通过调整抛光机的各项参数，以获得最佳的抛光效果，这些参数包括：抛光头压力，抛光头和抛光台的转速等<sup>[14]</sup>。随着晶片质量要求的提高和生产工艺的不断改进，CMP 抛光机也引入了越来越多的功能。其中重要的一项是当磨掉了适量的材料时抛光机的检测能力，即终点检测技术<sup>[15]</sup>。

### 抛光垫

抛光垫是对 CMP 工艺过程中的材料去除速率和平坦化能力起到关键作用的一个消耗性材料。抛光垫通常使用聚氨酯（polyurethane）材料制成，因为聚氨酯材料具有像海绵一样的多孔吸水特性（图 1.8），其表面丰富的小孔能够通过促进抛光液的输送来提高抛光的均匀性。此外，聚氨酯材料同时具有高强度、高硬度和模量等物理属性，能够在抛光过程中保证足够的机械特性。

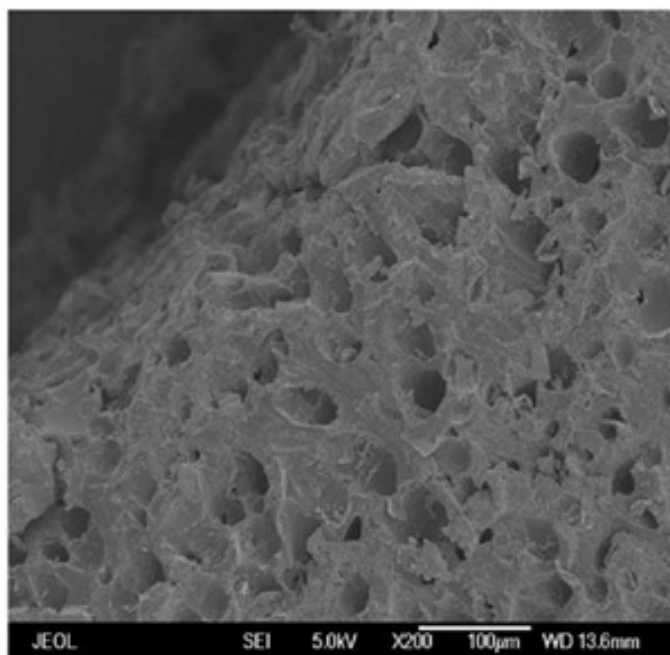


图 1.8 IC-1000 抛光垫表面的扫描电子显微镜图片<sup>[16]</sup>

在经过一定次数的晶片抛光后，抛光垫的表面会变得平坦和光滑，达到一种表面光滑（glazed）的状态<sup>[17]</sup>，这样的抛光垫表面不再保持应有的多孔特性和足够的机械强度，会造成抛光速率的显著下降。为了保持稳定的抛光速率，需要定期对抛光垫进行修整。然而在持续的晶片抛光和抛光垫修整过程中，将不可避免的对抛光垫造成磨损和老化，因此需要定期更换抛光垫。目前，针对 CMP 抛光垫的研究面临的挑战之一，是如何确定抛光垫的修整和更换时间，以及在抛光垫的修整和延长使用寿命之间进行折衷<sup>[18]</sup>。

## 抛光液

抛光液是精细研磨的固体颗粒和化学品的混合物，是一种在 CMP 工艺中用来磨掉晶片表面的特殊消耗品（图 1.9）。CMP 过程受到众多的抛光液参数，如 pH 值，溶液化学性质，离子类型、浓度，磨料颗粒的大小，络合剂，氧化剂，缓冲剂，表面活性剂，腐蚀抑制剂等<sup>[11,19]</sup>很大程度的影响。抛光液的特殊性质和复杂的化学反应机理使得难以对抛光液在晶片表面平坦化过程中的确切影响机理进行系统的阐明。

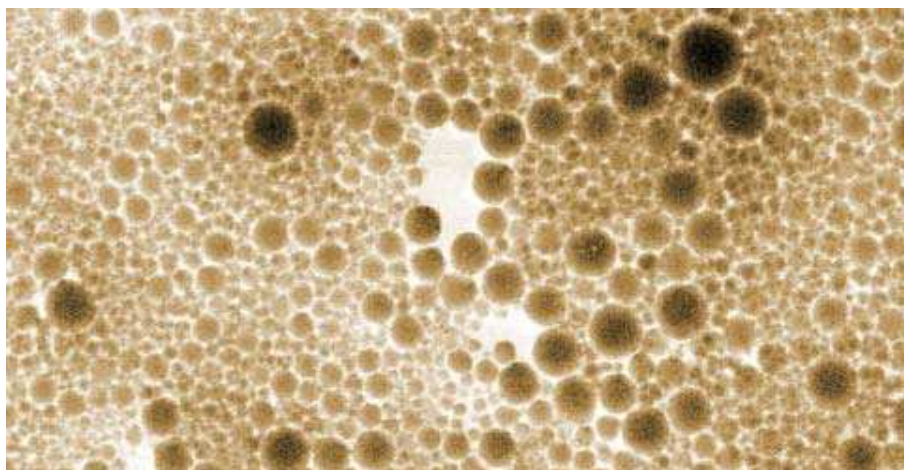


图 1.9 CMP 抛光液的显微镜图像<sup>[20]</sup>

在 CMP 过程中，抛光液通常经由设置在抛光垫中央的喷嘴喷出。实现抛光液在抛光垫表面的均匀分布，以及通过提高抛光液质量来避免在抛光过程中对晶片表面造成擦痕（scratch）是非常重要的。目前，在关于 CMP 抛光液的研究中，关注的重点是如何通过抛光液的配制达到材料的高去除速率，优异的全局平坦性，防止腐蚀（特别是在金属铜的抛光中），晶片表面良好的光洁度，以及产品的低缺陷率<sup>[21]</sup>。

此外，CMP 过程中化学反应和机械摩擦的协同作用一直是许多研究的主题，但由于识别化学作用反应机制的困难，过去的研究一直主要集中在机械摩擦的作用。然而，机械效应并不能单独提供晶片制造中所需的抛光程度。化学作用有助于增加晶片的全局平整性，并有效减少微观粗糙度。因此，在进行 CMP 过程的建模和分析时，需要协同考虑机械抛光和化学反应的综合作用。

### 1.3 CMP 的研究现状与趋势

自 1983 年 IBM 开发 CMP 技术以来，已经经过 30 余年的发展历程。CMP 技术最先应用于氧化物介质材料(Oxide CMP)的平坦化，继而被用来平坦化金属钨（W CMP）。1998 年，IBM 开始使用铜制程 CMP（Cu CMP），使得 CMP 成为晶片制造中实现多金属层和层间互联线的不可缺少的技术。现在，CMP 技术已经被广泛用于多种薄膜和在同一晶片表面上的多种材料的平坦化。

目前，学界对于 CMP 技术的研究，主要集中在以下几个方面：

首先是 CMP 过程工艺的建模。由于 CMP 过程综合了复杂的化学反应与晶片、抛光垫、研磨颗粒三个部分组成的摩擦系统，目前仍然没有完善的过程模型能够完整有效地描述整个平坦化过程。然而，已经有学者从不同的建模角度对



CMP 的工艺过程进行分析。文献<sup>[22,23]</sup>从研磨颗粒,甚至分子规模分析了接触面的微观摩擦,并提出了涉及化学反应的微观接触摩擦理论,进而建立数学模型对 CMP 过程进行分析。文献<sup>[24-27]</sup>通过对现有的化学反应模型如 Arrhenius 模型,材料去除模型如 Preston 模型,以及接触面摩擦模型 Greenwood-Williamson 模型等进行改进,综合考虑化学反应和表面摩擦过程,得出 CMP 过程的材料去除模型。

其次是对 CMP 过程中材料去除速率(Material Removal Rate, MRR)的研究。文献<sup>[23,28,29]</sup>分别从机械摩擦、抛光垫特性以及抛光垫磨损程度等角度分析了影响 MRR 的各项参数,并提出了有助于保持 CMP 过程中稳定的 MRR 的建议措施。文献<sup>[30]</sup>根据铜 CMP 过程中表面材料的磨损行为,建立了铜 CMP 时的材料去除率构成成分模型,并通过材料去除率实验,得出了机械、化学及其交互作用所引起的材料去除率及其作用率。

然后是关于降低晶片表面不均匀性的研究。晶片表面的不均匀性分为晶片内不均匀性(Within Wafer Non-Uniformity, WIWNU)和晶片间不均匀性(Wafer To Wafer Non-Uniformity, WTWNU)。其中, WIWNU 是指同一晶片表面的不均匀程度, WTWNU 是指不同晶片之间的不均匀程度,这两种不均匀性都将影响晶片抛光的质量。文献<sup>[31,32]</sup>从机械摩擦和动力学的角度分析了造成晶片表面不均匀性的原因。文献<sup>[33]</sup>分析了抛光垫磨损对晶片不均匀性造成的影响,并说明了定期进行抛光垫的修整对降低晶片不均匀性的重要作用。

此外还有对 CMP 工艺过程中的过程检测和终点检测技术的研究。文献<sup>[34-36]</sup>分别使用 CMP 过程中的摩擦因数、抛光垫温度、声发射信号进行终点检测,并通过实验验证其方法的有效性。文献<sup>[37]</sup>首先使用传感器对晶片表面进行光学成像,然后通过图像处理的方式进行终点检测。文献<sup>[15]</sup>综合 CMP 设备电机电流信号终点检测、光学终点检测以及抛光垫温度终点检测三种技术,由主机综合三种终点检测信号的情况进行抛光终点位置的综合判断。

## 1.4 本文研究的内容和目的

目前针对 CMP 工艺过程的研究中,一个重要的领域是 CMP 抛光过程状态的检测,例如抛光垫表面状态和磨损程度的检测。随着抛光次数的增多以及抛光垫的修整,将会造成抛光垫表面不可逆的磨损,因此需要定期修整和适时更换抛光垫。如果能够有效地检测抛光垫的磨损状态,及时进行修整,并在抛光垫达到临界使用寿命时进行更换,可以避免造成晶片质量缺陷和材料浪费。

传统的关于抛光垫表面状态检测的研究大多是使用基于扫描电子显微镜(Scanning Electron Microscope, SEM)成像的检验方法,利用表面成像可以进行

抛光垫表面粗糙程度的测量<sup>[38]</sup>，但是这一方法需要借助外设，并且成本高昂，并不适合用于实际的生产过程；在实验方法的基础上，有部分学者提出了对 CMP 过程中的热量流动过程进行建模，并将 CMP 过程变量如摩擦因数和温度等信号引入模型，从而利用模型进行 CMP 过程预测的方法<sup>[39-41]</sup>。然而这种方法在抛光环境改变，例如抛光垫状态发生持续退化时，将无法做出准确有效的预测。随着传感器技术的发展，目前已经开始广泛使用基于信号处理和统计分析的方法<sup>[42-44]</sup>进行抛光过程状态的检测和监控。这些方法能够提供较好的准确性，但是只能适用于固定的场景并且缺乏有效的解释。

在同时考虑模型可解释程度和灵活性的基础上，本文拟通过 CMP 过程中的热量守恒关系，同时考虑机械摩擦作用和热量传导机制，提出基于热量守恒关系的动态线性模型。通过对该模型状态变量进行估计，可以实现对抛光垫表面状态和磨损程度的检测。该模型综合了物理模型与统计模型，参数具有直观的物理意义，并且保持动态变化。因此，模型能够在保持灵活性的基础上，提供良好的可解释程度。

本论文的结构安排如下。第一章介绍论文研究的背景，CMP 的基本原理和组成部分，以及当前 CMP 领域的关键问题和研究现状；第二章介绍影响 CMP 过程的关键因数和过程变量以及其对 CMP 过程的影响作用和程度，这些参数和变量将直接影响所提出的动态线性模型的状态变量；第三章介绍基于热量守恒关系的动态线性模型，模型同时包含了 CMP 过程中的机械摩擦作用和热量传导机制，并介绍了对该模型状态变量进行求解的 Kalman 滤波器方法；第四章进行试验设计和仿真分析，以获取数据对模型进行验证；第五章利用试验数据验证提出的模型，并对结果进行分析和讨论；第六章给出结论并总结全文。



第二章 影响化学机械抛光的关键因素和过程变量

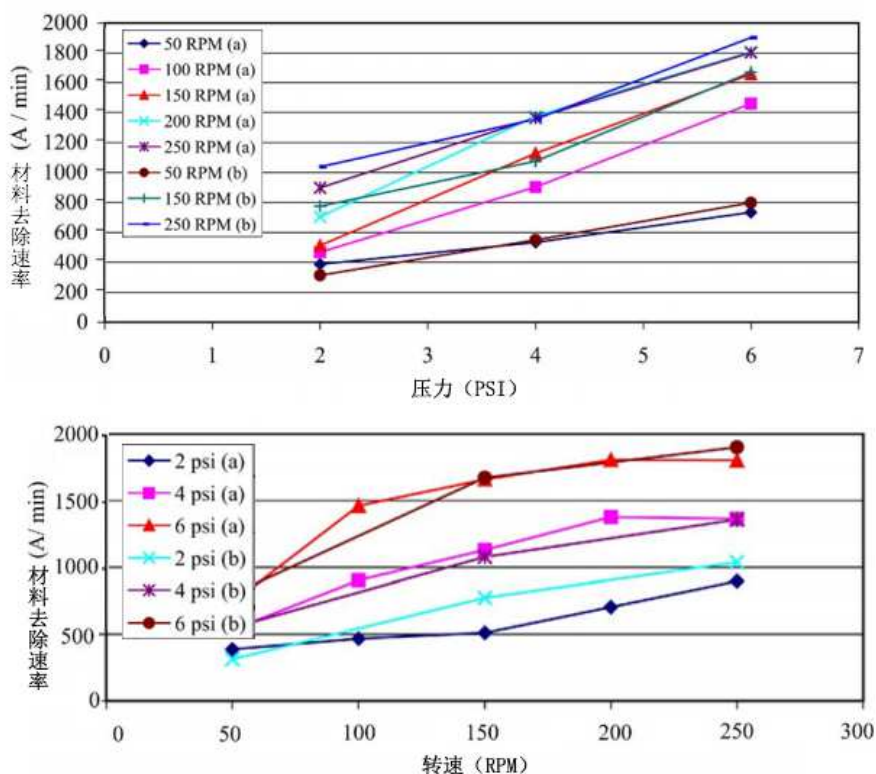
CMP 过程综合了氧化、络合等复杂的化学反应过程以及接触面摩擦和固体颗粒微小摩擦等机械作用，受到众多过程参数和变量的影响。图 2.1 列举了部分影响 CMP 抛光效果的关键因素和过程变量。本章将按照抛光机、晶片磨料、抛光垫、抛光液、过程变量这几个方面对这些参数和变量进行分类，并分别对各类参数及其对 CMP 过程的影响作用和程度进行分析。

输入参数		过程变量	输出指标
<div>抛光机</div> <ul style="list-style-type: none"><li>晶片压力</li><li>晶片转速</li><li>终点检测</li></ul> <div>晶片磨料</div> <ul style="list-style-type: none"><li>氧化硅抛光</li><li>金属抛光</li></ul> <div>抛光垫</div> <ul style="list-style-type: none"><li>材料特性</li><li>表面形貌</li><li>抛光垫修整</li><li>抛光垫均匀性</li><li>实际接触面积</li></ul>	<div>抛光液</div> <div>研磨颗粒属性</div> <ul style="list-style-type: none"><li>颗粒尺寸</li><li>尺寸分布</li><li>形状</li><li>机械性质</li><li>浓度</li><li>散布程度</li></ul> <div>化学性质</div> <ul style="list-style-type: none"><li>氧化剂</li><li>酸碱度 (pH)</li><li>络合剂</li><li>分散剂</li><li>浓度</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>温度</li><li>摩擦因素</li><li>声发射信号</li><li>CMP设备电机电流信号</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>材料去除速率</li><li>平坦化程度</li><li>终点检测</li><li>选择性</li><li>晶片内不均匀性 (WIWNU)</li><li>晶片间不均匀性 (WTWNU)</li><li>凹陷</li><li>腐蚀</li><li>晶片刮伤</li></ul>

图 2.1 影响 CMP 的关键因素<sup>[1]</sup>

2.1 抛光机特性对 CMP 过程的影响

抛光机对 CMP 过程的影响主要体现在两个方面：抛光头和抛光台的相对转速（RPM）以及抛光头压力（PSI）。图 2.2 描述了转速和压力对材料去除速率（MRR）的影响。从图中可以看出，在同样的转速下，MRR 随着压力的增大而增大；而在同样的压力下，MRR 随着转速的增大会先增大，然后逐渐达到稳定水平，这可能是由于在高转速下，晶片与抛光垫之间的接触面上缺乏足量的抛光液造成的<sup>[45]</sup>。


 图 2.2 材料去除速率与转速和压力的关系<sup>[45]</sup>

文献<sup>[46]</sup>系统地考察了抛光机压力、转速等参数对晶片平坦化速率的影响，研究发现，抛光头压力越大，材料去除速率越大，但是材料去除的不均匀性也随之增大，压力一定时，随着转速的增大，材料去除速率先增大，再缓慢减小，这是因为转速增加产生局部高温以及使得抛光液较难平铺在抛光垫上。

## 2.2 晶片磨料特性对 CMP 过程的影响

根据被抛光磨料的不同，CMP 过程通常可以分为两种：氧化硅抛光和金属抛光，其中后者的作用过程更为复杂。

### 2.2.1 氧化硅抛光

氧化硅抛光是半导体晶片制造中最早和最广泛使用的 CMP 平坦化工艺。氧化硅抛光是用来全局平坦化金属层之间淀积的层间介质（Inter Layer Dielectrics, ILD）的。对于传统的接触面抛光，可以使用在 1927 年就已经提出的 Preston 方程对材料的抛光速率进行研究<sup>[47]</sup>。

$$R = KPV \quad (2.1)$$

其中,  $R$  为材料去除速率,  $P$  为对抛光头所施加的压力,  $V$  为晶片和抛光垫的相对速率,  $K$  为与设备和工艺相关的参数, 包括抛光液和抛光垫参数, 待抛光材料的硬度等。图 2.3 描述了氧化硅抛光过程中  $MRR$  与  $RPM \times PSI$  之间的线性关系, 验证了 Preston 方程对于描述氧化硅抛光过程的有效性。

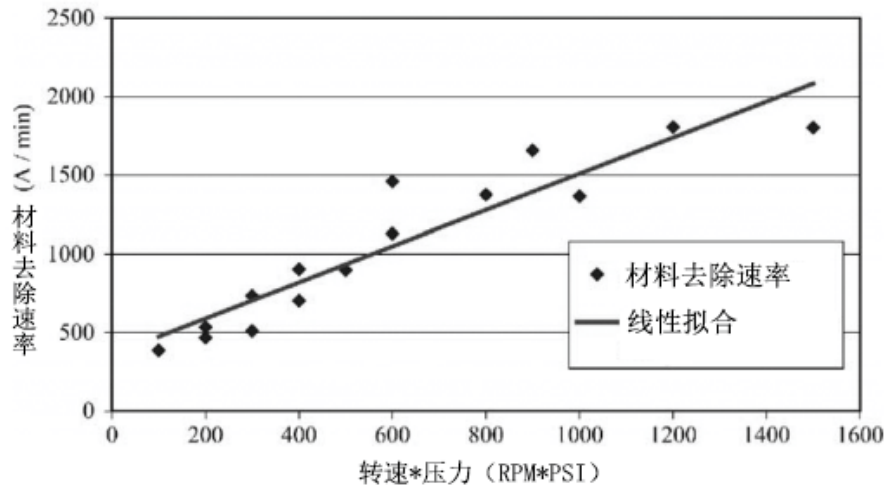


图 2.3  $MRR$  与  $RPM \times PSI$  的线性关系<sup>[48]</sup>、

文献<sup>[49]</sup>结合现有的 CMP 过程数学模型, 通过实验分析了氧化硅 CMP 过程中, 抛光晶片大小对材料去除速率和抛光均匀性的影响。结果表明, 随着晶片尺寸的增加, 将会引起抛光过程温度的增加, 从而加快接触面化学反应的速率, 导致氧化硅的去除速率的增加。

### 2.2.2 金属抛光

金属 CMP 的机理与氧化硅 CMP 的机理不同。文献指出, 可以用化学氧化和机械研磨的机理来解释金属 CMP 过程。首先, 抛光液中的氧化剂与金属表面接触并氧化它, 例如在铜(Cu)CMP 过程中, 铜会氧化生成氧化铜( $CuO$  或  $Cu_2O$ )和氢氧化铜 ( $Cu(OH)_2$ ); 然后, 这层金属氧化物被接触面摩擦以及抛光液中的固体颗粒机械的磨掉。一旦这层氧化物被去掉, 抛光液又会继续氧化新露出的金属表面, 然后又被机械作用磨去, 这一过程重复进行, 直到金属层完全被磨掉或 CMP 过程达到预设的终点。

在金属 CMP 过程中, 随着抛光时间的增加, 容易发生金属层的凹陷和侵蚀 (图 2.4)。侵蚀 (dishing) 是指在图形区域金属和氧化物被减薄, 凹陷 (erosion) 是指图形中央位置材料厚度的减小。侵蚀和凹陷的发生通常与抛光时间、抛光垫的硬度等参数有关。

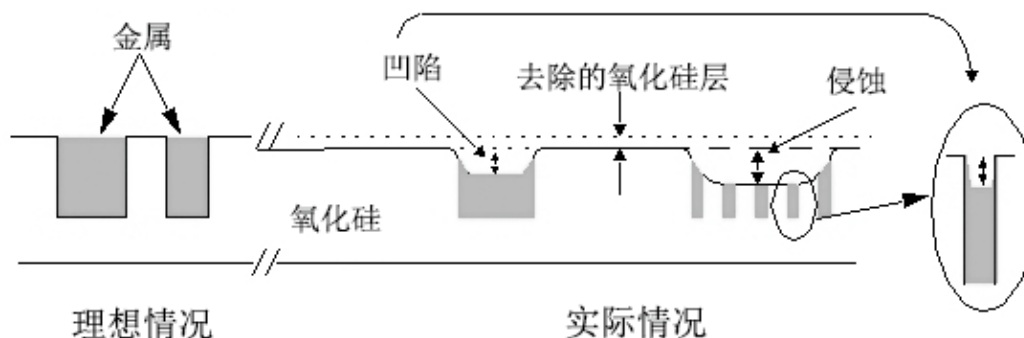


图 2.4 金属 CMP 中的凹陷和侵蚀

文献<sup>[50]</sup>总结了集成电路芯片常用金属材料钨、铝及铜的化学机械抛光研究现状和进展，并分析了金属化学机械抛光过程中化学作用同机械作用的协同效应。有文献<sup>[51]</sup>指出，在金属 CMP 过程中，金属的化学氧化和金属氧化物层的分解比机械的研磨作用更重要。这意味着对金属 CMP 而言，通过控制抛光液的化学特性可以显著地影响抛光的过程。

## 2.3 抛光垫特性对 CMP 过程的影响

抛光垫的诸多特性，如材料硬度、弹性模量，表面孔洞密度、均匀性、沟槽设计，以及抛光垫的磨损情况等，将会对 CMP 抛光结果造成关键影响<sup>[52]</sup>。关于抛光垫的相关研究，主要集中在三个方面：抛光垫材料属性、抛光垫表面特性、抛光垫的磨损和修整。

### 2.3.1 抛光垫材料属性

抛光垫的材料属性如硬度、弹性模量、剪切模量等机械性能对抛光过程中的材料去除速率、抛光的均匀性和抛光质量、以及抛光垫的寿命有着显著的影响。

硬度较大的抛光垫通常具有更快的抛光速率和更好的表面平整性<sup>[32,53]</sup>，但抛光过程中更容易引起晶片表面的划伤（scratch），尤其是在压力较大时，可能会引起严重的表面损伤。相较之下，硬度较小的抛光垫能够减小晶片表面划伤，但是对晶片表面的平整效果不好。

抛光垫的弹性模量和剪切模量主要通过影响抛光垫在抛光头压力和旋转应力作用下的稳定性和韧性来影响抛光过程。文献<sup>[54]</sup>应用 Greenwood-Williamson 方程对并考虑弹性机制下的接触面摩擦，建立了材料去除模型，并通过实验结果进行验证。文献<sup>[55]</sup>同时从弹性和非弹性接触的角度分析了晶片与抛光垫之间的接触

摩擦，并指出只考虑弹性接触的模型将严重低估材料的去除速率，应该同时考虑非弹性接触的作用。

### 2.3.2 抛光垫表面特性

由于聚氨酯材料的多孔特性，抛光垫表面分布大量的微小孔洞。在抛光过程中，这些孔洞可以在接触面处容纳、运输抛光液，促进化学反应的进行。然而随着抛光过程的进行，过度的机械摩擦可能会导致这些孔洞的闭合，或由于被抛光过程中从晶片表面剥离的微小废屑填充，造成对抛光速率的影响。文献研究<sup>[56]</sup>表明，抛光垫表面孔洞的大小、形状、开闭情况及其分布等因素，对 CMP 的抛光速率有显著的影响。

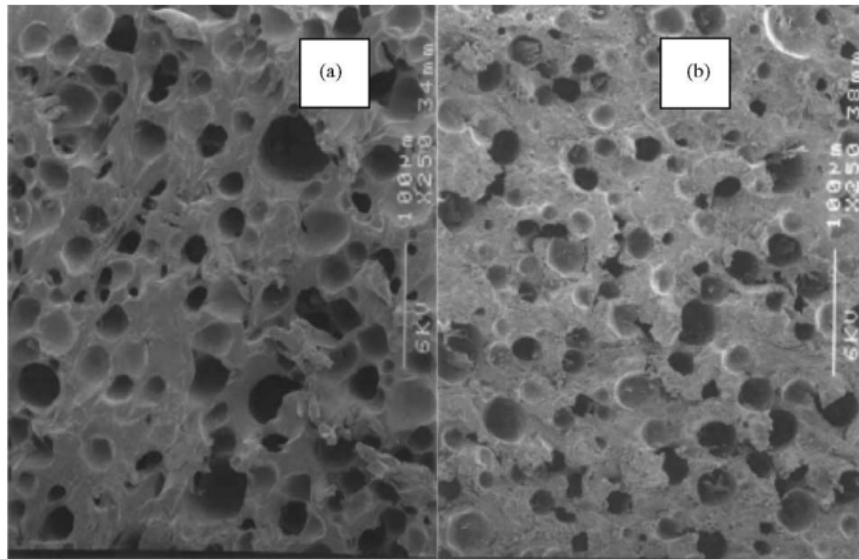


图 2.5 CMP 前后抛光垫表面结构对比<sup>[56]</sup>

抛光垫的表面粗糙度是决定 CMP 过程中材料除去速率的主要因素，因为表面粗糙程度直接决定了摩擦过程的作用效果。文献<sup>[57]</sup>建立了一个初步的二维流动模型以考虑抛光垫的弹性、孔隙参数、粗糙度以及晶片形状等因素对抛光液流动性能的影响，并通过数值模拟得出了它们对压力分布和膜厚等的作用。文献<sup>[58]</sup>使用 X 射线断层扫描技术（X-ray CT）对抛光垫表面图形进行记录，并提出“表面区域占比”（Top Surface Area Ratio, TSA）变量来定量地描述抛光垫的表面粗糙程度及其对摩擦因数的影响。

### 2.3.3 抛光垫的磨损和修整

随着抛光过程的进行，抛光垫将产生塑性形变和磨损而表面变得光滑，或者



表面孔洞被磨削的微小废屑所堵塞。因此，需要定期对抛光垫进行修整来维持其粗糙程度和多孔特性，以防止抛光液的输送和废屑的排除受阻以及摩擦因数降低。抛光垫的修整是 CMP 加工过程中的一个重要环节，目的是在抛光垫的寿命期间获得一致的抛光性能。通常可以通过机械式的摩擦、去离子水喷溅、金刚石颗粒磨盘打磨等技术进行表面修整，修整后的抛光垫性能主要由修整器的性能和相关的工艺参数决定。然而，由于修整工艺将去除抛光垫表面的材料，因而将对抛光垫的厚度和寿命造成重要的影响。

文献<sup>[33]</sup>研究了抛光垫磨损对材料去除速率和晶片表面不平整性的影响，研究发现抛光垫磨损将增大晶片表面的不平整程度，并降低材料去除速率。文献<sup>[18,59]</sup>研究了用金刚石磨盘对抛光垫进行修整的过程，研究发现，金刚石的颗粒类型、密度，尺寸大小，分布情况等参数对抛光垫的修整速率和磨损程度有重要影响。

## 2.4 抛光液特性对 CMP 过程的影响

抛光液对 CMP 过程的影响主要表现在两个方面：抛光液的化学性质，抛光液中固体颗粒的性质。

### 2.4.1 抛光液的化学性质

根据化学性质的不同，CMP 抛光液主要分为两大类：以 HF 或 HF-NH<sub>4</sub>F 为缓冲溶液的酸性抛光液和以 KOH 或 NH<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>O 为缓冲溶液的碱性抛光液。此外，通常还会加入纳米研磨颗粒提供研磨作用，加入氧化剂提供腐蚀和溶解的作用，加入表面活性剂影响抛光液的分散性、晶片表面吸附颗粒后的清洗难易程度以及金属离子的玷污等。在氧化物 CMP 抛光中，通常使用 SiO<sub>2</sub> 为研磨颗粒，pH 值一般控制在 pH > 10；而抛光金属通常 pH 值为酸性，并通常以 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 作为研磨颗粒，以便控制粘性和腐蚀并去除副产品。

文献<sup>[60]</sup>讨论了抛光液的流速和氧化剂含量对 CMP 速率的影响，研究发现，当抛光液流量在 200 mL/min 时，既节约了生产成本又能提高效率；当氧化剂体积分数在 2%~3% 时，抛光液既保持了较好的稳定性，又能保证氧化能力，从而提高抛光速率。文献<sup>[61]</sup>介绍了一种用于铜 CMP 的多元胺醇型非离子表面活性剂，结果表明，微量表面活性剂的加入能显著降低抛光液的表面张力并大幅提高抛光液的稳定性，表面活性剂含量为 0%~2% 时，随其含量增大，化学机械抛光速率减小，抛光面的粗糙度降低。文献<sup>[62]</sup>介绍了一种未加入抑制剂的新型碱性抛光液，并通过与商用抛光液的对比发现，该新型抛光液能够带来更好的晶片表面平整度和更少的腐蚀。

### 2.4.2 抛光液中固体颗粒的性质

抛光液中固体研磨颗粒的大小、硬度和浓度等参数会对 CMP 过程造成影响。研磨颗粒的大小和硬度可以影响微观的摩擦作用中颗粒对晶片表面造成的摩擦面积和压痕深度；研磨颗粒的浓度增大可以增加在接触面上参与摩擦的颗粒数量，进而增大材料的去除速率。文献<sup>[63]</sup>中研究发现，在金属钨的 CMP 过程中，材料去除速率随着研磨颗粒浓度的增大而增大。

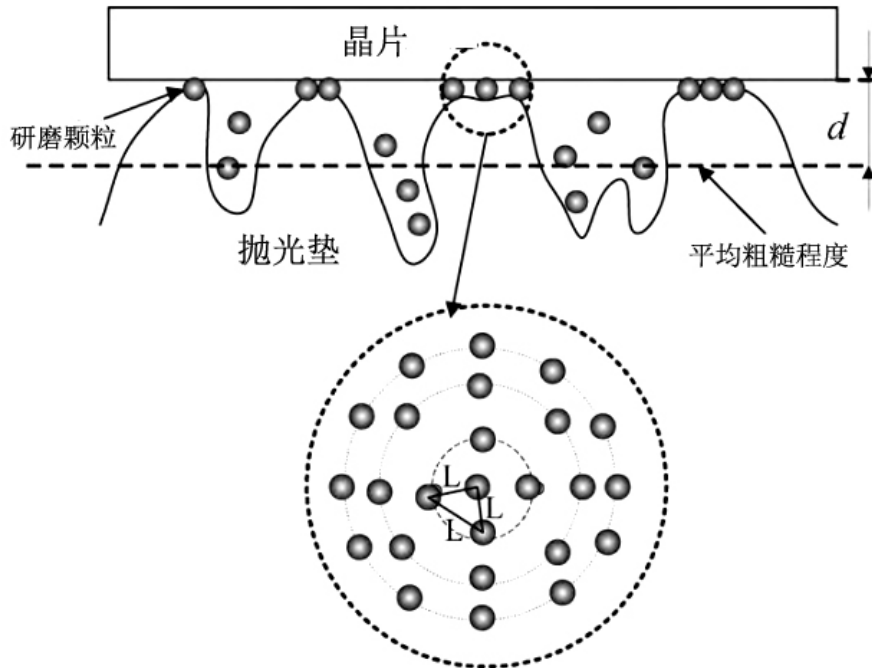


图 2.6 抛光液研磨颗粒分布示意图<sup>[1]</sup>

然而，增大研磨颗粒的大小和硬度可能对晶片表面造成损伤，如可能造成晶片表面损伤和微小划痕等。直径越大、硬度越高的研磨颗粒可能会引起越深的表面压痕，难以通过后续的 CMP 工艺消除。同时，颗粒浓度的增大也只能在一定程度上增加材料的去除速率。文献<sup>[19]</sup>中指出，在低浓度情况下，材料去除速率随着研磨颗粒的增大而增大，而在浓度超过一定的阈值时，情况正好相反，这可能是由于材料去除的机制发生了变化造成的。

文献<sup>[22]</sup>基于分子尺度的机械和接触理论，应用概率统计的手段，建立了微观的 CMP 材料去除模型，以研磨颗粒的大小和浓度作为变量，发现了 MRR 与研磨颗粒大小和浓度之间的非线性关系。文献<sup>[64]</sup>通过建立晶片-抛光垫-研磨颗粒三者的摩擦模型解释了研磨颗粒大小的分布对材料去除速率的影响。

## 2.5 影响 CMP 的关键过程变量

### 2.5.1 摩擦因数

摩擦因数 (Coefficient of Friction, COF) 是在 CMP 抛光过程中晶片和抛光垫之间接触面的切向力与法向压力的比值。COF 是接触面特性的一个重要表征, 是影响 CMP 效果的关键过程变量之一, 通常由 CMP 抛光机自动记录, 并作为抛光过程诊断和终点检测之用。图 2.7 描述了在抛光过程中 COF 随着转速 (RPM) 和压力 (PSI) 的变化趋势。从图中可以发现, 随着转速的增加, COF 呈现下降趋势; 而随着压力的增大, COF 并没有出现显著的变化。

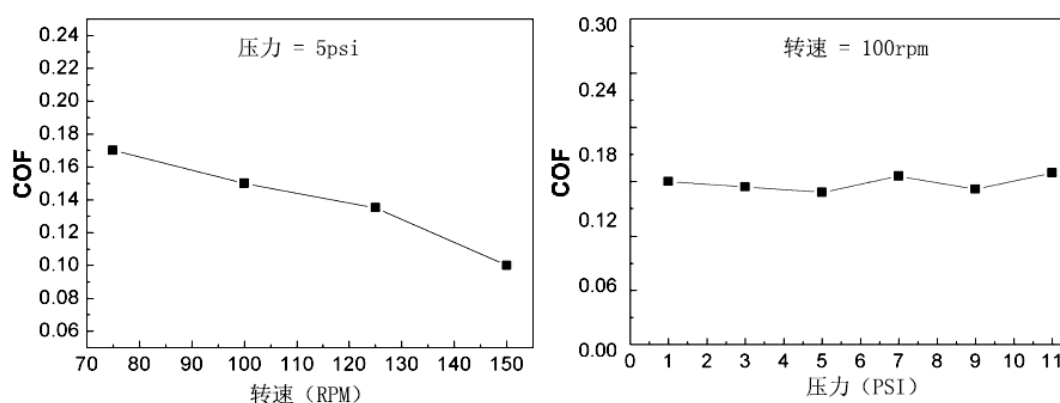


图 2.7 摩擦因素随转速和压力的变化趋势<sup>[28]</sup>

文献研究表明, COF 对 CMP 抛光速率, 晶片表面的局部和全局平整性具有显著的影响。文献<sup>[58,65]</sup>通过对抛光垫表面进行成像, 分别提出了抛光垫表面平整性系数 (Pad Flattening Ratio, PFR) 和表面区域占比 (Top Surface Area, TSA) 变量, 来表征抛光盘表面的粗糙程度, 并结合 COF 信号进行分析, 定量分析了 COF 对材料去除速率的影响作用和程度。文献<sup>[44,66]</sup>发现了 COF 和温度等过程变量之间的非线性关系, 并提出了通过对这种非线性关系的作用模式进行分析来进行 CMP 抛光过程诊断的方法。

### 2.5.2 温度

由于化学反应和机械摩擦的吸、放热作用, 晶片和抛光垫接触面会产生大量的热量, 这些热量通过热传导进入晶片、抛光垫和抛光液中, 并通过辐射进入周围环境的空气中, 表现为抛光过程温度的上升。温度的升高, 会对化学反应的速率和机制造成影响, 也可能对抛光垫材料的特性造成暂时或永久性的影响。因此, 通过对抛光垫表面温度及其分布情况进行分析, 可以帮助我们更好的了解



CMP 的过程状况。图 2.8 描述了抛光头的压力和抛光头与抛光垫相对转速对抛光垫表面温度的影响。可以看出,抛光垫表面温度随着压力和转速的增大而增大。

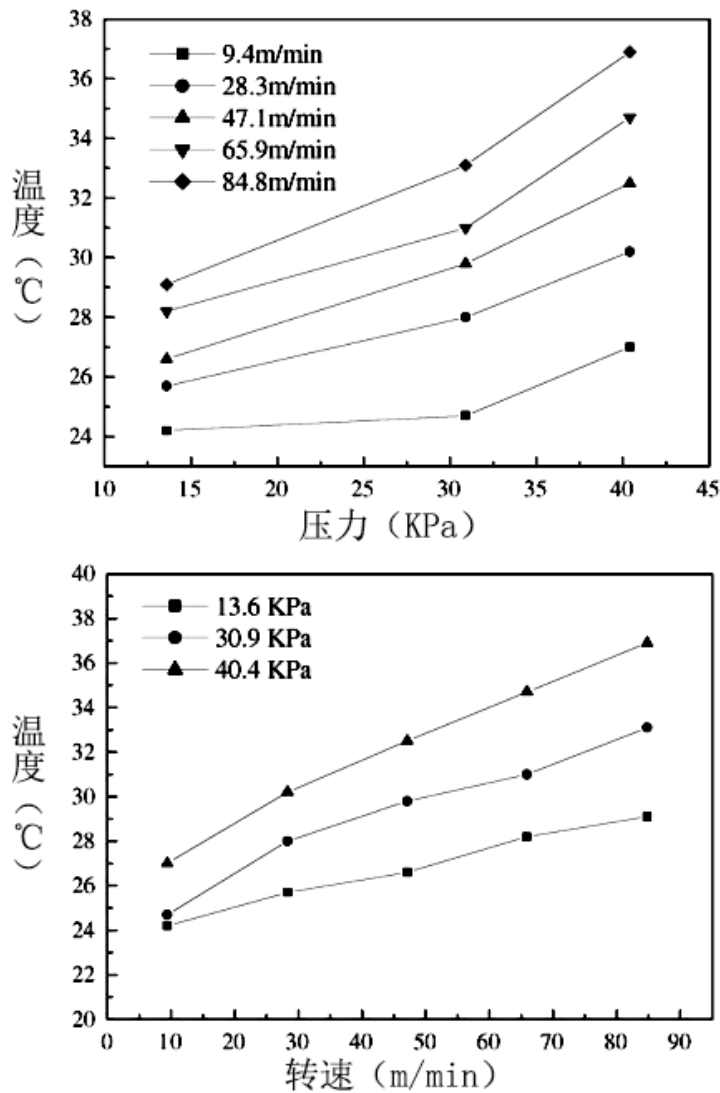


图 2.8 压力和转速对抛光垫温度的影响<sup>[67]</sup>

文献<sup>[68]</sup>建立动力学模型,从机械摩擦和能量传递的角度分析了温度升高的幅度及其热量来源。文献<sup>[67]</sup>使用红外线摄影仪对抛光过程中的温度场进行记录,并分析了抛光垫表面温度的变化对抛光液和抛光垫的影响,研究发现,对于碱性抛光液,随着温度的升高,抛光液 pH 值降低(图 2.9)。文献<sup>[69]</sup>研究了温度对接触面摩擦作用的影响,如图 2.10 所示,当温度升高时,金属铜 CMP 过程的 COF 会有显著的升高,而氧化物 CMP 过程的 COF 升高幅度较小,这可能是由于化学反应机理的不同造成的。文献<sup>[39-41]</sup>从能量守恒的角度,通过对机械摩擦以及化学反应的热量吸、放过程进行分析,得出了热量的产生和传递的守恒方程,进而预测

抛光垫表面的温度场的分布。

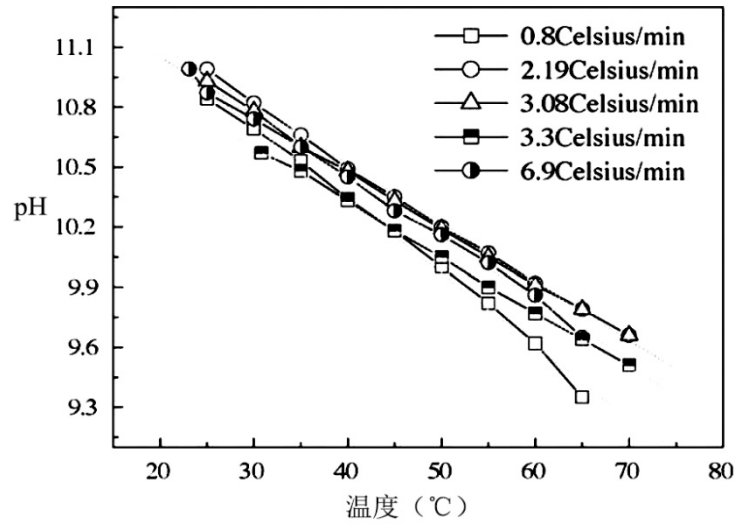


图 2.9 温度对抛光液 pH 值的影响<sup>[67]</sup>

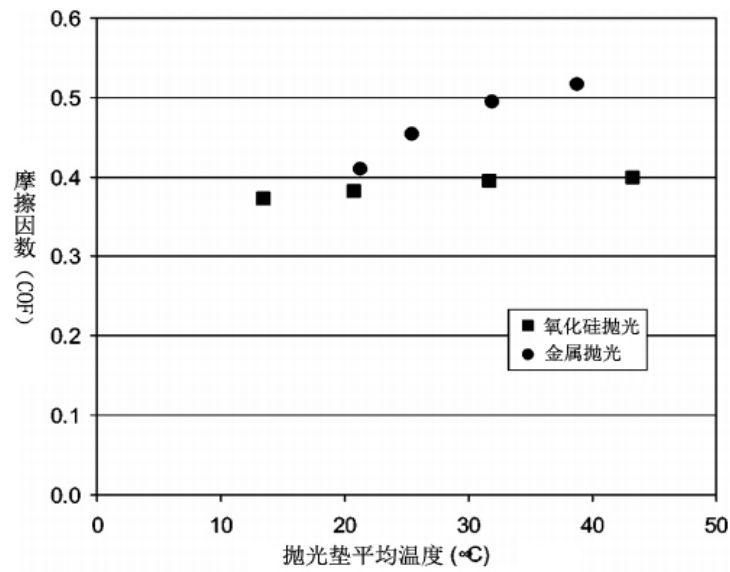


图 2.10 温度对 COF 的影响<sup>[69]</sup>

2.5.3 声发射信号

声发射信号（Acoustic Emission, AE）是由材料在应力状态发生变化的情况下发出的弹性波信号。在 CMP 过程中，可以通过使用 AE 传感器记录抛光垫在各种表面状态下发出的 AE 信号，并对 AE 信号进行分析，从而进行 CMP 过程状态的检测和诊断。

文献<sup>[70]</sup>通过对 AE 信号的功率谱和快速傅里叶变换（Fast Fourier Transform,

FFT) 频谱进行分析, 实现了对 CMP 过程的监控和分析。文献<sup>[71]</sup>基于小波分析的方法对 CMP 过程中的 AE 信号和 COF 信号进行综合分析, 并实现了对 CMP 过程中晶片表面的层离 (delamination) 缺陷的实时检测。文献<sup>[35]</sup>使用 AE 信号对 CMP 过程进行终点检测, 并取得了与传统方法一致的检测效果。

### 小结

本章通过调研大量中外文献, 总结了 CMP 过程中影响抛光结果的关键因素和过程变量, 并且针对各类参数和变量分析了其对 CMP 过程的影响机制和作用程度。

影响 CMP 过程的关键因素包括抛光机、晶片磨料、抛光垫、抛光液四个部分。针对抛光机, 分析了压力和转速对材料去除速率的影响。根据化学反应过程的不同, 针对氧化物和金属磨料的 CMP 过程, 分析其反应机理和影响因素。对抛光垫, 分别从材料属性、表面属性以及磨损和修整三个角度分析了其对 CMP 的材料去除速率、全局平整性的影响。而对于抛光液, 分析了不同化学性质的抛光液的作用效果, 并且基于微观接触摩擦过程, 分析了抛光液中固体研磨颗粒对 CMP 抛光效果的影响。

CMP 中的过程变量主要包括摩擦因数、温度、声发射信号三种, 已经有许多文献进行了多角度的分析。这三类过程变量是在抛光过程中产生并收集到的, 包含了 CMP 过程的丰富信息, 通过对这些信号进行分析并提取特征信息, 可以实现对抛光过程状态的检测。

本章总结的 CMP 过程的关键因素和过程变量, 将影响下一章中所提出的热量守恒模型和动态线性模型中的参数。通过对这些参数和变量的分析, 可以了解模型中参数的变化趋势。

### 第三章 化学机械抛光过程的动态线性模型建模

在上一章中，我们总结了 CMP 过程中的关键因素和过程变量，这些参数有的是静态的，有的将随着抛光过程发生动态变化，而过程变量数据作为抛光过程状态的反映，包含了 CMP 过程的丰富信息。由于在 CMP 过程中，机械摩擦作用、化学反应过程以及抛光液的流动都会伴随着热量的产生、消耗和传递，而这部分热量又是与 CMP 过程的参数和变量密切相关的。通过对 CMP 过程中的热量守恒关系进行建模，可以实现对过程参数和变量的估计，从而进行抛光过程状态的检测。

本章通过考虑 CMP 过程中的热量流动，提出了一个基于热量守恒关系的动态线性模型，同时包含了 CMP 过程中的热量流动和守恒关系与抛光过程状态的动态变化趋势。这一模型由两个部分组成：一是通过动力学和热力学分析建立静态的热量守恒模型，该模型同时考虑了 CMP 过程中的机械摩擦与热量传递机制；二是考虑热量守恒模型中参数的动态变化趋势，将静态的热量守恒模型推广到考虑参数变化的动态线性模型，并利用 Kalman 滤波器方法估计模型中状态变量的变化过程，从而实现对 CMP 过程状态的检测，例如抛光垫表面粗糙程度和老化程度等。

#### 3.1 热量守恒模型

通常情况下，CMP 过程中产生的热量会通过热传导的方式进入晶片、抛光垫和抛光液中，其中小部分会以热辐射的形式进入周围环境，并且产生和消耗的热量之间存在均衡的关系。CMP 过程产生和消耗的热量与抛光过程中的参数和变量密切相关，例如抛光垫和抛光液的属性，抛光头的下压力以及抛光垫和晶片的相对速率等。

##### 3.1.1 机械摩擦作用产生的热量

假设在 CMP 过程中，抛光机对抛光头施加的压力不变，并且均匀的分布在抛光垫和晶片的接触面上，单位面积上的压力为  $P$ 。接触面的摩擦因数（Coefficient Of Friction, COF） $\mu(t)$  将随着抛光过程中接触面粗糙程度的变化和抛光液化学性质的变化而持续发生改变。通过记录 CMP 过程中的摩擦因素，我们可以得到抛光过程中摩擦力  $F_f(t)$  的计算公式如下

$$F_f(t) = \mu(t)PA \quad (3.1)$$

其中， $A$  是抛光垫与晶片之间接触面的面积。通过接触面摩擦力，可以计算出在任意  $t$  时间内，由机械摩擦作用产生的热量

$$E_f = \int_t F_f(t) V_r dt \quad (3.2)$$

其中， $V_r$  表示距离抛光垫中心为  $r$  的点与晶片之间的相对线速度，是抛光垫转速  $\vec{V}_p$ 、抛光头转速  $\vec{V}_w$  以及抛光头沿着抛光垫半径的横向往返运动速度  $\vec{v}$  三者的叠加， $V_r = |\vec{V}_w + \vec{v} - \vec{V}_p|$ 。

根据图 3.1 中定义的详细参数，对于距离抛光垫中心为  $r_w$  的任意点  $Q$ ，我们可以通过动力学的分析得出  $V_r$  的表达式如下<sup>[36]</sup>

$$V_r = \left| \left[ v + r_w (w_p - w_w) \sin \theta \right] \vec{i} + \left[ r_w (w_w - w_p) \cos \theta - x_w w_w \right] \vec{j} \right| \quad (3.3)$$

其中， $\theta = w_p t$ ， $\vec{V}_w$  和  $\vec{V}_p$  分别表示该点处晶片与抛光盘的线速度， $\vec{v}$  是晶片在抛光垫上沿着垫半径横向往返移动（为了避免抛光垫上局部过热）的速度。

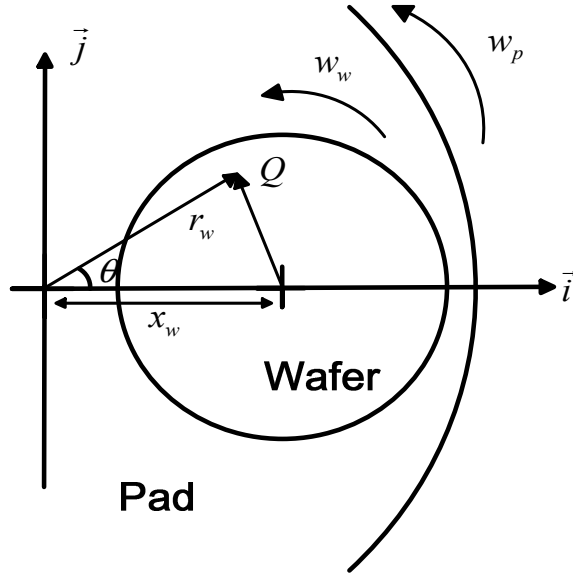


图 3.1 抛光垫与晶片的相对运动参数定义

在实际抛光过程中，摩擦因数  $\mu(t)$  通常由切向摩擦力和正向压力的比值得到，并由抛光机自动记录下来。综合以上分析，我们可以计算出由机械摩擦过程产生的热量。

### 3.1.2 化学反应中的吸、放热分析

化学反应的过程中通常也伴随着热量的产生和消耗。从微观尺度考虑材料的去除作用时，需要考虑材料原子之间的结合能（binding energy）。原子间结合能被认为是将晶体状态的材料分解为独立的原子时需要消耗的能量。在 CMP 过程中，通过化学反应以及抛光液中微小研磨颗粒的作用，可以将晶片表面原子间紧密的集合关系变得松散，并在之后的机械摩擦作用中去除。此外，CMP 过程中化学性质活泼的抛光液与晶片表面材料发生氧化、络合等复杂化学反应时，将会伴随着热量的产生和消耗，但正如文献<sup>[71]</sup>指出，这部分能量仅占 CMP 过程中能量产生与消耗非常小的一部分，可以忽略不计。

文献<sup>[72]</sup>从材料的焓（enthalpy）的角度出发，分析了将一定量的材料分解需要消耗的能量，并得出结论发现，在 CMP 过程中，通过化学反应放出的热量相对于机械的摩擦作用产生的能量是可以忽略的，这一结论与文献<sup>[71]</sup>是一致的。综合以上分析，在进行宏观的热量流动平衡建模时，我们忽略化学反应产生的能量，而仅对机械摩擦和热量传导部分的能量进行考虑。

### 3.1.3 热量传递和消耗

CMP 过程中产生的热量主要被抛光垫和晶片吸收，并且随之传导到抛光液中，以及通过辐射作用进入周围环境。有相关研究表明，由摩擦过程产生的热量是按照固定的比例分配进入晶片和抛光垫中的，而分配的比例则是由材料的相关属性决定的<sup>[39]</sup>。

抛光垫吸收摩擦过程中产生的热量，引起温度的上升。通过记录一段时间  $t$  内抛光垫表面的温度分布及其变化，我们可以计算出由抛光垫吸收的部分热量，可以由以下公式表示

$$E_{pad} = c_p m \Delta T_p \quad (3.4)$$

其中， $E_{pad}$  是抛光垫在  $t$  时间内抛光垫吸收的热量， $c_p$  和  $m$  分别表示抛光垫的比热容和质量。 $\Delta T_p = T_p - T_0$  是抛光垫表面在  $t$  时间内的温度变化（ $T_0$  是抛光垫的初始温度）。

CMP 过程中，恒温的抛光液经由温度控制器不断输送到抛光垫上。由于抛光垫与抛光液之间存在一定的温度差，抛光垫上的热量将会传递到抛光液中，该部分热量可以经由以下热传递方程计算

$$E_{slurry} = kA(T_p - T_{slurry}) \quad (3.5)$$

其中,  $k$  是热传递系数, 由抛光垫和抛光液的材料属性以及接触面的属性决定,  $A$  是抛光垫与抛光液之间的接触面积,  $T_p$  和  $T_{slurry}$  分别表示抛光垫和抛光液的温度 (其中,  $T_{slurry}$  通常由抛光液循环系统控制在固定的温度, 并假设经由热传导后, 抛光液与抛光垫具有相同的温度)。

### 3.1.4 热量守恒

在考虑 CMP 过程中的热量损失时, 我们通常假设可以忽略掉传导到抛光头中的部分热量, 因为通常可认为抛光头具有良好的绝热性质<sup>[41]</sup>。此外, 聚氨酯抛光垫也通常被认为具有良好的绝热性, 而忽略掉经由抛光垫传导到抛光台的部分热量<sup>[39]</sup>。另外, 通过热辐射形式进入周围环境的热量也假设可以忽略。

综合以上的分析, 我们可以通过热量守恒方程将机械摩擦产生的热量与经由抛光垫和抛光液传导和耗散的热量综合起来, 得到

$$E_f = E_{pad} + E_{slurry} + o(E) \quad (3.6)$$

其中, 方程左边是通过机械摩擦作用产生的热量, 方程右边是经由抛光垫和抛光液传导和耗散的热量以及可以忽略的能量耗散部分  $o(E)$ , 例如辐射到周围环境中的部分热量。

由于抛光垫的厚度非常小<sup>[72,73]</sup>, 可以近似认为热量沿着抛光垫的纵向是均匀分布的, 因此不需要考虑抛光垫中纵向的热量传递。由此, 我们可以得出抛光垫上的一维热量守恒模型<sup>[39]</sup>, 如下所示

$$\rho h c_p \frac{\partial T_p(t)}{\partial t} = \chi_r \gamma_l \mu(t) P V_r - h_{ps} (T_p(t) - T_{slurry}) \quad (3.7)$$

其中,  $\rho$ ,  $h$  和  $c_p$  分别代表抛光垫的密度, 厚度和比热。  $\chi_r$  是抛光垫上的固定点在 CMP 过程中得到抛光的时间占比,  $\gamma_l$  是机械摩擦产生的热量中进入抛光垫的比例,  $h_{ps}$  是抛光垫和抛光液之间热量对流传导的系数。

## 3.2 CMP 过程中的动态线性模型

随着抛光过程的进行, 抛光垫表面将发生退化 (degradation) 和磨损 (wear), 晶片和抛光垫接触面的属性也将发生持续的变化, 并且将导致热量平衡关系 (公式(3.7)) 中参数的变化。例如, 当抛光垫粗糙程度越来越小, 晶片与抛光垫之间的实际接触面积会逐渐增大, 在固定的抛光头压力下, 将导致压强  $P$  的减小; 另外, 随着抛光垫的磨损和老化以及抛光过程产生的废屑, 抛光垫表面的微小孔洞

的大小、形状将会发生变化甚至出现闭合，将影响抛光液的运输以及与抛光垫的热量交换；此外，在金属抛光过程中，随着晶片表面的金属的磨削即将达到临界点，化学反应类型和摩擦作用将会发生改变。因此，热量守恒模型中的参数不再是固定的，而是随着抛光过程的进行，时刻保持动态变化的。

上述这些过程变化都将导致热量守恒模型中的参数的变化，而从这些参数的物理意义可知，它们表征了 CMP 抛光过程的状态。因此，通过考虑过程参数的动态变化，将静态的热量守恒模型扩展到动态过程，并对动态变化的过程参数进行估计，我们可以实现对抛光过程状态的有效检测。这一节中，我们使用动态线性模型（Dynamic Linear Model）对静态的热量守恒模型进行扩展，并且利用 Kalman 滤波器方法进行模型状态变量的估计。

### 3.2.1 状态空间模型

作为动态线性模型更一般化的推广，我们将首先介绍状态空间模型（State Space Model）。状态空间模型是在一阶马尔科夫假设的基础上，建立的更复杂的观测值模型。

对时间序列  $(y_t)_{t \geq 1}$ ，计算对任意  $t \geq 1$  的联合分布  $(y_1, \dots, y_t)$  并不容易，尤其是当时间序列中的独立性和相关性并不确定时。当时间有限时，一阶马尔科夫关系是序列  $(y_t)$  最简单的一种依赖形式。当对任意  $t > 1$ ，都有  $(y_t)_{t \geq 1}$  满足以下关系时，我们称  $(y_t)_{t \geq 1}$  为一阶马尔科夫链

$$\pi(y_t | y_{1:t-1}) = \pi(y_t | y_{t-1}) \quad (3.8)$$

公式(3.8)意味着  $(y_1, \dots, y_t)$  中包含的关于  $y_t$  的信息与  $y_{t-1}$  中包含的关于  $y_t$  的信息是完全一致的。也就是说， $y_t$  与  $y_{1:t-2}$  是条件无关的。对于一阶马尔科夫链，我们可以很容易的写出序列的有限维联合分布

$$\pi(y_{1:t}) = \pi(y_1) \cdot \prod_{j=2}^t \pi(y_j | y_{j-1}) \quad (3.9)$$

在状态空间模型中，我们假设存在一个无法被观测到的马尔科夫链  $(a_t)$ ，被称为状态过程，观测值  $y_t$  是  $a_t$  的不精确观测。在工程应用中， $a_t$  通常描述一个物理系统的不可见的状态，而  $y_t$  则是在该状态下的观测值。

状态空间模型满足以下两点假设：

1. 状态过程  $(a_t)$  是一个马尔科夫链
2. 在  $(a_t)$  的条件下，观测值  $y_t$  是相互独立的，并且  $y_t$  仅由状态  $a_t$  决定



由以上两点假设可知，状态空间模型可以由初始状态分布  $\pi(a_0)$  以及  $t > 1$  时的条件密度  $\pi(a_t | a_{t-1})$  和  $\pi(y_t | a_t)$  决定。实际上，对于任意的  $t > 0$ ，有

$$\pi(a_{0:t}, y_{1:t}) = \pi(a_0) \cdot \prod_{j=1}^t \pi(a_j | a_{j-1}) \pi(y_j | a_j) \quad (3.10)$$

从公式(3.10)我们可以使用条件概率和边际概率方法得到对于随机向量的  $(a_0, a_1, \dots, a_t, y_1, \dots, y_t)$  任意感兴趣的分布。

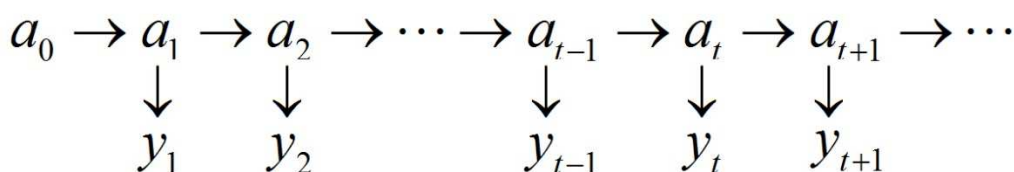


图 3.2 状态空间模型的依赖结构

状态空间模型中的依赖结构如图 3.2 所示，为一个有向的非循环图。该模型的图形表示可用于推断状态空间模型中产生的随机变量的条件独立性质。例如在图 3.2 中，我们可以证明在  $a_t$  已知时， $(a_{0:t-1}, y_{1:t-1})$  和  $y_t$  是条件独立的。因为在马尔科夫链中，从任意的观测值  $y_s$  ( $s < t$ ) 或状态  $a_s$  ( $s < t$ ) 到观测值  $y_t$ ，都必须经过状态  $a_t$ ，也就是说  $\{a_t\}$  隔开了  $\{a_{0:t-1}, y_{1:t-1}\}$  和  $\{y_t\}$

$$\pi(y_t | a_{0:t}, y_{1:t-1}) = \pi(y_t | a_t) \quad (3.11)$$

同样的，我们也可以得出在已知  $a_{t-1}$  时， $a_t$  与  $(a_{0:t-2}, y_{1:t-1})$  是条件独立的，用公式表示如下

$$\pi(a_t | a_{0:t-1}, y_{1:t-1}) = \pi(a_t | a_{t-1}) \quad (3.12)$$

### 3.2.2 动态线性模型

动态线性模型(Dynamic Linear Model, DLM)是状态空间模型的一种特例，也被称为高斯线性状态空间模型 (Gaussian Linear State Space Model) [74]，在系统状态初始分布满足高斯假设并且系统观测和状态变量之间为线性关系时，可以使用动态线性模型对状态空间模型进行简化。

在热量守恒模型中，模型的参数作为抛光过程状态的表征是不可见的，而 CMP 过程中的过程变量如摩擦因数和温度，作为系统的输入和输出，是可以进行观测的。系统的输入、输出与过程状态之间，存在线性关系，可以用热量守恒

模型进行表征。考虑热量守恒模型中的参数动态变化，我们可以使用动态线性模型对该模型进行扩展。动态线性模型可以用来描述一个输入、输出可见，而状态不可见的动态系统。并且，系统输出和输入之间满足线性关系，系统状态假设为高斯分布并且状态的变化为一阶马尔科夫过程。

为了使用动态线性模型来描述 CMP 过程参数的动态变化，我们定义

$$\alpha = \frac{\chi\gamma_1 P V_r}{\rho h c_p} \quad (3.13)$$

$$\beta = -\frac{h_{ps}}{\rho h c_p} \quad (3.14)$$

其中  $\alpha$  和  $\beta$  分别是热量守恒模型(3.7)中 COF 和温度变量前的系数，表征了 CMP 抛光过程的状态。由于 CMP 过程状态随着抛光过程的进行发生动态变化， $\alpha$  和  $\beta$  也将不再是固定值，而是随着时间发生变化的。假设  $\alpha$  和  $\beta$  的变化过程满足一阶马尔科夫条件，我们可以得到随着时间变化的状态变量  $\alpha_i$  和  $\beta_i$ 。其中， $\alpha_i$  表示热量产生的系数，而  $\beta_i$  表示热量传递的系数。

结合公式(3.7)可以知道， $\alpha_i$  和  $\beta_i$  分别是摩擦因数和温度变量前的系数，对应了热量的产生和消耗过程。在公式(3.13)和(3.14)中， $\rho, c_p$  是由抛光垫的材料特性决定的， $\chi, \gamma_1$  和  $V_r$  是由接触面材料和相对运动决定的，在 CMP 过程中可以认为并不随着时间发生改变。 $P$  为抛光过程中单位面积上的压力，在总的压力一定时，晶片与抛光垫之间的实际接触面积越大， $P$  值越小； $h_{ps}$  为抛光垫和抛光液之间热量对流传导的系数，表征当抛光液温度升高一度时单位面积上热量传递的功率，因此当抛光垫越粗糙，在接触面能够运输的抛光液越多时， $h_{ps}$  的值也将越大；而  $h$  是抛光垫的厚度，随着抛光过程的进行， $h$  将逐渐减小。根据状态变量的物理意义，并结合模型状态变量的估计结果，我们可以分析 CMP 当前的过程状态，从而实现对 CMP 过程中抛光垫状态和磨损程度的检测。

综合热量守恒模型与动态线性模型的特征，可以得到一个基于热量守恒方程的动态线性模型，该模型同时包含了 CMP 过程中的热量守恒关系与动态变化趋势。根据热量守恒模型(3.7)，定义  $X_t = [\mu(t), T_p(t) - T_{slurry}]$ ， $y_t = \frac{\partial T_p(t)}{\partial t}$ ，

$a_t = (\alpha_t, \beta_t)^T$ ，我们可以得到

$$y_t = X_t a_t + \varepsilon_t, \quad \varepsilon_t \sim N(0, H) \quad (3.15)$$

$$a_t = F_t a_{t-1} + \eta_t, \quad \eta_t \sim N(0, \Theta) \quad (3.16)$$

其中，公式(3.15)称为观测方程，用来描述系统输出  $y_t$  与不可见的状态变量  $a_t$  之间的线性变换关系；公式(3.16)称为状态方程，用于描述系统状态变量  $a_t$  的一阶马尔科夫关联结构。

在公式(3.15)到(3.16)组成的 CMP 过程动态线性热量守恒模型中， $X_t$  作为系统观测矩阵，将真实的状态空间映射到观测空间， $y_t$  作为系统观测值与输入之间为线性映射关系， $a_t$  包含  $\alpha_t$  和  $\beta_t$ ，是系统的状态变量，并且满足一阶马尔科夫条件。 $H$  是观测误差  $\varepsilon_t$  的方差， $\Theta$  是系统噪声  $\eta_t$  的协方差矩阵，在这里都假设为固定值。由于假设系统噪声  $\eta_t$  满足独立性条件， $\Theta$  为对角矩阵。此外，根据一阶马尔科夫条件，假设  $F_t$  为单位状态转移矩阵，表征了系统状态从  $t-1$  时刻到  $t$  时刻的转移。

表 3.1 模型定义中的假设以及合理性说明

模型假设	合理性说明
参数 $\alpha$ 和 $\beta$ 不再是固定值，而是随着抛光过程的进行发生动态变化，表示为 $\alpha_t$ 和 $\beta_t$	根据上一章的分析以及热量守恒模型中的参数定义，抛光压力 $P$ 、热传导系数 $h_{ps}$ 和抛光垫厚度 $h$ 等参数都将随着抛光过程发生变化，因此 $\alpha$ 和 $\beta$ 也不再为固定值
模型状态 $\alpha_t$ 和 $\beta_t$ 的动态变化满足一阶马尔科夫条件	抛光过程状态的变化是缓慢进行的，并且通常是单向的，因此可以认为在 $t$ 时刻的状态与 $t-1$ 时刻密切相关，而与之前时刻的状态无关
模型观测值 $y_t$ 是相互独立的，并且 $y_t$ 仅由状态 $a_t$ 决定	由热量守恒模型可知，观测值 $y_t$ 作为 $t$ 时刻的温度变化，仅由当前时刻的输入 $X_t$ 与系统状态 $a_t$ 决定，因此可以认为是相互独立的
观测误差 $\varepsilon_t$ 和系统噪声 $\eta_t$ 为相互独立的高斯随机向量，且均值为 0，方差 $H$ 和协方差 $\Theta$ 为固定的对角矩阵	根据热量守恒模型可知，观测误差 $\varepsilon_t$ 为模型忽略的吸放热过程的热量，可以认为是高斯随机误差；系统噪声 $\eta_t$ 为状态转移过程中的误差，由于状态转移的随机性，也可以认为 $\eta_t$ 为高斯随机误差
状态转移矩阵 $F_t$ 为单位矩阵	抛光过程状态的变化是缓慢进行的，并且通常是单向的，因此认为 $t$ 时刻的状态可以由 $t-1$ 时刻的状态与一个高斯随机误差相加得到，从而得出状态转移矩阵 $F_t$ 为单位矩阵

在模型定义过程中,我们提出了许多假设,连同其合理性说明一并列入表 3.1。定义好 CMP 过程中的动态线性模型后,关键的一步便是利用系统观测进行模型状态变量的估计以及未来观测值的预测。然而,由于模型参数矩阵  $\mathbf{H}$  和  $\mathbf{\Theta}$  通常是未知的,因此我们需要首先对参数矩阵进行估计,然后才能进行下一步的状态变量估计。

### 3.2.3 动态线性模型的参数估计

假设模型参数矩阵  $\mathbf{H}$  和  $\mathbf{\Theta}$  是由一个未知的参数向量  $\boldsymbol{\psi}$  决定的,并且通常并不随着时间而改变。在进行动态线性模型状态变量的估计之前,我们首先需要估计出系统参数向量  $\boldsymbol{\psi}$ 。这里我们介绍两种可以用于估计参数向量  $\boldsymbol{\psi}$  的参数估计方法:最大似然估计和贝叶斯估计。

#### 最大似然估计

假设有  $n$  个随机向量,  $y_1, \dots, y_n$ , 其分布是由一个未知的参数  $\boldsymbol{\psi}$  决定的。这些随机向量的观测的联合分布概率密度函数是  $p(y_1, \dots, y_n; \boldsymbol{\psi})$ 。似然函数可以定义为,在给定参数  $\boldsymbol{\psi}$  时,观测数据的概率密度函数。对于动态线性系统,观察数据的联合密度函数可以写为

$$p(y_1, \dots, y_n; \boldsymbol{\psi}) = \prod_{t=1}^n p(y_t | y_{1:t-1}; \boldsymbol{\psi}) \quad (3.17)$$

其中  $p(y_t | y_{1:t-1}; \boldsymbol{\psi})$  是在给定  $1, \dots, t-1$  时刻的观测值时观测值  $y_t$  的条件密度函数,其中假设  $\boldsymbol{\psi}$  为未知参数。从文献<sup>[74]</sup>可知,公式(3.17)的右边为高斯分布,且假设均值为  $f_t$ , 方差为  $Q_t$ 。因此,我们可以将似然函数写为

$$l(\boldsymbol{\psi}) = -\frac{1}{2} \sum_{t=1}^n \log |Q_t| - \frac{1}{2} \sum_{t=1}^n (y_t - f_t)' Q_t^{-1} (y_t - f_t) \quad (3.18)$$

通过最大化公式(3.18),我们可以得出未知参数  $\boldsymbol{\psi}$  的最大似然估计。

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = \arg \max_{\boldsymbol{\psi}} l(\boldsymbol{\psi}) \quad (3.19)$$

#### 贝叶斯估计

在使用最大似然估计得出的参数向量  $\hat{\boldsymbol{\psi}}$  进行滤波和平滑时,由于未能考虑到参数  $\boldsymbol{\psi}$  的不确定性,滤波和平滑的效果会受到影响。另一种用于动态线性模型中未知参数  $\boldsymbol{\psi}$  的估计方法是贝叶斯估计,其中未知的参数  $\boldsymbol{\psi}$  会被视为随机向量。关

于  $\psi$  的先验知识假设为概率  $\pi(\psi)$ ，因此，对于任意  $n \geq 1$ ，假设

$$(\alpha_0, \dots, \alpha_n, Y_1, \dots, Y_n, \psi) \sim \pi(\alpha_0 | \psi) \pi(\psi) \prod_{t=1}^n \pi(y_t | \alpha_t, \psi) \pi(\alpha_t | \alpha_{t-1}, \psi) \quad (3.20)$$

已知观测值  $y_{1:t}$  时，对在时刻  $s$  的未知状态  $\alpha_s$  以及未知参数的推断是通过计算器联合后验分布得出的

$$\pi(\alpha_s, \psi | y_{1:t}) = \pi(\alpha_s | \psi, y_{1:t}) \pi(\psi | y_{1:t}) \quad (3.21)$$

同样的，当  $s=t$  时，为滤波问题；当  $s > t$  时，为状态预测问题；当  $s < t$  时，为平滑问题。通过公式(3.21)可以得出  $\theta_s$  的边际条件密度函数，例如，对于滤波问题

$$\pi(\alpha_t | y_{1:t}) = \int \pi(\alpha_t | \psi, y_{1:t}) \pi(\psi | y_{1:t}) d\psi \quad (3.22)$$

通常，我们想知道系统中到时刻  $t$  的所有历史未知状态。在已知观测数据  $y_{1:t}$  的情况下，可以通过联合后验密度函数推断状态  $\alpha_{0:t}$  和系统参数  $\psi$

$$\pi(\alpha_{0:t}, \psi | y_{1:t}) = \pi(\alpha_{0:t} | \psi, y_{1:t}) \pi(\psi | y_{1:t}) \quad (3.23)$$

公式(3.23)所示的后验密度通常可以由贝叶斯法则得到。然而，由于计算量大，通常难以通过计算得出表达式。因此，通常使用马尔科夫蒙特卡洛 (Markov Chain Monte Carlo, MCMC) 或序列蒙特卡洛算法 (Sequential Monte Carlo Algorithms) 等工具进行后验分布的渐进估计，详细的算法介绍参见文献<sup>[75-77]</sup>，我们使用  $R$  语言<sup>[78]</sup>中提供的工具包 `d1m`<sup>[79]</sup>进行动态线性模型的参数估计。

### 3.2.4 Kalman 滤波器求解状态空间模型

动态线性模型的参数向量  $\psi = [H, \Theta]$  通过参数估计方法得到后，我们可以利用观测值  $y_t$  进行系统状态变量  $a_t$  的估计以及对未来观测值的预测。在动态线性模型的假设下，根据多元高斯分布的性质我们可以知道，在任意  $t \geq 1$  时刻，随机向量  $(a_0, a_1, \dots, a_t, y_1, \dots, y_t)$  的联合分布为高斯分布。并且，相应的边缘分布和条件分布也是高斯的，因此我们可以使用 Kalman 滤波器进行系统状态变量的估计。在 19 世纪 70 年代，Kalman 发表了他关于离散数据线性滤波器的递归算法的著名文章<sup>[80]</sup>，提出了后来被称为 Kalman 滤波器的算法。Kalman 滤波器是一组可以通过高效的计算（递归）来估计系统状态，同时最小化残差的数学方程式，能够非常有效地估计出历史、当前以及未来时间的系统状态，甚至在系统的参数未知

的情况下得出这些估计。

根据动态线性模型的定义，为了估计模型中的状态变量，我们需要计算条件密度  $\pi(a_s | y_{1:t})$ 。根据  $s$  值的不同，我们将问题分为三类：滤波（当  $s=t$  时）、状态预测（当  $s>t$  时）以及平滑（当  $s<t$  时）。在滤波问题中，数据根据时间先后到达，我们根据当前时刻  $t$  已经获得的所有观测数据计算系统的当前状态，也就是计算条件密度  $\pi(a_t | y_{1:t})$ ；而在平滑过程中，通常是在已经有了一段时间的观测数据后，根据这段时间的观测数据来估计系统在这段时间的状态变化，也就是计算条件分布  $\pi(a_{1:t} | y_{1:t})$ ；同样的，在预测过程中，我们基于当前时刻  $t$  已经获得的所有观测数据预测系统未来的观测，例如在一步向前预测中，通常我们可以先根据滤波过程计算下一时刻的状态密度  $\pi(a_{t+1} | y_{1:t})$ ，然后可以得到一步向前预测密度  $\pi(y_{t+1} | y_{1:t})$ 。

关于 Kalman 滤波器方程，有多种不同的表达形式。综合动态线性模型(3.15)和(3.16)，我们可以给出一种简单的表示。令  $a_{t-1} | y_{1:t-1} \sim N(\theta_{t-1}, P_{t-1})$ ，其中

$$\begin{aligned}\theta_{t-1} &= E[a_{t-1} | y_{1:t-1}] \\ P_{t-1} &= Var[a_{t-1} | y_{1:t-1}] = E[(a_{t-1} - \theta_{t-1})(a_{t-1} - \theta_{t-1})^T]\end{aligned}\quad (3.24)$$

在观测值  $y_{1:t-1}$  已知的情况下，状态变量  $a_t$  的一步向前预测服从高斯分布。根据公式(3.24)，利用  $t-1$  时刻的信息，可以得出在  $t$  时刻的状态变量及其协方差矩阵  $a_{t|t-1}$  和  $P_{t|t-1}$

$$\begin{aligned}\theta_{t|t-1} &= E[a_t | y_{1:t-1}] = F_t \theta_{t-1} \\ P_{t|t-1} &= Var[a_t | y_{1:t-1}] = F_t P_{t-1} F_t^T + \Theta\end{aligned}\quad (3.25)$$

同样的，在  $y_{1:t-1}$  已知时，观测值  $y_t$  的一步向前预测也服从高斯分布，且有

$$\begin{aligned}g_t &= E[y_t | y_{1:t-1}] = X_t \theta_{t|t-1} \\ G_t &= Var[y_t | y_{1:t-1}] = X_t P_{t|t-1} X_t^T + H\end{aligned}\quad (3.26)$$

令  $K_t = P_{t|t-1} X_t^T G_t^{-1}$ ，当在  $t$  时刻出现新的观测值  $y_t$  时， $\theta_t$  和  $P_t$  可以由以下公式迭代更新

$$\begin{aligned}\theta_t &= E[\theta_t | y_{1:t}] = \theta_{t|t-1} + K_t (y_t - X_t \theta_{t|t-1}) \\ P_t &= Var[\theta_t | y_{1:t}] = P_{t|t-1} - K_t X_t P_{t|t-1}\end{aligned}\quad (3.27)$$

其中， $K_t$  被称为 Kalman 最佳增益，可以得到最小化的均方误差。公式(3.25)到公式(3.27)组成了 Kalman 滤波方法（详细证明过程见附录 A）。其中，公式(3.25)

为时间更新部分，可以对当前时间点的状态做出提前预测；公式(3.27)为观测更新部分，可以通过当前时间点的实际观测值来更新当前状态，两部分可以递推地得出 Kalman 滤波和预测结果。

由于 CMP 过程变量温度和摩擦系数分别是由抛光机和红外线摄像机自动采集的，并且每个样本包含整个 CMP 抛光过程的数据。因此，我们可以使用 Kalman 平滑方法进行过程状态变量的估计，在由公式(3.15)和(3.16)定义的动态线性模型中，如果  $a_{t+1} | y_{1:T} \sim N(s_{t+1}, S_{t+1})$ ，那么可以证明  $a_t | y_{1:T} \sim N(s_t, S_t)$ （详细证明过程见附录 B），其中

$$\begin{aligned} s_t &= \theta_t + P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (s_{t+1} - \theta_{t+1|t}) \\ S_t &= P_t - P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (P_{t+1|t} - S_{t+1}) P_{t+1|t}^{-1} F_{t+1} P_t \end{aligned} \quad (3.28)$$

根据公式(3.28)，我们可以先利用 Kalman 滤波方法计算  $t = T$  时刻  $a_t | y_{1:T}$  的分布，也就是  $a_T | y_{1:T} \sim N(s_T = \theta_T, S_T = P_T)$ ，然后向前回溯地计算  $t = T-1$ ， $t = T-2, \dots, t=1$  等时刻  $a_t | y_{1:T}$  的分布。

## 小结

本章通过考虑 CMP 过程中的热量产生和消耗过程，提出了一个基于热量守恒关系的动态线性模型，该模型同时包含了 CMP 过程中的热量守恒关系与过程参数的动态变化趋势。这一模型由两个部分组成：一是通过动力学和热力学分析建立起机械摩擦与热量传递的静态热量守恒模型；二是考虑 CMP 过程状态的变化，将静态的热量守恒模型推广到动态线性模型，并利用 Kalman 滤波器方法检测该模型的参数变化。

首先，我们从热量流动的角度分析了 CMP 过程中的热量来源及其流向。并利用运动学分析得到了摩擦产生能量的定量关系。此外，根据文献分析发现，化学反应产生和消耗的能量仅占到全部能量非常小的一部分，通常可以忽略。另外，我们通过热传导和对流分析了被抛光垫和抛光液吸收的部分热量，并根据热量守恒方程建立了 CMP 过程中的静态热量流动模型。

然后，我们通过对抛光过程中关键因素和过程变量的动态变化趋势进行分析，提出了综合热量守恒方程与动态线性模型进行 CMP 过程状况检测的方法。通过合理的模型假设，我们建立了 CMP 过程的动态线性模型，并给出了模型表达式以及参数定义。

最后，我们介绍了对动态线性模型状态变量进行估计的 Kalman 滤波器方法，并分别说明了使用 Kalman 滤波器进行滤波、平滑和预测的方法。此外，在动态

线性模型参数向量未知的情况下,需要对参数向量进行估计,然后才能使 Kalman 滤波器方法,我们介绍了用于对参数向量进行估计的最大似然估计方法和贝叶斯方法。

利用本章中介绍的 CMP 过程动态线性模型和对模型状态变量进行估计的 Kalman 滤波器方法,我们可以实现对 CMP 的过程状态进行检测。下一章中,我们将通过试验设计收集 CMP 过程数据,并利用仿真分析验证热量守恒模型的有效性。



## 第四章 试验设计和仿真分析

在这一部分，我们进行试验设计和仿真分析，利用实际数据和仿真结果的对比验证上一章中提出的 CMP 过程热量守恒模型。通过试验设计我们可以获得在不同试验条件下的 CMP 过程变量数据，以用于验证在不同的抛光垫表面状况和老化情况下，模型状态变量具有不同的大小和动态变化趋势。此外，在仿真分析中，我们利用试验过程中获取到的过程变量 COF，结合热量守恒模型预测 CMP 过程温度的变化，通过与实际试验过程中采集到的温度信号进行对比，验证模型的有效性。

### 4.1 试验设计

为了验证所提出的 CMP 过程动态线性模型的有效性，我们进行了多组试验，并获取其中的过程变量数据如温度和 COF 信号等。在这些试验过程中，我们使用具有不同大小金刚石颗粒的修整器进行抛光垫打磨，以得到欠打磨、适度打磨、过度打磨三种状态的抛光垫。这三组抛光垫将具有不同的表面粗糙程度和抛光能力，并且在 CMP 过程中的老化速度和趋势也将显著不同。

试验中采用 CETR 公司生产的台式 CP-4 抛光机，及 Rodel 公司生产的直径 6 英寸的 IC 1000-A4 聚氨酯抛光垫。晶片直径为 2 英寸，并且被固定在抛光头上与抛光垫同时进行逆时针旋转。此外，为避免接触面局部过热，晶片沿着抛光垫半径方向进行来回移动，移动速度为 3mm/s，周期为 5s。CMP 过程中采用过氧化氢含量为 2.5%的 Cabot 5001 铜抛光液，以固定速率 50mL/min 被输送到抛光垫中央。抛光液温度通过 Corning 公司生产的温度控制器控制在 25℃。试验过程中的其它参数见表 4.1。

表 4.1 试验参数

参数	说明
晶片	LG Siltron 硅晶片，直径 2 英寸
抛光垫	IC 1000-A4 抛光垫，直径 6 英寸
抛光液	Cabot 5001 铜抛光液
氧化剂	过氧化氢

修整器	金刚石修整器
抛光垫修整	压力: 2psi 转速: 150 rpm
抛光液流速	50 mL/min
抛光头转速	150 rpm
抛光垫转速	145 rpm

根据试验中所使用的修整器上金刚石颗粒直径大小的不同,我们一共进行了三组试验,分别使用金刚石颗粒直径为 0.25, 8 和 100  $\mu\text{m}$  的修整器(如图 4.1 所示)进行抛光垫的修整打磨。在每组试验中,抛光垫首先经过时长 20 分钟的预打磨,并使用样品晶片进行 1 分钟的抛光,再经过 20 分钟的修整后,完成对抛光垫的初始化。然后,用初始化好的抛光垫进行连续两次持续 2 分钟的晶片抛光,其间使用修整器进行 20 分钟的表面修整,以加速抛光垫的老化和磨损。我们在三组试验中分别进行了 2 次晶片抛光,一共得到 6 组数据。

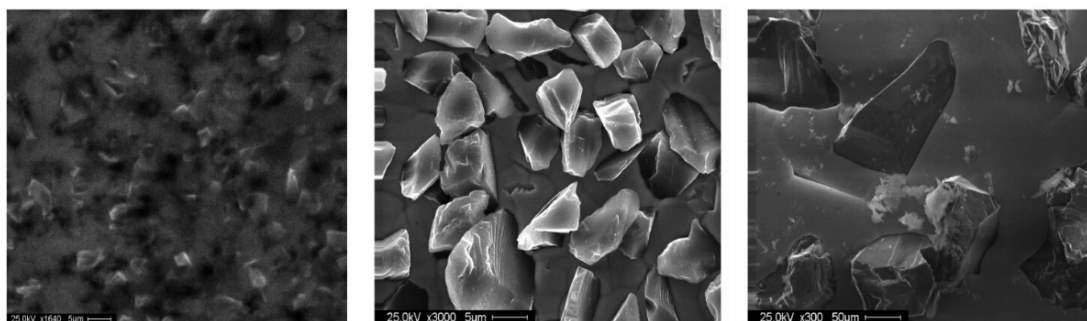


图 4.1 显微镜下具有不同直径金刚石颗粒的修整器图像(从左到右金刚石颗粒直径分别为 0.25, 8 和 100  $\mu\text{m}$ )

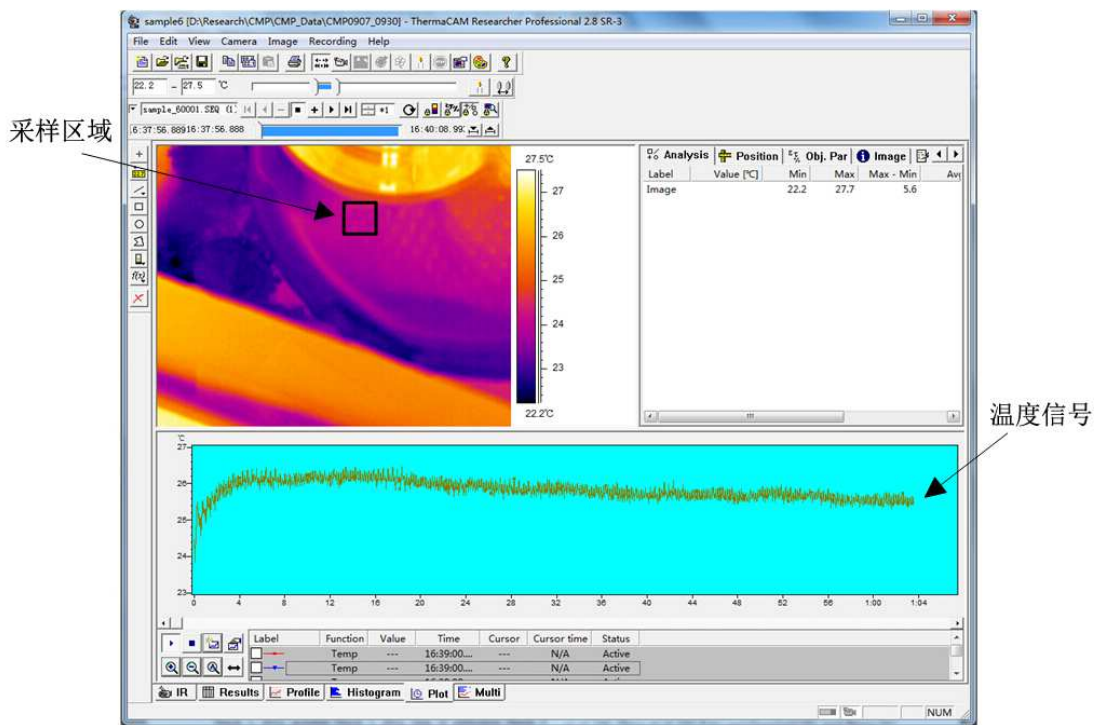


图 4.2 试验设计中温度信号的提取

每组抛光过程中的过程变量 COF 和抛光垫表面温度分布都被记录下来。COF 作为切向力和正向压力的比值通过抛光机上的传感器记录，采样频率为 50Hz。与此同时，一台红外线温度摄像机同步地记录下抛光垫表面的温度分布。图 4.2 所示为红外线温度摄像机记录下的抛光垫表面温度和曲线。根据文献介绍，我们选取了晶片边缘的一小块区域，并提取该区域的温度均值<sup>[26]</sup>。

图 4.3 所示为 CMP 试验过程中记录下的三组温度和 COF 信号。图中左边所示为温度信号，右边为 COF 信号。图中上、中、下三行分别对应使用金刚石颗粒直径为 0.25, 8, 100  $\mu\text{m}$  的修整器进行抛光垫修整的三组试验。可以发现，这三组试验数据具有相同的变化趋势，仅从这些信号的观察中难以发现三组过程的明显差异。

在每一组 CMP 试验完成之后，我们使用光学显微镜对抛光后的晶片表面进行成像（如图 4.4 所示）。从三组试验后的晶片表面成像结果可以看出，使用被具有较大直径金刚石颗粒的修整器打磨后的抛光垫进行抛光后的晶片，其表面划伤也更多，并且划痕的宽度也更宽。这是因为，使用金刚石颗粒更大的修整器修整后的抛光垫，其表面粗糙程度也更大。

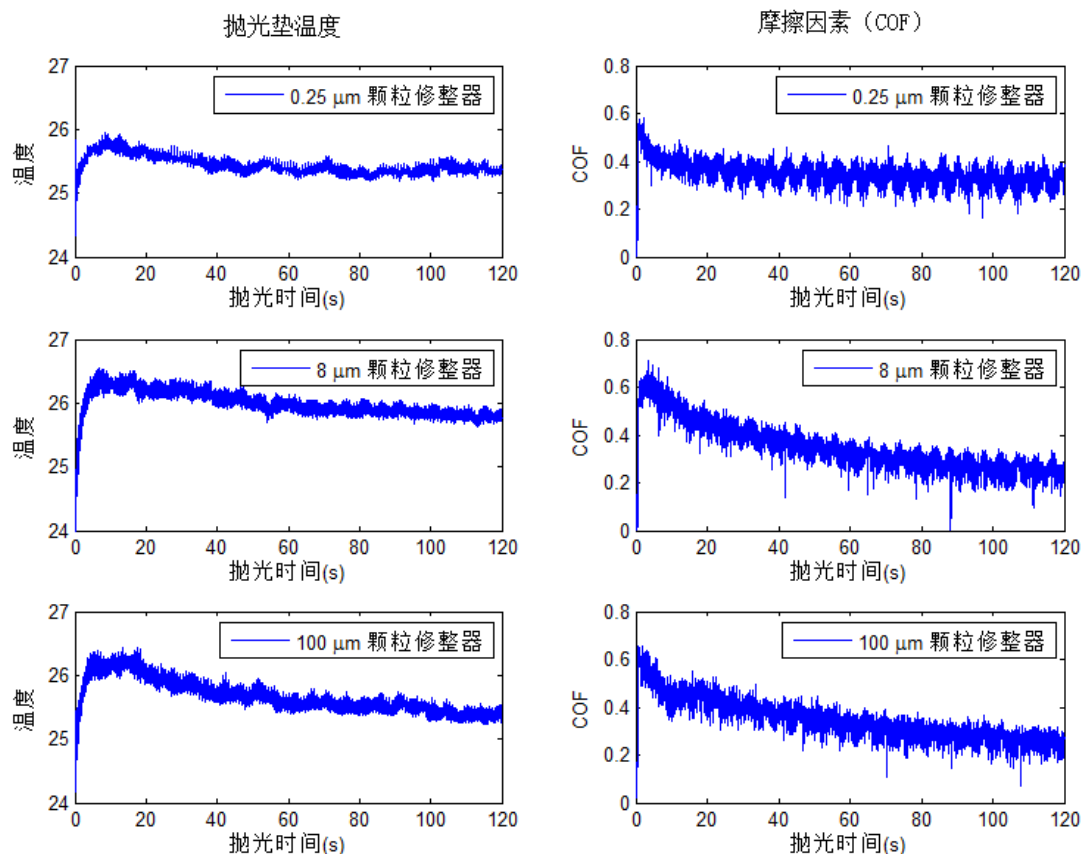
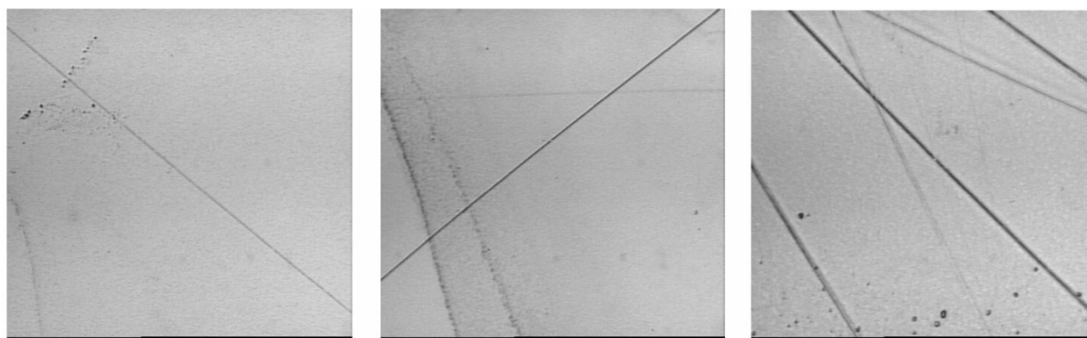


图 4.3 试验过程中获取的三组温度和 COF 信号


 图 4.4 使用被不同大小金刚石颗粒的修整器打磨后的抛光垫进行抛光后的晶片表面图像（从左到右使用的修整器金刚石颗粒直径分别为 0.25, 8 和 100  $\mu\text{m}$ ）

## 4.2 CMP 热量守恒模型的仿真分析

上一章中介绍了描述 CMP 过程中热量产生、流动和消耗的热量守恒模型(公式 3.7)。这一节中我们将利用这一模型进行 CMP 抛光过程中的温度预测, 并结

合试验设计中实际获得的温度值，通过对比验证热量守恒模型的有效性。

在仿真过程中，我们使用从试验设计中获得的摩擦因数信号，并利用热量守恒方程进行抛光垫表面温度的预测。作为仿真结果的验证，我们使用试验过程中真实测量的温度值与仿真的预测值进行对比。

仿真过程中的参数设置综合了试验设计中的参数，并参考文献<sup>[39]</sup>中的介绍，详细参数见表 4.2。

表 4.2 热量守恒模型仿真中的参数设置

参数	值
仿真时间	120 s
最小时间间隔	0.02 s
抛光垫厚度	1.27e-3 m
抛光垫密度	7.1e+2 kg/m <sup>3</sup>
抛光垫比热	0.2e+3 J/(kg*K)
抛光垫转速	145 rpm
抛光垫吸热比例	0.3
抛光垫与抛光液之间的热传导系数	4.06e+1 W/m <sup>2</sup> °C
晶片中心与抛光垫中心的距离	7.62e-2 m
晶片转速	150 rpm
抛光头压力	2e+3 N/m <sup>2</sup>
抛光液温度	25°C

显然，抛光垫表面的温度分布取决于抛光的时间 $t$ 和离抛光垫中心的距离 $r$ 。例如，当 $t=60s$ 时仿真得到的抛光垫右上角的表面温度分布如图 4.5 所示。从图中可以看出，在同一时刻，抛光垫表面温度随着距垫中心的距离先增大，再逐渐减小，并且在抛光垫表面呈现环状分布。



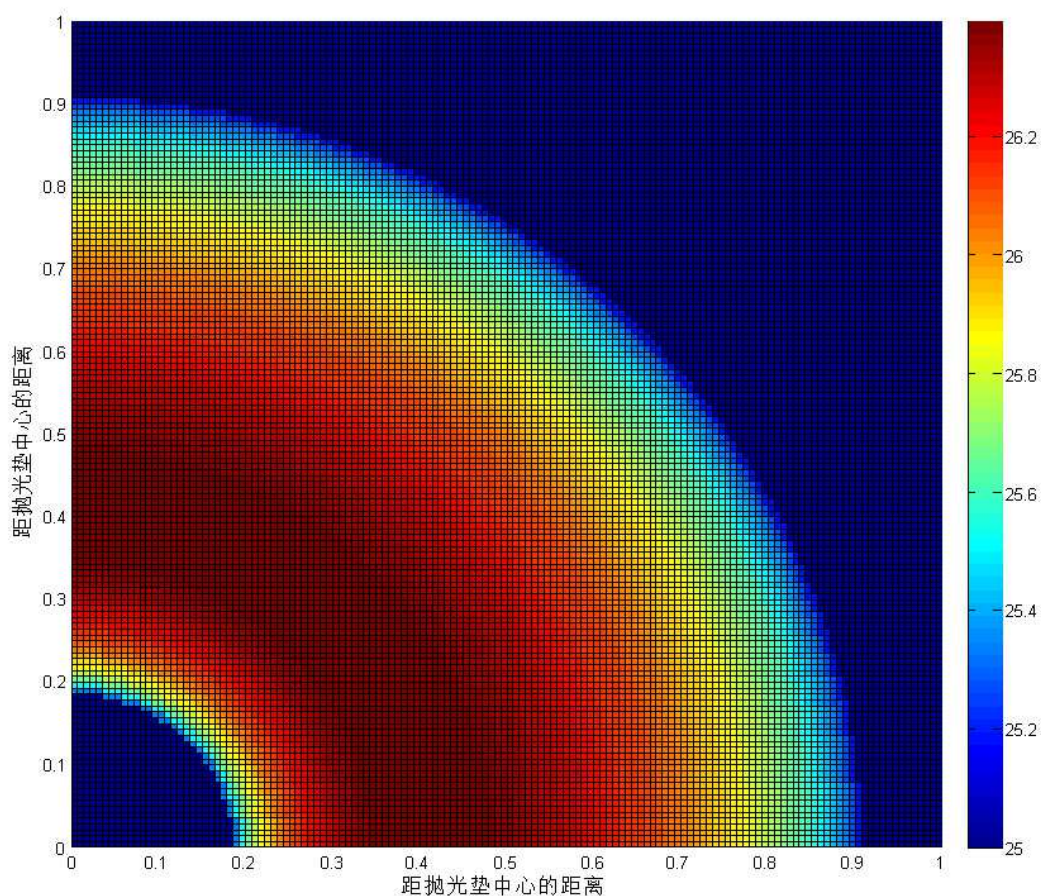


图 4.5  $t = 60s$  时抛光垫右上角温度分布仿真结果

对离抛光垫中心一定距离的点进行分析，我们可以得到该点的温度曲线。图 4.6 所示为抛光垫上固定点的实际温度与仿真分析结果的对比。从图中可以看出，仿真结果与实际温度曲线具有相同的变化趋势，都是先随时间迅速增大，然后缓慢减小。然而，仿真分析结果无法捕捉到实际温度信号中的动态变化和局部波动，这是因为在仿真模型中，我们使用固定的过程变量来进行温度分布的预测，而在实际过程中，CMP 过程变量将会发生动态变化，导致模型无法准确预测。

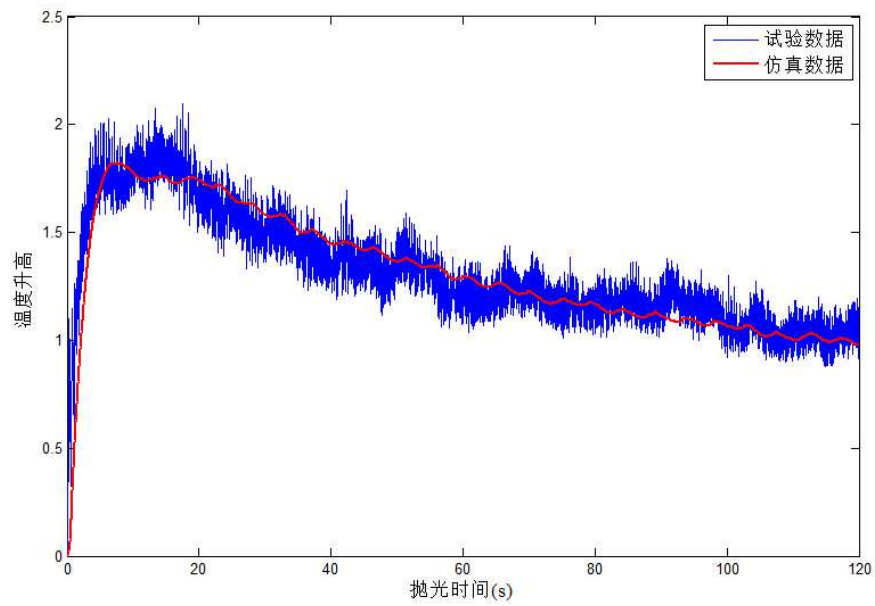


图 4.6 仿真分析与试验过程中的温度曲线

此外，选取抛光垫上固定的几个点进行分析，我们可以得到在任意时间 $t$ 时离抛光垫中心不同位置点的温度分布曲线（如图 4.7 所示）。从图中可以看出，仿真结果与实际温度分布具有相同的变化趋势，都是随着离抛光垫中心的距离增大先上升到最大，然后逐渐减小。

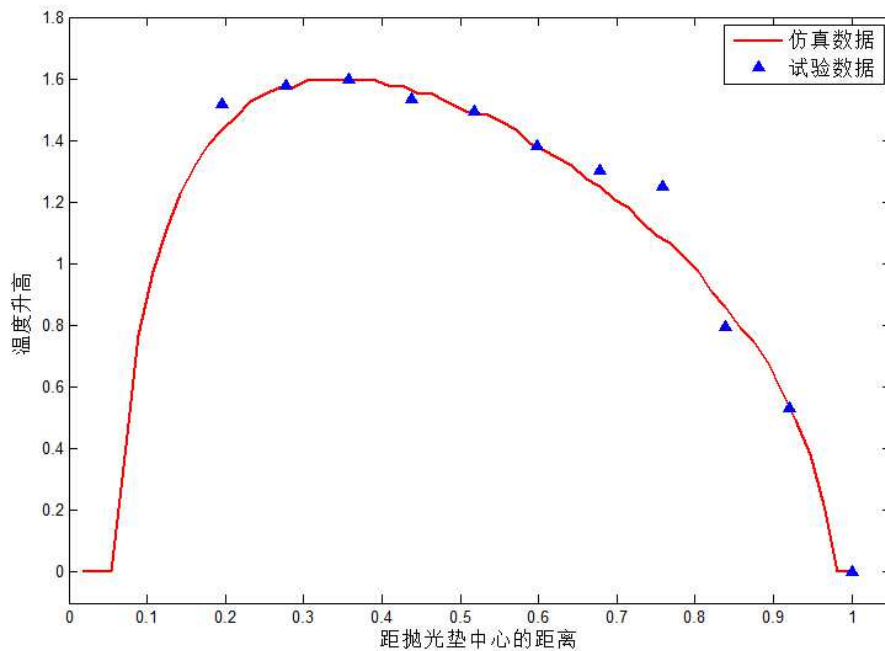


图 4.7 距离抛光垫中心不同位置点的温度分布

从仿真结果与试验数据的比较验证中，我们可以看出，所提出的热量流动与守恒模型既能够有效地描述抛光垫上固定点的温度曲线，同时也能分析在任意时刻，沿抛光垫半径的温度分布。

## 小结

这一章中，我们进行了试验设计以获得模型的验证数据，并通过仿真分析和试验数据的对比得出了模型有效的结论。

在试验设计中，我们通过三组试验得到了在使用不同的修整器进行打磨时，所得到的不同表面状态的抛光垫进行 CMP 磨削的过程变量数据（温度和摩擦因数）。在热量守恒模型仿真分析中，我们利用模型分析了抛光垫表面温度随着时间和离垫中心距离的变化趋势。

通过对比仿真结果与试验数据，我们可以发现，所提出的热量守恒模型能够很好的描述 CMP 过程中的抛光垫表面温度的分布和变化趋势。然而，仿真模型并不能有效地捕捉到温度的局部波动和动态变化，这可能是由于在仿真模型中，我们使用固定的过程参数，而在实际试验和生产过程中，CMP 的过程参数将会随着抛光的进行发生动态变化。因此，只有通过对 CMP 的动态过程变量进行有效的估计，才能有助于更好的理解抛光过程的变化，并用于抛光状态的检测。



## 第五章 基于动态线性模型的抛光过程状态检测

上一章的模型仿真结果与试验设计数据对比分析说明,所提出的热量守恒模型能够有效地描述 CMP 过程中的热量流动并预测抛光垫上的温度分布和变化趋势。这一章中,我们将首先利用仿真数据对 Kalman 滤波器方法在进行动态线性模型状态变量估计中的有效性进行验证。然后,我们将试验设计中收集到的过程变量数据如摩擦因数、抛光垫表面温度等引入提出的基于热量流动的动态线性模型,并利用 Kalman 滤波器方法进行模型状态变量的估计,以实现 CMP 抛光过程状态的检测。

### 5.1 动态线性模型状态变量估计的仿真验证

我们使用模型仿真的方法验证 Kalman 滤波器方法在进行动态线性模型状态变量估计中的作用。在仿真模型中,过程状态变量以及作为输入的时序变量可以通过仿真过程生成,状态变量的动态变化过程也可以设置。

与上文提出的模型具有相同的形式,我们建立仿真模型如下

$$y(t) = \alpha_t x_1(t) + \beta_t x_2(t) + \xi_t \quad (5.1)$$

$$\alpha_t \sim GP(\mu_1(t), \Sigma_1(t)) \quad (5.2)$$

$$\beta_t \sim GP(\mu_2(t), \Sigma_2(t)) \quad (5.3)$$

其中,  $x_1(t)$  和  $x_2(t)$  是由仿真过程生成的 ARMA(1,1)过程,作为系统输入的时序变量。状态变量  $\alpha_t$  和  $\beta_t$  都是设定为高斯过程,其中  $\mu_1(t)$  和  $\mu_2(t)$  分别是  $\alpha_t$  和  $\beta_t$  的时变均值函数,并满足一阶马尔科夫条件。 $\Sigma_1(t)$  和  $\Sigma_2(t)$  是协方差函数,在这里假设为固定值。此外,模型的观测噪声  $\xi_t \sim N(0, H_t)$ , 其中  $H_t$  设置为不随时间变化的固定值。

仿真过程中,我们考虑实际 CMP 过程中通常会遇到的两种状态变量变化情景:一是状态变量按照一阶马尔科夫动态特性正常变化,二是当状态变量在抛光过程中发生突然偏移或持续漂移的情况。此外,状态变量的方差以及观测噪声的方差都假设为未知的,并使用上述介绍的最大似然估计方法进行估计。然后,分别使用 Kalman 滤波(filtering)和平滑(smoothing)方法对模型的状态变量进行估计。

在正常情况下，均值函数  $\mu_1(t)$  和  $\mu_2(t)$  如模型假设中一致，由高斯随机过程产生。图 5.1 所示为状态变量的估计结果。我们可以看出，Kalman 滤波和平滑方法都能够捕捉到状态变量的动态变化，并且滤波方法对状态变量的变化更加敏感，而 Kalman 平滑方法则可以得到更为稳定和平滑的估计结果。

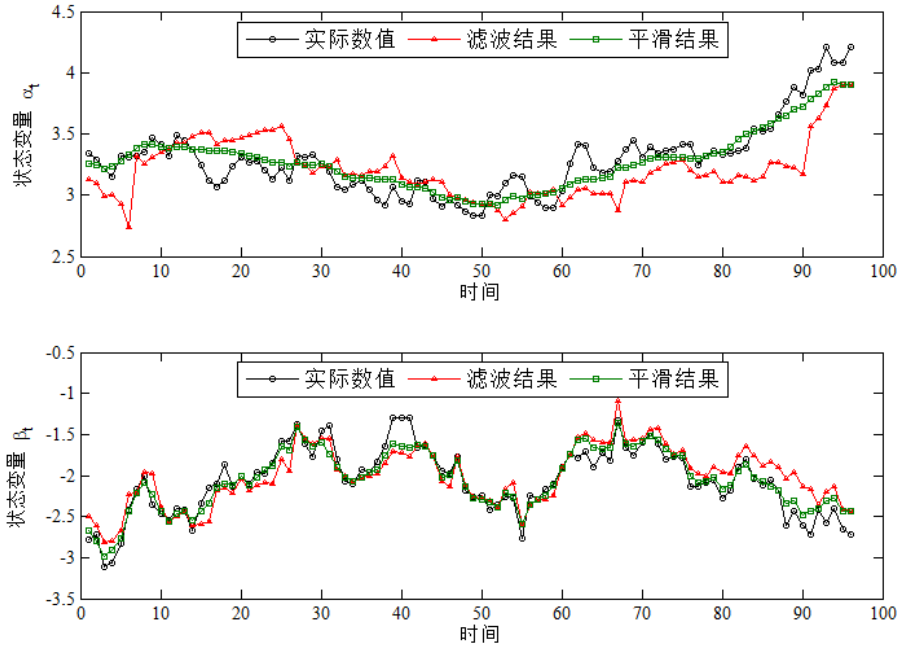


图 5.1 正常情况下状态变量的估计

上文中已经提到，随着 CMP 过程的进行，抛光垫表面状态和磨损程度将发生持续改变，这通常会导致模型状态变量的突然偏移或持续的漂移。因此我们在这里同时也对 Kalman 滤波器在状态变量发生异常波动状况下的有效性进行验证。例如，当实际的状态变量均值函数变为

$$\mu'_1(t) = \mu_1(t) + d \quad (5.4)$$

$$\mu'_2(t) = \mu_2(t) + \delta t \quad (5.5)$$

其中，模型的均值函数  $\mu_1(t)$  和  $\mu_2(t)$ ，协方差函数  $\Sigma_1(t)$  和  $\Sigma_2(t)$  与正常情况下是一致的。 $d$  是状态变量  $\mu'_1(t)$  发生突然的均值偏移的幅度，当  $t < k$  时，有  $d = 0$ ； $t > k$  时，有  $d > 0$ 。状态变量  $\mu'_2(t)$  将随着时间发生持续的漂移， $\delta$  是其发生持续漂移的斜率。

图 5.2 所示为在这一情况下的状态变量估计结果。从图中可以看出，Kalman 滤波和平滑方法都能够识别状态变量均值发生突然偏移和持续漂移的情况，并且很好的捕捉到状态变量发生变化的趋势。然而，Kalamn 滤波方法结果中出现了

检测时间的延迟和局部波动过大的问题，而 Kalman 平滑方法对于突然偏移的情况能够更加及时的检测，并且估计结果也更为稳定和平滑。

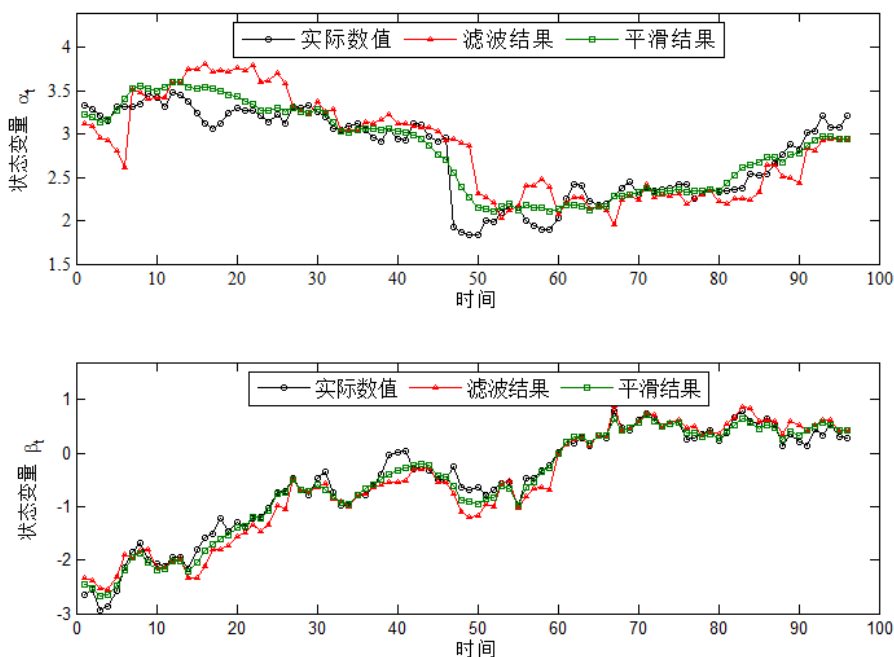


图 5.2 当状态变量发生突然偏移和持续漂移时的估计

从仿真模型的验证结果来看，Kalman 滤波器对两种情况下的动态线性模型状态变量的估计是有效的。然而，Kalman 滤波方法在状态变量的估计上具有较大的波动性并且当状态变量发生均值偏移时存在检测延迟。Kalman 平滑方法则在两种情况下都能够准确有效的估计状态变量的动态变化，而且在状态变量发生突然偏移时能够更快速的捕捉到状态变量的变化，此外，估计结果也更为平滑和稳定。因此，我们在接下来的数据验证中采用 Kalman 平滑的状态变量估计方法。

## 5.2 CMP 动态线性模型用于试验数据

上一节中，我们利用仿真模型和数据验证了 Kalman 滤波器方法在动态线性模型状态变量估计中的有效性。这一节中，我们将使用试验设计中获取的真实过程变量数据，利用 Kalman 滤波器方法对 CMP 动态线性模型中的状态变量进行估计，以实现 CMP 抛光过程状态的检测。

在试验设计中，我们进行了三组试验，在三组试验中唯一的区别是分别使用金刚石颗粒大小为 0.25, 8 和 100  $\mu\text{m}$  的修整器进行抛光垫的打磨，造成三组试验条件下抛光垫粗糙程度以及老化速度的显著差异。在每一组试验条件下，我们连

续进行了两次试验，并在其间使用与该组试验同样的修整器进行持续 20 分钟的抛光垫打磨，打磨强度将加速抛光垫的老化。在三组试验条件下我们共可以得到六组过程变量数据样本。

文献<sup>[81,82]</sup>指出，修整器上的金刚石颗粒大小对修整后的抛光垫表面粗糙程度有显著的影响。在相同的修整时间和颗粒密度下，金刚石颗粒直径越大，抛光垫将具有更大的表面粗糙程度和沟槽深度。然而，过度的修整器打磨将会加速抛光垫的退化并造成磨损，使得抛光垫无法保持足够的抛光性能。因此，通过试验设计中获取的六个数据样本，我们不仅可以分析三组试验条件下抛光垫粗糙程度对动态线性模型状态变量的影响，也可以分析随着抛光过程的进行和抛光垫的退化磨损，模型状态变量的动态变化趋势。

图 5.3 所示为在三组试验条件下动态线性模型中状态变量的变化。显然，状态变量  $\alpha_i$  始终为正值，而状态变量  $\beta_i$  始终为负值，这是由热量流动模型方程的物理性质决定的。从图中可以看出，当修整器上的金刚石颗粒直径越大时（将获得更大的抛光垫表面粗糙程度），状态变量  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  都将越大。此外，在金刚石颗粒直径较大的情况下，随着抛光过程的进行， $\alpha_i$  表现出持续的下降趋势，而  $\beta_i$  则表现出小幅度的增大。在金刚石颗粒直径较小的情况下， $\alpha_i$  和  $\beta_i$  几乎始终保持稳定的值，并未表现出明显的变化。

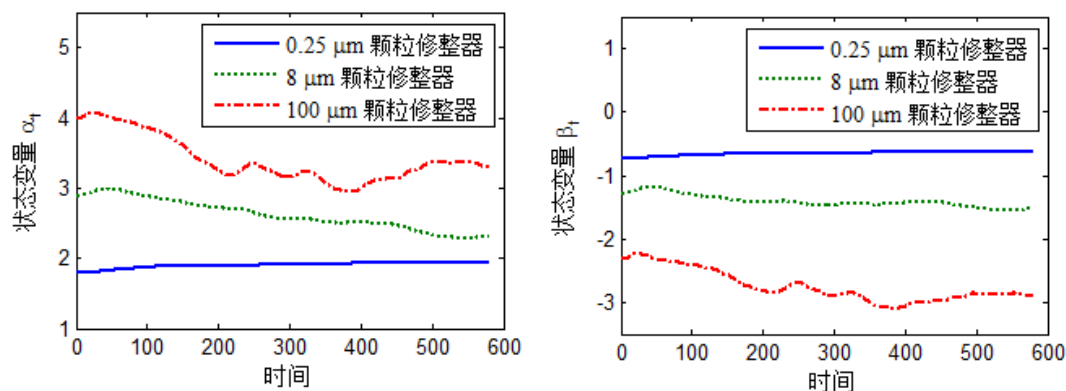


图 5.3 不同试验条件下的状态变量变化趋势

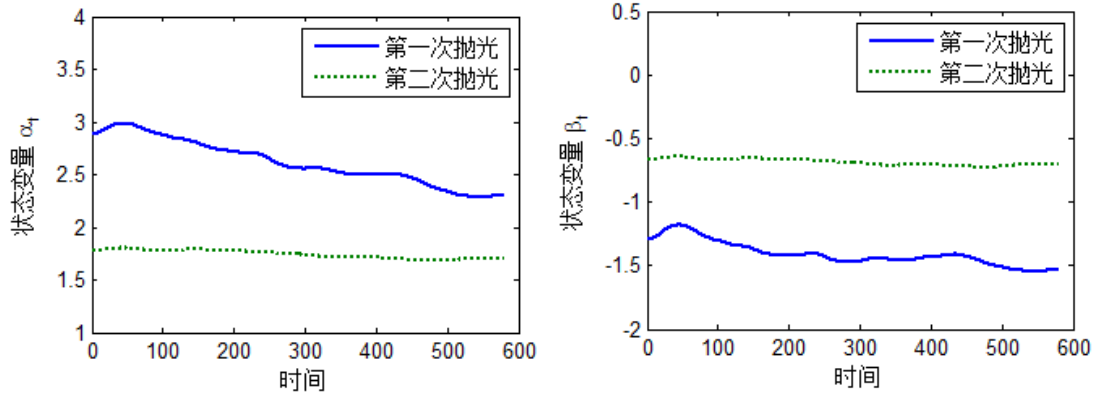


图 5.4 不同抛光顺序下的状态变量变化趋势

图 5.4 所示为在同一组试验条件下，前后两次抛光过程中估计出的动态线性模型中状态变量的变化。从图中可以看出，在第一次抛光试验中（抛光垫退化和磨损程度较轻），估计出的状态变量  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  更大。此外，在第一次抛光试验中， $\alpha_i$  表现出减小的趋势，而  $\beta_i$  则有缓慢增大的趋势。而在第二次抛光试验中， $\alpha_i$  和  $\beta_i$  并未表现出明显的变化趋势。

### 5.3 结果分析和讨论

根据公式(3.13)和公式(3.14)可知，CMP 过程的动态线性模型中的状态变量  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  分别是摩擦因数和温度变量前的系数，并分别对应了 CMP 过程热量的产生和消耗过程。根据  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  的物理意义，通过对  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  的动态变化过程进行监控，我们可以检测当前 CMP 过程中抛光过程状态的变化。

对状态变量  $\alpha_i$ ， $\chi_r$  和  $V_r$  是由抛光垫和晶片间的相对位置和转速决定的固定值， $\gamma_i$  是通过摩擦产生的热量中进入抛光垫中部分的比例，由接触面的材料属性决定，通常被认为固定值。 $\rho$  和  $c_p$  是抛光垫的材料属性，也被认为是固定不变的值。因此，状态变量  $\alpha_i$  的主要变化是由抛光头对抛光垫上单位面积的压力  $P$  引起的。在 CMP 过程中，随着抛光垫的物理性质如硬度、剪切模量、弹性模量等发生变化，以及抛光垫粗糙程度的降低，将造成抛光垫和晶片之间实际接触面积增大。在抛光头压力固定的情况下，单位面积上的压力  $P$  将逐渐减小，因此导致了在三组不同的试验条件下， $\alpha_i$  表现出的大小关系以及随着 CMP 过程的进行， $\alpha_i$  逐渐减小的趋势。

对状态变量  $\beta_i$ ， $h_{ps}$  是指当抛光液温度上升一个单位时，抛光垫上单位面积上传导到抛光液中热量的功率 ( $W/m^2 \cdot ^\circ C$ )。当抛光垫的表面越粗糙或抛光垫表面沟槽越深时，在抛光垫表面固定面积上将能运输更多的抛光液，从而提高热量

交换的功率,  $h_{ps}$  也将越大。因此说明了在三组不同的试验条件下,  $\beta_i$  表现出的大小关系。此外, CMP 抛光过程中状态变量  $\beta_i$  缓慢增大的趋势, 则可能是由于随着抛光垫的退化和磨损, 抛光垫厚度  $h$  的减小造成的。

另外, 当抛光垫打磨不足时 ( $0.25\ \mu\text{m}$  颗粒修整器进行打磨的情况), 或者抛光垫已经处于严重磨损状态时 (第二次抛光), 抛光垫将由于其材料物理性质的变化或粗糙程度的严重不足导致失去其抛光能力<sup>[38,58]</sup>, 因此导致  $\alpha_i$  和  $\beta_i$  都非常小, 并且并未出现明显的变化。

## 小结

本章中, 我们首先使用模型仿真的方法验证了 Kalman 滤波器方法在动态线性模型状态变量估计中的有效性。并且利用试验中收集到的过程变量数据如摩擦因数、抛光垫表面温度等, 使用 Kalman 滤波器对 CMP 过程中的动态线性模型进行状态变量估计。

从模型仿真验证的结果看, Kalman 滤波器方法在过程状态变量正常变化和发生突然偏移和持续漂移的状况下都能做出较好的估计。并且, 与 Kalman 滤波方法相比, 采用 Kalman 平滑方法能够得到更加稳定和平滑的估计结果。

在利用试验设计数据进行模型状态变量的估计结果来看, 利用 Kalman 滤波器和提出的 CMP 过程动态线性模型能够有效地估计模型中的状态变量的动态变化。并且, 通过介绍的 CMP 过程动态线性模型, 我们不仅可以分析在不同的抛光垫粗糙程度下, 状态变量所受的影响和变化趋势, 也可以分析随着抛光过程的进行和抛光垫的退化磨损, 状态变量的动态变化趋势。

由于 CMP 动态线性模型中的状态变量具有明显的物理意义, 可以作为抛光垫表面粗糙程度以及抛光垫磨损程度的表征, 因此, 通过对模型状态变量的估计, 我们可以实现对 CMP 过程中抛光垫表面状态和磨损程度的检测。

## 结论与展望

化学机械平坦化 (Chemical Mechanical Planarization, CMP) 是半导体制造过程中的一项关键过程工艺, 也是唯一能够实现晶片表面全局平坦化的技术方法, 对于高集成度趋势下的半导体制造过程有着重要的意义。

本文首先介绍了半导体产业的发展以及 CMP 的原理和技术, 通过分析大量国内外文献说明了 CMP 技术的研究现状与发展趋势。目前针对 CMP 工艺过程的研究中, 一个重要的领域是抛光过程状态的检测, 例如抛光垫表面粗糙程度和磨损程度的检测。随着抛光次数的增多以及抛光垫的修整, 会造成抛光垫表面不可逆的磨损, 因此需要定期修整和更换抛光垫。如果能够有效地检测抛光垫的老化和磨损状态, 及时进行修整, 并在抛光垫达到临界使用寿命时进行更换, 可以避免造成晶片质量缺陷和材料浪费。

本文通过对 CMP 过程各个环节中影响平坦化效果的关键因素和过程变量进行总结分析, 得到了 CMP 过程中的主要影响因素及其影响程度。然后, 结合文献提出的静态热量守恒模型, 考虑机械摩擦作用和热量传导机制以及过程参数的动态变化, 提出了基于热量流动的动态线性模型。通过仿真分析和试验设计的结果对比, 证实了本文提出的热量守恒模型在进行抛光垫表面温度分布预测中的有效性。此外, 仿真分析中, 我们利用仿真的动态线性模型验证了 Kalman 滤波器方法在进行模型状态变量估计中的有效作用。最后, 利用试验设计中获得的数据进行模型状态变量的估计结果表明, 提出的模型不仅能很好地检测 CMP 过程中的抛光垫表面状态, 也能够有效地检测抛光垫的磨损程度。

然而, 从结果来看, 通过估计所提出的模型的状态变量并不能有效区分抛光垫的欠打磨状态和过度磨损状态, 这可能是由于在这两种状态下, 抛光垫具有相似的表面粗糙程度引起的。此外, 本文提出的 CMP 过程动态线性模型提供了一种抛光垫表面状态检测的方法, 但为了实现抛光过程的在线诊断以及准确判断抛光垫的打磨和替换时间, 仍然需要进一步的研究。





## 参考文献

- [1] Parshuram B. Zantye, Ashok Kumar A. K., Chemical mechanical planarization for microelectronics applications [M], 2004: 89-220.
- [2] Chamness Lara, 2011: A look back at the semiconductor equipment and materials market and outlook [M].
- [3] Jin Wu, China will invest 120 billion in integrated circuits [M], 2014.
- [4] Chai Nobunaga, Digitimes Research: China unveils new semiconductor industry development guidelines [M], 2014.
- [5] Wikipedia, Moore's law [M].
- [6] Watanabe Masaharu, Kramer Scott, 450 mm silicon: An opportunity and wafer scaling[J], Interface-Electrochemical Society, 2006, 15(4): 28-32.
- [7] Jiao Y. B., Liao X. Y., Wu C. H. et al., Tribological, Thermal and Kinetic Attributes of 300 vs 450 mm Chemical Mechanical Planarization Processes[J], Journal of the Electrochemical Society, 2012, 159(3): H255-H259.
- [8] Quirk Michael, Serda Julian, Semiconductor manufacturing technology[M], Prentice Hall NJ, USA, 2001.
- [9] Kondo S., Sakuma N., Homma Y. et al., Abrasive-free polishing for copper damascene interconnection[J], Journal of the Electrochemical Society, 2000, 147(10): 3907-3913.
- [10] Willardson Robert K., Weber Eicke R., Li Shin M. Hwa et al., Chemical mechanical polishing in silicon processing[M], Academic Press, 1999.
- [11] Steigerwald Joseph M., Murarka Shyam P., Gutmann Ronald J., Chemical mechanical planarization of microelectronic materials[M], John Wiley & Sons, 2008.
- [12] 苏建修, 郭东明, 康仁科等. ULSI 制造中硅片化学机械抛光的运动机理[J], 半导体学报, 2005(03): 606-612.
- [13] Directindustry, [http://img.directindustry.com/images\\_di/photo-g/mechanical-chemical-polishing-machine-single-sided-54360-6329567.jpg](http://img.directindustry.com/images_di/photo-g/mechanical-chemical-polishing-machine-single-sided-54360-6329567.jpg)[M].
- [14] 周国安, 柳滨, 王学军等. CMP 加工过程去除率的影响因素研究[J], 电子工业专用设备, 2008(01): 34-37.
- [15] 周国安, 刘多勤, 涂佃柳等. CMP 综合终点检测研究[J], 微纳电子技术, 2009(06): 371-374.
- [16] What-when-how, IC-1000 polishing pad surface as imaged by AFM (top image) and SEM[M].
- [17] Ming-Yi Tsai, Wei-Zheng Yang, Water-jet-assisted diamond disk dressing characteristics of CMP polishing pad[J], International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2012, 62(5-8): 645-654.
- [18] 华钱锋, 方海生, 袁巨龙. 化学机械抛光用抛光垫的修整对修整效果的影响因素[J], 轻工机械, 2009(05): 48-51.

- [19] Tsai Tzu-Hsuan, Yen Shi-Chern, Localized corrosion effects and modifications of acidic and alkaline slurries on copper chemical mechanical polishing[J], Applied surface science, 2003, 210(3): 190-205.
- [20] Colloidal-Dynamics, CMP slurry - Electron micrograph of a colloid[M].
- [21] 胡伟, 魏昕, 谢小柱等. CMP 抛光半导体晶片中抛光液的研究[J], 金刚石与磨料磨具工程, 2006(06): 78-80.
- [22] Wang Yongguang, Zhao Yongwu, An Wei et al., Modeling effects of abrasive particle size and concentration on material removal at molecular scale in chemical mechanical polishing[J], Applied Surface Science, 2010, 257(1): 249-253.
- [23] Jeng Y. R., Huang P. Y, A material removal rate model considering interfacial micro-contact wear behavior for chemical mechanical polishing[J], Journal Of Tribology-Transactions Of The ASME, 2005, 127(1): 190-197.
- [24] Xu Q. Z., Chen L, A Feature-Scale Greenwood-Williamson Model for Metal Chemical Mechanical Planarization[J], Journal Of Electronic Materials, 2013, 42(8): 2630-2640.
- [25] Bott S., Rzehak R., Vasilev B. et al., A CMP Model Including Global Distribution of Pressure[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2011, 24(2): 304-314.
- [26] Sorooshian J., DeNardis D., Charns L. et al., Arrhenius characterization of ILD and copper CMP processes[J], Journal Of The Electrochemical Society, 2004, 151(2): G85-G88.
- [27] Borucki L., Mathematical modeling of polish-rate decay in chemical-mechanical polishing[J], Journal of Engineering Mathematics, 2002, 43(2-4): 105-114.
- [28] Zhang Z. F., Yan W. X., Zhang L. et al., Effect of mechanical process parameters on friction behavior and material removal during sapphire chemical mechanical polishing[J], Microelectronic Engineering, 2011, 88(9): 3020-3023.
- [29] Park K. H., Kim H. J., Chang O. M. et al., Effects of pad properties on material removal in chemical mechanical polishing[J], Journal OF Materials Processing Technology, 2007, 187: 73-76.
- [30] 苏建修, 高虹, 陈锡渠等. 铜化学机械抛光材料去除机理研究[J], 金刚石与磨料磨具工程, 2010(01): 5-9.
- [31] Zhao D. W., He Y. Y., Wang T. Q. et al., Effect of Kinematic Parameters and Their Coupling Relationships on Global Uniformity of Chemical-Mechanical Polishing[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2012, 25(3): 502-510.
- [32] Jeong S., Bae J., Lee H. et al., Effect of mechanical factor in uniformity for electrochemical mechanical planarization[J], Sensors and Actuators A: Physical, 2010, 163(1): 433-439.
- [33] Park Kihyun, Oh Jiheon, Jeong Haedo, Pad Characterization and Experimental Analysis of Pad Wear Effect on Material Removal Uniformity in Chemical Mechanical Polishing[J], Japanese Journal of Applied Physics, 2008, 47(10): 7812-7817.
- [34] Xu Chi, A signal processing method for the friction-based endpoint detection system of a CMP process[J], Journal of Semiconductors, 2010.
- [35] Hong Hocheng, Yun-Liang Huang, In Situ Endpoint Detection by Acoustic Emissions in

- Chemical Mechanical Polishing of Metal Overlay[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2007, 20(3): 306-312.
- [36] Hong Hocheng, Yun-Liang Huang, In situ endpoint detection by pad temperature in chemical-mechanical polishing of copper overlay[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2004, 17(2): 180-187.
- [37] Yi Jingang, Xu C. Shan, Broadband optical end-point detection for linear chemical–mechanical planarization (CMP) processes using an image matching technique[J], Mechatronics, 2005, 15(3): 271-290.
- [38] Liang H., Kaufman F., Sevilla R. et al., Wear phenomena in chemical mechanical polishing[J], Wear, 1997, 211(2): 271-279.
- [39] Borucki L., Li Z., Philipossian A., Experimental and theoretical investigation of heating and convection in copper polishing[J], Journal Of The Electrochemical Society, 2004, 151(9): G559-G563.
- [40] Oh Seunghee, Seok Jongwon, Modeling of chemical–mechanical polishing considering thermal coupling effects[J], Microelectronic Engineering, 2008, 85(11): 2191-2201.
- [41] White D., Melvin J., Boning D., Characterization and modeling of dynamic thermal behavior in CMP[J], Journal Of The Electrochemical Society, 2003, 150(4): G271-G278.
- [42] Lee C., Park J., Kinoshita M. et al., Development of intelligent pad monitoring system and application to analysis of pressure distribution in chemical mechanical polishing process[J], International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, 2014, 15(9): 2005-2009.
- [43] Rao P. K., Bhushan M. B., Bukkapatnam STS et al., Process-Machine Interaction (PMI) Modeling and Monitoring of Chemical Mechanical Planarization (CMP) Process Using Wireless Vibration Sensors[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2014, 27(1): 1-15.
- [44] Xi Zhang, Hui Wang, Qiang Huang et al., Statistical and experimental analysis of correlated time-varying process variables for conditions diagnosis in chemical-mechanical planarization[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2009, 22(4): 512-521.
- [45] Sikder A. K., Giglio Frank, Wood John et al., Optimization of tribological properties of silicon dioxide during the chemical mechanical planarization process[J], Journal of Electronic Materials, 2001, 30(12): 1520-1526.
- [46] 谭刚. 硅晶圆 CMP 抛光速率影响因素分析[J]. 微纳电子技术, 2007(Z1): 1-2.
- [47] Preston F. W., The theory and design of plate glass polishing machines[J], J. Soc. Glass Tech., 1927, 11: 214.
- [48] Lu H., Obeng Y., Richardson K. A., Applicability of dynamic mechanical analysis for CMP polyurethane pad studies[J], Materials Characterization, 2002, 49(2): 177-186.
- [49] Hyunseop Lee, Yeongbong Park, Sangjik Lee et al., Effect of wafer size on material removal rate and its distribution in chemical mechanical polishing of silicon dioxide film[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2013, 27 (10) : 2911-2916.
- [50] 赵永武, 刘家浚. 半导体芯片化学机械抛光过程中材料去除机理研究进展[J]. 摩擦学学

- 报, 2004(03): 283-287.
- [51] Willardson Robert K., Weber Eicke R. et al., Chemical mechanical polishing in silicon processing[M], Academic Press, 1999.
- [52] 吴雪花. 抛光垫特性及其对化学机械抛光效果影响的研究[D], 大连理工大学, 2005.
- [53] Jianfeng Luo, Dornfeld D. A., Material removal mechanism in chemical mechanical polishing: theory and modelling[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2001, 14(2): 112-133.
- [54] Tsai H. J., Huang P. Y., Tsai H. C. et al., Chemical Mechanical Polishing in Elastic Contact and Partial Hydrodynamic Lubrication: Modeling and Experiments[J], Materials and Manufacturing Processes, 2011, 26(2): 319-324.
- [55] Changxue Wang, Sherman P., Chandra A., A stochastic model for the effects of pad surface topography evolution on material removal rate decay in chemical-mechanical planarization[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2005, 18(4): 695-708.
- [56] Lu H., Obeng Y., Richardson K. A., Applicability of dynamic mechanical analysis for CMP polyurethane pad studies[J], Materials Characterization, 2002, 49(2): 177-186.
- [57] 张朝辉, 杜永平, 常秋英等. 化学机械抛光中抛光垫作用分析[J], 北京交通大学学报, 2007(01): 18-21.
- [58] Yamada Yohei, Kawakubo Masanori, Kadomura Kazunori et al., Experimental Analysis of Pad Wear Response Effect on Removal Rate Variations in Tungsten Chemical Mechanical Polishing[J], Journal Of The Electrochemical Society, 2010, 157(6): H617-H623.
- [59] 胡伟, 魏听, 谢小柱等. 化学机械抛光中抛光垫修整的作用及规律研究[J], 金刚石与磨料磨具工程, 2007(05): 58-63.
- [60] 王胜利, 袁育杰, 刘玉岭. 铜 CMP 中工艺参数对抛光速率的影响[J], 润滑与密封, 2006(07): 113-114.
- [61] 李炎, 刘玉岭, 李洪波等. 新型表面活性剂对低磨料铜化学机械抛光液性能的影响[J], 电镀与涂饰, 2014(08): 325-329.
- [62] Wang C. W., Liu Y. L., Tian J. Y. et al., A study on the comparison of CMP performance between a novel alkaline slurry and a commercial slurry for barrier removal[J], Microelectronic Engineering, 2012, 98: 29-33.
- [63] Singh Rajiv K., Bajaj Rajeev., Advances in chemical-mechanical planarization[J], MRS bulletin, 2002, 27(10): 743-751.
- [64] Jianfeng Luo, Dornfeld D. A., Effects of abrasive size distribution in chemical mechanical planarization: modeling and verification[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2003, 16(3): 469-476.
- [65] Lee H., Zhuang Y., Sugiyama M. et al., Pad flattening ratio, coefficient of friction and removal rate analysis during silicon dioxide chemical mechanical planarization[J], Thin Solid Films, 2010, 518(8): 1994-2000.
- [66] Hui Wang, Xi Zhang, Kumar A. et al., Nonlinear dynamics modeling of correlated functional process variables for condition monitoring in chemical-mechanical planarization[J], IEEE

- Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2009, 22(1): 188-195.
- [67] Kwon Daehee, Kim Hyoungjae, Jeong Haedo, Heat and its effects to chemical mechanical polishing[J], Journal of Materials Processing Technology, 2006, 178(1-3): 82-87.
- [68] Hocheng H., Huang Y. L., Chen L. J., Kinematic analysis and measurement of temperature rise on a pad in chemical mechanical planarization[J], Journal Of The Electrochemical Society, 1999, 146(11): 4236-4239.
- [69] Sorooshian J., Hetherington D., Philipossian A., Effect of process temperature on coefficient of friction during CMP[J], Electrochemical and Solid State Letters, 2004, 7(10): G222-G224.
- [70] Lee E. S., Cha J. W., Kim S. H., Evaluation of the wafer polishing pad capacity and lifetime in the machining of reliable elevations[J], International Journal of Machine Tools and Manufacture, 2013, 66: 82-94.
- [71] Ganesan R., Das T. K., Sikder A. K. et al., Wavelet-based identification of delamination defect in CMP (Cu-low k) using nonstationary acoustic emission signal[J], IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, 2003, 16(4): 677-685.
- [72] Meled A., Zhuang Y., Wei X. et al., Analyses of Diamond Disk Substrate Wear and Diamond Microwear in Copper Chemical Mechanical Planarization Process[J], Journal Of The Electrochemical Society, 2010, 157(3): H250-H255.
- [73] Kincal S., Basim G. B., Impact of Pad Conditioning on Thickness Profile Control in Chemical Mechanical Planarization[J], Journal of Electronic Materials, 2013, 42(1): 83-96.
- [74] G. Petris, S. Petrone and P. Campagnoli., Dynamic Linear Models with R[M].
- [75] Fr U Hwirth-Schnatter Sylvia., Data augmentation and dynamic linear models[J], Journal of Time Series Analysis, 1994, 15(2): 183-202.
- [76] Shephard Neil., Partial non-Gaussian state space[J], Biometrika, 1994, 81(1): 115-131.
- [77] Durbin James, Koopman Siem Jan., A simple and efficient simulation smoother for state space time series analysis[J], Biometrika, 2002, 89(3): 603-616.
- [78] CRAN, The R Project for Statistical Computing[M].
- [79] CRAN, dlm: Bayesian and Likelihood Analysis of Dynamic Linear Models[M].
- [80] Kalman Rudolph Emil., A new approach to linear filtering and prediction problems[J]. Journal of Fluids Engineering, 1960, 82 (1) : 35-45.
- [81] Sun T., Borucki L., Zhuang Y. et al., Investigating the effect of diamond size and conditioning force on chemical mechanical planarization pad topography[J], Microelectronic Engineering, 2010, 87(4): 553-559.
- [82] Hua Qian-feng, Fang Hai-sheng, Yuan Ju-long., Influencing Factors of Conditioning Effect about Polishing Pad Conditioning for Chemical Mechanical Polishing[J], Light Industry Machinery, 2009, 27(5): 48-51.



## 附录 A Kalman 滤波方法的证明

这里，我们证明由公式(3.25)到(3.27)组成的 Kalman 滤波方法，过程如下：

从状态空间模型的定义中我们可以知道，随机向量  $(a_0, a_1, \dots, a_t, y_1, \dots, y_t)$  具有如公式(3.10)所示的联合分布，且相关的边际分布和条件分布是高斯的。由多元正态分布的基本性质可知，在  $t > 1$  时刻，随机向量  $(a_0, a_1, \dots, a_t, y_1, \dots, y_t)$  的联合分布也是高斯的。因此，任意子向量的分布，以及基于部分子向量条件下的其它子向量的分布也是高斯的，于是我们可以仅通过计算均值和方差来得到这些分布。

对于公式(3.25)，由于在已知从开始到  $t-1$  时刻的观测值  $y_{1:t-1}$  时， $a_t$  服从高斯分布。令  $a_t | y_{1:t-1} \sim N(\theta_{t|t-1}, P_{t|t-1})$ ，可以得到

$$\begin{aligned}\theta_{t|t-1} &= E(a_t | y_{1:t-1}) = E[E(a_t | a_{t-1}, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] \\ &= E(F_t a_{t-1} | y_{1:t-1}) = F_t \theta_{t-1}\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

以及

$$\begin{aligned}P_{t|t-1} &= \text{Var}(a_t | y_{1:t-1}) \\ &= E[\text{Var}(a_t | a_{t-1}, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] + \text{Var}[E(a_t | a_{t-1}, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] \\ &= \Theta + F_t P_{t-1} F_t^T\end{aligned}\quad (\text{A.2})$$

对于公式(3.26)，由于在已知从开始到  $t-1$  时刻的观测值  $y_{1:t-1}$  时， $t$  时刻的观测值  $y_t$  也服从高斯分布。令  $y_t | y_{1:t-1} \sim N(g_t, G_t)$ ，可以得到

$$\begin{aligned}g_t &= E(y_t | y_{1:t-1}) \\ &= E[E(y_t | a_t, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] \\ &= E(X_t a_t | y_{1:t-1}) = X_t \theta_{t|t-1}\end{aligned}\quad (\text{A.3})$$

以及

$$\begin{aligned}G_t &= \text{Var}(y_t | y_{1:t-1}) \\ &= E[\text{Var}(y_t | a_t, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] + \text{Var}[E(y_t | a_t, y_{1:t-1}) | y_{1:t-1}] \\ &= H + X_t P_{t|t-1} X_t^T\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

另外，对于公式(3.27)，为了计算  $t$  时刻的分布  $\pi(a_t | y_{1:t})$ ，我们可以利用后验概率  $\pi(a_t | y_{1:t-1})$  与似然概率  $\pi(y_t | a_t)$ ，通过贝叶斯公式进行计算，

$$\pi(a_t | y_{1:t}) = \frac{\pi(y_t | a_t) \pi(a_t | y_{1:t-1})}{\pi(y_t | y_{1:t-1})} \quad (\text{A.5})$$

由于在动态线性模型中，所有的分布都满足高斯条件，因此，我们可以利用线性回归模型中的贝叶斯推断的结论。对于线性回归模型

$$y_t = c_t + T_t a_t + R_t \eta_t, \quad \eta_t \sim N(0, Q_t) \quad (\text{A.6})$$

其中，回归模型参数  $a_t$  的共轭先验分布为高斯分布  $N(\theta_{t|t-1}, P_{t|t-1})$ ，模型参数  $a_t$  的后验分布同样是高斯分布，并且有

$$a_t | y_{1:t} \sim N(\theta_t, P_t) \quad (\text{A.7})$$

根据贝叶斯公式，可以计算  $a_t$  的后验概率密度，进而得出高斯分布的参数<sup>[75]</sup>

$$\begin{aligned} \theta_t &= \theta_{t|t-1} + P_{t|t-1} X_t^T G_t^{-1} (y_t - X_t \theta_{t|t-1}) \\ P_t &= P_{t|t-1} - P_{t|t-1} X_t^T G_t^{-1} X_t P_{t|t-1} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$



## 附录 B Kalman 平滑方法的证明

这里，我们证明由公式(3.28)中介绍的 Kalman 平滑方法，过程如下：

由多元高斯分布的基本性质可以知道，条件分布  $a_t | y_{1:T}$  同样服从高斯分布，因此，我们可以使用均值和方差来描述这一分布。定义

$$\begin{aligned} s_t &= E(a_t | y_{1:T}) \\ &= E[E(a_t | a_{t+1}, y_{1:T}) | y_{1:T}] \\ S_t &= Var(a_t | y_{1:T}) \\ &= Var[E(a_t | a_{t+1}, y_{1:T}) | y_{1:T}] + E[Var(a_t | a_{t+1}, y_{1:T}) | y_{1:T}] \end{aligned} \quad (B.1)$$

由于在已知  $a_{t+1}$  时， $a_t$  和  $y_{t+1:T}$  是条件独立的，因此有  $\pi(a_t | a_{t+1}, y_{1:T}) = \pi(a_t | a_{t+1}, y_{1:t})$ ，我们可以用贝叶斯公式计算这一分布。从动态线性模型的定义可知  $\pi(a_{t+1} | a_t, y_{1:t}) = \pi(a_{t+1} | a_t)$ ，并且有

$$a_{t+1} | a_t \sim N(F_{t+1}a_t, \Theta) \quad (B.2)$$

先验概率密度为  $\pi(a_t | y_{1:t})$ ，且有  $a_t | y_{1:t} \sim N(\theta_t, P_t)$ ，利用贝叶斯公式，可以得到

$$\begin{aligned} E(a_t | a_{t+1}, y_{1:t}) &= \theta_t + P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (a_{t+1} - T_{t+1} \theta_t) \\ &= \theta_t + P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (a_{t+1} - \theta_{t+1}) \\ Var(a_t | a_{t+1}, y_{1:t}) &= P_t - P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} F_{t+1} P_t \end{aligned} \quad (B.3)$$

于是可以得出

$$\begin{aligned} s_t &= E[E(a_t | a_{t+1}, y_{1:t}) | y_{1:T}] \\ &= \theta_t + P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (s_{t+1} - \theta_{t+1}) \\ S_t &= Var[E(a_t | a_{t+1}, y_{1:t}) | y_{1:T}] + E[Var(a_t | a_{t+1}, y_{1:t}) | y_{1:T}] \\ &= P_t - P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} F_{t+1} P_t + P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} S_{t+1} P_{t+1|t}^{-1} F_{t+1} P_t \\ &= P_t - P_t F_{t+1}^T P_{t+1|t}^{-1} (P_{t+1|t} - S_{t+1}) P_{t+1|t}^{-1} F_{t+1} P_t \end{aligned} \quad (B.4)$$

其中，按照定义有  $s_{t+1} = E(a_{t+1} | y_{1:T})$ ， $S_{t+1} = Var(a_{t+1} | y_{1:T})$ 。



## 致 谢

本论文的工作是在我的导师张玺特聘研究员的悉心指导下完成的，张玺老师在科研上的严谨态度和治学上的严格要求给予了我极大的帮助和影响。在此，我由衷的感谢张玺老师在我的三年硕士生涯中，对我的亲切关心和耐心指导。

在张玺老师的悉心指导下，我得以顺利完成实验室的科研工作以及课题项目，得到了多方面的锻炼。此外，张玺老师在科研学习和业余生活中，也给与了我很大的关心和帮助，在此向张玺老师表示衷心的感谢。

在实验室的日常工作以及撰写论文期间，陈丽莉、宋畅越等同学对我的科研和项目工作提供了热情的帮助，在此表示由衷的感激。

另外，我要感谢我的家人，感谢他们理解我每周仅有一次的长途电话问候，期待我每年仅有两次的短暂回家相聚，他们的支持使我能够没有后顾之忧，在学校专心完成学业。最后，我要感谢我的女友，从武汉到北京，再从北京到成都，她一路陪伴我，理解我，支持我，感谢她的包容使我更加专心致志的完成实验室科研工作。



# 北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

## 原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：                    日期：      年      月      日

## 学位论文使用授权说明

（必须装订在提交学校图书馆的印刷本）

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
- 学校有权保存学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；
- 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；
- 因某种特殊原因需要延迟发布学位论文电子版，授权学校  一年/  两年/  三年以后，在校园网上全文发布。

（保密论文在解密后遵守此规定）

论文作者签名：                    导师签名：

日期：      年      月      日

