

[19] 中华人民共和国国家知识产权局



[12] 发明专利申请公开说明书

[21] 申请号 200480028518.0

[51] Int. Cl.

G06F 9/45 (2006.01)

G06F 7/62 (2006.01)

G06F 17/50 (2006.01)

[43] 公开日 2006 年 11 月 8 日

[11] 公开号 CN 1860440A

[22] 申请日 2004.9.30

[21] 申请号 200480028518.0

[30] 优先权

[32] 2003. 9. 30 [33] US [31] 10/673,583

[32] 2003. 9. 30 [33] US [31] 10/673,501

[86] 国际申请 PCT/US2004/028819 2004. 9. 30

[87] 国际公布 WO2005/034185 英 2005. 4. 14

[85] 进入国家阶段日期 2006. 3. 30

[71] 申请人 东京毅力科创株式会社

地址 日本东京都

[72] 发明人 安德杰 · S · 米托维克

[74] 专利代理机构 北京东方亿思知识产权代理有限责任公司

代理人 王 怡

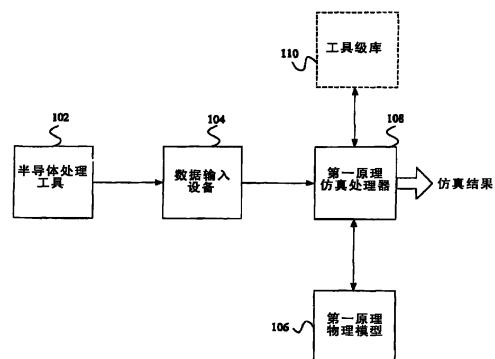
权利要求书 12 页 说明书 31 页 附图 14 页

[54] 发明名称

用于工具上半导体仿真的系统和方法

[57] 摘要

一种用于辅助半导体处理工具(102)所执行的处理的方法、系统和计算机可读介质。该方法包括输入与半导体处理工具(102)所执行的处理有关的数据(104)，以及输入与半导体处理工具(102)有关的第一原理物理模型(106)。使用输入数据(104)和物理模型(106)来执行第一原理仿真(108)，以提供与半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量，并且虚拟传感器测量被用来辅助半导体处理工具(102)所执行的处理，并且仿真结果被用作为表征半导体处理工具(102)所执行的处理的数据集合的一部分。



1. 一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的方法，包括：
输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据；
5 输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型；
使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供与所述半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量；以及
使用所述虚拟传感器测量来辅助所述半导体处理工具所执行的处理。
2. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入操作包括从被物理地安装在所述半导体处理工具上的物理传感器和度量工具中的至少一个直接输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据。
10
3. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入操作包括从手工输入设备和数据库中的至少一个间接输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据。
15
4. 如权利要求 3 所述的方法，其中所述间接输入操作包括输入从所述半导体处理工具先前执行的处理而记录的数据。
5. 如权利要求 3 所述的方法，其中所述间接输入操作包括输入由仿真操作者设置的数据。
20
6. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入数据的操作包括输入与所述半导体工具环境和所述半导体处理工具的物理特性中的至少一个有关的数据。
25
7. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入数据的操作包括输入与所述半导体处理工具所执行的处理的特性和结果中的至少一个有关的数据。
8. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入第一原理物理模型包括输入所述半导体处理工具的几何的空间解析模型。
9. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述输入第一原理物理模型包括输入执行第一原理仿真以获得虚拟传感器读数所需的基本等式。
10. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括与所

述半导体处理工具所执行的处理并发地执行第一原理仿真。

11. 如权利要求 10 所述的方法，还包括：

在所述半导体处理期间反复地更新来自所述物理传感器或度量工具的数据；

5 在所述半导体处理期间反复地使用更新后的数据执行所述第一原理仿真；以及

基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，与运行所述半导体处理并发地辅助所述半导体处理。

12. 如权利要求 10 所述的方法，还包括：

10 在所述半导体处理开始之前，设置用于所述第一原理仿真的边界条件；

在所述半导体处理期间并且在没有来自所述半导体处理的直接输入的情况下，执行对所述半导体处理的时间相关仿真；以及

15 基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，与运行所述半导体处理并发地辅助所述半导体处理。

13. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括不与所述半导体处理工具所执行的处理并发地来执行第一原理仿真。

14. 如权利要求 13 所述的方法，其中所述输入数据的操作包括输入从先前执行的处理而记录的所述第一原理仿真的初始和边界条件中的至少 20 一个。

15. 如权利要求 3 所述的方法，其中所述间接输入操作包括输入用于所述物理模型的最佳已知输入参数。

16. 如权利要求 15 所述的方法，还包括：

将所述虚拟传感器测量与实际传感器测量进行比较；以及

25 细化所述最佳已知输入参数和所述物理模型中的至少一个，以获得所述虚拟传感器测量与实际传感器测量之间更好的一致。

17. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述使用所述虚拟传感器测量包括使用所述虚拟传感器测量来表征所述半导体处理工具所执行的处理。

18. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述使用所述虚拟传感器测量包

括使用所述虚拟传感器测量来控制所述半导体处理工具所执行的处理。

19. 如权利要求 1 所述的方法，其中所述使用所述虚拟传感器测量包括使用所述虚拟传感器测量来检测所述半导体处理工具所执行的处理中的故障。

5 20. 如权利要求 1 所述的方法，还包括将所述虚拟传感器测量存储在库中以便以后在第一原理仿真中使用。

21. 如权利要求 1 所述的方法，还包括使用互连资源的网络来执行权利要求 1 所述的处理步骤中的至少一个。

10 22. 如权利要求 21 所述的方法，还包括使用互连计算资源之间的代码并行化来分摊所述第一原理仿真的计算负荷。

23. 如权利要求 21 所述的方法，还包括在互连资源之间共享仿真信息以辅助所述半导体处理工具所执行的处理。

15 24. 如权利要求 23 所述的方法，其中所述共享仿真信息包括在所述互连资源之间分发仿真结果，以减少不同资源对基本类似的第一原理仿真的冗余执行。

25. 如权利要求 23 所述的方法，其中所述共享仿真信息包括在所述互连资源之间分发模型改变，以减少不同资源对第一原理仿真的冗余细化。

26. 如权利要求 21 所述的方法，还包括经由广域网使用远程资源以20 辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

27. 如权利要求 26 所述的方法，其中所述使用远程资源包括经由广域网使用远程计算和存储资源中的至少一个来辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

28. 一种系统，包括：

25 被配置为执行处理的半导体处理工具；

被配置为输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据的输入设备；以及

被配置为执行以下操作的第一原理仿真处理器：

输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型；

使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供与所述半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量，其中所述虚拟传感器测量被用来辅助所述半导体处理工具所执行的处理。

29. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述输入设备包括被物理地安装在所述半导体处理工具上的物理传感器和度量工具中的至少一个。

30. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述输入设备包括手工输入设备和数据库中的至少一个。

31. 如权利要求 30 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入从所述半导体处理工具先前执行的处理而记录的数据。

10 32. 如权利要求 30 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入由仿真操作者设置的数据。

33. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入与所述半导体工具环境和所述半导体处理工具的物理特性中的至少一个有关的数据。

15 34. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入与所述半导体处理工具所执行的处理的特性和结果中的至少一个有关的数据。

35. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述处理器被配置为输入包括所述半导体处理工具的几何的空间解析模型的第一原理物理模型。

20 36. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述处理器被配置为输入包括执行第一原理仿真以获得虚拟传感器读数所需的基本等式的第一原理物理模型。

37. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述处理器被配置为与所述半导体处理工具所执行的处理并发地执行所述第一原理仿真。

25 38. 如权利要求 37 所述的系统，其中所述处理器还被配置为：

在所述半导体处理期间反复地更新来自所述物理传感器或度量工具的数据；以及

在所述半导体处理期间反复地使用更新后的数据执行所述第一原理仿真，其中基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，所述半导体

处理与运行所述半导体处理并发地被辅助。

39. 如权利要求 37 所述的系统，其中所述处理器还被配置为：

在所述半导体处理开始之前，设置用于所述第一原理仿真的边界条件；

5 在所述半导体处理期间并且在没有来自所述半导体处理的直接输入的情况下，执行对所述半导体处理的时间相关仿真，其中基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，所述半导体处理与运行所述半导体处理并发地被辅助。

10 40. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述处理器被配置为不与所述半导体处理工具所执行的处理并发地来执行所述第一原理仿真。

41. 如权利要求 40 所述的系统，其中所述处理器被配置为至少通过使用所述输入数据来设置从先前执行的处理而记录的所述第一原理仿真的初始和边界条件中的至少一个，来执行所述第一原理仿真。

15 42. 如权利要求 30 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入用于所述物理模型的最佳已知输入参数。

43. 如权利要求 42 所述的系统，其中所述处理器被配置为：

将所述虚拟传感器测量与实际传感器测量进行比较；以及
细化所述最佳已知输入参数和所述物理模型中的至少一个，以获得所述虚拟传感器测量与实际传感器测量之间更好的一致。

20 44. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述虚拟传感器测量被用来表征所述半导体处理工具所执行的处理。

45. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述虚拟传感器测量被用来控制所述半导体处理工具所执行的处理。

25 46. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述虚拟传感器测量被用来检测所述半导体处理工具所执行的处理中的故障。

47. 如权利要求 28 所述的系统，其中所述处理器还被配置为将所述虚拟传感器测量存储在库中以便以后在第一原理仿真中使用。

48. 如权利要求 28 所述的系统，还包括连接到所述处理器的互连资源的网络，所述互连资源的网络被配置为帮助所述处理器执行输入第一原

理仿真模型和执行第一原理仿真中的至少一个。

49. 如权利要求 48 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为使用与所述处理器的代码并行化来分摊所述第一原理仿真的计算负荷。

50. 如权利要求 48 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为与所述处理器共享仿真信息，以辅助所述半导体处理工具所执行的所述处理。

51. 如权利要求 50 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为将仿真结果分发到所述处理器，以减少对基本类似的第一原理仿真的冗余执行。

10 52. 如权利要求 50 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为将模型改变分发到所述处理器，以减少对第一原理仿真的冗余细化。

53. 如权利要求 48 所述的系统，还包括经由广域网连接到所述处理器的远程资源，所述远程资源被配置为辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

15 54. 如权利要求 53 所述的系统，其中所述远程资源包括计算和存储资源中的至少一种。

55. 一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的系统，包括：

用于输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据的装置；

用于输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型的装置；

20 用于使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供与所述半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量的装置；以及

用于使用所述虚拟传感器测量来辅助所述半导体处理工具所执行的处理的装置。

56. 如权利要求 55 所述的系统，其中所述用于执行第一原理仿真的装置包括用于与所述半导体处理工具所执行的处理并行地执行第一原理仿真的装置。

57. 如权利要求 56 所述的系统，还包括：

用于在所述半导体处理期间反复地更新来自所述物理传感器或度量工具的数据的装置；

用于在所述半导体处理期间反复地使用更新后的数据执行所述第一原理仿真的装置；以及

用于基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，与运行所述半导体处理并行地辅助所述半导体处理的装置。

5 58. 如权利要求 56 所述的系统，还包括：

用于在所述半导体处理开始之前设置用于所述第一原理仿真的边界条件的装置；

用于在所述半导体处理期间并且在没有来自所述半导体处理的直接输入的情况下，执行对所述半导体处理的时间相关仿真的装置；以及

10 用于基于在所述半导体处理期间获得的虚拟传感器测量，与运行所述半导体处理并行地辅助所述半导体处理的装置。

59. 如权利要求 55 所述的系统，还包括用于输入用于所述物理模型的最佳已知输入参数的装置，所述系统还包括：

用于将所述虚拟传感器测量与实际传感器测量相比较的装置；以及

15 用于细化所述最佳已知输入参数和所述物理模型中的至少一个，以获得所述虚拟传感器测量与实际传感器测量之间的更好的一致的装置。

60. 如权利要求 55 所述的系统，还包括用于分摊所述第一原理仿真的计算负荷的装置。

61. 如权利要求 41 所述的系统，还包括用于在互连资源之间共享仿
20 真信息以辅助所述半导体处理工具所执行的处理的装置。

62. 一种包含用于在处理器上执行的程序指令的计算机可读介质，当所述程序指令被计算机系统执行时，使得所述处理器执行以下步骤：

输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据；

输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型；

25 使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供与所述半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量；以及

使用所述虚拟传感器测量来辅助所述半导体处理工具所执行的处理。

63. 一种辅助半导体处理工具所执行的处理的方法，包括：

输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据；

输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型；

使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于所述半导体处理工具所执行的处理的仿真结果；以及

5 使用所述仿真结果作为表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

64. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入操作包括从被物理地安装在所述半导体处理工具上的物理传感器和度量工具中的至少一个直接输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据。

10 65. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入操作包括从手工输入设备和数据库中的至少一个间接输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据。

66. 如权利要求 65 所述的方法，其中所述间接输入操作包括输入从所述半导体处理工具先前执行的处理而记录的数据。

15 67. 如权利要求 65 所述的方法，其中所述间接输入操作包括输入由仿真操作者设置的数据。

68. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入操作包括输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据作为来自仿真模块的虚拟传感器数据。

20 69. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入数据的操作包括输入与所述半导体工具环境和所述半导体处理工具的物理特性中的至少一个有关的数据。

70. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入数据的操作包括输入与所述半导体处理工具所执行的处理的特性和结果中的至少一个有关的数据。

25 71. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入第一原理物理模型包括输入所述半导体处理工具的几何的空间解析模型。

72. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述输入第一原理物理模型包括输入执行第一原理仿真以获得仿真结果所需的基本等式，其中所述仿真结果可形成表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

73. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括与所述半导体处理工具所执行的处理并发地执行第一原理仿真。

74. 如权利要求 73 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括执行第一原理仿真以提供这样的仿真结果，所述仿真结果是通过所述半导体
5 处理工具所执行的并发处理所测试的参数的变化。

75. 如权利要求 73 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括执行第一原理仿真来提供这样的仿真结果，所述仿真结果与和通过所述半导体处理工具所执行的并发处理所测试的参数不同的参数有关。

76. 如权利要求 63 所述的方法，其中所述执行第一原理仿真包括不
10 与所述半导体处理工具所执行的处理并发地来执行第一原理仿真。

77. 如权利要求 63 所述的方法，还包括将所述数据集合存储在库中，以便以后在所述半导体处理工具所执行的处理中使用。

78. 如权利要求 63 所述的方法，还包括使用互连资源的网络来执行权利要求 1 所述的处理步骤中的至少一个。

79. 如权利要求 78 所述的方法，还包括使用互连计算资源之间的代码并行化来分摊所述第一原理仿真的计算负荷。

80. 如权利要求 78 所述的方法，还包括在互连资源之间共享仿真信息以辅助所述半导体处理工具所执行的处理。

81. 如权利要求 80 所述的方法，其中所述共享仿真信息包括在所述互连资源之间分发仿真结果，以减少不同资源对基本类似的第一原理仿真的冗余执行。

82. 如权利要求 80 所述的方法，其中所述共享仿真信息包括在所述互连资源之间分发模型改变，以减少不同资源对第一原理仿真的冗余细化。

83. 如权利要求 80 所述的方法，还包括经由广域网使用远程资源以辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

84. 如权利要求 83 所述的方法，其中所述使用远程资源包括经由广域网使用远程计算和存储资源中的至少一个来辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

85. 一种系统，包括：

被配置为执行处理的半导体处理工具；

被配置为输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据的输入设备；以及

5 被配置为执行以下操作的第一原理仿真处理器：

输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型，以及

使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于所述半导体处理工具所执行的处理的第一原理仿真结果，其中所述仿真结果被用作为表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

10 86. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述输入设备包括被物理地安装在所述半导体处理工具上的物理传感器和度量工具中的至少一个。

87. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述输入设备包括手工输入设备和数据库中的至少一个。

15 88. 如权利要求 87 所述的方法，其中所述输入设备被配置为输入从所述半导体处理工具先前执行的处理而记录的数据。

89. 如权利要求 87 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入由仿真操作者设置的数据。

90. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据作为来自仿真模块的虚拟传感器数据。

91. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述输入设备被配置为输入与所述半导体工具环境和所述半导体处理工具的物理特性中的至少一个有关的数据。

25 92. 如权利要求 85 所述的方法，其中所述输入设备被配置为输入与所述半导体处理工具所执行的处理的特性和结果中的至少一个有关的数据。

93. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述处理器被配置为输入包括所述半导体处理工具的几何的空间解析模型的第一原理物理模型。

94. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述处理器被配置为输入包括执行第一原理仿真以获得仿真结果所需的基本等式的第一原理物理模型，其中所述仿真结果可形成表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

5 95. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述处理器被配置为与所述半导体处理工具所执行的处理并发地执行所述第一原理仿真。

96. 如权利要求 95 所述的系统，其中所述处理器被配置为执行所述第一原理仿真来提供这样的仿真结果，所述仿真结果是通过所述半导体处理工具所执行的并发处理所测试的参数的变化。

10 97. 如权利要求 95 所述的系统，其中所述处理器被配置为执行所述第一原理仿真来提供这样的仿真结果，所述仿真结果与和通过所述半导体处理工具所执行的并发处理所测试的参数笔筒的参数有关。

98. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述处理器被配置为不与所述半导体处理工具所执行的处理并发地来执行所述第一原理仿真。

15 99. 如权利要求 85 所述的系统，其中所述处理器还被配置为将所述数据集合存储在库中，以便以后在所述半导体处理工具所执行的处理中使用。

100. 如权利要求 85 所述的系统，还包括连接到所述处理器的互连资源的网络，所述互连资源的网络被配置为帮助所述处理器执行所述输入第 20 一原理仿真模型和执行第一原理仿真中的至少一个。

101. 如权利要求 100 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为使用与所述处理器的代码并行化来分摊所述第一原理仿真的计算负荷。

102. 如权利要求 100 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为与所述处理器共享仿真信息，以辅助所述半导体处理工具所执行的处 25 理。

103. 如权利要求 102 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置为将仿真结果分发给所述处理器，以减少对基本类似的第一原理仿真的冗余执行。

104. 如权利要求 102 所述的系统，其中所述互连资源的网络被配置

为将模型改变分发给所述处理器，以减少第一原理仿真的冗余细化。

105. 如权利要求 100 所述的系统，还包括经由广域网连接到所述处理器的远程资源，所述远程资源被配置为辅助所述半导体处理工具所执行的半导体处理。

5 106. 如权利要求 105 所述的系统，其中所述远程资源包括计算和存储资源中的至少一个。

107. 一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的系统，包括：

用于输入与所述半导体处理工具所执行的处理有关的数据的装置；

用于输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型的装置；

10 用于使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于半导体处理工具所执行的处理的仿真结果的装置；以及

用于使用所述仿真结果作为表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分的装置。

108. 如权利要求 105 所述的装置，还包括用于分摊所述第一原理仿真的计算负荷的装置。

109. 如权利要求 105 所述的系统，还包括用于在互连资源之间共享仿真信息以辅助所述半导体处理工具所执行的处理的装置。

110. 一种包含用于在处理器上执行的程序指令的计算机可读介质，当所述程序指令被计算机系统执行时，使得所述处理器执行以下步骤：

20 输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据；

输入与所述半导体处理工具有关的第一原理物理模型；

使用所述输入数据和所述物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于所述半导体处理工具所执行的处理的仿真结果；以及

25 使用所述仿真结果作为表征所述半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

用于工具上半导体仿真的系统和方法

5 技术领域

本发明一般地涉及制造半导体器件，更具体而言涉及在半导体制造过程中使用第一原理（first principles）仿真。

背景技术

10 半导体工业中的材料处理给集成电路（IC）的制造提出了巨大的挑战。对提高一般而言的 IC（具体而言的存储器器件）速度的需求强迫半导体制造者将衬底表面上的器件做得越来越小。此外，为了降低制造成本，必须减少生产 IC 结构所需的步骤（例如刻蚀步骤、沉积步骤等）的数量，从而降低 IC 结构及其制造方法的整体复杂度。特征尺寸的减小和衬
15 底尺寸的增大（即，200mm 到 300mm 和更大）进一步加剧了这些需求，其更加强调对关键尺寸（CD）、处理速率和处理均匀性的精确控制，以最大化优良器件的产率。

在半导体制造中，IC 演化期间的众多步骤被采用，包括真空处理、热
20 处理、等离子体处理等。在每个处理步骤中都存在影响处理结果的众多变量。为了更精确地控制每个处理步骤的结果，各个处理工具配备了越来越多的诊断系统（电的、机械的和光的），以在处理期间测量数据，并提供用于通过过程控制器的动作来校正过程变化的智能基础。诊断系统的数量变得繁多并且成本高。但是，还是没有对整个过程控制在空间和时间上充分解析的数据。

25 这些工业和制造中的挑战引起了对在半导体制造工业中更多地使用基于计算机的建模和仿真的兴趣。基于计算机的建模和仿真正被越来越多地用于在半导体制造工具设计过程期间预测工具性能。建模的使用减少了工具开发周期中涉及的成本和时间。在诸如力、热、磁等很多方面的建模都已相当成熟，能够可信地为设计问题提供准确的答案。此外，随着新求解

算法的发展，计算机能力已经迅速提高，二者都使得获得仿真结果所需的时间减少。事实上，本发明的发明人已经意识到，一般在工具设计阶段进行的大量仿真现在可与晶片或晶片盒处理时间相比而言及时地运行。这些趋势已经引起了这样的建议：一般仅用于工具设计的仿真能力可在工具本身上直接实现，以辅助工具执行的各种处理。例如，2001 国际半导体科技进程（2001 International Technology Roadmap for Semiconductors）识别了阻碍作为用于使能制造未来半导体器件中很小特征的技术的在工具上集成的仿真能力的发展的问题。

事实上，工业上在实现工具上（on-tool）仿真以辅助工具处理方面的失败主要是由于需要能够在合理的时间内执行仿真的计算资源。具体而言，当前专用于半导体制造工具的处理器能力一般限于诊断和控制功能，因此仅能执行较简单的仿真。因此，半导体制造工业已经意识到需要提供强大的专用计算机，以实现有意义的工具上仿真能力。但是，将这样的计算机专用于半导体处理工具造成了在工具运行使用简单仿真或根本不使用仿真的处理时，计算资源的浪费。对昂贵的计算资源的这种低效使用已经成为在半导体处理工具上实现仿真能力的主要阻碍。

发明内容

本发明的一个目的是减少或解决现有技术的上述和/或其他问题。

本发明的另一个目的是将第一原理仿真能力与半导体制造工具集成，以辅助工具所执行的处理。

本发明的另一个目的是提供工具仿真能力而无需工具专用的强大计算资源。

本发明的另一个目的是使用现有的制造工厂中每种工具的专用计算资源来提供广泛适用的工具上仿真能力。

通过本发明的以下方面可提供这些和/或其他目的。

根据本发明的一个方面，一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的方法包括：输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据，以及输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型。使用输入的数据和物理模型

来执行第一原理仿真，以提供与半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量，并且虚拟传感器测量被用来辅助半导体处理工具所执行的处理。

根据本发明的另一方面，一种系统包括被配置为执行处理的半导体处理工具，以及被配置为输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据的输入设备。第一原理仿真处理器被配置为输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型，并且使用输入的数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供与半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量。虚拟传感器测量被用来辅助半导体处理工具所执行的处理。

在本发明的另一方面中，一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的系统，包括用于输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据的装置，以及用于输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型的装置。还包括用于使用输入数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供与半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量的装置，以及用于使用虚拟传感器测量来辅助半导体处理工具所执行的处理的装置。

在本发明的另一方面中，提供了一种包含用于在处理器上执行的程序指令的计算机可读介质，当程序指令被计算机系统执行时，使得处理器执行以下步骤：输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据，以及输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型。处理器还被使得使用输入的数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供与半导体处理工具所执行的处理有关的虚拟传感器测量，以及使用虚拟传感器测量来辅助半导体处理工具所执行的处理。

本发明的另一方面是一种辅助半导体处理工具所执行的处理的方法，包括输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据，以及输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型。使用输入的数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于半导体处理工具所执行的处理的仿真结果，并且仿真结果被用作表征半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

本发明的另一方面是一种系统，包括被配置为执行处理的半导体处理工具，以及被配置为输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据的输

入设备。第一原理仿真处理器被配置为输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型，以及使用输入的数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于半导体处理工具所执行的处理的第一原理仿真结果。仿真结果被用作表征半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

5 本发明的另一方面是一种用于辅助半导体处理工具所执行的处理的系统，该系统包括用于输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据的装置，以及用于输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型的装置。该系统还包括用于使用输入数据和物理模型来执行第一原理仿真，以提供用于半导体处理工具所执行的处理的仿真结果的装置，以及用于使用仿真结果作为表征半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分的装置。
10

本发明的另一方面是一种包含用于在处理器上执行的程序指令的计算机可读介质，当程序指令被计算机系统执行时，使得处理器执行以下步骤：输入与半导体处理工具所执行的处理有关的数据，以及输入与半导体处理工具有关的第一原理物理模型。处理器还被使得使用输入数据和物理
15 模型来执行第一原理仿真，以提供用于半导体处理工具所执行的处理的仿真结果，以及使用仿真结果作为表征半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分。

附图说明

20 当结合附图考虑时，通过参考下面的详细描述，可以更好地理解并容易地获得对本发明及其优点的更完整的理解，附图中：

图 1 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来辅助半导体处理工具所执行的处理的系统的框图；

25 图 2 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来辅助半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图；

图 3 是根据本发明实施例的可被用来提供第一原理仿真技术以辅助半导体处理工具所执行的处理的网络体系结构的框图；

图 4 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来提供半导体处理工具上的虚拟传感器测量的系统的框图；

图 5 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来表征半导体处理工具上的处理的系统的框图；

图 6 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来控制半导体处理工具所执行的处理的系统的框图；

5 图 7 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图；

图 8 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和经验模型来控制半导体处理工具所执行的处理的系统的框图；

10 图 9 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和经验模型来控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图；

图 10 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和故障检测器来控制半导体处理工具所执行的处理的系统的框图；

图 11 是对 PLS 分析的数据输入 \bar{X} 和 \bar{Y} ，以及相应的输出 \bar{T} 、 \bar{P} 、 \bar{U} 、 \bar{C} 、 \bar{W} 、 \bar{E} 、 \bar{F} 、 \bar{H} 和变量投影重要性（VIP）；

15 图 12 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来检测故障并控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图；

图 13 是可应用本发明的过程控制实施例的真空处理系统的框图；以
及

图 14 示出了其上可实现本发明的实施例的计算机系统。

20

具体实施方式

现在参照附图，其中在所有图中，相似的标号标记相同或相应的部分。图 1 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来辅助半导体处理工具所执行的处理的系统的框图。如图 1 所示，该系统包括半导体处理工具 102、数据输入设备 104、第一原理物理模型 106 以及第一原理仿真处理器 108。图 1 的系统还可包括如虚线框所示的工具级库 110。

半导体处理工具 102 是用于执行与制造集成电路或半导体晶片有关的处理的工具。例如，半导体处理工具 102 可以被实现为材料处理系统、刻蚀系统、光刻胶旋涂系统、光刻系统、电介质涂敷系统（即旋涂玻璃

(SOG) 或旋涂电介质 (SOD) 系统)、沉积系统 (即化学气相沉积 (CVD) 系统或物理气相沉积 (PVD) 系统)、用于热退火的快速热处理 (RTP) 系统、批扩散炉 (batch diffusion furnace)，或用于执行半导体制造处理的任何其他工具。

5 数据输入设备 104 是用于收集与半导体处理工具 102 所执行的处理有关的数据并将收集到的数据输入到第一原理仿真处理器 106 的设备。半导体处理工具 102 所执行的处理可以是表征处理 (即工艺设计或开发)、清洁处理、生产处理或半导体处理工具所执行的任何其他处理。在一个实施例中，数据输入设备 104 可被实现为用于收集关于半导体处理工具 102 本身和/或工具的处理室内包含的环境的数据的物理传感器。这样的数据可包括：流体力学数据，例如处理室内各种位置处的气体速度和压力；电学数据，例如处理室的电学系统内各种位置处的电压、电流和阻抗；化学数据，例如处理室内各种位置处的物质浓度和反应化学性质；热数据，例如处理室内各种位置处的气体温度、表面温度和表面热通量；等离子体处理数据（当使用等离子体时），例如等离子体密度（例如从 Langmuir 探针获得）、离子能量（例如从离子能量谱分析仪获得）；以及力学数据，例如处理室内各种位置处的压力、挠度、应力和应变。

除了工具和工具环境数据以外，数据输入设备 104 还可收集与处理本身有关的数据，或者在工具 102 对其执行处理的半导体晶片上获得的处理结果。在一个实施例中，数据输入设备 104 被实现为耦合到半导体处理工具 102 的度量工具。该度量工具可被配置为测量处理性能参数，例如：刻蚀速率、沉积速率、刻蚀选择性（第一材料被刻蚀的速率与第二材料被刻蚀的速率之比）、刻蚀关键尺寸（例如特征长度或特征宽度）、刻蚀特征各向异性（例如刻蚀特征侧壁轮廓）、膜性质（例如膜应力、孔隙度等）、掩模（例如光刻胶）膜厚度、掩模（例如光刻胶）图案关键尺寸，或半导体处理工具 102 所执行的处理的任何其他参数。

数据输入设备可直接耦合到处理工具 102 和第一原理仿真处理器 106，以自动接收来自工具 102 的数据并将该数据转发到第一原理仿真处理器 106，如图 1 所示。或者，数据输入设备 104 可被实现为用户输入设

备，用来将与半导体处理工具 102 所执行的处理有关的数据间接地提供给仿真处理器 106。例如，数据输入设备 104 可以是键盘，仿真操作者使用其将数据输入到第一原理仿真处理器 106。或者，数据输入设备可以是数据库，用于存储与半导体处理工具 102 过去执行的处理有关的数据。在该 5 实施例中，可以通过使用耦合到半导体处理工具 102 的物理传感器或度量工具来自动填充数据库，和/或者通过手工输入来填充数据库。数据库可以被第一原理仿真处理器 108 自动访问，以将数据输入到处理器。

第一原理物理模型 106 是工具和工具环境的物理属性的模型，并且是执行第一原理仿真和提供用于辅助半导体处理工具所执行的处理的仿真结果所必须的基本等式。因此，第一原理物理模型 106 在某种程度上依赖于被分析的半导体处理工具 102 的类型以及工具中执行的处理。例如，物理模型 106 可包括工具 102 的物理几何结构的空间解析模型，其例如对于化学气相沉积（CVD）室和扩散炉是不同的。类似地，计算流场所必需的第一原理等式与计算温度场所必需的那些等式有很大的不同。物理模型 106 可以是如以下的商业化软件中实现的模型，以计算流场、电磁场、温度场、化学性质、表面化学性质（即刻蚀表面化学性质或沉积表面化学性质），所述商业软件例如：ANSYS Inc., Southpointe, 275 Technology Drive Canonsburg, PA 15317 的 ANSYS; Fluent Inc., 10 Cavendish Ct. Centerra Park, Lebanon, NH 03766 的 FLUENT；或者 CFD Research 15 Corp., 215 Wynn Dr., Huntsville, AL 35805 的 CFD-ACE+。但是，也可使用从第一原理开发的专用或定制模型来解析处理系统内的这些和其他细节。

第一原理仿真处理器 108 是这样的处理设备，其将来自数据输入设备 104 的数据输入应用到第一原理物理模型 108，以执行第一原理仿真。具体而言，第一原理仿真处理器 108 可使用数据输入设备 104 提供的数据来设置用于第一原理物理模型 106 的初始条件和/或边界条件，其然后被仿真模块执行。本发明的第一原理仿真包括但不限于：从 Maxwell 等式导出的电磁场仿真；从连续性、Navier-Stokes 等式和热力学第一定律导出的例如用于质量、动量和能量传输的连续（continuum）仿真；以及从 Boltzmann

等式导出的原子仿真，例如稀薄气体的蒙特卡洛（Monte Carlo）仿真（见 Bird, G.A. 1994. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows, Clarendon Press）。第一原理仿真处理器 108 可被实现为物理上与半导体处理工具 102 集成的处理器或工作站，或者被实现为诸如图 14 的计算机 5 系统 1401 这样的通用计算机系统。第一原理仿真处理器 108 的输出是仿真结果，其被用来辅助半导体处理工具 102 所执行的处理。例如，仿真结果可被用来辅助工艺开发、过程控制和故障检测，并且提供辅助工具处理的虚拟传感器输出，如后面将要描述的那样。

如图 1 中虚线框所示，该系统还可包括工具级库 110，用于存储仿真 10 结果。该库实质上是对过去仿真的结果的汇编，其可用来在将来提供仿真结果。工具级库 110 可被存储在独立的存储设备中，或者存储在与第一原理仿真处理器 108 集成在一起的诸如硬盘之类的计算机存储设备中。

应当理解，图 1 中的系统仅是示例性的，本领域的普通技术人员将很容易知道对用于实现本发明的具体硬件和软件的很多改变。例如，第一原理物理模型 106、第一原理仿真处理器 108 和工具级库 110 的功能可被组合在单个设备中。类似地，数据输入设备 104 的功能可与半导体处理工具 102 和/或第一原理仿真处理器 108 的功能进行组合。为了实现这些变化和其他变化，单个计算机（例如图 14 的计算机系统 1401）可被编程以执行 15 图 1 所示的设备的两个或更多个的专用功能。另一方面，两个或更多个被编程的计算机可以与图 1 所示的设备之一进行替换。诸如冗余和复制这样的分布式处理的原理和优点也可根据需要被实现，以例如提高系统的鲁棒性 20 和性能。

图 2 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来辅助 25 半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图。图 2 所示的过程例如可运行在图 1 的第一原理仿真处理器 104 上。如图 2 所示，过程开始于步骤 201，其中半导体处理工具 102 执行与处理有关的数据输入。如上所述，输入数据可以是与工具/工具环境的物理属性有关的数据，和/或与工具在半导体晶片上执行的处理或这种处理的结果有关的数据。同样如上所述，输入数据可以从耦合到第一原理仿真处理器 104 的物理传感器或度量工具

直接输入，或者可以从手工输入设备或数据库间接输入。当数据由手工输入设备或数据库间接输入时，数据可以是自先前运行的处理而记录的数据，例如来自先前运行的处理的传感器数据。或者，数据可以被仿真操作者设置为用于特定仿真的“最佳已知输入参数”，其可以与处理期间收集 5 的数据有关或者可以不与处理期间收集的数据有关。处理工具输入的输入数据类型一般依赖于希望的仿真结果。

除了将输入数据输入以外，第一原理仿真处理器 104 还输入第一原理物理模型 106，如步骤 203 所示。步骤 203 包括输入通过模型被建模的工具的物理属性，以及执行由半导体处理工具 102 所执行的处理的希望属性 10 的第一原理仿真所必需的被编码在软件中的第一原理等式。第一原理物理模型 106 可从外部存储器或与处理器集成的内部存储器设备被输入处理器。此外，虽然在图 2 中步骤 203 被示为跟在步骤 201 之后，但是应当理解，第一原理仿真处理器 104 可同时执行这些步骤，或者以与图 2 所示顺序相反的顺序执行这些步骤。

15 在步骤 205，第一原理仿真处理器 108 使用步骤 201 的输入数据和步
骤 203 的第一原理物理模型，来执行第一原理仿真，并提供仿真结果。步
骤 205 可以与半导体处理工具所执行的处理并发地执行，或者可以不与半
导体处理工具所执行的处理并发地执行。例如，能以短的求解时间执行的
20 仿真可与工具处理并发地运行，并且结果被用来控制该处理。计算较为密
集的仿真可不与工具处理并发地执行，并且仿真结果可被存储在库中以便
以后检索。在一个实施例中，步骤 205 包括使用步骤 201 的输入数据来设
置步骤 205 中提供的物理模型的初始和/或边界条件。

一旦仿真被执行，仿真结果就被用来辅助半导体处理工具 102 所执行
的处理。这里使用的术语“辅助半导体处理工具所执行的处理”包括例如
25 使用仿真结果来检测处理中的故障、控制处理、表征制造过程的处理、提
供与处理有关的虚拟传感器读数，或与辅助半导体处理工具 102 所执行的
处理相结合的对仿真结果的其他使用。

图 3 是根据本发明实施例的可用来提供第一原理仿真技术以辅助半导
体处理工具所执行的处理的网络体系结构的框图。如图所示，该网络体系

结构包括经由因特网 314 连接到远程资源的设备制造工厂。该设备制造工厂包括连接到各自的仿真模块 302 的多个半导体处理工具 102。如参考图 1 所描述的，各个半导体处理工具 102 是用于执行与制造诸如集成电路之类的半导体器件有关的处理的工具。各个仿真模块 302 是计算机、工作站 5 或能够执行第一原理仿真技术以辅助半导体处理工具 102 所执行的处理的任何其他处理设备。因此，每个仿真模块 302 都包括参考图 1 描述的第一原理物理模型 106 和第一原理仿真处理器 108，以及可能有助于执行第一原理仿真的任何其他硬件和/或软件。此外，仿真模块 302 被配置为使用任何已知的物理通信协议与工厂级的先进过程控制（APC）控制器通信。每 10 个仿真模块 302 可被实现为诸如图 14 的计算机系统 1401 之类的通用计算机。

虽然未在图 3 中示出，但是每个仿真模块 302 与用于输入与工具 102 所执行的处理有关的数据的数据输入设备相关联。在图 3 的实施例中，仿真模块 302 直接耦合到各自的工具 102，因此，数据输入设备被实现为物理上安装在各自的工具 102 上的物理传感器和/或度量工具。但是，如上所述，数据输入设备可以被实现为由仿真模块操作者使用的手工输入设备或者数据库。此外，每个仿真模块 302 可被配置为将信息存储在诸如库 306 这样的工具级库中并且从这样的库获取信息。再次如上所述，工具级库实质上是对将来的仿真可能有用的过去的仿真结果的汇编。

20 在本发明的一个实施例中，每个仿真模块 302 经由网络连接被连接到主工厂级 APC 控制器 304。如图 3 所示，工厂级 APC 控制器 304 还可连接到独立仿真模块 308 和工厂级库 310，并经由因特网 314 和通信服务器 316 连接到独立仿真模块 312。

独立仿真模块 308 和 312 是可被用来帮助仿真模块 302 执行计算密集 25 的第一原理仿真的计算资源，如下所述。工厂级库 310 是用于存储从网络系统的任何仿真模块获得的仿真结果的数据库。工厂级 APC 控制器 304 是任何合适的工作站、服务器或用于与仿真模块 302、308 和 312 通信并且在工厂级库 310 中存储信息和从工厂级库 310 获取信息的其他设备。工厂级 APC 控制器 304 还基于仿真模块 302 的仿真结果，辅助半导体处理工具

102 所执行的处理。例如，APC 控制器可被配置为从仿真模块接收仿真结果，并使用仿真结果来实现用于工具 102 中任何一个的处理调整和/或校正的控制方法。工厂级 APC 控制器 304 使用任何合适的协议与仿真模块 302、308 和 312 以及工厂级库 310 通信，并且可例如使用图 14 的计算机 5 系统 1401 来实现。

本发明的发明人发现，图 3 的网络配置提供了计算和存储资源共享，其允许合理的求解速度的很宽范围的第一原理仿真结果，从而提供了能够辅助工作所执行的处理的有意义的工具上仿真能力。具体而言，虽然简单仿真可由工具的专用仿真模块执行，但是需要更多计算资源的复杂仿真可 10 使用代码并行化技术在网络中的可能是工具上的也可能是独立的多个仿真模块上执行。甚至当前正进行预防性维修的设备中的工具上仿真模块也可被用作为共享的计算资源，只要对该仿真模块供电即可。类似地，用于以后的查找的仿真结果可被存储在工厂网络中任意位置处的库（例如存储设备）中，并在进行对诊断或控制数据的查找时被所有工具访问。

本发明的发明人还发现，图 3 的网络体系结构提供了这样的能力，其将针对一个条件集合的在一个处理工具 102 处得到的模型结果分发到以后在相同或类似条件下工作的其他类似或等同的工具，从而消除了多余的仿真。仅在工具上和独立模块处针对唯一的处理条件运行仿真，并重新使用来自已经知道仿真的解的类似工具的结果，允许了快速开发包含可在很大 15 范围处理条件上被用于诊断和控制的结果的查找库。此外，将已知解重新用作用于第一原理仿真的初始条件，减少了计算需要，并且辅助了在与在线控制一致的时间帧内产生仿真解。类似地，图 3 的网络体系结构还提供了如下能力：将对物理模型和模型输入参数作出的改变和细化从一个仿真模块传播到网络中的其他仿真模块。例如，如果在处理过程和模型的并行 20 执行期间，确定某些输入参数需要改变，则这些改变可经由网络被传播到所有其他仿真模块和工具。

图 3 的网络体系结构还允许到远程计算资源的可选连接，所述远程计算资源包括可帮助执行仿真任务并将结果传送回设备制造者工厂的仿真模块。可通过诸如虚拟专用网络这样的安全连接来连接到远程资源。这样的

安全连接还可被建立到提供计算资源以支持处理工具上的第一原理仿真的第三方。类似地，远程通信服务器可充当用于大多数最新软件、模型、输入参数和仿真结果的“交换所”，其可被多个客户使用，从而进一步提高创建准确的结果库的速度。这些更新后的模型可从客户站点被上载到远程
5 资源，并且被分析，并且如果确定出细化适用于大多数客户，则使细化经由通信服务器和到其他客户的因特网连接而变得可用。

因此，本发明的发明人已经发现了有意义的工具上仿真能力，其可辅助工具所执行的处理，而不需要专用于工具的昂贵的计算机。基于这个发现，本发明的发明人还开发了新颖的工具上仿真系统，用于提供虚拟传感器读数、提供表征数据以用于开发工具所执行的处理，以及用于提供过程
10 故障检测和过程控制能力。本发明的工具上仿真的这些辅助半导体处理工具所执行的处理的用途可被实现在单个工具和仿真模块上，或者被实现在诸如图 3 所示的计算和存储资源的互连网络上。

具体而言，工具上仿真结果可被用来增加来自物理传感器的测量数据
15 集合。当代的半导体处理工具的缺点之一是用来表征当前运行的处理（尤其是生产工具上的处理）的传感器数量较少。如果所需传感器的数量很大，则在工具上安装更多的传感器成为很昂贵的建议，而且在很多情形下，在工具上没有用于修改和安装额外的传感器的剩余空间。然而，即使在生产工具中，也存在需要在不能安装传感器的位置进行“测量”的情况。
20 假设存在使用其他实际测量值作为初始和/或边界条件来对测量进行预测的鲁棒的模型，本发明的工具上第一原理仿真能力提供了所需的“测量”，而无需任何额外硬件。在本文中，术语“虚拟传感器”被用来指这样的“传感器”，其中测量值实际上是由来自工具上仿真的预测提供的。

图 4 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来提供
25 可辅助半导体处理工具所执行的处理的虚拟传感器读数的过程的流程图。

图 4 所示的过程例如可运行在图 1 的第一原理仿真处理器 108 上，或者使用图 3 的网络体系结构。如图 4 所示，过程开始于步骤 401，其中输入数据以获得与半导体处理工具 102 所执行的处理有关的虚拟传感器读数。在步骤 401 输入的数据类型可以是参考图 2 的步骤 201 描述的任意数据类

型，只要输入的数据使得第一原理仿真能够提供虚拟传感器仿真结果。因此，输入的数据可以是与工具/工具环境的物理属性、工具在半导体晶片上执行的处理，或者是这样的处理的结果有关的数据。此外，步骤 401 的输入数据可以从耦合到第一原理仿真处理器 108 的物理传感器或度量工具直接输入，或者从手工输入设备或数据库间接输入。

在使用度量数据作为用于获取虚拟传感器读数的输入数据的一个示例中，度量数据与刻蚀掩模图案有关，并且下层膜厚度可充当到第一原理刻蚀处理模型和后续执行的处理的输入。在执行刻蚀处理之前，对掩模图案的测量可被提供作为到刻蚀处理模型的输入，其中对掩模图案的测量包括给定衬底批次的给定衬底上的一个或多个位置（例如中心和边缘）处的（一个或多个）图案关键尺寸和掩模膜厚度。此外，对下层膜厚度（即，要被刻蚀的膜的膜厚度）的测量也可充当到刻蚀处理模型的输入。在执行针对特定处理配方和上述度量输入数据的第一原理刻蚀处理模型之后，例如在中心和边缘处完成刻蚀处理的时间可被计算作为输出，该输出可用来确定过度刻蚀时段和例如保持中心到边缘特征关键尺寸所必需的任何处理调整。然后，这些结果可被用来调整用于当前或即将处理的衬底批次的处理配方。

在数据通过手工输入设备或数据库被间接输入的情况下，数据可以是自先前运行的处理被记录的数据，例如来自先前运行的处理的传感器数据。或者，数据可以被仿真操作者设置为用于特定仿真的“最佳已知输入参数”，其可以与在处理期间收集的数据有关，或者可以不与在处理期间收集的数据有关。处理工具输入的输入数据类型一般依赖于要获得的希望的虚拟传感器测量。

除了输入输入数据以外，第一原理仿真处理器 108 还输入第一原理物理模型，以模拟物理传感器，如步骤 403 所示。步骤 403 包括输入通过模型被建模的工具的物理属性，以及执行第一原理仿真以获得虚拟传感器读数所必需的第一原理基本等式，其中虚拟传感器读数可代替与半导体处理工具 102 所执行的处理有关的物理传感器读数。步骤 403 的第一原理物理模型可从外部存储器或集成到处理器的内部存储器设备被输入到处理器。

此外，虽然在图 4 中步骤 403 被示为跟在步骤 401 之后，但是应当理解，第一原理仿真处理器 104 可同时执行这些步骤，或者以与图 4 所示顺序相反的顺序执行这些步骤。

在步骤 405，诸如图 1 的处理器 108 之类的第一原理仿真处理器使用 5 步骤 401 的输入数据和步骤 403 的第一原理物理模型来执行第一原理仿真，并提供虚拟传感器测量。步骤 405 可以与半导体处理工具所执行的处理不同时执行，也可以与半导体处理工具所执行的处理并发执行。不与晶片处理并发运行的仿真可使用根据具有相同或相似处理条件的先前处理过程存储的初始和边界条件。如前面参考图 2 所述，这适用于仿真的运行比 10 晶片处理慢的情形；例如，在晶片盒之间甚至用于预防性维修的工具停机期间的时间可被用来使仿真模块为所需测量求解。这些“测量”以后可在晶片处理期间被显示，就好像它们是与晶片处理并发地被求解的一样，而且好像处理是在与仿真过程相同的处理条件下被执行的一样。

当第一原理仿真与半导体工具所执行的处理并发运行时，在步骤 401 15 中输入的数据可以是来自安装在半导体处理工具上用于在工具所运行的处理期间感应预定参数的物理传感器的数据。在本实施例中，通过使用物理传感器测量来重复更新第一原理仿真模型的边界条件，稳定状态仿真与处理并发地重复运行。生成的虚拟测量数据对工具操作者进行监控是很有用的，并且与物理传感器进行的测量没有任何区别。但是，仿真优选地能够 20 快速运行，从而虚拟测量可以以合理的速率（例如“采样速率”）被更新。第一原理仿真还可在不使用物理传感器输入数据的情况下被并发运行。在本实施例中，仿真的初始和边界条件基于工具处理之前的工具的初始设置和运行之前的物理传感器的读数而被设置；然后，全部依赖于时间的仿真在工具处理期间但是独立于工具处理而被运行。获得的虚拟测量值 25 可被显示给操作者并被操作者分析，就像任何其他被实际测量的工具参数一样。如果仿真运行得比晶片处理快，则仿真结果在晶片处理期间进行的相应的实际测量之前就已知了。提前知道测量值允许实现基于这些测量的各种前馈控制功能，如下所述。

在图 4 的过程的另一实施例中，第一原理仿真可通过比较虚拟传感器

测量值和相应的物理传感器测量值来以自校正模式执行。例如，在利用某种处理配方/工具条件的第一次运行期间，工具操作者将使用模型的“当时最佳已知输入参数”。在每个仿真过程期间和之后，（一个或多个）仿真模块可在由物理传感器进行实际测量的位置处将预测的“测量值”与实际
5 测量值进行比较。如果检测到明显差别，则优化和统计方法可被用来改变输入数据和/或第一原理物理模型本身，直到预测的和实际的测量的数据达到较好的一致。依赖于情况，这些额外的细化的仿真过程可与下一晶片/晶片盒并发地进行，或者在工具离线时运行。一旦知道了细化的输入参数，
10 它们就可被存储在库中以便以后使用，使得不再需要用于相同处理条件的后续输入参数和模型细化。此外，模型和输入数据的细化可经由图 3 的网络设置被分发到其他工具，使得不再需要在其他这些工具中运行自校正。

一旦仿真被执行以提供虚拟传感器测量，虚拟传感器测量就被用来辅助半导体处理工具 102 所执行的处理。例如，虚拟传感器测量可被用作到工具控制系统的输入用于各种目的，例如与实际传感器测量的比较、处理
15 中的配方改变、故障检测和操作者警告、处理条件数据库生成、模型和输入数据的细化等等。这些是工具控制系统基于物理传感器进行的测量而执行的典型动作。虚拟传感器测量的使用可以被用来表征或控制处理，如下所述。此外，虚拟传感器测量可被存储在计算机存储介质上的库中，以便以后使用，使得不再需要重复具有相同输入条件的仿真过程，除非模型或
20 输入条件已经有所改变（例如在细化期间）。

除了提供虚拟传感器读数以外，本发明的工具上第一原理仿真能力还辅助半导体工艺的开发。更具体而言，通过使用当前的实验设计工艺开发手段来表征工具上的处理需要用于操作参数的每种变化的不同处理过程，这导致时间耗费以及昂贵的表征过程。本发明的工具上第一原理仿真能力允许在工具本身上的参数变化和假设分析，而无需包括被第一原理仿真很好地建模的那些处理参数的变化的实际处理过程。这允许大大减少表征工具上的处理所需的实验次数。
25

图 5 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来表征半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图。图 5 所示的过程例如可运

行在图 1 的第一原理仿真处理器 108 上，或者使用图 3 的体系结构。如图 5 所示，过程开始于步骤 501，其中输入用于获得与半导体处理工具 102 所执行的处理有关的表征信息的数据。在步骤 501 中输入的数据可以是参考图 2 的步骤 201 描述的任何数据类型，只要输入数据使得第一原理仿真能够提供用于表征半导体处理工具所执行的处理的仿真结果。因此，该输入数据可以是与工具/工具环境的物理属性、工具在半导体晶片上执行的处理或者这种处理的结果有关的数据。此外，步骤 501 的输入数据可以从耦合到第一原理仿真处理器 104 的物理传感器或度量工具直接输入，或者从手工输入设备或数据库间接输入。数据还可以从如参考图 4 所述的提供虚拟传感器读数的仿真模块输入。在数据通过手工输入设备或数据库间接输入的情况下，数据可以是从先前运行的处理记录的数据，例如来自先前运行的处理的传感器数据。或者，数据可以被仿真操作者设置为用于特定仿真的“最佳已知输入参数”，其可以与处理期间收集的数据有关，或者可以不与处理期间收集的数据有关。处理工具输入的输入数据类型一般依赖于要获得的希望的表征数据。

除了输入输入数据以外，第一原理仿真处理器 108 还输入用于表征处理的第一原理物理模型，如步骤 503 所示。步骤 203 包括输入通过模型被建模的工具的物理属性，以及执行第一原理仿真以获得用于半导体处理工具 102 所执行的处理的表征数据所必需的一般被编码在软件中的第一原理基本等式。步骤 503 的第一原理物理模型可从外部存储器或集成到处理器的内部存储器设备被输入到处理器。此外，虽然在图 5 中步骤 503 被示为跟在步骤 501 之后，但是应当理解，第一原理仿真处理器 108 可同时执行这些步骤，或者以与图 5 所示顺序相反的顺序执行这些步骤。

在步骤 505，例如图 1 的处理器 108 之类的第一原理仿真处理器使用步骤 501 的输入数据和步骤 503 的第一原理物理模型，来执行第一原理仿真，并提供用来表征处理的仿真结果。步骤 505 可以与半导体处理工具所执行的处理不同时地被执行，也可与半导体处理工具所执行的处理并发地被执行。不与工具处理并发运行的仿真可使用根据具有相同或相似处理条件的先前的处理过程存储的初始和边界条件。如上面参照图 2 所述，这适

用于仿真运行得比晶片处理慢的情形，并且在晶片盒之间甚至用于预防性维修的工具停工期间的时间可被用来使仿真模块为所需仿真结果求解。

在第一原理仿真与半导体处理工具所执行的处理并发运行的情况下，第一原理仿真可提供对与通过仿真所执行的实验处理所测试的参数相同或不同的参数的表征数据。例如，第一原理仿真可被执行，以提供通过半导体处理工具所执行的实验处理的设计而被测试的参数的变化。或者，第一原理仿真可提供与在半导体处理工具上执行的实验中被测试的参数不同的参数的表征数据。

一旦在步骤 505 执行仿真，仿真结果就被用作用于表征半导体处理工具所执行的处理的数据集合的一部分，如步骤 507 所示。如上所述，将仿真结果用作表征数据可显著减少或消除表征处理的实验设计手段所需的昂贵的实验和时间的消耗。该表征数据集合可被存储在库中，以便在工具执行的以后的处理中使用。

本发明的工具上第一原理仿真能力还可被用来提供故障检测和过程控制。半导体处理工具所执行的处理的故障检测和过程控制的现有方法在本质上大多是统计性的。这些方法所需的实验设计方法具有在改变工具的所有操作参数的同时执行多个处理过程的负担。这些处理过程的结果被记录在用于查找、内插、外插、灵敏度分析等的数据库中，以便感应或控制半导体处理工具的处理。

但是，为了使这些统计方法能够在变化很大的操作条件下可靠地感应和控制工具，数据库必须足够大，以覆盖所有操作条件，而这使得数据库的产生相当麻烦。本发明的工具上第一原理仿真能力不需要创建任何这种数据库，因为给定准确的工作模型和准确的输入数据，对处理条件的工具响应从物理第一原理被直接和准确地预测。但是，随着在不同操作条件下的更多运行时信息变得可用，统计方法还是可被用来细化工作模型和输入数据，但是本发明并不要求具有这样的信息来用于处理感应和控制能力。事实上，处理模型可提供这样的基础，在该基础上，可通过使用处理模型来将那些已知的经验解扩展到在物理上尚未得到经验结果的“解”，来对处理进行经验性控制。因此，本发明在一个实施例中通过用第一原理仿真

模块解来补充已知（即在物理上观察到的）解，从而经验性地表征处理工具，其中仿真模块解与已知解一致。最后，随着更好的统计进展，仿真模块解可被经验解的数据库取代。

在本发明的一个实施例中，工具上第一原理仿真不需要创建或访问数
5 据库，因为对处理条件的工具响应是从第一原理直接预测的。随着在不同操作条件下的更多运行时信息变为可用，统计方法还是可被用来细化工作模型和输入数据，但是本实施例并不要求具有这样的信息来用于处理感应和控制以及故障检测。

图 6 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来控制半导体
10 处理工具所执行的处理的系统的框图。如图所示，该系统包括耦合到先进过程控制（APC）基础设施 604 的处理工具 602，APC 基础设施 604 包括仿真模块 606、APC 控制器 608 和库 610。度量工具 612 和远程控制器 614 也耦合到 APC 基础设施 604。如图 6 所示，库 610 可包括解数据库 616 和栅格（grid）数据库 618。

15 处理工具 602 可被实现为参考图 1 描述的半导体处理工具 102。从而，处理工具 602 例如可以是材料处理系统、刻蚀系统、光刻胶旋涂系统、光刻系统、电介质涂敷系统、沉积系统、用于热退火的快速热处理（RTP）系统，和/或批扩散炉或其他合适的半导体制造处理系统。如图 6 所示，处理工具 602 提供工具数据到仿真模块 606 并从 APC 控制器 608 接收控制数据，如下所述。处理工具 602 还耦合到度量工具 612，其提供处理结果信息到仿真模块 606。
20

仿真模块 606 是计算机、工作站或能够执行第一原理仿真技术以控制工具 602 所执行的处理的其他处理设备，因此可被实现为参考图 3 描述的仿真模块 302。因此，仿真工具 602 包括参考图 1 描述的第一原理物理模型 106 和第一原理仿真处理器 108，以及可能有助于执行第一原理仿真以控制处理的任何其他硬件和/或软件。在图 6 的实施例中，仿真模块 606 被配置为接收来自工具 602 上的一个或多个诊断的工具数据，以用于仿真模型执行期间的处理和后续使用。工具数据可包括上述流体力学数据、电学数据、化学数据、热和机械数据，或者上面参考图 1 和图 2 描述的任何输
25

入数据。在图 6 的实施例中，工具数据可被用来确定用于要在仿真模块 606 上执行的模型的边界条件和初始条件。模型例如可包括上述 ANSYS、FLUENT 或 CFD-ACE+代码，以计算流场、电磁场、温度场、化学性质、表面化学性质（即刻蚀表面化学性质或沉积表面化学性质）等。从第一原理开发的模型可解析处理系统内的细节，以提供用于工具的过程控制的输入。

APC 控制器 608 耦合到仿真模块 606，以接收来自仿真模块 606 的仿真结果，以及使用该仿真结果来实现用于工具 602 上所执行的处理的过程调整/校正的控制方法。例如，可进行调整来校正处理不均匀性。在 10 本发明的一个实施例中，以当前在处理工具 602 上运行的处理的过程解为中心，在仿真模块 606 上执行一个或多个扰动解。然后，扰动解可例如利用非线性优化方案而被使用，以确定用于应用校正的 n 维空间内的方向，其中非线性优化方案例如是最速下降方法 (Numerical Methods, Dahlquist & Bjorck, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ, 1974, p.441; Numerical Recipes, Press et al., Cambridge University Press, Cambridge, 1989, pp.289-15 306)。然后，校正可被 APC 控制器 608 实现在处理工具 602 上。例如，给定当前初始/边界条件，至少一个工具数据（即物理传感器数据）或来自仿真的当前执行的结果可表明处理系统呈现出衬底上的非均匀静压场。非均匀性又可引起用于量化衬底处理的性能的衬底上的观察到的一个度量 20（即关键尺寸、特征深度、膜厚度等）的非均匀性，所述度量由度量工具测量。通过扰动到当前的仿真执行的输入参数，可获得一组扰动解，以便确定为了去除或减小静压不均匀性而应采取的最佳“路径”。例如，用于处理的输入参数可包括压力、功率（被提供给电极以产生等离子体）、气体流率，等等。在一次扰动一个输入参数并保持所有其他输入参数恒定的 25 同时，灵敏度矩阵可被形成，其可与上述优化方案一起用来导出适于校正处理非均匀性的校正。

在本发明的其他实施例中，仿真结果结合公式化的主元分析 (PCA) 模型一起使用，PCA 模型在题为 “Method of detecting, identifying, and correcting process performance” 的未决美国专利申请 No. 60/343174 中有所

描述，该申请的全部内容通过引用被包含于此。其中，使用多变量分析（即 PCA），可以确定被仿真的特征（signature）（即仿真模型结果的空间分量）和一组（至少一个）可控处理参数之间的关系。该关系可被用来细化与处理性能参数（即模型结果）相对应的数据配置（data profile）。

5 主元分析确定半导体处理工具的仿真的结果（或预测的输出）的空间分量和一组（至少一个）控制变量（或输入参数）之间的关系。确定出的关系被用来确定对所述至少一个控制变量（或输入参数）的校正，以最小化空间分量的大小，从而改善（或降低）仿真结果（或者测量结果，如果可用的话）的不均匀性。

10 如上所述，图 6 中耦合到仿真模块 606 的库 610 被配置为包括解数据库 616 和栅格数据库 618。解数据库 616 可包括解的粗 n 维数据库，n 维空间的阶数 n 由给定的求解算法的独立参数的数目决定。当仿真模块 606 获得用于给定的处理过程的工具数据时，库 610 可基于模型输入而被搜索，以确定最接近的拟合解。根据本发明，该解可被用作为后续的第一原理仿
15 真的初始条件，从而减少了仿真模块为了提供仿真结果而需要执行的迭代次数。利用每次模型执行，新的解可被添加到解数据库 616。此外，栅格数据库 618 可包括一个或多个栅格集合，每个栅格集合针对一个给定处理工具或处理工具度量。每个栅格集合可包括一个或多个具有从粗到细的不同栅格分辨率的栅格。通过执行多栅格求解技术（即在粗栅格上对仿真结
20 果求解，然后在更细的栅格上求解，然后用最细的栅格，等等），可以利用对栅格的选择来减少求解时间。

度量工具 612 可被配置为测量处理性能参数，例如：刻蚀速率、沉积速率、刻蚀选择性（第一材料被刻蚀的速率与第二材料被刻蚀的速率之比）、刻蚀关键尺寸（例如特征长度或宽度）、刻蚀特征各向异性（例如刻蚀特征的侧壁轮廓）、膜特性（例如膜应力、孔隙率等）、掩模（例如光刻胶）膜厚度、掩模（例如光刻胶）图案关键尺寸，或者半导体处理工具所执行的处理的任何其他参数。远程控制器 612 与仿真模块 606 交换信息，包括模型解算机参数（即解算机参数更新）、解状态、模型解和解收敛历史。

图 7 是示出根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图。该流程图开始于步骤 702，用于在例如处理工具 602 这样的处理工具内处理一块或一批衬底。在步骤 704，工具数据被测量并且被提供作为到例如仿真模块 606 这样的仿真模块的输入。然后，边界条件和初始条件被加在仿真模块的第一原理物理模型上，以设置模型，如步骤 706 所示。在步骤 708，第一原理物理模型被执行，以提供第一原理仿真结果，其被输出到例如图 6 的 APC 控制器 608 这样的控制器。然后，控制器从仿真结果确定控制信号，如步骤 710 所示。在任意时刻，例如从一个过程到另一过程或从一个批次到另一批次的时刻，操作者都有机会选择要在 APC 控制器 608 内采用的控制算法。例如，APC 控制器可利用处理模型扰动结果或 PCA 模型结果。在过程间或批次间，使用仿真结果，处理可被控制器调整/校正，如步骤 712 所示。

在本发明的另一实施例中，经验模型可与第一原理仿真结合使用，以提供对处理工具所执行的处理的控制。图 8 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和经验模型来控制半导体处理工具所执行的处理的系统的框图。如图所示，该系统包括耦合到先进过程控制（APC）基础设施 804 的处理工具 802，APC 基础设施 804 包括仿真模块 806 和 APC 控制器 808。度量工具 812 和远程控制器 814 也耦合到 APC 基础设施 804。这些部件类似于参考图 6 描述的相应部件，但是图 8 的部件被进一步配置为在考虑经验模型的情况下工作。因此，这些相似的部件将不再参考图 8 进行描述。

如图 8 所示，系统包括模型分析处理器 840，其耦合到仿真模块 806，并被配置为接收来自模型 806 的仿真结果。在图 8 的实施例中，模型分析包括从没被维度化的仿真结果构建经验模型。随着仿真结果在过程间或批次间的基础上被接收，经验模型被构建并存储在经验模型库 842 中。例如，处理工具 802 经历了经过产量的逐渐增加而从处理开发到量产的处理周期历史。在这些处理周期中，工具的处理室通过室熟化（qualification）和陈化（seasoning）而从“干净的”室演化为室清洁和维修前的“老化（aged）”室。在若干维修周期之后，经验模型可演化为包

括与特定处理工具及其相关处理相对应的参数空间的在统计上足够的样本。换言之，通过清洁周期、处理周期和维修周期，工具 802（在仿真模块的帮助下）固有地确定了参数空间的边界。最后，存储在库 842 中的经演化经验模型可取代基于第一原理仿真的一般是更密集的处理模型，并且可提供到 APC 控制器的输入以用于处理调整/校正。
5

如图 8 所示，远程控制器 814 可被耦合到经验模型库 842，以监控经验模型的演化，并且执行判决以推翻仿真模块控制器输入并选择经验模型控制器输入。此外，度量工具 814 可被耦合到经验模型库（该连接未被示出），以类似地提供输入到经验模型库以用于校准。

10 图 9 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和经验模型来控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图。该流程图开始于步骤 902，其中在例如处理工具 802 这样的处理工具内处理一块或一批衬底。在步骤 904，工具数据被测量并且被提供作为到例如仿真模块 806 这样的仿真模块的输入。然后，边界条件和初始条件被施加在仿真模块的第一原理物理模型上，以设置模型，如步骤 906 所示。在步骤 908，第一原理物理模型被执行，以提供第一原理仿真结果，其被输出用于分析和构建经验模型，如步骤 910 所示。
15

在任意时刻，例如从一个过程到另一过程或从一个批次到另一批次的时刻，操作者都有机会基于第一原理仿真或经验模型来选择过程控制。在
20 建立经验模型的某些时候，操作者可选择推翻第一原理仿真，并赞同使用经验模型，该经验模型此时可使用数据的库和内插/外插方案，来迅速提取用于给定工具数据集合的控制器输入。因此，判断块 912 确定是使用第一原理仿真还是经验模型来控制处理。如果在步骤 912 确定不推翻，则处理进行到步骤 914，使用 APC 控制器从仿真结果确定控制信号。当选择模型
25 推翻时，APC 控制器从经验模型确定控制信号，如步骤 916 所示。在另一实施例中，第一原理仿真结果与经验建模的组合可被 APC 控制器用来控制处理。如步骤 918 所示，使用步骤 914 所示的模型输出或步骤 916 所示的经验模型输出，处理可被控制器调节/校正。因此，图 9 的过程示出了原位（*in-situ*）构建经验模型的方法，并且一旦变得在统计上明显，经验模型

就可推翻计算密集的仿真处理模型。在过程控制期间，可以采用例如指数加权移动平均（EWMA）滤波器这样的滤波器，以便仅给予被请求的校正的一部分。例如，滤波器的应用可采用形式 $X_{\text{new}} = (1 - \lambda) X_{\text{old}} + \lambda (X_{\text{predicted}} - X_{\text{old}})$ ，其中 X_{new} 是给定的输入参数（控制变量）的新值， X_{old} 是给定的输入参数的旧（或先前用过的值）， $X_{\text{predicted}}$ 是基于上述技术之一的输入参数的预测值， λ 是范围为 0 到 1 的滤波器系数。

在本发明的另一实施例中，故障检测器/分类器可与第一原理仿真一起使用，以提供对处理工具所执行的处理的控制。图 10 是根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术和故障检测器来控制半导体处理工具所执行的处理的系统的框图。如图所示，该系统包括耦合到先进过程控制（APC）基础设施 1004 的处理工具 1002，该 APC 基础设施 1004 包括仿真模块 1006 和 APC 控制器 1008 以及库 1010。虽然未在图 10 中示出，但是库 1010 包括解数据库和栅格数据库。度量工具 1012 和远程控制器 1014 也耦合到 APC 基础设施 1004。这些部件与参考图 6 描述的相应部件类似，只是图 10 的部件被进一步配置为在考虑到故障检测的情况下工作。因此，这些类似的部件不再参考图 10 进行描述。

如图 10 所示，该系统包括耦合到仿真模块 1006 的故障检测器 1040，其被配置为接收来自模块 1006 的仿真结果。例如，仿真模块 1006 的输出可包括数据配置。然后，该数据配置可作为到例如在故障检测设备 1040 中执行的部分最小二乘（PLS）这样的多变量分析的输入。在 PSL 分析中，一组载荷（相关）系数可被定义，该系数将工具扰动数据 (\bar{X}) 与处理性能数据 (\bar{Y}) 联系起来，从而描述仿真结果 Y_{sim} 和实际结果 Y_{real} 之间的差别。

例如，使用 PLS，工具扰动数据的观测值集合被故障检测器 1040 从 25 仿真模块接收。工具扰动数据以当前模型解为中心在原位确定，或者使用处理模型在 n 维解空间内被预先确定。 n 维参数空间的阶数 (n) 与解空间中的独立参数（即压力、质量流率、温度等；见下）的数目有关。

对于给定的扰动集合，各扰动的微分（即 $\partial Y / \partial v_1, \partial Y / \partial v_2, \partial Y / \partial v_3$ ；其中 v_1, v_2, v_3 是不同的独立参数）被存储在矩阵 \bar{X} 内。对于每个观测集

合，工具扰动数据可被存储为矩阵 \bar{X} 中的列，而性能数据（即 Y_{sim} - Y_{real} ）可被存储为矩阵 \bar{Y} 中的列。因此，一旦矩阵 \bar{X} 被形成，则每一行代表不同的扰动观测值，每一列代表不同的工具数据参数。一旦矩阵 \bar{Y} 被形成，则每一行代表不同的观测值，每一列代表不同的处理性能参数。一般
5 地，矩阵 \bar{X} 可以是 $m \times n$ 矩阵，而矩阵 \bar{Y} 可以是 $m \times p$ 矩阵。一旦所有数据都被存储在矩阵中，则数据可根据需要以平均值为中心和/或被归一化。存储在矩阵列中的数据的以平均值为中心的处理涉及计算列元素的平均值并从每个元素减去该平均值。此外，矩阵的列中的数据可通过列中数据的标准差归一化。

10 一般地，对于多变量分析，工具数据和处理性能数据之间的关系可被表达如下：

$$\bar{X}\bar{B} = \bar{Y}; \quad (1)$$

其中 \bar{X} 代表上述 $m \times n$ 矩阵， \bar{B} 代表 $n \times p$ ($p < n$) 载荷（或相关）矩阵， \bar{Y} 代表上述 $m \times p$ 矩阵。一旦数据矩阵 \bar{X} 和 \bar{Y} 被形成，就使用 PLS 分析来建立被设计为最好地近似 \bar{X} 和 \bar{Y} 空间并最大化 \bar{X} 与 \bar{Y} 之间的相关性的关系。
15

在 PLS 分析模型中，矩阵 \bar{X} 和 \bar{Y} 被分解如下：

$$\bar{X} = \bar{T}\bar{P}^T + \bar{E} \quad (2a)$$

$$\bar{Y} = \bar{U}\bar{C}^T + \bar{F} \quad (2b)$$

以及

$$20 \quad \bar{U} = \bar{T}^T + \bar{H} \quad (2c)$$

其中 \bar{T} 是总结 \bar{X} 变量的得分 (score) 的矩阵， \bar{P} 是用于矩阵 \bar{X} 的载荷的矩阵， \bar{U} 是总结 \bar{Y} 变量的得分的矩阵， \bar{C} 是表达 \bar{Y} 和 \bar{T} (\bar{X}) 之间的相关性的权值矩阵， \bar{E} 、 \bar{F} 和 \bar{H} 是残差矩阵。此外，在 PLS 分析模型中，存在将 \bar{U} 和 \bar{X} 进行相关的被称为权值的额外载荷 \bar{W} ，其被用于计算 \bar{T} 。

25 总的来说，PLS 分析在几何上对应于对表现为多维空间中的点的 \bar{X} 和 \bar{Y} 数据两者进行直线、平面或超平面拟合，其目的是紧密近似原始数据表 \bar{X} 和 \bar{Y} ，并最大化超平面上的观测位置之间的协方差。

图 11 提供了到 PLS 分析的数据输入 \bar{X} 和 \bar{Y} 的示意表示和相应的输出 \bar{T} 、 \bar{P} 、 \bar{U} 、 \bar{C} 、 \bar{W} 、 \bar{E} 、 \bar{F} 、 \bar{H} 和变量投影重要性 (VIP)。可购买到的

支持 PLS 分析建模的软件的一个示例是与 MATLAB 一起提供的 PLS_Toolbox (可从 Mathworks, Inc., Natick, MA 购买), 或 SIMCA-P 8.0 (可从 Umetrics, Kinnelon, NJ 购买)。例如, 关于该软件的进一步细节在 SIMCA-P 8.0 的用户手册中提供: 多变量数据分析中的一个新标准是
5 Umetrics AB, Version 8.0, 其也适用于本发明。一旦矩阵被形成, 矩阵 \bar{X} 就针对每个仿真结果被确定。仿真结果与实际结果之间的任何差别都可被确定, 并使用 PLS 分析和 VIP 结果而被归因于特定的 (独立的) 处理参数。例如, 从 PLS 模型输出的最大 VIP 值对应于最有可能造成该差别的处理参数。

图 12 是示出了根据本发明实施例的用于使用第一原理仿真技术来检测故障和控制半导体处理工具所执行的处理的过程的流程图。该流程图开始于步骤 1202, 其中在例如处理工具 1002 这样的处理工具内处理一块或一批衬底。在步骤 1204, 工具数据被测量并被提供作为到例如仿真模块 1006 这样的仿真模块的输入。然后, 边界条件和初始条件被施加在仿真模块的物理模型上, 以设置模型, 如步骤 1026 所示。在步骤 1208, 第一原理物理模型被执行, 以执行第一原理仿真结果, 该结果是到例如图 10 的 APC 控制器 1008 这样的控制器的输出。在任何时刻, 例如在从一个过程到另一个过程或从一个批次到另一批次的任意时刻, 操作者都有机会选择要在 APC 控制器内采用的控制模型。例如, APC 控制器可使用处理模型
15 扰动结果或 PCA 模型结果。在过程间或批次间, 控制器可使用模型输出来对处理进行调整/校正。在步骤 1010, 处理模型的输出充当到故障检测器 1040 中的 PLS 模型的输入, 允许故障在步骤 1012 被检测和分类。例如, 如上所述, 实际处理性能 Y_{real} 和用于给定的处理条件 (即一组输出控制变量) 的仿真 (或预测) 的处理性能 Y_{sim} 之间的差别可被用来确定过程
20 故障的存在, 其中 Y_{real} 是使用物理传感器或度量工具测量得到的, 而 Y_{sim} 是通过执行被提供了用于当前处理条件的输入的仿真来确定的。如果实际结果和仿真结果之间的差别 (或方差、均方根或其他统计量) 超过了预定阈值, 则可预测出已发生了故障。预定阈值例如可以包括特定数据的平均值的百分比, 即 5%、10%、15%, 或可以是数据的均方根的倍数,

即 1σ 、 2σ 、 3σ 。一旦检测到故障，就可以使用 PLS 分析进行对其分类。例如，已针对给定的输入条件（即一组输入控制变量）确定了灵敏度矩阵 \bar{X} （并且可能已被存储在库 1010 中）。工具扰动数据（灵敏度矩阵）以当前模型解为中心被在原位确定，或者使用处理模型在 n 维解空间内被预先确定。使用灵敏度矩阵和实际结果与仿真结果之间的差别，可使用 PLS 分析来对等式（1）求解，以识别那些与观察到的实际结果和仿真结果之间的差别呈最大相关性的控制变量（输入参数）。使用上面提供的示例，可通过衬底上的空间的静压分布，来总结处理性能。实际结果 Y_{real} 代表测量得到的压力分布，而 Y_{sim} 代表仿真得到的压力分布。假设气体流率被设定，但是质量流控制器使流率加倍（但是报告设置值）。可以预期会看到仿真的和测量的（实际）压力分布之间有差别；即在实际情形和仿真情形之间，流率被除以因子 2。实际结果和仿真结果之间的差别可能大到足够超过预定阈值。使用 PLS 分析，可以识别出那些趋于对压力分布产生最大影响的参数，例如气体流率。故障的存在及其特性可作为处理工具故障状态被报告给操作者，或者可以使得 APC 控制器响应于故障检测来执行对处理工具的控制（例如关机）。

图 13 是可以应用本发明的过程控制实施例的真空处理系统的框图。

图 13 所示的真空处理系统是示例性的，其不以任何方式限制本发明的范围。真空处理系统包括处理工具 1302，其具有用于支撑衬底 1305 的衬底固定器 1304、充气系统 1306 和真空泵浦系统。充气系统 1306 可包括充气板、充气压力间（gas injection plenum）和充气压力间中的一个或多个充气隔板。充气压力间可被耦合到一个或多个气源，例如气体 A 和气体 B，其中气体 A 和气体 B 进入处理系统的质量流率受两个质量流控制器 MFCA 1308 和 MFCB 1310 的影响。此外，用于测量压力 P_1 的压力传感器 1312 可被耦合到充气压力间。衬底固定器例如可包括多个组件，这些组件包括但不限于用于提高衬底和衬底固定器之间的气隙导热性的氦气源、静电夹持系统、包括冷却元件和加热元件的温度控制元件，以及用于将衬底移至衬底固定器表面和从该表面移开的顶针（lift pin）。此外，衬底固定器可包括用于测量衬底固定器温度（T1）或衬底温度的温度传感器（T1），以

及用于测量冷却剂温度 (T3) 的温度传感器 1316。如上所述，氦气被提供给衬底背面，其中气隙压力 (P (He)) 可能在一个或多个位置有所变化。此外，另一压力传感器 1318 可被耦合到处理工具，以测量处理室压力 (P2)，另一温度传感器 1320 可被耦合到处理工具，以测量表面温度 5 (T2)，另一压力传感器 1322 可被耦合到真空泵系统的入口，以测量入口压力 (P3)。

诊断控制器 1324 可被耦合到上述每个传感器，并且可被配置为将来自这些传感器的测量提供给上述仿真模块。对于图 13 的示例性系统，在仿真模块上执行的模型例如可包括 3 个组件，即热组件、气体动力组件和 10 化学组件。在第一组件中，气隙压力场可被确定，然后气隙导热性被计算。然后，通过适当地设置边界条件（和内部条件），衬底（以及衬底固定器）的空间解析温度场可被确定，所述边界条件（和内部条件）例如是边界温度或边界热通量、电阻加热元件中积聚的功率、冷却元件中移除的功率、由于等离子体的存在而导致的衬底表面的热通量，等等。

15 在本发明的一个实施例中，ANSYS 被用来计算温度场。利用处理模型的第二组件（即气体动力组件），可使用在热组件中计算的表面温度以及若干前述测量，来确定气体压力场和速度场。例如，质量流率和压力 (P1) 可被用来确定入口条件，而压力 (P3) 可被用来确定出口条件， CFD-ACE+ 可被用来计算气体压力和速度场。使用化学模型（即第三组 20 件），先前计算的速度、压力和温度场可被用作到化学模型的输入，以例如计算刻蚀速率。依赖于处理工具几何复杂度，这些模型组件中的每一个可在批次间处理周期内的时间刻度上执行。这些组件中的任何一个例如都可被用来提供空间均匀性数据，作为到过程控制、方法论、过程表征和/或故障检测/分类的输入。

25 从获得的模型和响应于对处理条件中的改变和/或例如反应器老化这样的影响而对处理进行的分析，经验模型可随着时间的流逝被相似化。这样，当在反应器上重复的次数在统计上变得很大（由标准统计分析程序确定）时，对于那些基本上是先前运行的操作的“重复”的处理来说，过程控制演化为基于经验的控制。但是，根据本发明，如果有必要，则过程控

制返回执行第一原理仿真的能力，以适应新处理或处理几何结果的改变。

图 14 示出了其上可实现本发明的实施例的计算机系统 1401。计算机系统 1401 可被用作为第一原理仿真处理器 108，以执行上述第一原理仿真处理器的任何或全部功能，或者可被用作为任何其他设备，或者执行参考

5 图 1~图 13 所述的任何过程步骤。计算机系统 1401 包括总线 1402 或其他用于传输信息的通信机制，以及与总线 1402 耦合的用于处理信息的处理器 1403。计算机系统 1401 还包括耦合到总线 1402 用于存储要被处理器 1403 执行的信息和指令的主存储器 1404，例如随机访问存储器（RAM）或其他动态存储器件（例如动态 RAM（DRAM）、静态 RAM（SRAM）10 和同步 DRAM（SDRAM））。此外，主存储器 1404 可被用来存储处理器 1403 执行指令期间的临时变量或其他中间信息。计算机系统 1401 还包括只读存储器（ROM）1405 或其他静态存储器件（例如可编程 ROM（PROM）、可擦除 PROM（EPROM）和电可擦除 PROM（EEPROM）），其耦合到总线 1402，用于存储静态信息和用于处理器 15 1403 的指令。

计算机系统 1401 还包括耦合到总线 1402 用于控制一个或多个用于存储信息和指令的存储器件的盘控制器 1406，所述存储器件例如是磁硬盘 1407 以及可移动介质驱动器 1408（例如软盘驱动器、只读压缩盘驱动器、读/写压缩盘驱动器、压缩盘唱片机、磁带驱动器和可移动磁光驱动器）。存储器件可使用适当的器件接口（例如小计算机系统接口（SCSI）、集成器件电子系统（IDE）、增强型 IDE（E-IDE）、直接存储器访问（DMA）或 ultra-DMA）被添加到计算机系统 1401。

计算机系统 1401 还可包括专用逻辑器件（例如专用集成电路（ASIC））或可配置逻辑器件（例如简单可编程逻辑器件（SPLD））、25 复杂可编程逻辑器件（CPLD），以及现场可编程门阵列（FPGA）。

计算机系统 1401 还可包括耦合到总线 1402 用于控制显示器 1410 的显示控制器 1409，显示器 1410 例如是阴极射线管（CRT），用于向计算机用户显示信息。计算机系统包括输入设备，例如键盘 1411 和点选设备 1412，用于与计算机用户交互并向处理器 1403 提供信息。点选设备 1412

例如可以是鼠标、轨迹球或点选杆，用于向处理器 1403 传送直接信息和命令选择，还用于控制显示器 1410 上的光标移动。此外，打印机可以提供计算机系统 1401 存储和/或生成的数据的打印列表。

响应于处理器 1403 执行例如主存储器 1404 这样的存储器中包含的一个或多个指令的一个或多个序列，计算机系统 1401 执行本发明的处理步骤中的部分或全部。这样的指令可从诸如硬盘 1407 或可移动介质驱动器 1408 这样的另一计算机可读介质被读入主存储器 1404。也可以使用多处理布置中的一个或多个处理器来执行主存储器 1404 中包含的指令序列。在替换的实施例中，硬连线电路可被用来代替软件指令或与软件指令组合使用。因此，实施例并不限于硬件电路和软件的任何特定组合。

如上所述，计算机系统 1401 包括至少一个计算机可读介质或存储器，用于保存根据本发明教导而编程的指令和用于包含数据结构、表、记录或这里描述的其他数据。计算机可读介质的示例是压缩盘、硬盘、软盘、磁带、磁光盘、PROM（EPROM、EEPROM、快闪 EEPROM）、DRAM、SRAM、SDRAM 或任何其他磁介质、压缩盘（例如 CD-ROM）或任何其他光介质、打孔卡、纸带，或任何其他具有孔图案的物理介质、载波（见下述）、或计算机可读的任何其他介质。

本发明包括被存储在任何计算机可读介质或其组合上用于控制计算机系统 1401 的软件，其用于驱动一个或多个设备来执行本发明，并使得计算机系统 1401 与人类用户（例如打印生产人员）交互。这种软件可包括但不限于设备驱动器、操作系统、开发工具和应用软件。这种计算机可读介质还包括用于执行在实现本发明时所执行的处理的全部或部分（如果处理是分布式的）的本发明的计算机程序产品。

本发明的计算机代码设备可以是任何可解释或可执行的代码机制，包括但不限于脚本、可解释程序、动态链接库（DLL）、Java 类和完全可执行程序。此外，本发明的处理的各个部分可被分布以获得更好的性能、可靠性和/或成本。

这里使用的术语“计算机可读介质”是指参与向处理器 1403 提供指令用于执行的任意介质。计算机可读介质可采取多种形式，包括但不限于

非易失性介质、易失性介质和传输介质。非易失性介质例如包括光、磁盘和磁光盘，例如硬盘 1407 或可移动介质驱动器 1408。易失性介质包括动态存储器，例如主存储器 1404。传输介质包括同轴电缆、铜线和光纤，包括构成总线 1402 的线路。传输介质还可采取声或光波的形式，例如在无线电波和红外线数据通信期间生成的波。
5 线电波和红外线数据通信期间生成的波。

在向处理器 1403 运送一个或多个指令的一个或多个序列时可涉及各种形式的计算机可读介质。例如，指令最初可被承载在远程计算机的磁盘上。远程计算机可将实现本发明的全部或部分的指令远程加载到动态存储器，并使用调制解调器在电话线路上发送指令。计算机系统 1401 本地的
10 调制解调器可接收电话线路上的数据，并使用红外线发射器将数据转换为红外线信号。耦合到总线 1402 的红外线检测器可接收红外线信号中承载的数据，并将数据放在总线 1402 上。总线 1402 将数据运送到主存储器 1404，处理器 1403 从主存储器 1404 获取并执行指令。主存储器 1404 接收的指令可以可选地在被处理器 1403 执行之前或者之后被存储在存储器件
15 1407 或 1408 上。

计算机系统 1401 还包括耦合到总线 1402 的通信接口 1413。通信接口 1413 提供耦合到网络链路 1414 的双向数据通信，网络链路 1414 例如连接到局域网（LAN）1415，或连接到另一通信网络 1416，例如因特网。例如，通信接口 1413 可以是附接到任何分组交换 LAN 的网络接口卡。作为
20 另一示例，通信接口 1413 可以是非对称数字订户线路（ADSL）卡、综合服务数字网络（ISDN）卡或调制解调器，以提供到相应类型的通信线路的数据通信连接。也可实现无线链路。在这种实现方式中，通信接口 1413 发送和接收承载代表各种信息的数字数据流的电、电磁或光信号。

网络链路 1414 一般提供通过一个或多个网络到其他数据设备的数据
25 通信。例如，网络链路 1414 可通过本地网络 1415（例如 LAN）或通过由服务提供商操作的设备来提供到另一计算机的连接，其中设备提供商通过通信网络 1416 来提供通信服务。本地网络 1414 和通信网络 1416 例如使用承载数字数据流的电、电磁或光信号以及相关的物理层（例如 CAT 5 电缆、同轴电缆、光纤等等）。通过各种网络的信号和通过通信接口 1413

在网络链路 1414 上的信号（这些信号承载去往和来自计算机系统 1401 的数字数据）可被实现为基带信号或基于载波的信号。基带信号将数字数据传达为未调制的电脉冲，这些电脉冲描述数字数据比特流，其中术语“比特”应被广义地理解为意思是符号，其中每个符号传达至少一个或多个信息比特。⁵ 数字数据还可被用来调制载波，例如用通过导电介质传播或通过传播介质作为电磁波传输的幅度、相位和/或频移键控信号进行调制。因此，数字信号可以作为未调制的基带数据，通过“有线”通信信道被发送，和/或通过调制载波，在与基带不同的预定频带内被发送。计算机系统 1401 可通过（一个或多个）网络 1415 和 1416、网络链路 1414 和通信接口 10 1413 发送和接收数据，包括程序代码。此外，网络链路 1414 可提供通过 LAN 1415 到移动设备 1417 的连接，移动设备 1417 例如是个人数字助理（PDA）膝上型计算机，或蜂窝电话。

根据上述教导可对本发明作出各种修改和改变。因此应当理解，在所附权利要求的范围内，本发明可以这里描述的方式之外的方式实现。例如，¹⁵ 这里所述和权利要求中叙述的处理步骤可以同时执行或与它们被描述或列举的顺序不同的顺序执行。本领域的普通技术人员应当理解，在较后的处理步骤被执行以前，仅那些较后的处理步骤的性能必需的处理步骤需要被执行。

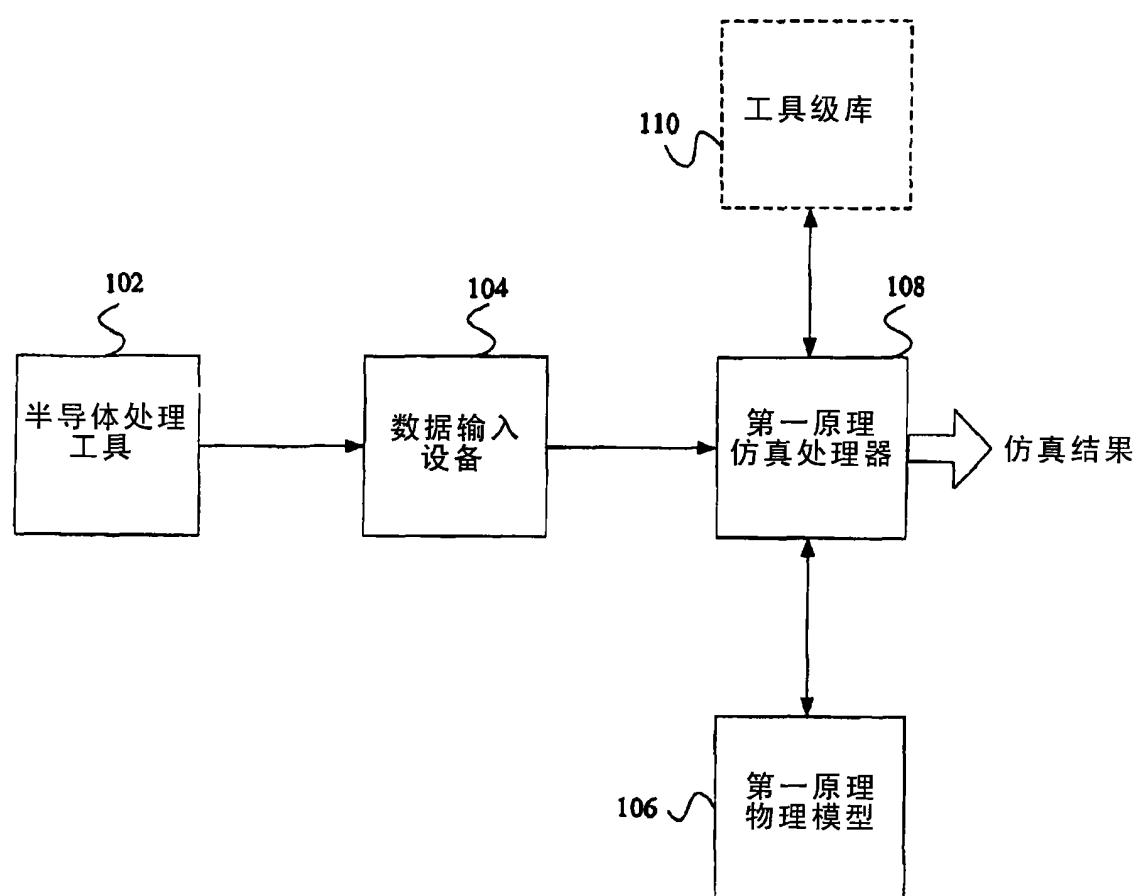


图1

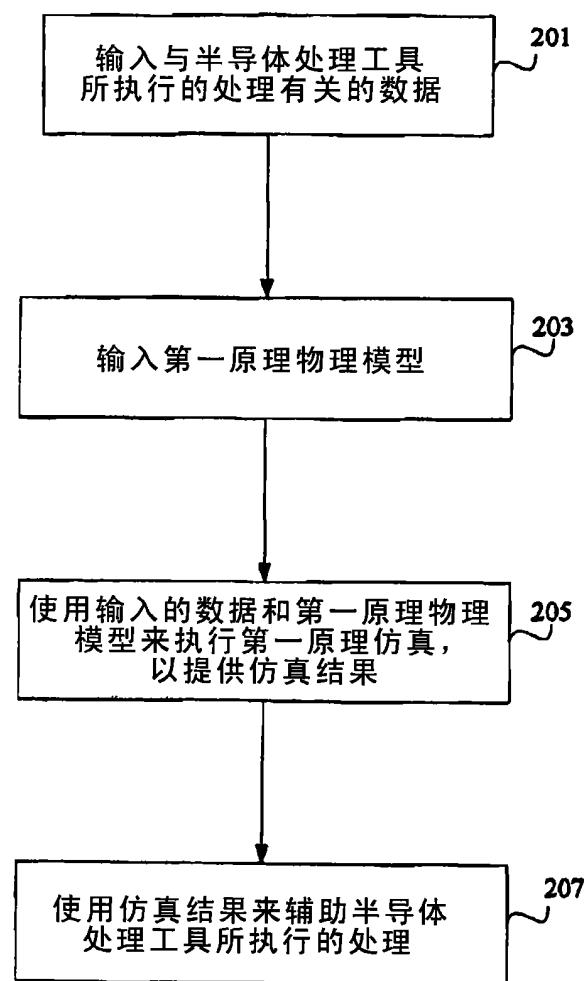


图2

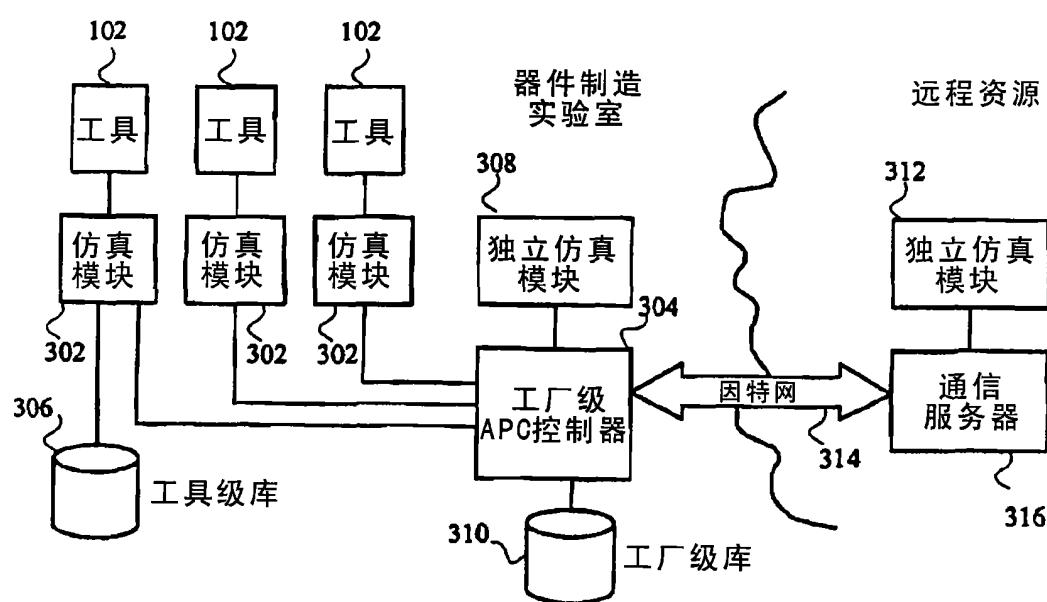


图3

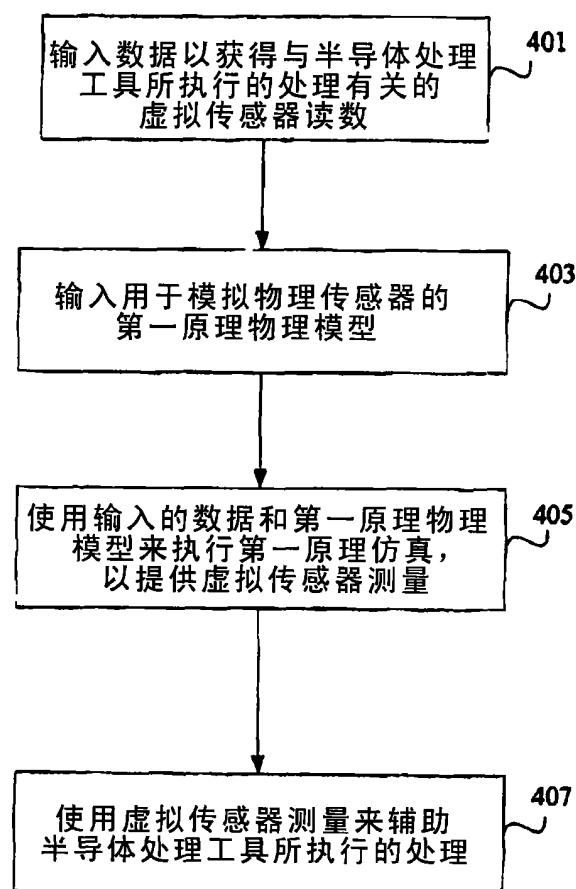


图4

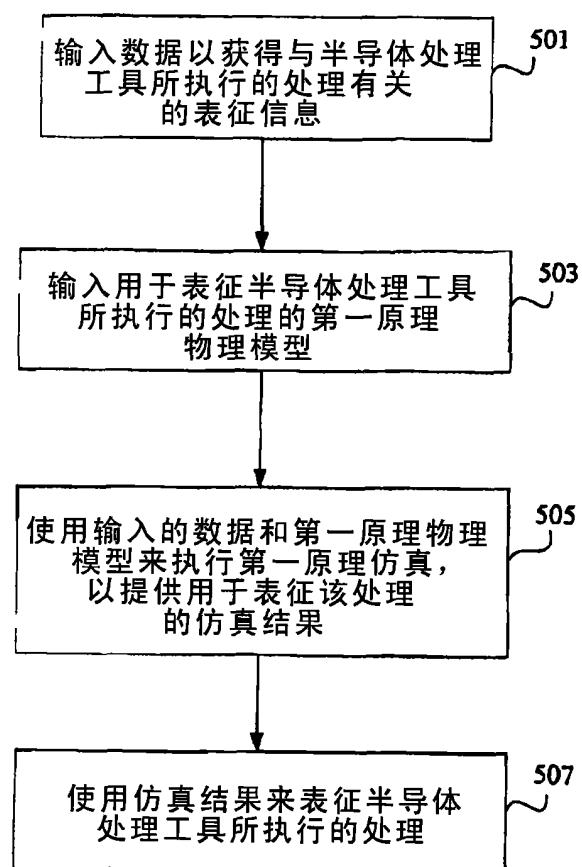


图5

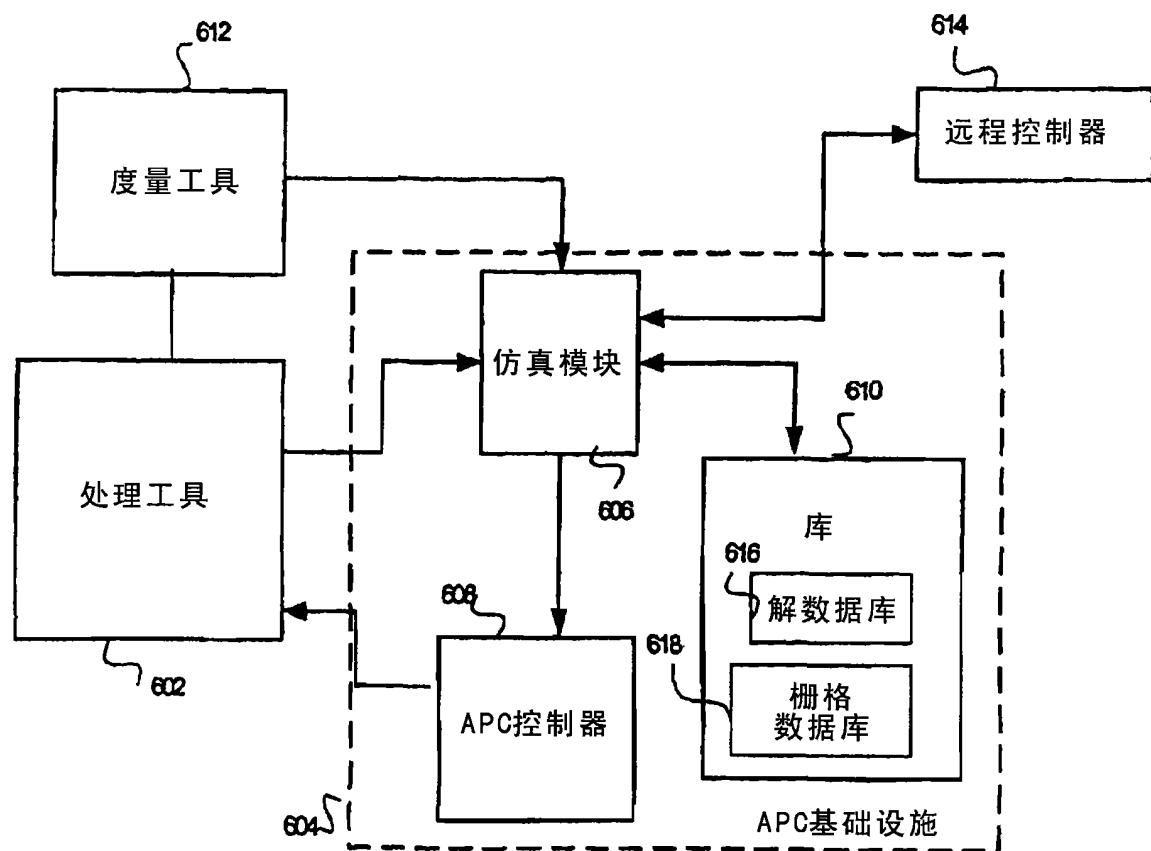


图6

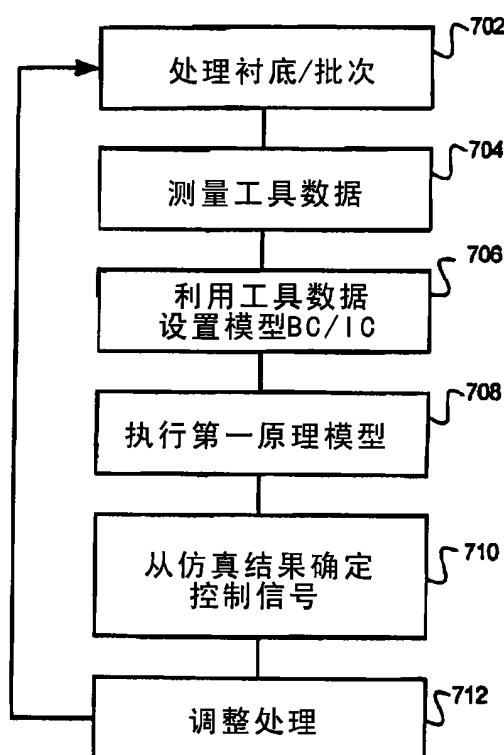


图7

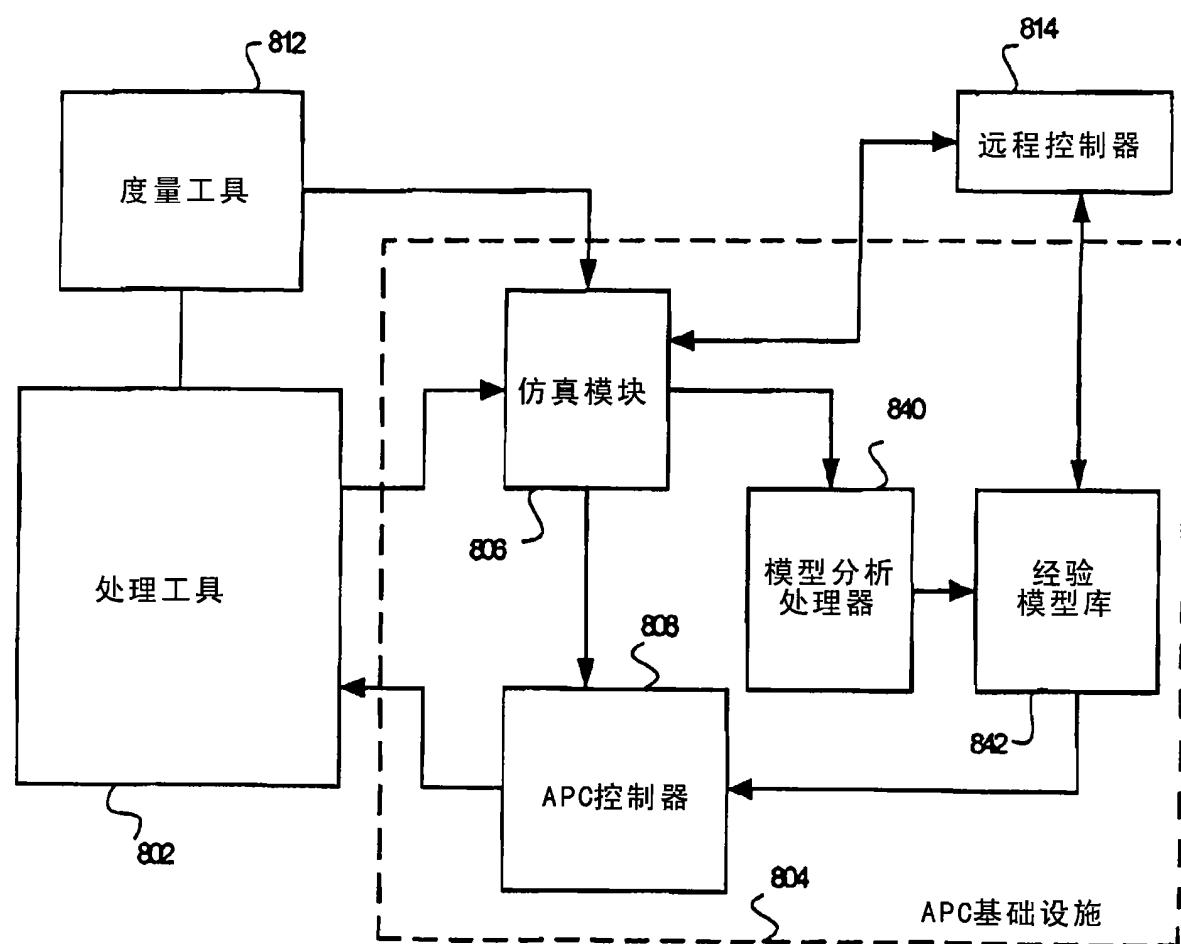


图8

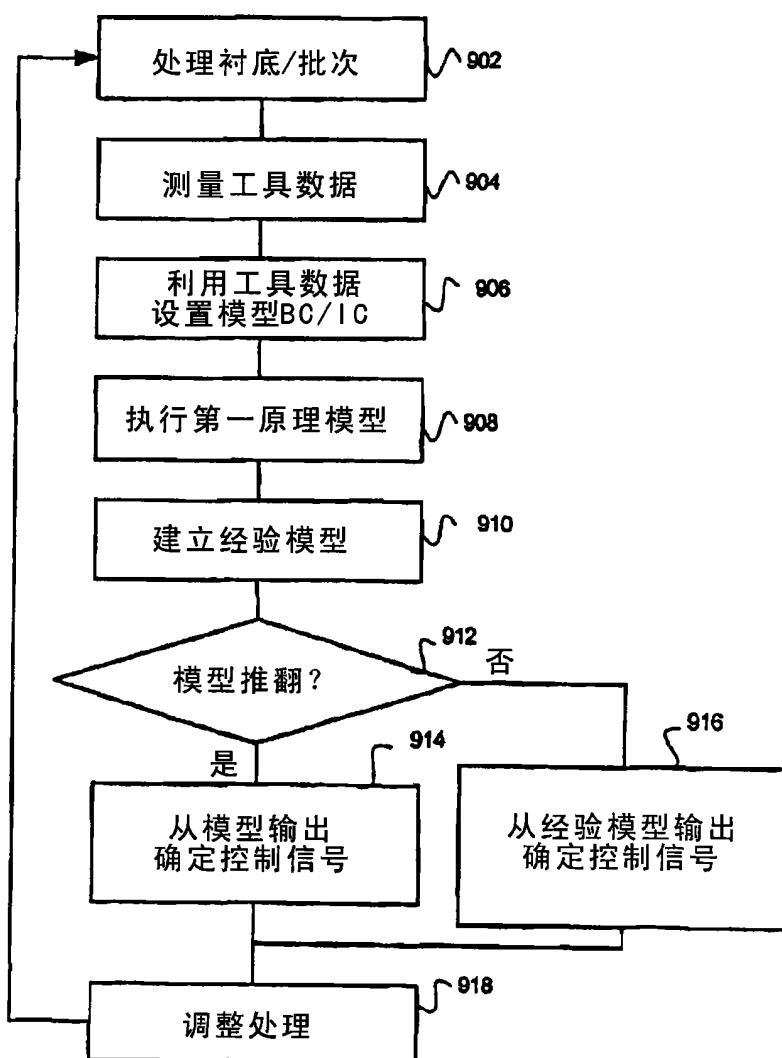


图9

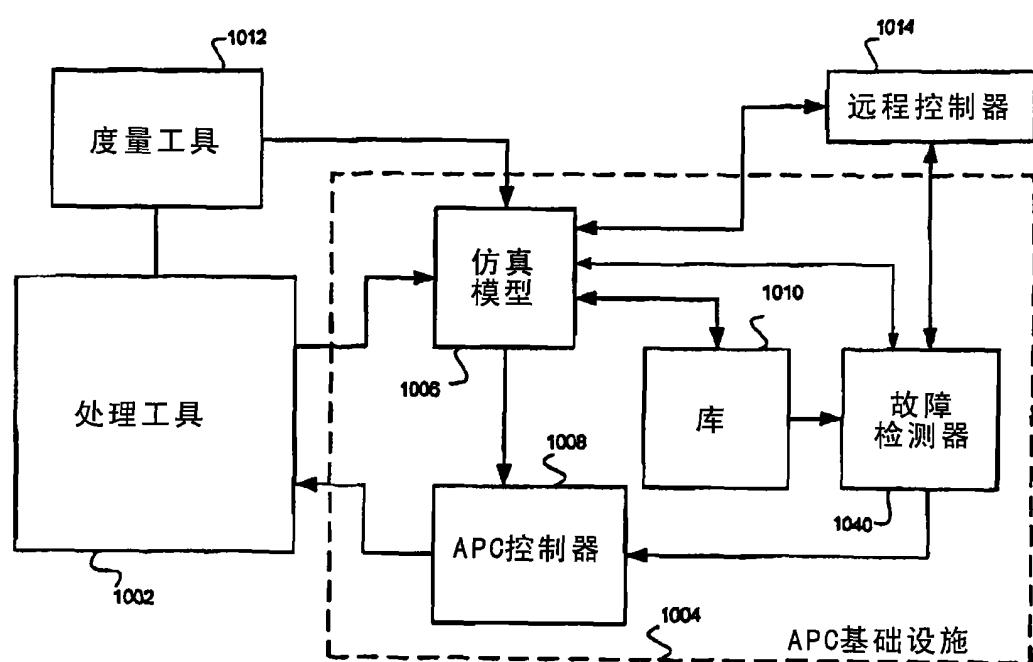


图10

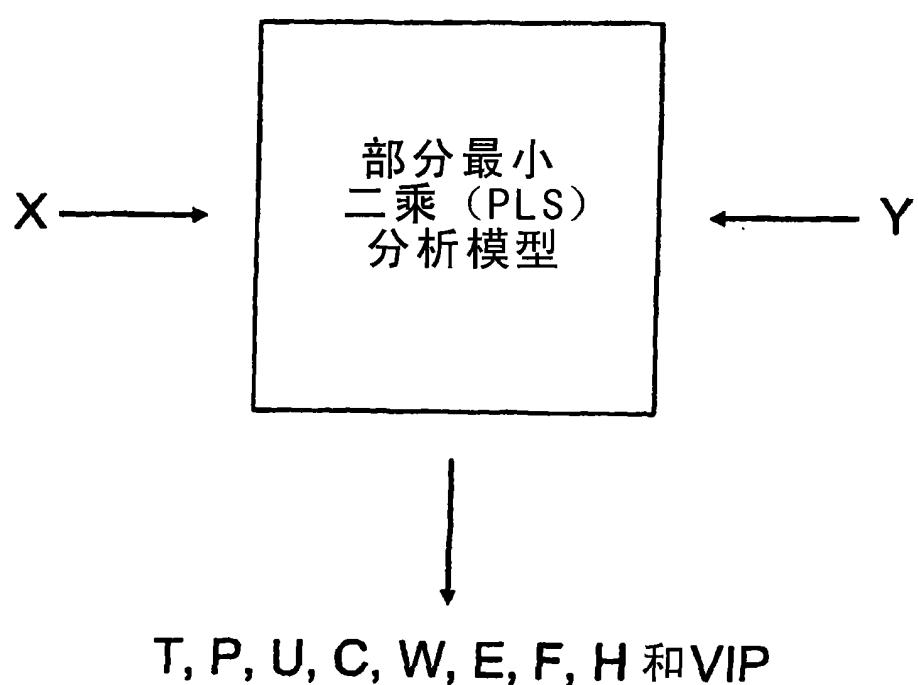


图11

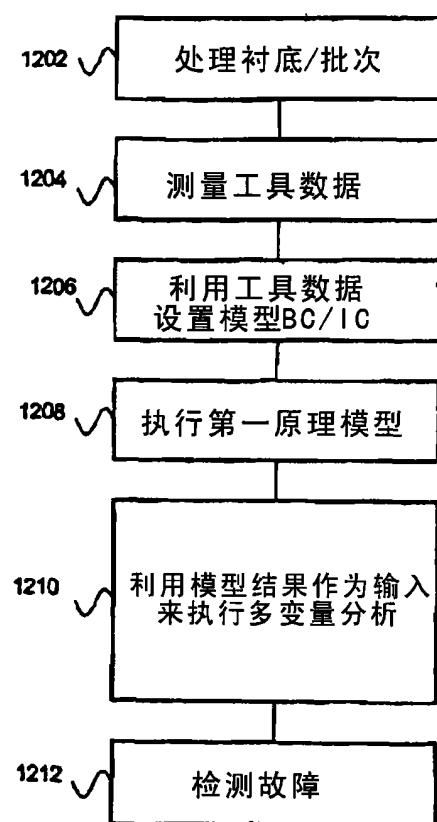


图12

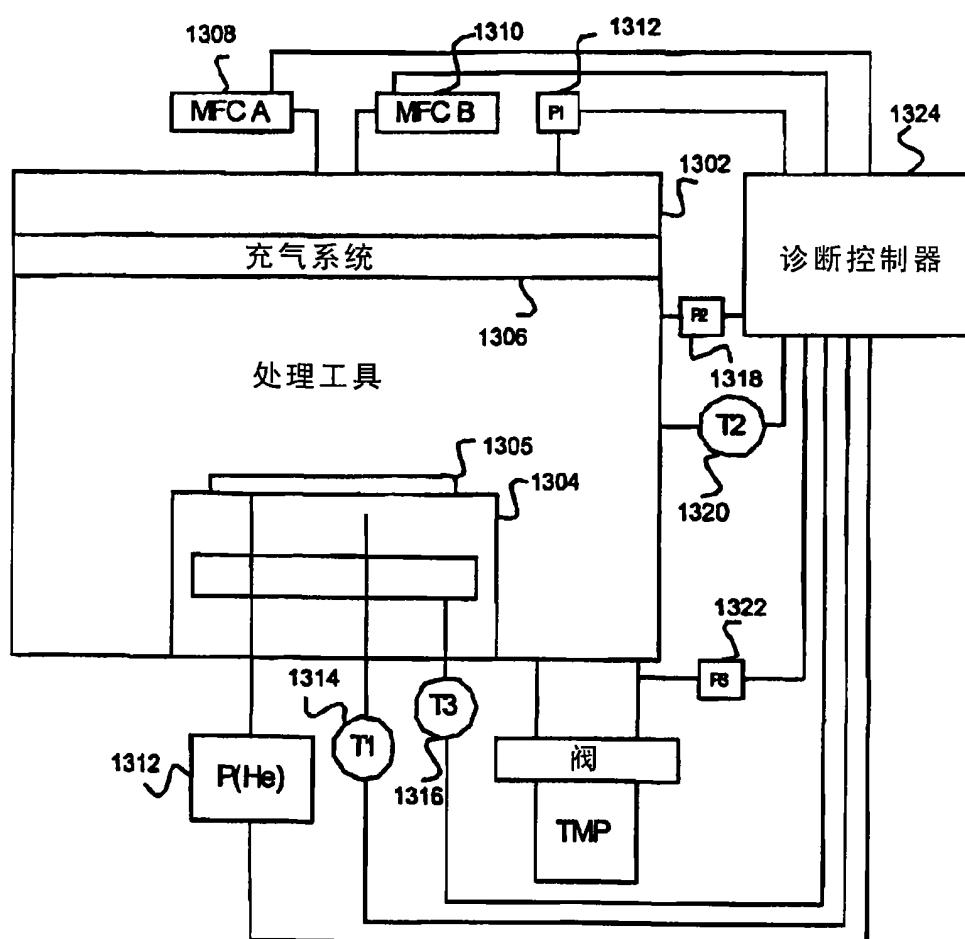


图 13

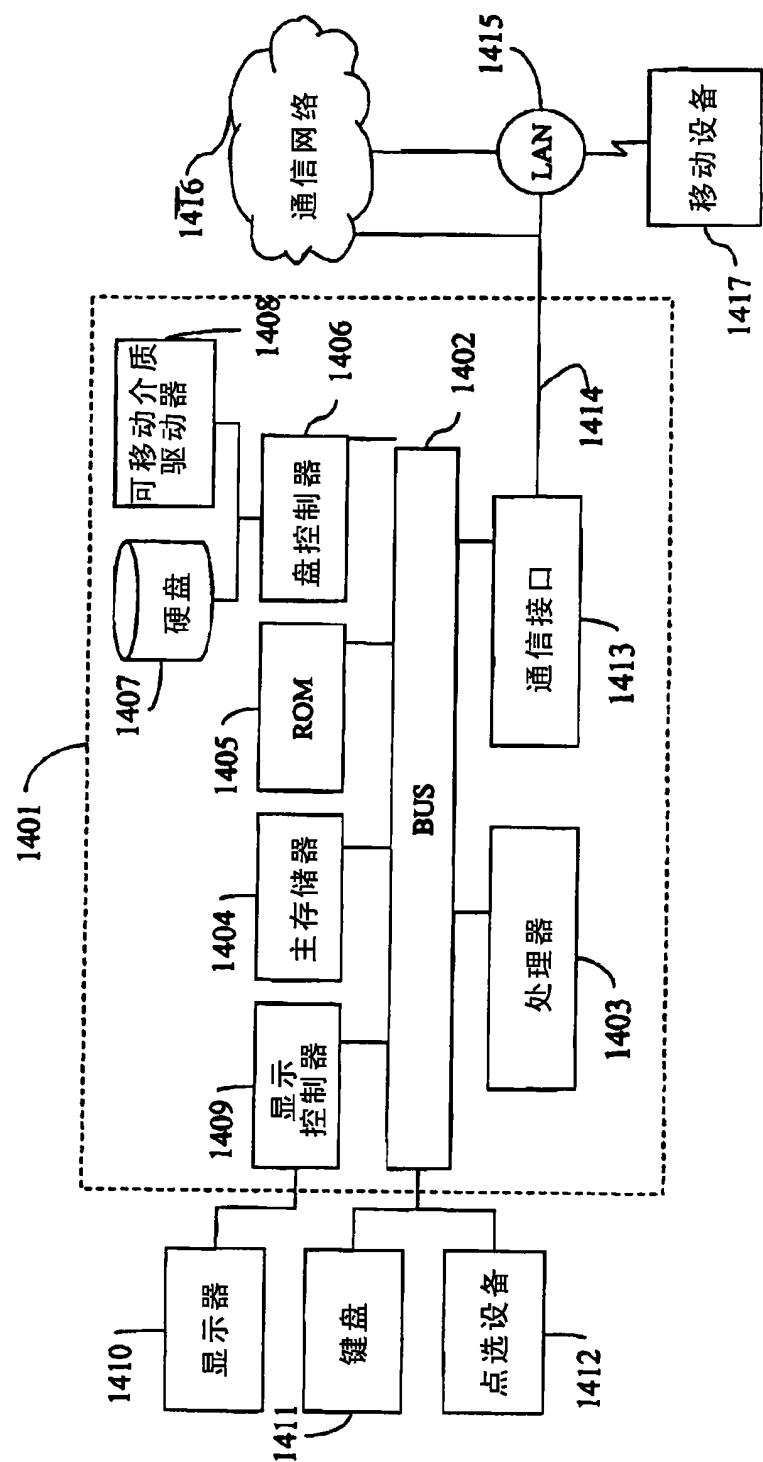


图 14