

文章编号:0254-0096(2018)09-2381-06

基于神经网络的金刚线硅片工艺优化研究

李 宁, 谷书辉, 陈秋颖, 任丙彦

(河北工业大学材料科学与工程学院, 天津 300019)

摘 要: 使用Tensorflow对金刚线切割过程深度学习,通过对500组样本的训练和预测,得到金刚线切割的神经网络模型。高进给速度($>1.4\text{ mm/min}$)和高线速($>1400\text{ mm/min}$)可发挥高颗粒密度($>100\text{ cm}^{-1}$)的优势,在提高切割效率的同时获得较低的总厚度变化(total thickness variation, TTV)。在切割过程中,高颗粒密度的钢线耐磨损能力强,有更大的工艺窗口。将神经网络技术应用到工艺优化方面可直观找到调整参数与实验结果的量化关系,为优化工艺提供一种简便高效的方法。

关键词: 硅片; 人工神经网络; 工艺优化; 金刚线切割

中图分类号: TM914

文献标识码: A

0 引 言

晶体硅片普遍使用多线切割技术制备,硅片成本约占太阳能电池成本的30%^[1]。以碳化硅、聚乙二醇、钢线为代表的三体磨料加工技术,即砂浆线切割技术,在过去的20 a占据统治地位^[2,3]。随着光伏技术的迅猛发展,低成本、高效率成为新技术发展的方向。在硅片加工领域,以金刚线切割(diamond wire saw, DWS)为代表的新型硅片加工技术逐渐成为主流^[4]。不同于砂浆线切割的游离磨料加工方式,金刚线切割技术采用金刚线固结加工模式,加工效率是砂浆线的3倍以上,且在减少硅片表面损伤层和金属沾污方向具有明显优势。近年来,以金刚线、切割液为加工主体的金刚线多线切割技术在硅片加工领域被快速引入,并在工业化生产中得到迅速推广^[5,6]。

很多报道对多线切割过程进行了研究,Bidiville等^[7]使用力学建模的方式对砂浆线切割过程进行建模,提出切割速度和进给速率对硅片强度有较大影响;Wang Peizhi等^[8]提出金刚线固结磨料切割模型,并用此模型对进给速率、线速度、金刚石颗粒等主要参数进行计算,分析不同金刚石接触角度对切割前沿破碎的影响,找到了切割效率与工艺参数之间的对应关系。葛梦然等^[9]通过建模方式分析金刚

石颗粒切割深度对硅片表面质量的影响。这些数值模型普遍使用单颗粒二维简化方式,对多线切割过程中的个体接触面进行分析,得到工艺参数与切割结果的对应关系,其分析过程是在稳态模型的基础上对实验结果进行解释,从而优化工艺参数,提高加工的稳定性。金刚线切割技术出于成本考虑,普遍使用往复走线的方式进行工艺设计。由于加工过程复杂,且整体加工过程随时间呈周期性变化,切割前沿金刚石磨料与硅晶体的相对位置也在实时变化,单纯用稳态单颗粒建模的方式无法对整个加工过程进行全面描述,在实际应用中局限性较大,实验重复性较差。

随着数据分析科学的迅猛发展,以大数据、深度学习、神经网络为代表的机器学习技术在理论分析中逐渐引入。Azlan Mohd Zain等^[10]用神经网络(artificial neural network, ANN)算法对硅片表面粗糙度分析预测,发现超级氮化物涂层对于改善硅片表面总厚度变化(total thickness variation, TTV)效果明显。Mozammel Mia等^[11]同样也使用ANN算法对冷却液对硅片表面粗糙度的影响进行了分析。Erhan Kayabasi等^[12]用三层神经网络的方法对金刚线切割过程进行建模,并使用线速度、进给速度和冷却液用量对硅片切割结果进行分析。上述过程多采用单线切割模型进行分析,不适于工业上普遍

收稿日期: 2018-03-22

基金项目: 国家高技术研究发展(863)计划(2012AA050301)

通信作者: 任丙彦(1946—),男,学士、教授,主要从事半导体光电子材料方面的研究。tjrby@sohu.com

使用的多线切割模型。此外由于硅片多线切割工艺过程复杂,加减速时间、线速度、进给速度、冷却液流量等参数均按照制定好的 CNC (computerized numerical control) 程序运行,如果只用单一数值来表征实验结果得到的结果将误差过大,不能全面反映加工过程。多线切割单次加工过程可加工 2000 多片硅片,在实际工业化生产中需更加关注批量硅片的线痕、TTV、粗糙度、厚度等整体分布,反而对单个硅片的质量关注较少。针对大批次硅片多线加工模型的研究鲜见报道。

本研究使用基于 Tensorflow 框架的神经网络算法对金刚线硅片多线切割过程进行数学建模,通过机器学习的方式对硅片多线切割过程进行深入学习训练,从而找到主要工艺条件对硅片 TTV 的影响关系,达到提高硅片品质的目的。

1 实 验

在硅片多线切割过程中,工艺参数、硅晶体结构和耗材的属性均直接影响硅片质量。多线切割加工过程如图 1 所示,其中工艺参数中进给速度(V_z)、线速度(V_w)、新线进给量、晶体结构、晶棒长度(L)、金刚线颗粒密度、冷却液用量等因素对硅片质量有直接影响。对整根硅晶体加工来说,单次加工过程中产生的硅片 TTV 均值可全面反映整个样本的综合结果。TTV 在数值上表现为连续值且与工艺参数关系紧密,类似于机器学习中的回归问题,所以可用神经网络中的回归模型分析^[13]。

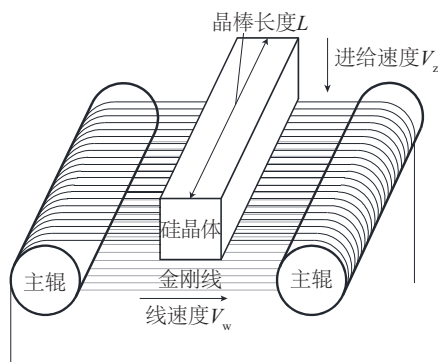


图1 多线切割示意图

Fig. 1 Schematic of diamond wire saw system

实验使用 PV600DT 多线切割机作为实验机台,被加工硅单晶晶向为(100)。因为本实验只对 TTV 均值进行判断,为简化模型,只考虑晶棒长度

(L)、进给速度(V_z)、线速度(V_w)、金刚线颗粒密度(D_w)这 4 个影响因素。计算模型基于 Tensorflow 编写的 3 层神经网络,以 L 、 V_z 、 V_w 、 D_w 作为神经网络的输入层,设置 10 个神经元作为隐藏层,预测结果 TTV 作为输出层,每 2 个计算层之间用线性方程连接,计算模型的结构图如图 2 所示。

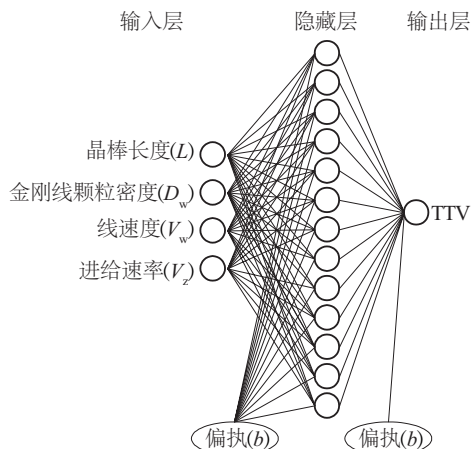


图2 神经网络示意图

Fig. 2 Diagram of artificial neural network

由于机器学习模型实验样本越多得到的准确率越高,本实验设计 500 个实验样本,晶棒长度 500~690 mm,进给速度 1.0~1.3 mm/min,线速度 1200~1800 mm/min,金刚线颗粒密度 80~120 cm⁻¹。为了表征一次加工过程对硅片整体质量影响,本实验选用单次切割过程中硅片 TTV 平均值作为质量评价标准,硅片厚度使用 MB 公司生产的 Henneck HE-WI 测试系统对每个硅片的四角和中心共 5 个点进行测量,然后对每组样本的 TTV 值求平均值,从而得到每组样本 TTV 测量值。

为了检验神经网络的准确度,将 500 个实验样本按照 8:2 的比例分为训练集和测试集,神经网络的学习效率设定为 0.1,使用梯度下降法(Gradient Descent Optimizer)作为优化算法,用修正线性单元(Rectified Linear Unit, ReLU)作为激励函数。每组样本平均产生 2500 片硅片,分别记录 500 组实验中的 L 、 V_z 、 V_w 、 D_w ,并测量每组对应样本的 TTV 均值。检验神经网络准确性的方法是使用训练集训练计算模型,再用训练好的模型计算预测集的输入层,从而得到预测值,使用均方差 MSE (mean square error) 计算预测值与测量值的偏离度,从而评价整个神经网络的准确率。

2 结果及讨论

2.1 神经网络模型建立

神经网络需要固定迭代次数,迭代次数是损失函数和预测值的主要影响因素。损失函数的收敛情况可确定适当的迭代次数^[12,13]。从本模型训练结果可看出,在 200 次后损失函数稳定在 0.03 以下(如图 3 所示),为了节约计算时间,最终确定迭代次数为 500 次。对 100 个预测样本的预测结果如图 4 所示,ANN 在 100 个预测样本中的误差值小于 2%。

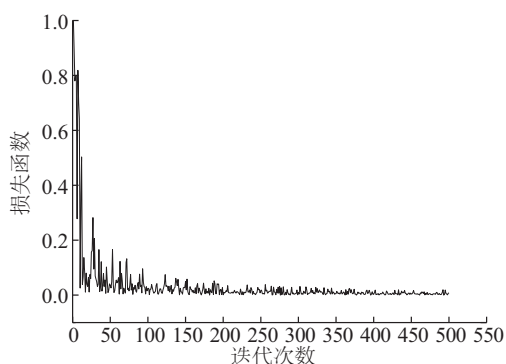


图3 迭代次数与损失函数的关系

Fig. 3 Relationship between iterations and loss function

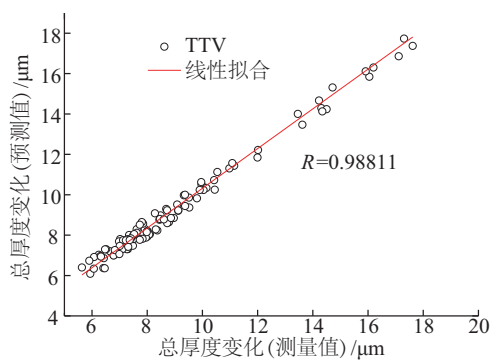


图4 预测样本线性回归评估

Fig. 4 TTV validation results of prediction samples

2.2 工艺参数对切割的影响

多线切割工艺参数对硅片质量有直接影响,其中进给速度和线速度是最直接的影响因素^[14,15]。由于工艺参数较多,且参数之间存在直接或间接的关系,很难直观得到单一因素对切割结果^[16]。通过对实验过程进行深度学习,使用神经网络的方法极易得到对应的量化关系。

2.2.1 进给速度对切割过程的影响

金刚线切割技术进给速度普遍在 1.0 mm/min 以上,约为传统砂浆切割速度的 3 倍。而进给速度与金刚线耗材的关系密切,金刚线颗粒密度与进给速度的匹配程度直接影响切割前沿的切割力,切割力稳定性直接影响硅片 TTV 的分布。如图 5 所示,在进线速度 1.3~1.4 mm/min 区间内,硅片的 TTV 均值达到 6 μm 的最小值。在 0~1.3 mm/min 区间内,提高进给速度有助于降低 TTV,这是由于切割前沿的线弓增大,有利于增强切割前沿的切割力,参与磨削的金刚石颗粒可稳定地固定在切割槽中,减少由于钢线左右摆动对切割前沿的影响。当进给速度超过 1.4 mm/min,TTV 会随进给速度的增大而迅速增大,且金刚线颗粒密度越小,TTV 增大的趋势越显著。切割前沿颗粒密度较大时,高进给速率带来的切割力会在金刚石颗粒上得到释放,从而充分发挥出高颗粒密度对切割的贡献。相反,当进给速度大于 1.4 mm/min 时,低金刚线颗粒样本 TTV 均值出现较大幅度的增大,这是由于单个金刚石颗粒承受了较大的切割力,而同时参与磨削的金刚石颗粒较少,切割前沿在金刚线往复运动过程中无法获得稳定状态,从而导致切割前沿出现游移,硅片表面出现厚度波动,这与实际测量结果相吻合。

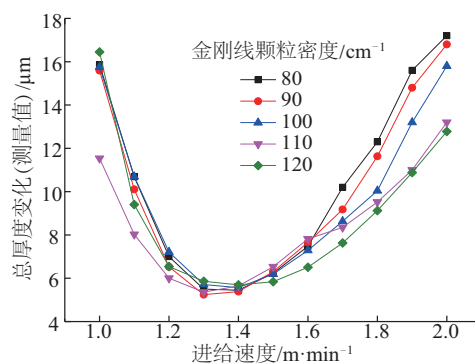


图5 不同金刚线颗粒密度条件下进给速度对总厚度变化的影响

Fig. 5 ANN results of TTV versus V_z for different DWS granule density

2.2.2 线速度对切割过程的影响

线速度是影响多线切割加工的最重要因素,在实际的加工过程中高线速可改善硅片的整体质量^[17,18]。图 6 为神经网络在不同金刚线颗粒密度条件下线速度和 TTV 的输出结果,在不同颗粒密度条

件下,TTV 随线速度的增大均出现大幅降低,其中颗粒密度越高对切割的影响越敏感,在线速度高于 1500 m/min 的情况下,高颗粒密度样本 TTV 降低较为明显,在线速度达到 1700 m/min 后各组数据相差不大,TTV 均稳定在约 6 μm 。

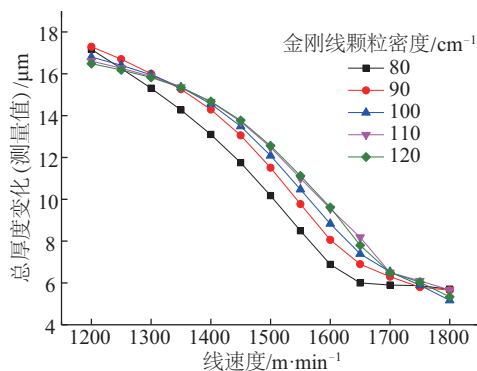


图6 不同金刚线颗粒密度条件下线速度对总厚度变化的影响

Fig. 6 ANN results of TTV versus V_w for different DWS granule density

为了深入分析原因,用扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)对相同线速下不同颗粒密度的新旧金刚线进行观察。由于各组结果相似,故只挑选线速为 1800 m/min 的结果,如图 7 所示。低密度钢线在切割后磨损较大,母线表面的金刚石颗粒脱落明显,特别是颗粒密度为 80 cm^{-1} 的样本,表面几乎磨平,不具备切割能力,而颗粒密度大于 100 cm^{-1} 的样本则在使用后表面仍保留金刚石颗粒,可见高线速配合较高的金刚石颗粒密度有利于切割前沿稳定。

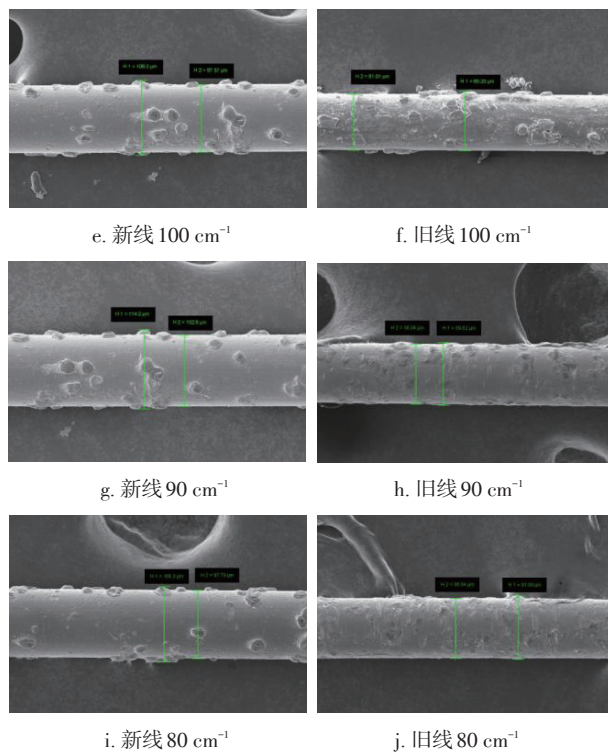
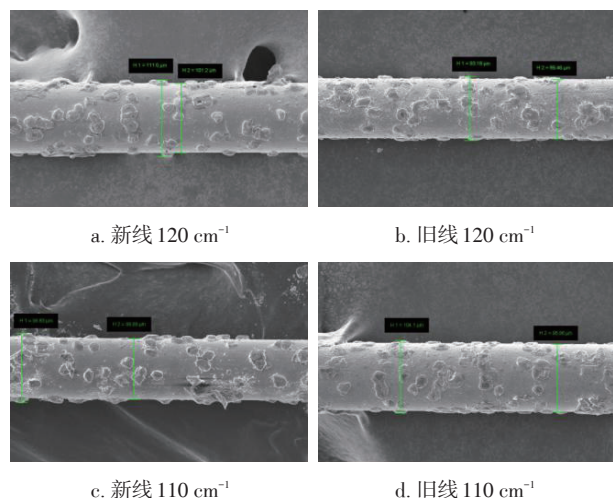


图7 线速度 1800 m/min 不同颗粒密度的新旧金刚线磨损 SEM 图

Fig. 7 SEM images of new and used wire with different DWS granule density at 1800 m/min

2.3 晶体长度对切割过程的影响

不同于单线切割,多线切割中需考虑切割面积对加工过程的影响。在硅片加工过程中需综合考虑晶体类型(单晶、多晶)、槽距、截面积、晶体长度等对切割过程的影响^[19,20]。在本研究中,为了简化模型,仅考虑晶体长度对切割过程的影响。通过神经网络计算,如图 8 所示,棒长与 TTV 均值呈正相关关系。在被加工晶体长度超 650 mm 后,TTV 均值显著增加。

相对来说高颗粒密度样本在较长晶棒长度情况下可获得较低的 TTV,颗粒密度为 120 cm^{-1} 的样本 TTV 显著增高。较高的线速度会使切割效率提高,在切割过程中单个金刚石颗粒所承受的力也会急剧增大,如果切割前沿颗粒密度小,则单个金刚石颗粒就更易失效,从而丧失切割能力,在切割力不足的情况下,钢线会出现游移,硅晶体与钢线之间相对位置改变,硅片表面出现线痕和 TTV 的概率会大幅增大。

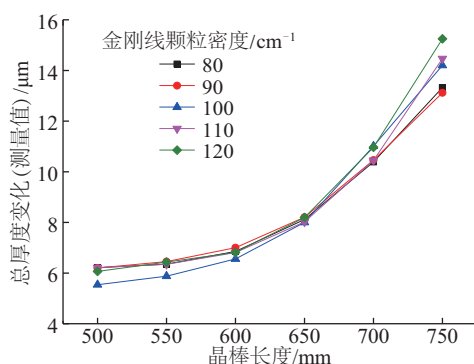


图8 不同金刚线颗粒密度条件下晶棒长度总厚度变化的影响

Fig. 8 ANN results of TTV versus ingot length for different DWS granule density

3 结 论

金刚线切割技术已广泛应用于硅晶体加工领域。工艺参数、材料性能、耗材等都是影响硅片质量的关键因素,各因素之间往往相互关联。如果单纯统计单一因素,很难有针对性地优化调整。仅使用稳态的单一颗粒简化模型不能反映整个加工过程中硅片质量的统计规律。

通过使用 Tensorflow 对金刚线切割过程深度学习,对 500 组样本的训练和预测,得到金刚线切割的神经网络模型,模型的 MSE 达到 0.03,可较好地预测实验结果。由神经网络模型分析进线速度、线速度和晶棒长度对硅片 TTV 的影响,发现高进给速度 (>1.4 mm/min) 和高线速 (>1400 mm/min) 可发挥高颗粒密度 (>100 cm $^{-3}$) 的优势,在提高切割效率的同时获得较低的 TTV。通过对不同颗粒密度新旧钢线表面观察,发现高颗粒密度的钢线耐磨损能力强,有更大的工艺窗口。

合理匹配工艺参数可提高硅片的加工质量和效率,将神经网络技术应用到工艺优化方面可直观地找到工艺参数与实验结果的量化关系,相信逐步完善计算,将更多的影响因素作为神经网络的输入层,将质量参数作为神经网络的输出层,再用大量数据训练整个神经网络,将会成为工艺优化提供一种简便高效的方法。

【参考文献】

[1] Xiao Zhigang, Geng Guoying, Xiu Qinwei, et al. On the mechanism of the vapor etching of diamond wire sawn

multi-crystalline silicon wafers for texturing[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2016, 53(11): 8—12.

- [2] Liu Tengyun, Ge Peiqi, Bi Wenbo, et al. Prediction of the thickness for silicon wafers sawn by diamond wire saw[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2017, 71(7): 133—138.
- [3] 高玉飞. 电镀金刚石线锯切割单晶硅技术及机理研究[D]. 济南: 山东大学, 2009.
- [3] Gao Yufei. Study on the mechanism of monocrystalline silicon slicing by electroplated diamond wire saw[D]. Ji'nan: Shandong University, 2009.
- [4] Gao Yufei, Ge Peiqi, Liu Tengyun. Experiment study on electroplated diamond wire saw slicing single-crystal silicon[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2016, 56(4): 106—114.
- [5] Yu Xuegong, Wang Peng, Li Xiaoqiang, et al. Thin czochralski silicon solar cells based on diamond wire sawing technology[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2012, 98(6): 337—342.
- [6] Buchwald Rajko, Fröhlich Kilian, Würzner Sindy, et al. Analysis of the sub-surface damage of mc- and cz-Si wafers sawn with diamond-plated wire[J]. Energy Procedia, 2013, 38(3): 901—909.
- [7] Bidiville A, Wasmer K, Van der Meer M, et al. Wire-sawing processes: Parametrical study and modeling[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2015, 132(7): 392—402.
- [8] Wang Peizhi, Ge Peiqi, Bi Wenbo, et al. Effect of wire speed on subsurface cracks in wire sawing process of single crystal silicon carbide[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2017, 184(5): 273—285.
- [9] Ge Mengran, Zhu Hongtao, Huang Chuanzhen, et al. Investigation on critical crack-free cutting depth for single crystal silicon slicing with fixed abrasive wire saw based on the scratching machining experiments[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2018, 74(3): 261—266.
- [10] Zain A M, Haron H, Sharif S, et al. Prediction of surface roughness in the end milling machining using Artificial Neural Network[J]. Expert Systems with Applications, 2010, 37(2): 1755—1768.
- [11] Mozammel Mia, Nikhil Ranjan Dhar. Prediction of surface roughness in hard turning under high pressure coolant using Artificial Neural Network[J]. Measurement, 2016, 92(8): 464—474.

- [12] Kayabasi E, Ozturk S, Celik E, et al. Determination of cutting parameters for silicon wafer with a diamond wire saw using an Artificial Neural Network [J]. *Solar Energy*, 2017, 149(4): 285—293.
- [13] Ahmed Y A, Hasegawa K. Automatic ship berthing using artificial neural network trained by consistent teaching data using nonlinear programming method [J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2013, 26(10): 2287—2304.
- [14] Anspach O, Hurka B, Sunder K, et al. Structured wire: From single wire experiments to multi-crystalline silicon wafer mass production [J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2014, 131(7): 58—63.
- [15] 何 健, 徐中民, 宋 丽. 往复式线切割对单晶硅表面粗糙度的影响[J]. *材料科学与工程学报*, 2015, 33(5): 692—696.
- [15] He Jian, Xu Zhongmin, Song Li. Influence on surface roughness of single-crystal silicon by reciprocating wire cutting process [J]. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2015, 33(5): 692—696.
- [16] Lottspeich L, Herold I, Richter H, et al. New methods to evaluate cleaning processes by detecting the particle load on surfaces of diamond wire sawn silicon wafers [J]. *Energy Procedia*, 2017, 124(7): 752—758.
- [17] Würzner S, Falke A, Buchwald R, et al. Determination of the impact of the wire velocity on the surface damage of diamond wire sawn silicon wafers [J]. *Energy Procedia*, 2015, 77(8): 881—890.
- [18] Niu Yuchao, Liu Hsing-Tsun, Liu Xiangju, et al. Study on nano-pores enlargement during Ag-assisted electroless etching of diamond wire sawn polycrystalline silicon wafers [J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2016, 56(2): 119—126.
- [19] 高玉飞, 葛培琪, 李绍杰. 单晶硅线锯切片亚表层损伤层厚度预测与测量[J]. *中国机械工程*, 2009, 20(14): 1731—1735.
- [19] Gao Yufei, Ge Peiqi, Li Shaojie. Prediction and measurement of subsurface damage thickness of silicon wafer in wire saw slicing [J]. *China Mechanical Engineering*, 2009, 20(14): 1731—1735.
- [20] Nassauer B, Hess A, Kuna M. Numerical and experimental investigations of micromechanical processes during wire sawing [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2014, 51(14): 2656—2665.

OPTIMAZATION STUDY OF DIAMOND WIRE SAW PROCESS BASED ON ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

Li Ning, Gu Shuhui, Chen Qiuying, Ren Bingyan

(School of Materials Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300019, China)

Abstract: In this study, Tensor flow deep learning framework is taken to study the diamond wire saw (DWS) process, 500 samples are selected to set up the artificial neural network (ANN), the sample dataset is divided into training and testing set. The predictions of ANN indicated that high feed rate (>1.4 mm/min) and fast wire velocity (>1400 mm/min) can take full advantages of high particle density (>100 cm⁻¹), which suggests cutting efficiency improved and wafer TTV (total thickness variation) decreased. A high granular density of diamond wire will provide a wider process window, due to granular duration extended. ANN represents the quantitative relationship between the process factors and the experimental results, which provides a simplified and efficient method for optimizing DWS process.

Keywords: silicon wafers; artificial neural networks; process optimization; diamond wire sawing