

# 半導体製造装置における無機溶液に対する樹脂耐薬性の機械学習予測

Machine Learning Prediction of the Chemical Resistance of Resin to Inorganic Solutions

in Semiconductor Production Equipment

株式会社 SCREEN ホールディングス<sup>1</sup>, 株式会社システム計画研究所<sup>2</sup>, 統計数理研究所<sup>3</sup>

○仲村 武瑠<sup>1</sup>, 山家 暢<sup>1</sup>, 國枝 省吾<sup>1</sup>, 塙 洋祐<sup>1</sup>, 上島 仁<sup>2</sup>, 新谷 俊了<sup>2</sup>, 杉山 竣哉<sup>2</sup>,  
林 慶浩<sup>3</sup>, 吉田 亮<sup>3</sup>

SCREEN Holdings Co., Ltd.<sup>1</sup>, Research Institute of Systems Planning, Inc.<sup>2</sup>,

The Institute of Statistical Mathematics<sup>3</sup>,

○ Takeru Nakamura<sup>1</sup>, Mitsuru Yambe<sup>1</sup>, Shogo Kunieda<sup>1</sup>, Yosuke Hanawa<sup>1</sup>, Hitoshi Kamijima<sup>2</sup>,  
Toshiaki Shintani<sup>2</sup>, Shunya Sugiyama<sup>2</sup>, Yoshihiro Hayashi<sup>3</sup>, Ryo Yoshida<sup>3</sup>

E-mail: take.nakamura@screen.co.jp

半導体製造装置において、新規薬液や樹脂を採用する際には耐薬性評価が必要となるが、その試験は高コストであった。我々は試験コスト削減を目的に、樹脂の耐薬性を予測する機械学習モデルの開発を進めている<sup>[1]</sup>。これまで、樹脂と有機溶媒の相互作用に関しては報告例<sup>[2]</sup>があるが、樹脂と無機溶液の耐薬性に関してまとまった報告例は、我々の知る限り存在しない。耐薬性評価への応用を鑑みると、予測対象を半導体製造装置に用いられる薬液、部材に限定すれば、少量データであっても十分な予測精度が得られると考えられる。そこで本研究では、半導体製造装置への利用を想定した無機溶液に対する樹脂の耐薬性予測モデルを新たに開発した。

文献から情報を収集し、樹脂 39 種類と溶液 295 種類からなるデータセットを構築した。樹脂と溶液の記述子を説明変数とし、耐薬性あり/なしを予測する 2 値分類モデルを勾配ブースティング決定木 (GBDT) により構築した。記述子は、XenonPy による特徴量<sup>[3]</sup>および Force Field 記述子<sup>[4]</sup>を使用した。樹脂の記述子の生成に用いた SMILES は 10 個の繰り返し構造を持つものとした。予測精度評価は半導体製造装置に用いられる代表的な樹脂および溶液に対して実施した。

図 1 に、学習データに有機・無機溶液をとともに含み学習した GBDT モデル (モデル A) と、無機溶液のみで学習した GBDT モデル (モデル B) に対する、代表的な樹脂 8 種の代表的な溶液 7 種に対する予測精度を示す。8 種の平均 F1 Score は、モデル A とモデル B でそれぞれ 0.79、0.82 であり、データを限定しても十分な精度となる結果が得られた。モデル B について、耐薬性予測に関連の大きい溶液特徴量を調べるため、2 種の樹脂、ETFE と ECTFE の予測時について、MIC (Maximal Information Coefficient) による上位 5 位までの特徴量を示した (表 1)。ECTFE は反応性に関連した特徴量が多い一方、ETFE は分子間相互作用や統計熱力学に関連した特徴量が多く占めている。以上の結果から、モデル B が樹脂の違いを反映した予測をすることを示唆した。

参考文献

- [1] M. Yambe *et al.*, The 71<sup>st</sup> JSAP Spring Meeting 24p-P07-2 (2024). [2] Y. Aoki *et al.*, *Macromolecules* 56, 5446 (2023).  
[3] C. Liu *et al.*, *Adv. Mater.* 33, 2102507, (2021). [4] M. Kusaba *et al.*, *Phys. Rev. B.* 108, 134107 (2023).

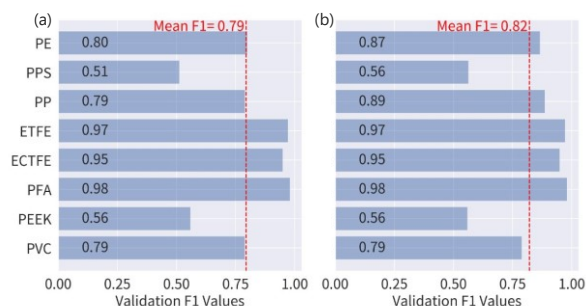


図 1 代表的な樹脂 8 種の代表的な溶液 7 種に対する予測精度。(a)モデル A の精度、(b)モデル B の精度。

表 1 モデル B について、ETFE と ECTFE に対して、MIC による上位 5 位までの溶液特徴量

ECTFE	ETFE
P軌道非占有電子数の最大値	P軌道非占有電子数の平均値
P軌道非占有電子数の平均値	ファンデルワールス半径(uffポテンシャル)の平均値
非占有原子価軌道の数の平均値	原子半径の最大値
P軌道価電子の数の平均値	融解エンタルピーの平均値
非占有原子価軌道の数の最大値	分散力(C6係数)の最大値