

パラメータの微分可能性を考慮した遺伝的アルゴリズムによる 物理モデルの自動合わせ込み

村川正宏[†] 小田嘉則^{††,*}
樋口哲也[†] 西謙二^{††,**}

本稿では、遺伝的アルゴリズムを用いた物理モデルの自動合わせ込み手法を提案する。半導体デバイスプロセスの設計時には物理モデルによるシミュレーションが現在駆使されている。その予測が正確であるためには、物理モデルのパラメータをあらかじめ計測した実験データと一致するように調整しておく必要がある。この工程は合わせ込みと呼ばれるが、調整されたパラメータに微分可能性確保の制約条件があるために、従来は自動化ができなかった。提案手法をイオン打ち込みモデルの合わせ込みに適用した結果、制約条件をみたしつつ、1台のPCを用いて17分、8台のPCを用いて2分強での自動合わせ込みに成功した。この工程は従来熟練者でも数日要したことから、大幅に作業効率、作業コストを改善できる。

Physical Model Calibration Preserving Smoothness on Extracted Model Parameters by Utilizing Genetic Algorithms

MASAHIRO MURAKAWA[†], YOSHINORI ODA^{††,*}, TETSUYA HIGUCHI[†]
and KENJI NISHI^{††,**}

In this paper, we present a GA application for physical model calibration. Maximum utilization of simulations in development of new LSI processes is heavily dependant on the calibration of relevant model parameters. With the increasing complexity of physical models, however, calibration becomes more and more labor and time intensive. Moreover, the constraint of smoothness on extracted model parameters makes the calibration process much more difficult. Experimental results with our method on a PC cluster system (eight PCs) demonstrate that the calibration of 144 parameters for an ion implantation model can be completed within a few minutes satisfying the constraint, although this would typically take a human expert a few days.

1. はじめに

半導体の先端デバイスプロセスを開発するには長い期間と大きな投資を必要とする。プロセス世代ごとに増大する開発コストを低減し、開発期間を短縮することは、半導体メーカーの解決すべき課題の一つである。その解決策のひとつとして、プロセス開発の初期段階において、テクノロジーCAD (TCAD) が駆使されている。TCADにより、計算機上でシミュレーション (仮想実験) を行なうことが可能となり、その結果が正しければ、ロット試作等に要する費用や工数を著しく削減することができる。しかし、TCADによる計算結果が正確であるためには、シミュレーションに用いる複数の物理モデルのパラメータを、あらかじめ計測した各プロセス工程ごとの実験データと一致するように調整しておく必要がある。これらの工程は「合わせ込み」もしくは「パラメータ抽出」と呼ばれ、特に高精度を要求されるシミュレーションでは、モデルパラメータの

数が多くなり合わせ込みに要する工数が増大する。また、TCADで用いられる物理モデルにおいては、調整されたパラメータに微分可能性確保の制約条件があるために、さらに工数が増大する。

そこで現在では、パラメータ群をいくつかのグループに分割し、グループごとにパラメータを合わせ込み、それらパラメータを統合した後に全体を再度合わせ込むなどの工夫が行われている。しかしそれらの理論的な分割方法は確立されておらず、熟練者が持つノウハウに頼っているのが実状である。また、微細化とともにプロセスの物理現象を説明できるシミュレーションモデルが年々複雑化し、現在ではモデルパラメータの数が百個を超えるケースもある。そのため、従来手法では熟練者による試行錯誤が不可避で、合わせ込みに1週間以上の工数が必要となる場合もあり、TCADの効率的利用の障害の1つとなっていた。

そこで本稿では、人手によるパラメータ群の分割作業を行わずに、遺伝的アルゴリズムを応用し、制約条件を満たしつつ、すべてのパラメータを一括して自動的に合わせ込む手法を提案する。この手法により、従来は数日から一週間程度かかっていた合わせ込み工程を大幅に効率化し、状況に応じてタイムリーなシミュレーションが可能となる。

[†] 半導体 MIRAI プロジェクト, 独立行政法人産業技術総合研究所

^{††} 株式会社半導体先端テクノロジーズ (Selete)

^{*} 現在, 松下電器産業株式会社

^{**} 現在, 近畿大学工業高等専門学校

$$f_{pearson}(x) = rf_1(x) + (1-r)f_2(x) \quad \text{where} \quad \int f(x)dx = dose$$

$$\frac{df_i(s)}{ds} = \frac{(s-a_i)f(s)}{b_{0i} + b_{1i}s + b_{2i}s^2} \quad s = x - R_{pi} \quad (i=1,2)$$

$$\begin{cases} a_i = -\gamma_i \sigma_{pi} (\beta_i + 3) / A_i \\ b_{0i} = -\sigma_{pi}^2 (4\beta_i - 3\gamma_i^2) / A_i \\ b_{1i} = a_i \\ b_{2i} = -(2\beta_i - 3\gamma_i^2 - 6) / A_i \end{cases} \quad \text{where} \quad \begin{cases} A_i = 10\beta_i - 12\gamma_i^2 - 18 \\ b_{0i}^2 - 4b_{0i}b_{2i} < 0, \quad b_{2i} < 0 \end{cases} \quad (i=1,2)$$

Model parameters: $r, R_{p1}, R_{p2}, \sigma_{p1}, \sigma_{p2}, \gamma_1, \gamma_2, \beta_1, \beta_2$

図1 デュアルピアソン分布

Fig. 1 Dual-Pearson Profile

また新たな物理モデルが提案された場合においても、従来ではパラメータ合わせ込みのノウハウ蓄積に多大な試行錯誤を必要としたが、提案手法によればそのステップも不要となる。さらに、モデルパラメータの合わせ込みを行える熟練者は確保するのが難しい場合もあり、その作業を専門とする業者に外注する場合も多かった。提案手法は一般的なPCで実装可能であるため、合わせ込みに要する費用を大幅に削減可能である。この利点はさまざまな物理モデルに適用することができるので、その産業的波及効果は大きい。

2. イオン打ち込みモデル

2.1 デュアルピアソン分布

イオン打ち込みとは、不純物（原子）をイオン化させシリコンなどの基板に加速注入し、基板に導電性を持たせる工程である。この工程とそれに続くアニール工程後に、基板表面から深さ方向に不純物がどのように分布しているかがその後の半導体特性を定める。そのため、半導体プロセスの設計時にはこの分布をいかに正確にシミュレーションできるかが重要となる。このシミュレーションには、デュアルピアソン（Dual-Pearson）分布（図1）とよばれる数式モデルが一般的に用いられている¹⁾。この分布（不純物分布関数）には、9つのモデルパラメータ（図1中の R_{p1} や R_{p2} など）が存在し、これら9つのパラメータを、事前にイオン打ち込み実験を行って計測した分布データ（プロファイル）と一致するように合わせ込む必要がある。

2.2 合わせ込みにおける問題点

このデュアルピアソン分布の合わせ込み工程には、二つの技術的課題がある。一つは、合わせ込みが局所最適解に陥ること、もう一つは、抽出したパラメータの微分可能性確保という制約である。

まず局所最適解に関しては、合わせ込むべきパラメータの数が増えれば増えるほど、計測データと物理モデルとの誤差関数（平均自乗誤差値など）に多数の局所最適解が存在する。そのため、LM法²⁾などの勾配を用いた最適化手法によって合わせ込みを行う場合、局所最適解に陥り失敗するケースがある。

次に、抽出したパラメータの微分可能性確保に関しては、以下のような問題がある。一般的に計測データは、打ち込

みイオン種、打ち込みエネルギー、打ち込みドーズ量、打ち込み角度、打ち込み方向、などの複数の打ち込み条件を変化させて計測されデータベース化されている。従来の合わせ込み工程では、それぞれの条件毎に9つのパラメータを抽出するが、抽出されたパラメータが打ち込み条件の変化に応じてなめらかに（連続的に）変化しなくてはならない。なぜならば、TCAD上のシミュレーションでは、データベース上に存在しない打ち込み条件でシミュレーションを行うことが普通で、その場合は、抽出済みパラメータから補間などによって条件に合うパラメータを計算するためである。パラメータがなめらかに変化していない場合は、補間値によるシミュレーションが微分不可能な境界上で発散してしまうこともあり、このようなパラメータ群はTCAD上のプロセスシミュレータでは用いることができない。

3. 遺伝的アルゴリズムを用いた自動合わせ込み手法

上記の問題点を解決するために、提案手法では、打ち込み条件毎に独立に分割してパラメータを求めるのではなく、すべてのパラメータを一括して合わせ込む。たとえば、第4章で説明する実験では、16種類の異なる打ち込みエネルギーに対してデュアルピアソン分布のパラメータを合わせ込んだ。その場合、エネルギー毎に9個のパラメータがあるので、合わせ込むべきパラメータは $9 \times 16 = 144$ 個になる。144個ものパラメータを同時に抽出することは、局所最適解数の増大により従来手法では事実上不可能だが、探索性能に優れた遺伝的アルゴリズムを利用することで合わせ込みが可能となる。また微分可能性確保の制約に関しては、パラメータのスミージング処理を適応度計算時に新たに組み込むことにより、制約条件を満たしつつ、合わせ込み誤差の最小化が行えるようにする。

なお本研究では、大規模な合わせ込み問題にも対応可能にするため、分散型遺伝的アルゴリズム³⁾を採用し、並列処理による高速化を可能にする。

3.1 パラメータのスミージング処理

本研究で提案するパラメータのスミージング処理は、具体的には、各小集団で行われる遺伝的アルゴリズムにおいて、図2に示すフローチャートにしたがって染色体の適応度を計算する。この適応度の計算方法によると、パラメータの微分可能性の制約条件を満たしつつ、すべてのパラメータを一括して最適化することができる。

- (1) まず、遺伝的アルゴリズムの染色体として、異なる打ち込み条件に対応するプロファイルそれぞれに対して、LM法における探索初期値（初期パラメータ）をコード化する。
- (2) 次に、 N 個のプロファイルそれぞれにおいて、染色体にコード化された初期値からLM法を開始して、独立に9つのパラメータを抽出する。
- (3) ここで、打ち込み条件上でなめらかな関数にフィットするように、LM法で抽出されたパラメータを修

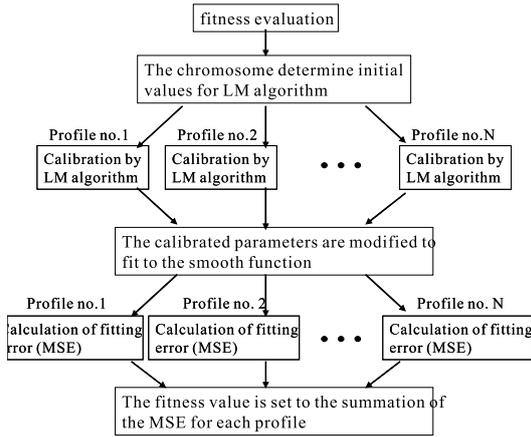


図2 提案する適応度計算のフローチャート
Fig. 2 Flowchart of the proposed GA fitness evaluation

正する．たとえば打ち込みエネルギー値 E を異なる打ち込み条件とする場合には，なめらかな関数として，下記のような指数関数を用いることができる．

$$g_j(E; m_{1j}, m_{2j}, m_{3j}) = m_{1j}E^{m_{2j}} + m_{3j}$$

を用いることができる．ここで， m_{1j}, m_{2j}, m_{3j} は，フィッティングパラメータであり， $j(= 1, \dots, 9)$ は，9つのパラメータに関するインデックスである．つまり，このなめらかな関数は9つあり，それぞれのフィッティングパラメータは，最急降下法などの従来手法で独立に決定する．このなめらかな関数上に，パラメータをスムージングする（修正する）ことで微分可能性の制約を満たすようになる．

- (4) なめらかな関数によって修正したパラメータを用いてデュアルピアソン分布を再計算する．計算で求めた値と，プロファイルの計測データとの平均自乗誤差 err_i を打ち込み条件毎に求める．
- (5) 最後に，実験条件毎に求めた平均自乗誤差を規格化し，すべて合算した値を遺伝的アルゴリズムの適応度とする．

$$fitness = \sum_{i=1}^N err_i / cmax_i$$

ここで $cmax_i$ は，各プロファイルでの最大濃度値を2乗した値である．

この提案した適応度関数は非常に多くの局所解を持つが，遺伝的アルゴリズムを用いることで，探索初期値に依存することなく準最適解を発見することが期待できる．また，この手法によって抽出されたパラメータは，上記スムージング処理によって，微分可能性の制約を必ず満たしているため，人手による試行錯誤の処理が必要ない．なお，上記した指数関数以外にも，なめらかな関数としてべき乗関数など他の微分可能な関数の採用も考えられる．

4. 自動合わせ込み実験

提案手法の有効性を検証するために，16種類の異なる打

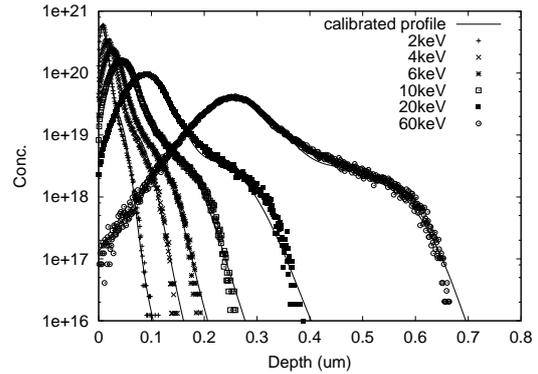


図3 計測データと提案手法により合わせこまれたデュアルピアソン分布との比較（ボロン打ち込みエネルギー：2keV～60keV，ドーズ量： 10^{15} 個/cm²）

Fig. 3 Calibrated profiles for B implantation energies from 2keV to 60keV (dose= 10^{15} atoms/cm²)

ち込みエネルギー（2keV～1000keV）における，ボロン（B）のシリコン基板への打ち込みプロファイルに対して，デュアルピアソン分布の自動合わせ込み実験を行った．すでに述べたようにこの実験では，144個のパラメータを同時に抽出する必要がある．

4.1 実験条件

実験としては，2種類の検証実験を行った．一つは，提案手法におけるスムージング処理の有無による比較実験である．もうひとつは，分散型遺伝的アルゴリズムの並列化による高速化実験である．

比較実験においては，前章で説明した適応度計算のフローにおいて，ステップ（3）のスムージング処理をスキップして，適応度を求めることとし，その合わせ込み性能を比較した．合わせ込み性能としては，計測値と計算値との規格化RMS誤差（Root-Mean-Square Error）と，微分可能性確保の制約を満たしているか否かを評価した．遺伝的アルゴリズムの全個体数は両者とも72とし，打ち切り世代は50とした．また，適応度計算で平均自乗誤差を求める際に，ボロンの濃度は対数処理した．

高速化実験においてはPCクラスタを用いて実験を行った．1台のPCに小集団を1つ割り当て，PCが1台，2台，8台の場合の3通りの実験を行った．すべての小集団の個体数は同一とし，それらの和が72となるようにした．分散型遺伝的アルゴリズムの打ち切り世代は，1台のPCを用いた遺伝的アルゴリズムと同じ世代数とした．

4.2 合わせ込み結果

計測値と，提案手法（PC 1台）により合わせ込まれたデュアルピアソン分布の比較を図3に示す．横軸はシリコン基板表面からの深さ（ μm ），縦軸は打ち込まれたボロンの濃度（個/cm³）を示す．各打ち込みエネルギーにおいて，ボロンの不純物分布を精度よく近似できていることがわかる．図示していない他の打ち込みエネルギーにおいても同様の結果である．全データにおけるRMS誤差は0.63%であった．実用的な目安がRMS誤差5%以内であること

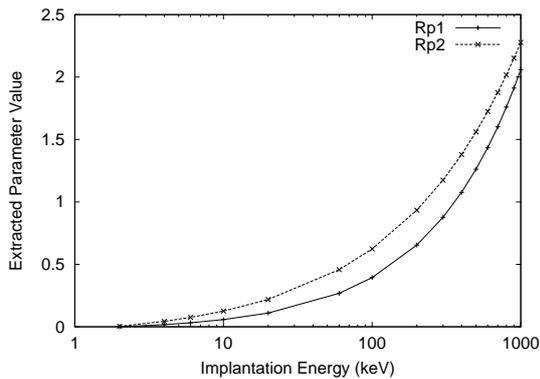


図4 抽出された Rp_1 , Rp_2 と打ち込みエネルギーの関係
Fig. 4 Extracted Rp_1 , Rp_2 versus implantation energy

表1 分散型遺伝的アルゴリズムによる高速化実験結果
(CPU:Pentium4 2.0GHz, NIC:10Mbps, MPICH 1.2.5)
Table 1 Experimental results with the distributed GA

10 試行平均	PC 1 台	PC 2 台	PC 8 台
計算時間	1037 秒	557 秒	140 秒
高速化率	1.0	1.86	7.41
RMS 誤差	0.63%	0.61%	0.62%

から、非常に高い合わせ込み精度を達成した。

また、図4に抽出されたパラメータ群 Rp_1 , Rp_2 をプロットした。打ち込みエネルギーに対して、なめらかにパラメータが変化しており、微分可能性確保の制約を満たしていることがわかる。このようななめらかなさを保ちつつ、RMS 誤差 0.63% という合わせ込み精度を従来手法によって得ようとしても、熟練した技術者でさえ数日から1週間程度かかることもあることから、提案手法の有効性が検証できた。

4.3 比較実験結果

提案手法において、スムージング処理を行った場合と、行わなかった場合の合わせ込み性能の比較結果を述べる。スムージング処理を行った場合は、すでに述べたように必ず微分可能性の制約を満たすことができる。一方スムージング処理を行わなかった場合は、乱数の種を変えて行った10試行いずれにおいても、微分可能性の制約を満たしたパラメータは現れなかった。ここでの微分可能性の制約を満たすか否かの判断は、適応度計算時にLM法によって抽出されたパラメータが、打ち込みエネルギーに対して単調に変化しているか否かで判断した。次に、合わせ込み誤差に関しては、スムージング処理を行わなかった場合のほうが、RMS 誤差 0.45% と、スムージング処理を行った場合の 0.63% よりも若干良いが、実用上は問題となる差ではない。これらの結果より、提案したスムージング処理により、合わせ込み精度を大きく損なうことなく制約条件を満たせることがわかった。

4.4 高速化実験結果

表1に高速化実験の結果を示す。表より、PC1台で17分かかる処理が、8台のPCを用いた場合、2分強で完了している。またいずれの場合も、ほぼ同程度のRMS誤差

値を実現していることから、提案手法が有効に並列化できていることが確認できた。このことにより、打ち込み条件が多くなり、合わせ込み問題の規模が大きくなった場合にも提案手法は対応することが可能である。

5. おわりに

本論文では、パラメータのスムージング処理を組み込んだ遺伝的アルゴリズムによる物理モデルの自動合わせ込み手法を提案し、それをイオン打ち込みモデルに適用した結果について報告した。実験の結果、144個のパラメータを分割することなく一括で、微分可能性の制約条件を満たしつつ抽出することに成功した。合わせ込み精度もRMS誤差 0.63% と実用上十分な精度である。また提案手法は、並列処理に使用したPCの数にほぼ比例して、計算時間を高速化できることを確認した。従来は人手を介して数日程度必要としていた作業を、8台構成のPCクラスタを用いることで数分程度で自動化できた。なお提案手法はすでにツール化されてTCADシステムに搭載されており^{*}、半導体メーカー各社で実用に供されている。

提案手法は、イオン打ち込みモデルに限らず、TCADにおける様々なパラメータ合わせ込み工程において、作業効率、作業コストを大幅に改善できる。現在、より規模の大きな問題であるMOSFETモデルのパラメータ自動合わせ込みの研究開発がすでに開始されている⁴⁾⁵⁾。半導体の先端デバイスプロセスの開発には、TCADの有効活用が今後必須であることから、提案手法のもたらすパラメータ合わせ込みの高速な自動化が必要不可欠な技術となることを筆者らは確信している。

謝辞 本研究開発の一部は、半導体MIRAIプロジェクトの一部として、NEDOからの委託により実施している。

参考文献

- 1) Park, C., Klein, K. M. and Tasch, A. F.: Efficient Modeling Parameter Extraction for Dual Pearson Approach to Simulation of Implanted Impurity Profiles in Silicon, *Solid-State Electronics*, Vol. 33, No. 6, pp. 645–650 (1990).
- 2) Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. and Flannery, B.P.: *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, p. 542 (1988).
- 3) Tanese, R.: Distributed genetic algorithms, *Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 434–439 (1989).
- 4) 馬場俊祐, 和田哲典: GAによる回路モデルパラメータの抽出, 2004年春季第51回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, No. 2, p. 979 (2004).
- 5) Murakawa, M., Miura-Mattausch, M. and Higuchi, T.: Towards Automatic Parameter Extraction for Surface-Potential-Based MOSFET Models with the Genetic Algorithm, *Proceedings of ASP-DAC 2005*, IEEE, pp. 204–207 (2005).

* 現在のバージョンはシングルプロセッサ版のみの提供