

イオン注入シミュレーションに対する機械学習の適用

Machine learning for ion implant simulation

名大院工¹, 名大未来研², 理研 AIP³, 産総研 GaN-OIL⁴

○蜂谷 涼太¹, 沓掛 健太郎^{2,3}, 原田 俊太^{1,2}, 田川 美穂^{1,2}, 宇治原 徹^{1,2,4}

Grad. School of Eng., Nagoya Univ.¹, IMASS Nagoya Univ², AIP RIKEN³, GaN-OIL AIST⁴

○Ryota Hachiya¹, Kentaro Kutsukake^{2,3}, Shunta Harada^{1,2}, Miho Tagawa^{1,2}, Toru Ujihara^{1,2,4}

E-mail: hachiya@unno.material.nagoya-u.ac.jp

【諸言】イオン注入は、半導体デバイスの作製において、不純物分布を制御するための重要な基盤技術である。イオン注入はランダム性を含む複雑な過程であるため、モンテカルロ法によるシミュレーションが不可欠である。しかし正確な不純物分布を得るためのシミュレーションは長時間を要し、イオン注入条件の最適化を目的とした繰り返し計算にはさらに膨大な計算コストがかかる。そこで本研究では、イオン注入のシミュレーション結果を機械学習することで、高速計算可能な予測モデルを構築した。またモンテカルロシミュレーションは確率に基づいた計算であるため、同条件でも結果が一意に決まらないほか、試行回数によっても結果のばらつきが生ずる。そこで、モンテカルロ法特有のばらつきと機械学習モデルの精度との関係を調べた。

【解析手法】本研究では、Si ウェハに対する B イオン注入を対象とし、シミュレーションおよび機械学習モデルのパラメータは、イオン注入エネルギー、注入角度、フォトレジスト側面形状とした。ここで、フォトレジストの形状は Fig. 1(a)のように 11 の変数を用いて形状近似を行なった。以上の説明変数をランダムに振った 200 条件でプロセスシミュレータ Athena (Silvaco 社製)を用いて試行回数 100 万回の 2 次元のイオン注入シミュレーションを行なった。シミュレーション結果から Si ウェハ内の座標と不純物濃度を抽出し、学習用データとした。機械学習は、ランダムに振ったパラメータに Si ウェハ内の座標を加えた 15 の入力変数に対して、不純物濃度を出力変数としてニューラルネットワークを用いた回帰を行なった。その後、テストデータを用いてモデルの精度を検証した。次に、モンテカルロシミュレーションの試行回数を 10 万として、同様にデータセットを作成し、同じ構造のニューラルネットワークで学習を行い、モデルの精度を評価した。

【結果と考察】Fig. 1 に、テストデータ中の 1 つの不純物濃度分布についてのシミュレーション結果 (b) と学習モデルによる推定結果 (c) を示す。図の推定結果の決定係数 (R^2 スコア) は、全体で 0.90、 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 以上の高濃度領域では 0.93 であり、十分に高い値が得られた。高濃度領域ほど推定精度が向上する傾向は、シミュレーションにおいて不純物濃度が高くなるにつれて結果のばらつきが減少することに起因すると考えられる。また 1 回のシミュレーションの計算時間が $1.1 \times 10^3 \text{ s}$ であるのに対して、学習モデルによる推定時間は $5.0 \times 10^{-2} \text{ s}$ と、非常に高速な代替モデルが得られた。次にモンテカルロシミュレーションの試行回数と学習モデルの精度の関係を検証した。テストデータ 20 条件の決定係数の平均は、試行回数 10 万では 0.74、100 万では 0.87 であった。この結果は、試行回数が増加することで不純物濃度が収束値に近づくため、シミュレーション結果のばらつきが減少したことによると考えられる。以上のように、機械学習はイオン注入のモンテカルロシミュレーションに対しても非常に有効であり、研究開発の加速が期待される。

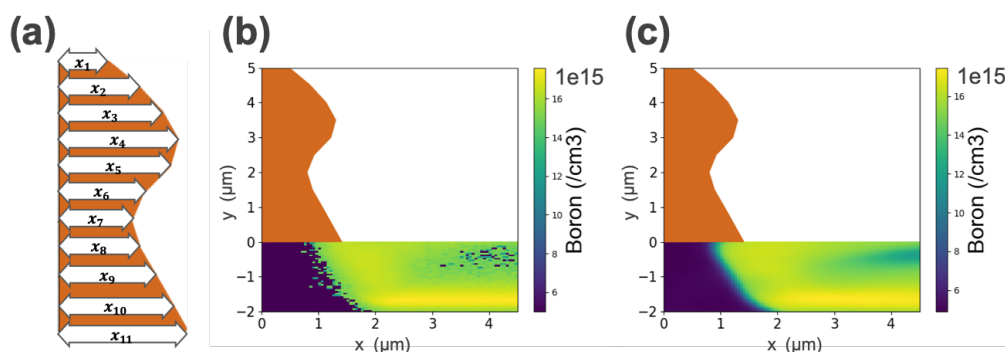


Fig.1 (a) Definition of approximate parameters of photoresist shape. (b) Calculation result by Monte Carlo simulation. (c) Calculation result by machine learning model.