

デバイスシミュレーションとAIの融合による半導体歩留まり向上の新たなアプローチ

原田 昌紀* 小田 嘉則*

A Novel Approach to Semiconductor Yield Improvement via Integration of TCAD and AI

Masanori Harada* and Yoshinori Oda*

近年の半導体製造プロセスは複雑化し、従来の TCAD 単独ではプロセス変動を反映した歩留まり改善が困難であった。本稿では、物理モデルの厳密性と AI 技術を融合した新たなデバイス特性予測システムを提案する。実データを学習する形状・物性予測 NN と、物理法則を内包する PINN の階層的統合により、数千パターンのばらつきを考慮した波形分布予測を数分で完了させる。さらに、異常予兆検知や要因特定、ロバスト設計への応用について解説し、本技術が開発の早期化と量産プロセスの歩留まり向上に貢献することを示す。

<https://doi.org/10.69290/j.001226-vol33>

Keywords: 半導体、デバイス、TCAD、デバイスシミュレーション、AI、Physics-Informed Neural Networks、PINN、歩留まり、プロセス変動、AutoEncoder、ロバスト設計

1. はじめに

近年の半導体製造プロセスは、先端ロジックデバイスにおける極限の微細化や 3 次元構造化（FinFET、GAA 構造等）に加え、パワーデバイスや各種センサー等における多様な新材料（SiC、GaN 等）の採用により、極めて高度かつ複雑化している[1]。この高度な技術領域において、Technology CAD（TCAD）によるプロセス・デバイスシミュレーションは、開発期間の短縮や試作コストの削減を実現する不可欠なツールとしての地位を確立してきた。

しかしながら、従来の TCAD は物理モデルに基づいた理想的な構造の計算に主眼を置いており、実際の製造現場で発生する複雑な現象、すなわち装置ごとの機差やウエハ面内のプロセスばらつきといった現実の変動を十分に反映しきれてい

ないという課題がある。このシミュレーションと現実の乖離は、特に量産立ち上げ時における歩留まり改善や、突発的な不良要因の特定といった技術課題に対し、迅速かつ正確な解決を図るという点において、従来のシミュレーション手法だけでは十分にカバーしきれない領域を残している。

近年、デバイスモデリングにおいて物理ベースのシミュレーションと最新の AI 技術（Physics-Informed Neural Networks 等）を融合させるアプローチが学術的にも注目を集めている[2]。本稿では、この概念をさらに発展させ、現場の実プロセス変動データを統合することで量産時の歩留まり向上とロバスト設計を実現する、当社独自の新たなシステム構成を提案する。本システムは、現場での製造データ活用プロセスと高度な AI 推論を統合し、プロセス変動を高速かつ高精度に予測することで、開発から量産に至るフェーズでの歩留まり向上に直接的に寄与することを目的としている。実運用においては、各製造現場の特性に合わせた柔軟なシステム構築と継続的な運用の最適

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

化が不可欠であり、本稿ではその実現に向けた技術的枠組みと支援体制についても言及する。

2. 従来の TCAD における運用上の課題

TCAD とは、半導体デバイスの製造工程やその電気特性を計算機上で物理的に再現するシミュレーション技術である。実機による試作回数の削減、開発期間の短縮、およびコスト低減を図る上で、現代の半導体開発において不可欠な役割を担っている。しかし、開発から量産へとフェーズが移行するにつれ、従来の TCAD だけでは十分に対応しきれない運用上の課題が顕在化してくる。

2.1. 設計基準値と実プロセス変動の差異

従来の半導体開発フロー（図 1 参照）において、TCAD はプロセスシミュレータや GUI によって作成された理想的な 3 次元形状に対し、物理方程式を解くことで I-V カーブ等の電気特性を予測してきた。このアプローチは、デバイスの動作原理の理解や基本設計には極めて有効である。

しかし、実際の製造プロセスでは、レシピ通りの制御を行っても、装置の状態や環境要因により不可避な変動が生じる。例えば、成膜工程における膜厚のわずかなばらつきや、エッチング形状の不均一性などである。従来の TCAD では、標準的なプロセス条件での代表値を予測することはできても、これら多種多様な変動パターンを含んだ実測値の分布を再現することは困難であった。その結果、シミュレーション結果と実測結果の間に

乖離が生じた際、その差異が正常な範囲内のプロセス変動によるものなのか、あるいは何らかのプロセス異常に起因するものなのかを、シミュレーションに基づいて迅速に判断することが容易ではなかった。

2.2. 計算コストに関する制約

歩留まり向上のためには、プロセス変動が電気特性に与える影響を統計的に把握することが重要である。しかし、物理モデルに基づく高精度な 3 次元デバイスシミュレーションは計算負荷が高く、1 条件の計算に数時間から数日を要することも珍しくない。

このため、プロセス変動を考慮して数百、数千パターンの計算を行うモンテカルロ解析のような手法を、日常的な開発・量産業務のタイムスケールで適用することは現実的ではなかった。これが、シミュレーションによる設計段階での製造マージンの検証を限定的なものとし、量産立ち上げ後の歩留まり改善に向けた多角的な取り組みにおいて、シミュレーションの活用領域を限定的なものに留めていた。

3. 物理モデルと AI を融合したデバイス特性予測システムの構成案

前章で指摘した従来の TCAD における実プロセス変動への追従性と計算コストという課題を克服するため、物理モデルの厳密性と AI の高速性を高度に融合させた新しいシステム構成の検

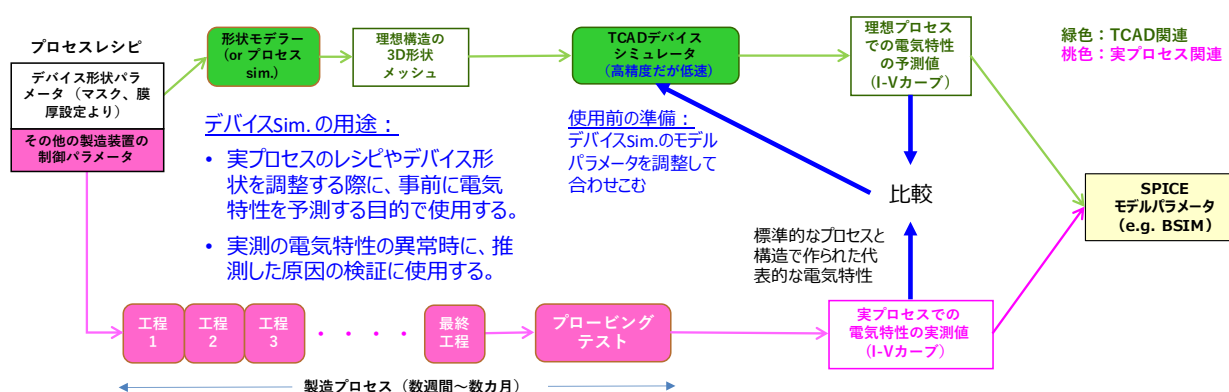


図 1 標準的なデバイス開発フローにおける TCAD の役割

討を進めている。本章では、物理ベースのシミュレーションとデータ駆動型の AI 技術を組み合わせたシステムの全体像とその動作メカニズムについて解説する。提案システムの全体構成を図 2 に示す。

3.1. システムの基本コンセプトと構成概要

本稿で提案する歩留まり向上システムは、現場における製造データの収集・運用フローと、その中核を担う AI 駆動型の解析エンジン（以下、便宜上「Advance PINN デバイスシミュレータ」と呼ぶ）によって構成される。この解析エンジンは、役割の異なる 3 種類のニューラルネットワーク（NN）を階層的に組み合わせた構成を特徴とする。

第一の構成要素は、デバイスの形状（各部の寸法）を予測する複数個の形状予測用の NN である。第二の構成要素は、トラップ準位や不純物分布といった物理的特徴を予測する複数個の物性予測用の NN である。そして第三の構成要素が、これら予測された形状・物性データおよびバイアス条件を入力として電気特性を出力する、物理エンジンを内包した推論コアである Physics-Informed

Neural Networks（PINN）である[3]。

本システムの最大の特長は、単に製造データから電気特性を直接予測するのではなく、製造装置の挙動をデバイスの物理的変化（形状・物性）として捉え、それを、物理法則を内包した PINN へと接続させるアーキテクチャにある。電気特性の概形は物理法則によって決定されるため、これを TCAD の知見を活かした PINN で担保しつつ、複雑な製造因子の影響を個別の予測 NN で処理することで、少ない学習データでも高い予測精度と物理的な整合性を両立させることが可能となる。

3.2. 詳細なデータ処理フローと学習メカニズム

本提案システムが想定する学習から推論に至るプロセスは、以下のステップで構成される。

(1) プロセス変動データの収集とプリ処理

まず、本システムの機能を有効に活用するための前提条件として、製造ラインから得られるプロセス変動データを収集する。これには、測長 SEM による寸法データや、成膜装置からの膜厚データといった直接的な検査データに加え、製造装置のモニタリングデータ（温度、圧力、ガス流量、プ

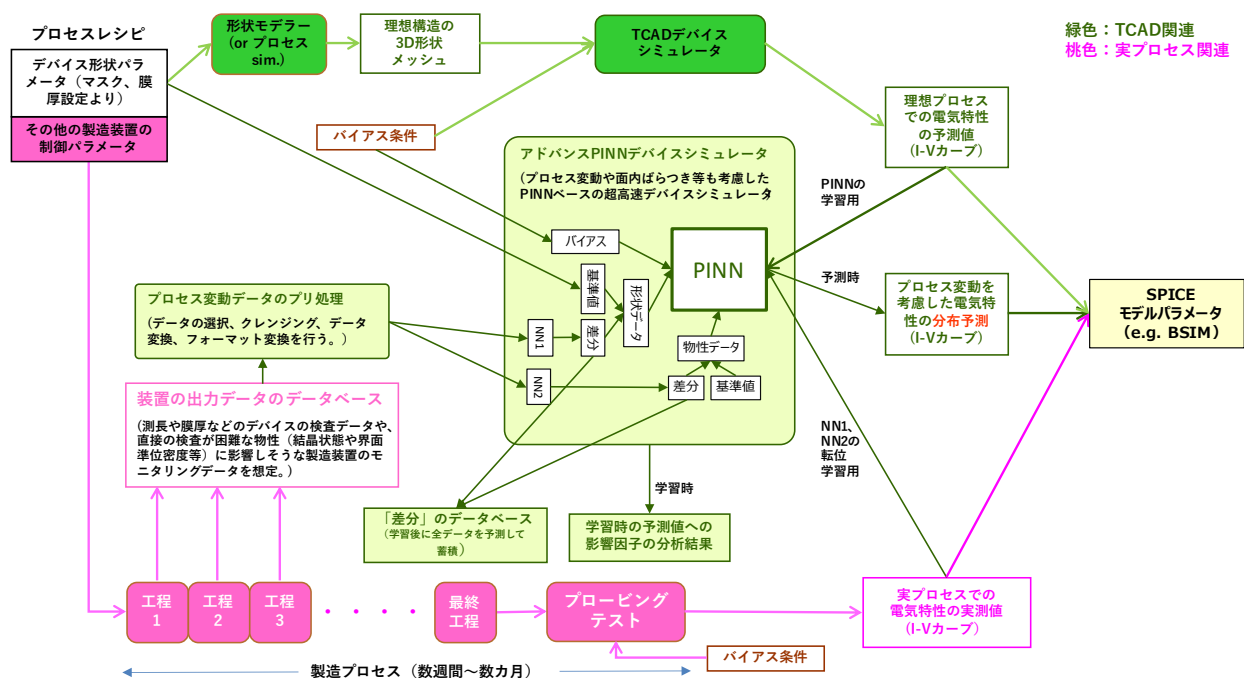


図 2 物理モデルと AI の融合によるデバイス特性予測システムの構成案

ラズマ発光等の時系列ログ) が含まれる。また、装置間の機差を識別するために装置の識別子をカテゴリ変数として付加する。収集されたデータは、プリ処理工程においてクレンジングやフォーマット変換が行われる。

(2) 形状および物性の予測ネットワーク

次に、プリ処理されたデータに基づき、デバイスの実際の状態を推定する。ここでは、予測対象となる寸法や物性ごとに独立した NN が用意される。

- 形状予測 NN：入力データの基準値である設計データをモニタリングデータとともに与えることで、対象デバイスの特定部位の寸法を出力する。設計値を入力に含めることで、類似の製造工程や異なるデバイスに対しても同一の NN を併用できる汎用性を持たせている。
- 物性予測 NN：電気特性に影響を与えるバイアスや形状以外の因子（材質、トラップ準位、界面準位、不純物分布、結晶状態、応力等）を予測する。形状予測 NN と同様、目標値が存在する場合はそれを入力に加えることで、多種多様な物性予測に柔軟に対応する。

(3) PINN による電気特性のマルチタスク予測

上記ステップで予測された、実際のデバイス形状データと物性データは、バイアス条件とともに PINN に入力される。PINN は、ポアソン方程式やドリフト拡散方程式といった半導体デバイスの支配方程式を「損失関数の正則化項」として組み込むことで、物理的に矛盾しない解を探索する。本システムでは、PINN の出力をマルチタスク化することで、特定の抽出指標のみならず、I-V カーブの波形全体を直接予測することを可能としている。この構成により、製造装置の微小な変動が、最終的に電気特性の分布にどのような影響を及ぼすかを、物理的な因果関係を保ったまま高速にシミュレートすることが可能となる。

3.3. プロセス変動データベースの構築と高速推論による分布予測

本システムでは、学習時や後述の定常的な運用における予測時に、各予測ネットワークへ入力される製造データをプロセス変動データベースとして蓄積する。このデータベースには、実際の製造ラインで発生した寸法や物性の微細なばらつき、および装置ごとの機差といった、実プロセス特有の変動情報が網羅的に保存される。

4 章で後述するような、プロセス変動を考慮した電気特性の分布予測を行う際には、このデータベースから抽出された多数のデータセットを予測ネットワークに供給し、一括して推論を実行する。ひとたび学習が完了すれば、個別の予測 NN と PINN による計算は極めて高速であるため、従来は計算負荷の観点から実用化が困難であった「数千パターンのモンテカルロ解析」に匹敵する波形分布予測を、わずか数秒から数分オーダーで完了させることが可能となる。この「実データに基づく高速なバッチ予測」こそが、本提案システムの実用性を支える核となる機能である。

4. 量産工程の安定化と歩留まり向上のための具体的な活用法

前章で述べた本提案システムの活用による最大のエンジニアリング上のメリットは、開発および量産段階における歩留まり向上と Time-to-Market の短縮を、シミュレーションとデータの融合によって強力に支援できる点である。以下に、現場の課題解決に資する具体的な二つのアプローチを示す。

4.1. 異常検知と要因特定による歩留まり低下の未然防止

量産工程において突発的な歩留まり低下が発生した場合、その原因究明のスピードがプロセスの復旧速度や製造ラインの稼働効率に直結する。本システムは、以下の AI 技術を用いて、エンジニアによる高度な解析業務を強力に支援し、客観的なデータに基づいた迅速な意思決定を可能にする。

(1) 重要因子分析による根本原因の特定

製造装置から得られる膨大なパラメータ（温度、圧力、ガス流量等）や検査データの中から、最終的な電気特性の変動に支配的な影響を及ぼしている真の要因を、人手による解析のみで正確に特定することは容易ではない。本システムでは、学習済みのニューラルネットワークに対して感度分析と呼ばれる手法を適用する。これは、AI モデルを仮定の製造ラインと見なし、特定の入力パラメータを微変動させた際に出力の電気特性プロファイル（I-V 波形）が理論上どの程度変化するかを個別に計算する手法である。

この解析の最大の特徴は、複数の変動要因が複雑に絡み合う中で、各因子の寄与度をデータに基づいて定量的に切り分けられる点にある。例えば、あるデバイスの閾値電圧（Vth）に異常が検出された際、エンジニアの経験からゲート絶縁膜の膜厚異常が疑われる場面でも、本システムを用いることで「Vth の変動に対し、膜厚変動の寄与は 30% に留まる一方で、チャネル界面の不純物濃度の急峻性の低下が 60% の影響を及ぼしている」といった物理的整合性を保った高精度な感度解析により、複雑な製造プロセスにおける真の支配因子を即座に特定できる。

この多段階の推論パスを遡る解析により、ブラ

ックボックス化しやすい製造プロセスのどの工程のどのパラメータを修正すべきかを、電気特性の異常からダイレクトに、かつ従来の人手による解析と比較して、極めて短時間に特定可能となる。これにより、従来数週間を要していた不良解析期間を劇的に短縮することが期待できる。

(2) AutoEncoder による予兆検知

装置の時系列のモニタリングデータの異常検知には、AutoEncoder を活用する[4]。この手法の特長は、従来の異常検知のように過去に起きた不良パターンを探すのではなく、正常なデータのみを学習させる点にある。

AutoEncoder は、入力データを一度圧縮してから元の形に復元するプロセスを経るが、正常データの特徴のみを学習させることで、正常な波形だけを極めて高い精度で再構成する機能を AI に持たせる。もし装置に予期せぬ変動が生じ、未知の波形が入力された場合、AI はそのデータをうまく復元できず、入力と出力の差異（再構成誤差）が大きくなる。この誤差を異常状態として捉えることで、ノイズやバイアスの影響を最小限に抑えつつ、波形の微妙な形状変化や位置ずれを高感度に検出し、不良品が発生する前にアラートを発出することが可能となる。これは、歩留まりの安定化と不良品流出の防止において極めて実用的な手

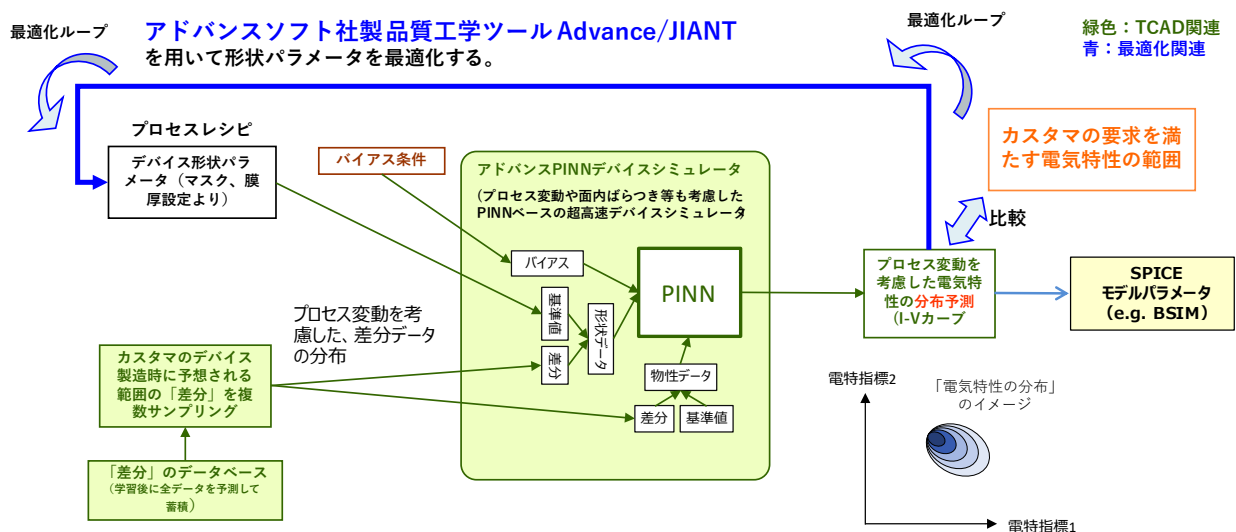


図 3 実プロセスの変動データを活用したデバイス特性の最適化フロー

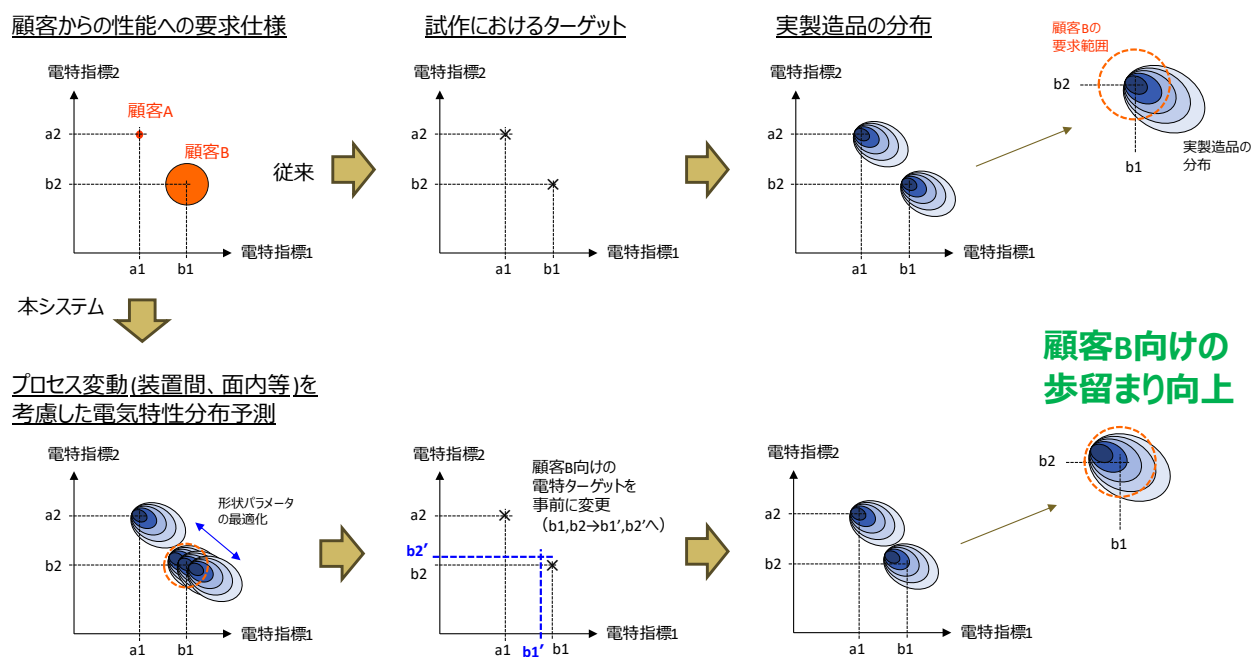


図 4 プロセス変動を考慮したターゲットシフト戦略による歩留まり向上

段となる。

4.2. プロセス変動を考慮したロバスト設計と顧客別最適化

本提案システムがもたらす高速な分布予測能力は、設計・開発段階における設計最適化のアプローチを実務レベルで変革する。これまで困難であった実製造における変動を前提とした最適化が可能になることで、量産時の歩留まりを最大化するロバスト設計が実現可能となる。

(1) 実製造のばらつきを考慮したフルオーダー型のプロセス最適化

顧客が要求する電気特性を満たすデバイスを製造するための従来のアプローチは、デバイスメーカーがあらかじめ準備した PDK (Process Design Kit) の範囲内で、顧客側が希望に近い特性を選択するセミオーダー的な手法が主流であった。これは、特定の特性に特化したプロセスレシピを新規に構築するには、膨大な試作コストとシミュレーション時間を要するためである。

これに対し、本システムでは、実際の製造ラインで発生するプロセスシフトやばらつきを考慮した電気特性の分布を高速に予測できる(図 3 参

照)。この特徴を活かし、最適化ツール(例えば当社製の品質工学・最適化ツール Advance/JIANT など)を組み合わせることでデバイス形状パラメータ(ゲート長、サイドウォール幅、膜厚等)の探索ループを回すことで、顧客が求める特定の電気特性を厳密に目標値として設定したフルオーダー型のプロセスレシピ構築が可能となる。3.3 節で述べたデータベースから実際の変動パターンを数百～数千パターン抽出・生成し、それら全ての電気特性を瞬時に予測することで、性能の高さと製造ばらつきに対する耐性(歩留まり)を高水準で両立させた最適なレシピを導き出すことができる。

(2) 顧客要求に合わせた製造ターゲットの最適調整

前述のフルオーダー型の最適化能力を前提とすれば、ファウンドリ等の製造形態において、顧客ごとの要求仕様(スペックウィンドウ)に合わせて製造ターゲットを動的に制御する高度な運用が可能となる。

具体的な例を図 4 に示す。顧客 A と顧客 B のように、デバイスに求める電気特性のターゲット値に対する許容範囲は顧客ごとに異なる。ここでは顧客 B のようにその許容範囲が広い場合を考え

る。従来は、試作したデバイスの電気特性が設計上のターゲット値 (b1, b2) になるようなデバイス形状を設計していた。しかし、実際に量産して製造されるデバイスは、プロセス変動により電気特性にばらつきが生じる。仮にそのばらつきが図 4 の右上に示すような偏りを持っており、分布の裾野の多くが規格外となる場合を想定する。このとき、図 4 の右下の図のように、あらかじめターゲットを (b1, b2) からずらせば、規格外となるデバイスの個数が減り、歩留まりは向上する。

本システムを用いれば、実製造プロセスのばらつきを正確に考慮した電気特性の分布を事前に予測することができるため、より歩留まりが大きくなるような最適化されたターゲット値 (b1', b2') へと事前に補正しておくことが可能となる。このように、個別のスペックに応じて製造の狙い値を最適化するアプローチは、歩留まりを理論的限界まで高めるための強力なエンジニアリング支援ツールとなる。

5. 本システムの社会実装に向けた運用上の考慮点

本稿で提案したシステムを実務レベルで機能させ、確かな成果を得るためには、単に AI エンジンを導入するだけでは不十分である。実際に導入を検討する読者が最も留意すべき点は、自社の製造ラインの特性に合わせた入力データの設計と、それに基づく段階的な精度の作り込みのプロセスである。

5.1. 製造現場のドメイン知識に基づくデータフローの設計

本システムを有効に活用するための前提条件として、現場の製造実態に即したデータフローを構築する必要がある。具体的には、どの工程のどのパラメータがデバイス特性に影響を与えるかを、製造現場のプロセスエンジニアが持つ知見（ドメイン知識）に基づいて選定することが、システムの成否を分ける。

本システムでは、形状予測 NN や物性予測 NN といった個別のネットワークを、推定したい寸法や物理量ごとに用意する構成を想定している。こ

れらに対し、どの検査装置のデータや製造装置のログを紐付けるかは、各ラインの状況に応じた柔軟な設計が求められる。また、装置間の機差を認識させるための装置識別子の付加や、設計基準値の入力といった工夫を凝らすことで、類似工程や他デバイスへの転用が可能な汎用性の高いシステムへと昇華させることが可能となる。

5.2. 段階的なシステム構築と精度の作り込み

製造現場におけるプロセス変動は極めて複雑であり、短期間で実運用に足る予測精度を達成することは困難である。そのため、まずは特定の重要な工程やパラメータに絞ってスモールスタートし、実測データとの照合を繰り返しながら段階的に学習を深めていく反復的な学習と検証のプロセスが必要となる。

この試行錯誤の過程において、物理的な正解を定義する TCAD の役割は極めて大きい。純粋なデータ駆動型 AI は、実測データが不足している条件や測定ノイズに対して脆弱になりがちであるが、TCAD を併用することで、実測データが存在しないプロセスウィンドウの境界領域などにおいても、物理法則に基づいたベースラインを提示できる。このように、物理シミュレーションによって AI の予測空間に物理的制約を課すことで、少ない実測データからでも、物理的に矛盾のない安定した予測精度を早期に確立することが期待できる。

5.3. アドバンスソフトによる技術的な伴走支援

本システムの構築には、計算科学とデータ科学の両面における深い理解が不可欠である。アドバンスソフト株式会社は、数値計算シミュレーションの専門企業として長年培ってきた物理モデルの知見と、実務適用を通じて蓄積してきた AI 技術の双方を融合させ、お客様の課題解決を支援する体制を整えている。

具体的には、当社の自社開発 3 次元 TCAD システム Advance/TCAD をベースとした高精度な基準値の算出、および AutoEncoder を用いた異常検知や PINN による高速推論といった多様な手法の中

から、お客様の製造現場に最適なアーキテクチャを選定・カスタマイズする支援を行う。単なるソフトウェアの提供にとどまらず、現場の運用に寄り添ったシステム設計から精度の作り込みまでを共に行うパートナーとして、半導体製造プロセスの革新と歩留まり向上の実現に貢献していきたいと考えている。

6. まとめ

本稿では、従来はデバイスの基本設計や R&D 用途が中心であった TCAD シミュレーションを、適切なデータ運用と AI 技術を統合したシステムとして量産現場の歩留まり向上に直接的に寄与させるための新たなアプローチを提案した。

厳密な物理法則に基づく TCAD の知見を組み込んだ PINN と、装置間ばらつきを含む実製造上の変動要因を的確に捉える形状・物性予測ネットワークを組み合わせた本システムは、実製造プロセスにおける複雑な変動を的確に捉え、電気特性のばらつき分布を圧倒的な速度で高精度に予測する。

本システムの真価を発揮させるためには、製造現場のドメイン知識を反映した適切な運用設計が不可欠である。物理モデルの厳密性と AI の柔軟な推論能力を、実際の製造ラインのデータフローと高度に統合させることで、歩留まり向上の技術的障壁を克服し、Time-to-Market の短縮という実利をもたらすことが可能となる。当社は、シミュレーションと AI の高度な融合技術を通じて、次世代の製品開発と量産プロセスの効率化を強力に支援していく所存である。

参考文献

- [1] J. Moyne and J. Iskandar, "Big Data Analytics for Smart Manufacturing: Case Studies in Semiconductor Manufacturing," *Processes*, vol. 5, no. 3, p. 39, 2017.
- [2] Y. Wang, et al., "A Physics-Informed Automatic Neural Network Generation Framework for Emerging Device Modeling," *Micromachines*, vol. 14, no. 6, p. 1150, 2023.

- [3] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," *Journal of Computational Physics*, vol. 378, pp. 686-707, 2019.
- [4] C.-H. Liao, et al., "Equipment Anomaly Detection for Semiconductor Manufacturing by Exploiting Unsupervised Learning from Sensory Data," *Sensors*, vol. 20, no. 19, p. 5650, 2020.

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMIII（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。