

基於光譜資訊之深度學習模型 反向重建半導體 FinFET-Fin 結構參數研究

本論文提出根據光譜資訊建立深度學習模型以重建 FinFET 半導體 Fin 結構參數。首先利用嚴格耦合波分析方法模擬在不同結構參數下被橢偏散射儀量測出的散射光譜，並計算出相對應的光譜訊號，接著將模擬出來的資料導入深度學習神經網路中訓練。本研究使用兩種神經網路模型，分別是反向神經網路和前向神經網路。前者以光譜訊號當作輸入，輸出為對應之結構參數；後者以結構參數當作輸入，輸出為對應的光譜訊號。有別於傳統的量測方法，本模型經過資料訓練後能準確地預測出結構的特徵或是光譜訊號，在半導體製程中提供一種快速而有效的結構參數測量方法。

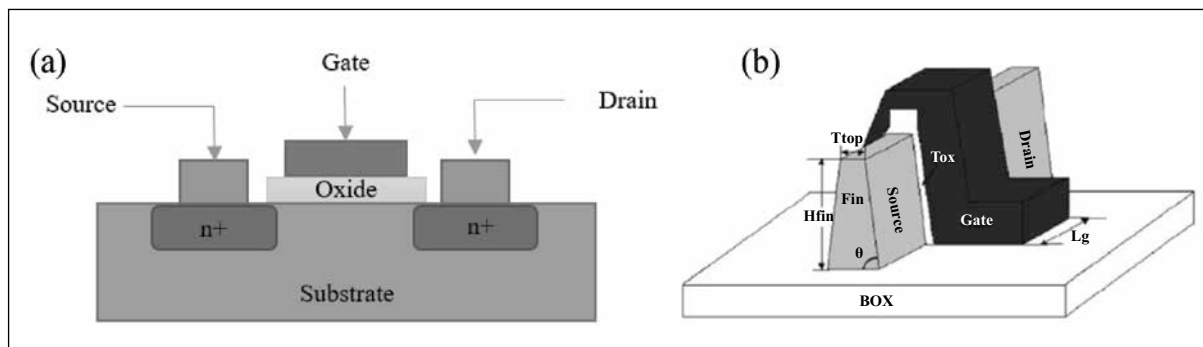
■ 陳瀚、藍永強

關鍵詞：半導體結構參數、深度學習、反向神經網路、前向神經網路

電子設備因技術的提升而使尺寸越做越小，在通訊設備及計算系統中，電子晶片為主要驅動核心，晶片是由幾百億的電晶體所組成，依照電晶體的大小決定單一晶片能容納多少電晶體，常理來說單位面積下的電晶體越多，此晶片的效能就會越強大，但是在製程技術上未必能做到如此精準地控制。由於傳統的平面 MOSFET 結構的物理限制 (圖一 (a)) (Hu., 2009)，閘極 (Gate) 寬

度縮小反而會導致有效通道面積也變小，使元件控制電流不易，故轉變成設計立體的 FinFET 結構 (Atalla et al., 2019) (Cui et al., 2018)，FinFET 電晶體的通道區域是垂直於基板方向向上延伸，使得通道面積相對增大，如圖一 (b) 所示。

採用嚴格耦合波分析 (rigorous couple-wave analysis, RCWA) 方法，以側傾角 (sidewall angle, SWA) (Peralagu et al., 2015)



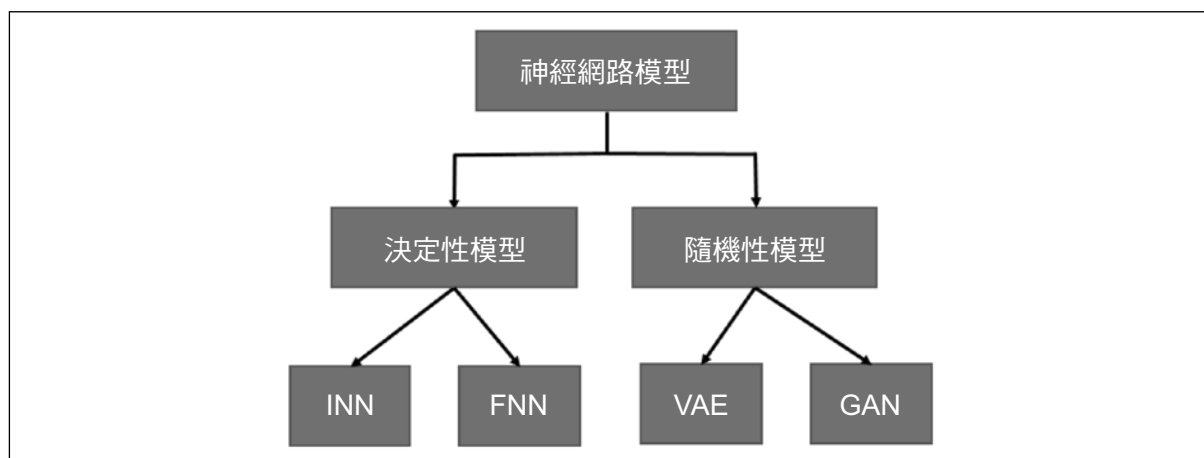
圖一 (a) MOSFET 結構示意圖 (Hu., 2009)，(b) FinFET 結構示意圖 (Cui et al., 2018)

為主軸並結合不同幾何參數 (例如：高度 H 和週期 $Pitch$)，可模擬 Fin 結構的光學散射特性 (Orji et al., 2018) (Diebold et al., 2018)，並反映蝕刻製程中的真實情況 (Kawahira et al., 2008)。當設置特定條件的入射光打到 Fin 結構上，將產生的反射訊號收集起來，轉換成 Jones matrix 和 Muller matrix，最後可計算出橢偏儀的光譜參數 ψ 和 δ ，這兩種參數也是以光學的方式 (橢偏儀和散射儀) 量測奈米結構時可得到的參數，同時也具有測量範圍較廣、量測速度較快等優點 (Chen et al., 2019)。本論文先使用以模擬方式產生特定結構下對應的橢偏儀光譜訊號 ψ 和 δ ，模擬的入射波波長為 200 nm 到 800 nm，接著採用此光譜資訊建立深度學習模型以重建 FinFET 半導體 Fin 結構參數 (Liu et al., 2022) (Ma et al., 2022)。

研究方法

一、深度學習神經網路模型設計

對於奈米結構反向設計問題通常可採用兩類模型，即決定性模型 (Deterministic models) 與隨機性模型 (Stochastic models) (圖二) (Ma et al., 2022)，前者只能針對訓練資料集的範圍內進行預測，必須要給予範圍限制下的資料才能映射出準確的輸出資料；後者相比於前者其最大差異在於輸出目標的多樣性，此模型不僅能學習訓練資料範圍內的資料特徵，甚至可以生成出我們未曾設想過的未知訊息。在本論文中我們採用決定性模型，並建立兩種神經網路模型：反向神經網路模型 (Inverse neural network, INN) 與前向神經網路模型 (Forward neural network, FNN)。

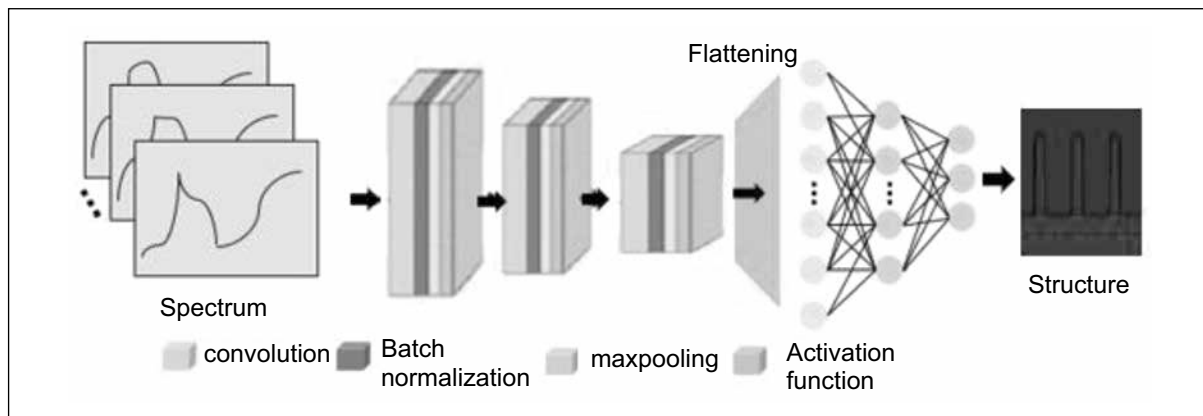


圖二 深度神經網路模型類別：INN(反向神經網路)、FNN(前向神經網路)、VAE(變分自編碼器神經網路) 與 GAN(生成對抗神經網路) (Ma et al., 2022)

二、反向神經網路模型

此模型以光譜訊號當作輸入資料，並預測出相對應的結構參數 (圖三)。由於光譜訊號是由連續波長段組合而成，一組光譜訊號會對應一種結構參數 (如 SWA 、 H 、 P)，也就會出現多對一的映射問題，我們在模型中

讓光譜資料先經過卷積神經網路的運算以萃取出特徵光頻，再送到全連接層做幾何結構預測的任務。卷積神經網路將資料萃取的作用等同於降維和壓縮，其後的全連接層就可以設置較少的神經元，故可大幅減少整個模型的參數量，使模型在計算上的複雜度下降。



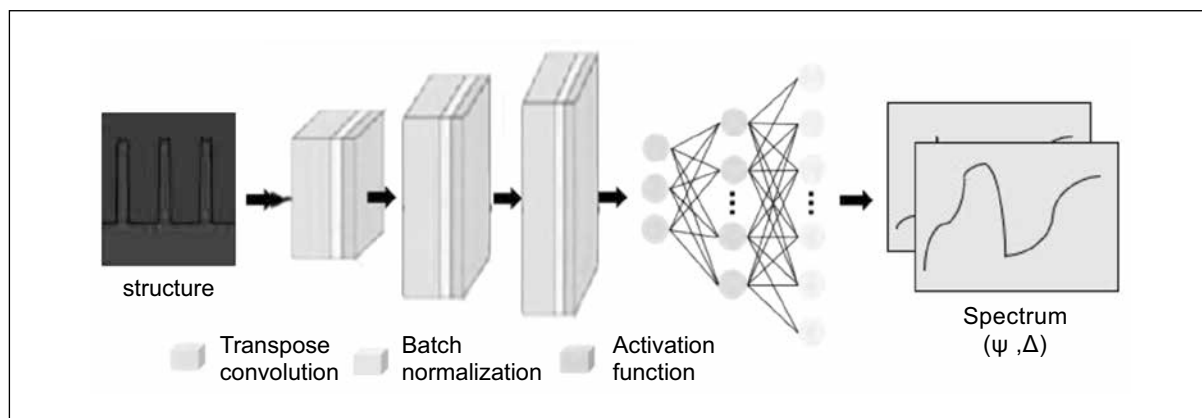
圖三 INN 神經網路示意圖：convolution(卷積層)、Batch normalization (批次規一化層)、maxpooling(最大池化層)、Activation function (激活函數層) 與 flattening(展平)

卷積神經網路是由好幾個不同功能的計算層所組成的一個單元，順序依次為卷積層 (convolution layer, CL)，最大池化層 (maxpooling layer, MPL)，再接著批次規一化層 (batch normalization layer, BNL)，最後連接非線性激活層 (Active function layer, AFL)，由 CL-MPL-BNL-AFL 不同功能的四層組合成卷積神經網路的一個計算單元 (Goodfellow et al., 2016)。本研究不使用最大池化層，亦即在卷積層 (CF) 之後不對資料作特徵強化，其餘的網路架構不變，以 CL-BNL-AFL 作為一個卷積計算單元。卷積層會依照輸入資料的長度、卷積核尺寸、卷積核滑動步長等因素去設置，通常以 4~5 組計算單元構成卷積神經網路，在此我們設置 5 組。接著會把卷積神經網路計算單元的輸出特徵信號展平 (flattening)，再接到全連接層 (full connected layer, FCL)，最後目標輸出預測值也就是結構參數。再根據網路輸出值與標籤值計算其誤差，誤差計算常採用均方誤差 (mean square error, MSE) 或均方根誤差 (Root mean square error, RMSE)，在每個回合 (epoch) 迭代下，模型以梯度下

降法 (gradient descent) 與倒傳遞學習 (back-propagation) 法修正網路的權重 (weight) 與偏值 (bias)，不斷找尋最佳解並持續更新網路的權重 (weight) 與偏值 (bias)，我們也設定一個訓練指標，當模型訓練回合數超過特定次數都無法找到更好的解時，就是模型訓練該結束的時刻。確認模型訓練完成後，可以用測試資料集來評估使用 INN 網路的計算效能與正確性。

三、前向神經網路模型

前向神經網路 FNN 模型以結構參數當作輸入資料，預測相對應的光譜訊號 (圖四)。FNN 模型可以想成 INN 模型的倒置操作，原本模型的網路架構是利用卷積計算將資料壓縮，而 FNN 則改為轉置卷積 (transpose convolution)，使少量資訊的結構參數放大成資訊量較大的光譜訊號，這裡可以用照片的解析度來理解卷積與轉置卷積，卷積會把高解析度的照片壓縮使檔案容量變小，轉置卷積則是將解析度低的照片變成更清晰的照片 (Langr et al., 2019)。



圖四 FNN 神經網路示意圖：Transpose Convolution(轉置卷積層)

除了採用轉置卷積層以取代卷積層外，FNN 的其他層與 INN 大致相同，FNN 也不採用最大池化層來強化特徵，因為最大池化層是對局部資訊抓出有效特徵以表示原資訊，所以也是對資料做壓縮的動作。在 FNN 網路中以轉置卷積層 (transpose convolution layer, TCL) 開始，再接著批次規一化層 (batch normalization layer; BNL)，最後連接非線性激活層 (Active function layer; AFL)，由 TCL-BNL-AFL 不同功能的三層組合成轉置卷積神經網路的一個計算單元，轉置卷積層也會依照卷積核尺寸、卷積核滑動步長等因素去設置，通常以 4~5 組計算單元構成轉置卷積神經網路，實際上需要以訓練狀況做調整，本研究設置 5 組單元。之後把轉置卷積神經網路的輸出的特徵信號展平 (flattening)，再接到全連接層 (full connected layer, FCL)，最後輸出一組預測光譜訊號。接著根據網路輸出值與標籤值，計算其均方根誤差 (Root mean square error; RMSE)，在每個回合 (epoch) 迭代下，FNN 模型以梯度下降法 (gradient descent) 與倒傳遞學習 (back-propagation) 法修正網路的權重 (weight) 與偏值 (bias)，不斷找尋最佳解

並持續更新權重 (weight) 與偏值 (bias)。模型訓練完成之後，我們亦使用測試資料集來評估使用 FNN 模型的計算效能與正確性。

本論文採用 PyTorch 來建立神經網路 (PyTorch, 2023)。

模型評估與預測結果

一、訓練資料

首先由 RCWA 方法模擬建立資料集共 11000 筆資料，先進行隨機打散以避免資料分布不均情況，並將前 8000 筆當作訓練集，中間 2000 筆作為驗證集，送至模型進行訓練，其結構範圍如表一。訓練完成後，將測試資料送進訓練好的模型進行預測以評估模型的效能，測試資料分成三個部份：Test0、Test1、Test2，其中 Test0 資料為原先打散的資料集中最後的 1000 筆資料，所以結構參數會在參數範圍內呈現均勻分布，而 Test1(1700 筆) 是另外進行符合結構參數範圍的模擬，結構參數呈現不規則變化並組合出與訓練資料不同的新資料，以觀察模型對於新資料的泛化能力，最後 Test2(720 筆) 則是由超出結構參數訓練範圍的新資料組成，以觀察模型是否能預測出不在訓練範圍內的資料。

表一 模擬結構參數範圍 (單位 nm)

structrue		下限	平均	上限
Height	48-57(10)	48 nm	52 nm	57 nm
Pitch	26-35(10)	26 nm	30 nm	35 nm
SWA	85-95(110)	85°	90°	95°
Width	6(fixed)	6 nm	6 nm	6 nm

二、反向神經網路模型

INN 模型以正確率為基準，期望預測結構參數 SWA 誤差小於 0.1° 要達到 99 %、小於 0.08° 要達到 90-95 %、小於 0.05° 要達到 85-90 %，H 誤差在小於 0.5 nm 要達到 99%、小於 0.3 nm 要達到 90-95 %、小於 0.1 nm 達到 85-90 %，Pitch 誤差在小於 0.5 nm 要達到 99 %、小於 0.3 nm 達到 90-95 %、小於 0.1 nm 達到 85-90 %。表二為設置神經網路模型的基本參數，表三為最佳模型之預測結果。

表二 INN 模型參數

參數	INN
Batch size	256
Channel depth factor	8
Epochs	5000
Learning rate	0.01
Learning rate decrease factor	0.5
Learning rate decrease after enpochs	300
parameter	406,611

表三 INN 模型測試資料之預測結果

accuracy		0.05 °	0.08 °	0.1 °	R2_score
Test1	SWA	0.8729	0.9894	0.9959	0.9998
Test2		0.2694	0.4431	0.5875	0.9896
		0.1 nm	0.3 nm	0.5 nm	R2_score
Test1	H	0.9612	0.9997	1.0	0.9997
Test2		0.2319	0.3514	0.4569	0.9488
Test1	Pitch	0.9806	0.9988	1.0	0.9998
Test2		0.3236	0.6194	0.7944	0.9871

三、前向神經網路模型

FNN 模型以 R^2 score 為指標，0 是完全不符合，1 則是完全符合標籤，在每組預測中會找出最高值、中間值和最低值各兩組 R^2 score 來呈現結果，最後也會針對相對誤差大的點做分析，用 R^2 score 配合相對誤差來評估 FNN 模型的效能。表四為設置 FNN 模型的基本參數，表五為最佳模型之預測結果。為了更直接觀察預測資料是否吻合標籤資料，將測試集的預測結果整理在圖五和

表四 FNN 模型參數

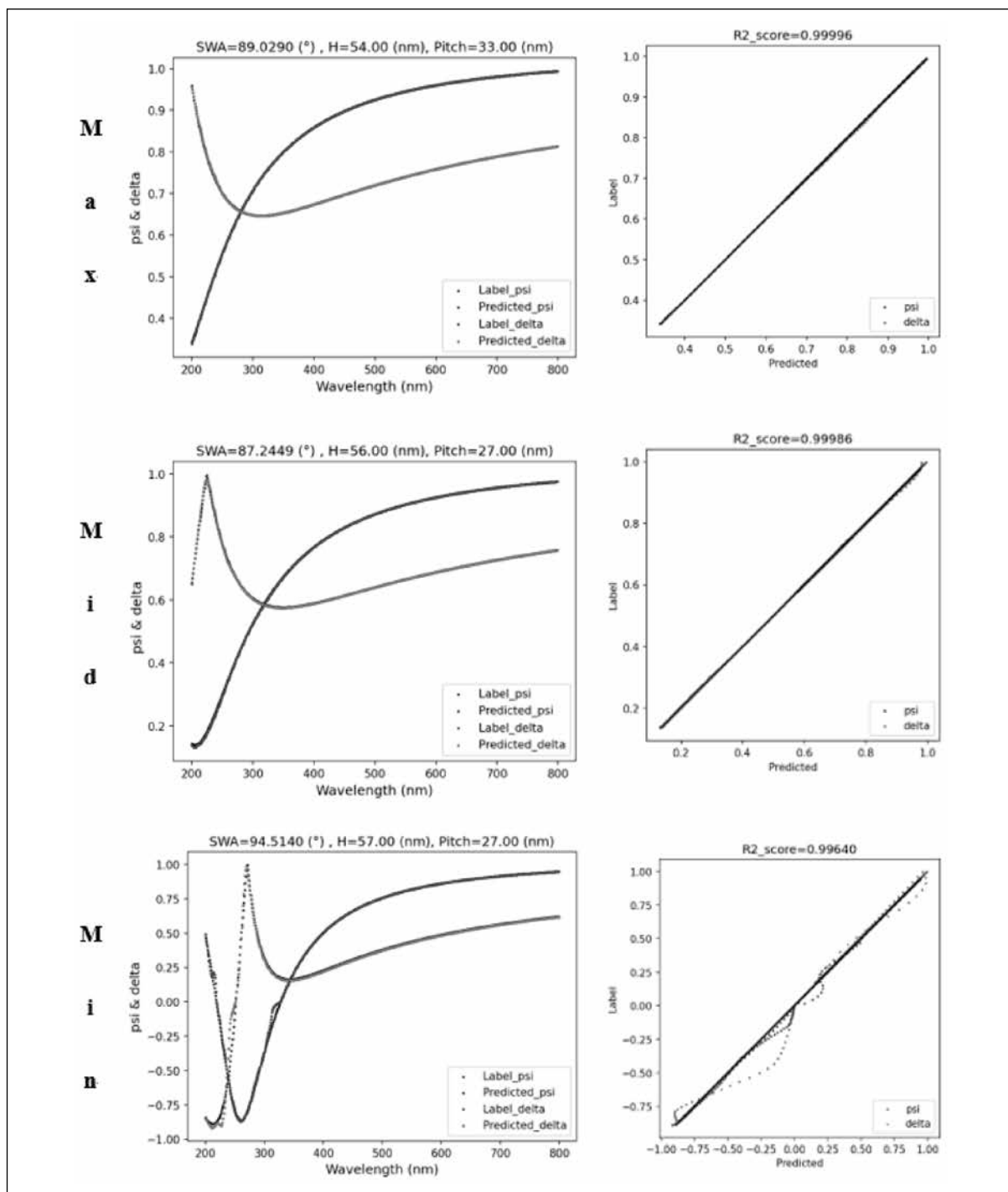
參數\model	FNN
Batch size	256
Channel depth factor	2
Epochs	7000
Learning rate	0.01
Learning rate decrease factor	0.5
Learning rate decrease after enpochs	500
parameter	10,648,696

表五 測試資料之預測結果 (Test1 與 Test2 中都選出兩組 R^2 score (r2) 分別為最大值 (Max)、中間值 (Mid) 與最小值 (Min) 的結果)

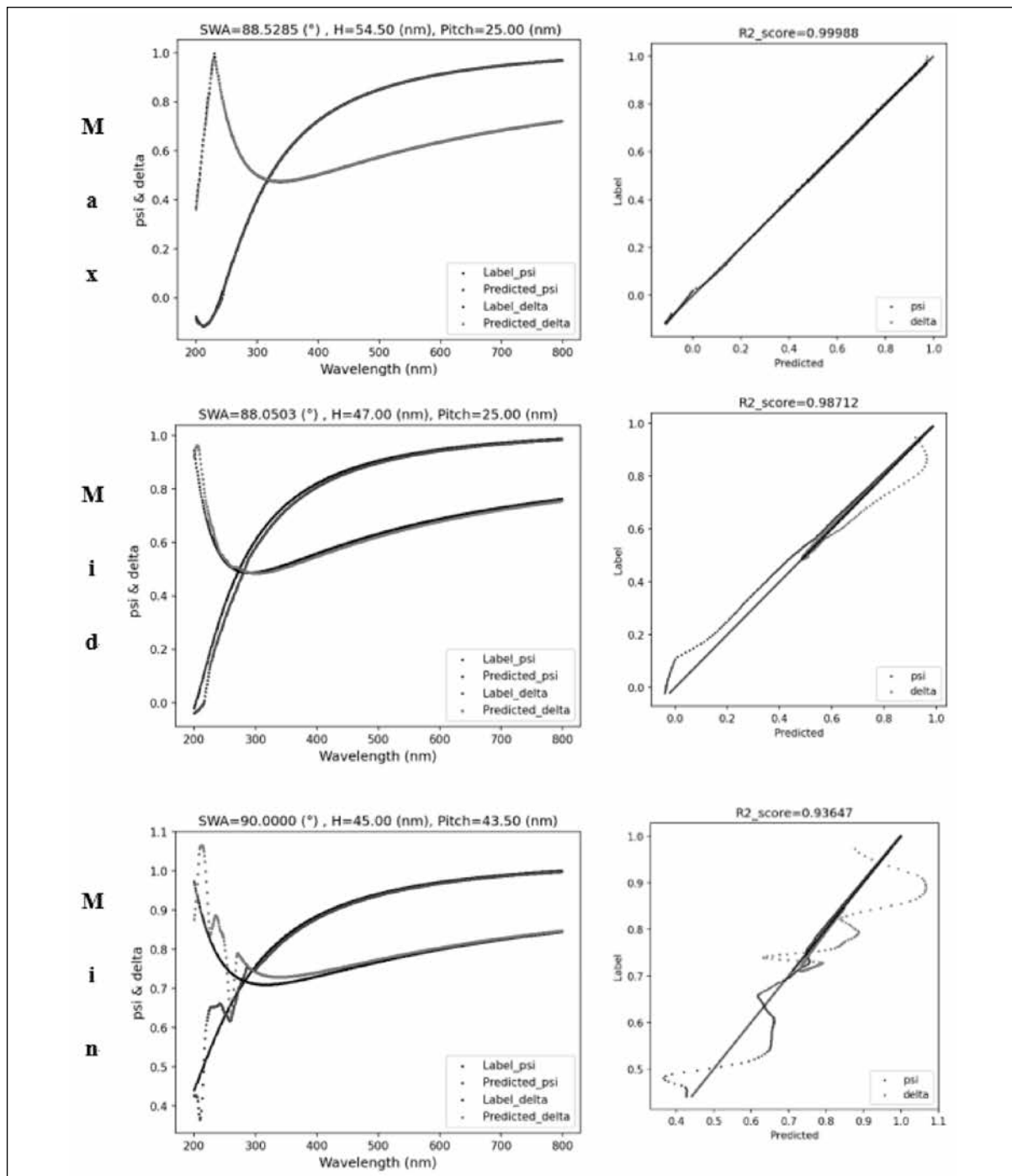
Average test	Test1	r2	Test2	r2
	Max1	1.0	Max1	0.9999
	Max2	1.0	Max2	0.9999
	Mid1	0.9999	Mid1	0.9871
	Mid2	0.9999	Mid2	0.9873
	Min1	0.9909	Min1	0.9382
	Min2	0.9955	Min2	0.9365

圖六，其中包含標籤與預測的光譜分佈圖和 R^2 score 的統計圖。圖五與圖六顯示 R^2 分數

達到 0.99 時，神經網路的預測結果能顯現出符合訓練資料的光譜趨勢及峰值。



圖五 Test1 測試資料集 FNN 預測結果，其中左欄為標籤與預測的光譜分佈圖，右欄為 R^2 score 的統計圖，Max、Mid 與 Min 則分別代表此圖屬於 R^2 score 為最高值群、中間值群與最低值群



圖六 Test2 測試資料集 FNN 預測結果，其中左欄為標籤與預測的光譜分布圖，右欄為 R^2 score 的統計圖，Max、Mid 與 Min 則分別代表此圖屬於 R^2 score 為最高值群、中間值群與最低值群

四、模型效能與傳統數值模擬比較

INN 可以根據光譜資料預測半導體元件結構參數，因此可以作為即時監測的工具，而 FNN 可以根據輸入結構參數以預測光譜，因此可以取代傳統數值模擬以應用於結構最佳化設計。然而要達到這些目的的神經網

路模型需要很高的計算效能，因此評估模型的計算效能亦是建立深度學習網路的重要工作。我們的 INN 模型在預測 2420 筆資料需花費 25-43 秒，平均一筆資料為 0.013 秒，如表六所示，因此能應用於及時監控。而 FNN 模型在預測 2420 筆資料需花費 5700-

7000 秒，平均一筆資料為 2.8-3.2 秒，如表七所示，相比傳統數值方法，平均模擬一筆資料需要花費 326-398 秒，即使把模型的訓練時間加進去，兩者耗時仍有 100 倍以上的

差異，在此能清楚顯示出 FNN 模型效能優越之處，若是能確保模型預測的正確率，將可應用於加速設計最佳結構。

表六 INN 模型時間表

time	seed	Train model(s)	Predicted(s)	Predicted(s)	每一筆 (s)
INN	807	4338.72	1073.85 (11000組)	39.04 (2420組)	0.013
	172	4533.54			
	963	5842.10			

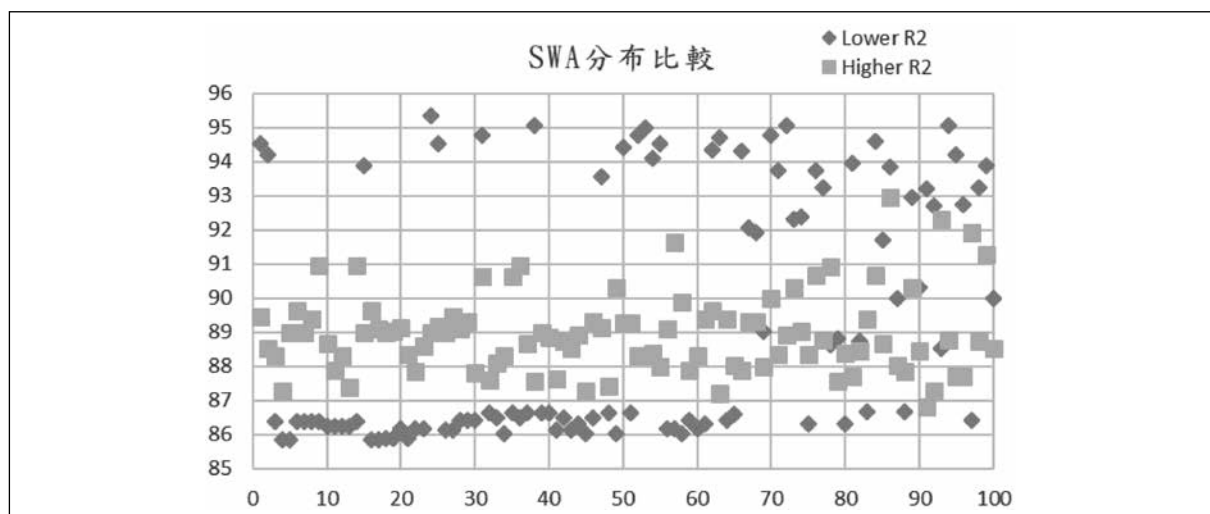
表七 FNN 模型與 RCWA 模擬時間表

time	seed	Train model(s)	Predicted(s)	每一筆 (s)	RCWA	Analysis(s)	Avg_time(s)	每一筆 (s)
FNN Pixel 272	523	6322.03	37079.98 (11000組) 5733.79 (2420組)	2.87	100組結構	41515.8	39810.1	398.1
	169	4090.48				38758.7		
	884	4571.56				39155.8		
FNN pixel 202	628	6293.42	31712.64 (11000組) 6989.64 (2420組)	3.14	200組結構	64797.9	65331.7	326.7
	200	4908.55				65917.9		
	223	6309.14				65279.2		

五、分析預測誤差點與結構參數關係

最後我們對預測誤差較大的點與結構參數的關係做進一步分析，圖七為依據預測資料 index 排序 (X 軸) 預測出的 SWA 值，並依顏色反映 R^2 score (橘色為低分群，黃色為高分群)。圖七顯示 R^2 score 分數低的

資料在 SWA 分佈上明顯有偏向上下界 (即高於 93° 與低於 87°)，而 R^2 score 高分群的 SWA 分佈就偏向中間區域 (87° - 92°)，此結果代表 SWA 在非 87° - 92° 區域有些不利於模型學習的因素，因此預期此區域需要使用更多的訓練資料以增進模型預測的正確率。



圖七 SWA 分佈與 R^2 score 相關性比較圖

結論

本研究之結構參考對象為鰭式場效電晶體 FinFET 中的 Fin 形貌，以嚴格耦合波 RCWA 數值模擬方法建構出有側傾角變化的週期性結構，並模擬出橢偏散射儀所量測到的光學訊號。在結構尺寸越來越精細的情況下，結構參數的量測不只考驗製程技術，也相當仰賴高精確的量測儀器。由結構參數 - 光學散射信號映射所建立的深度神經網路具有良好的泛化 (generalization) 能力，在訓練完成後可以取代模擬 / 觀測直接用於預測光學橢偏儀訊號，這又可以大幅縮短資料庫建立與逆向設計所需要的時間。以光學量測為主軸、實際應用在半導體製程中，將橢偏散射儀所測量到的光學訊號輸入到成熟的 INN 模型，根據本研究呈現的效能和正確率，INN 模型將可能做到即時監控的作用，在每道製程中監視著結構變化，可以節省時間和資源的浪費。

本研究前面提及的數值方法 RCWA 是在設定的結構下，利用複雜的電磁理論計算和傅立葉轉換下得知散射光訊號，不管是 RCWA、有限時差分 (FDTD) 或是頻域法，傳統的數值模擬方法都需要龐大的計算資源和時間成本。FNN 模型利用轉置卷積計算從結構參數轉換成光譜訊號，從研究結果來看，雖然有少數結構在部分波段的預測偏差的情況，但是主體和趨勢都是符合標籤的，以 R^2 score 作為評估標準， R^2 score > 0.99 共佔了 98 %，若是訓練出更穩定的 FNN 模型將可以取代傳統數值模擬方法，其優勢就是時間成本降低很多，更可用來設計最佳化結構化參數。

本研究所建立的 INN 模型已與國內某半導體製造商合作，根據其所提供的某時段內不同機台獲取的散射光譜訊號與 SWA 標籤值建立 INN 模型網路參數，預測同機台後續時間段內的 SWA 值，同時為進一步提升預測正確率，模型還使用轉移學習 (transfer learning) 方法，在已建立的網路參數基礎下，根據後續時段初期所獲取的少量資料微調網路參數，在此方法下，同一機台的 SWA 預測值有非常高的正確率。

參考文獻

1. Atalla Y., Hashim Y., Ghafar A. N. A., & Jabbar W. A. (2019). A temperature characterization of (Si-FinFET) based on channel oxide thickness. TELKOMNIKA (Telecommunication Computing Electronics and Control), 17(5), 2475-2480.
2. Chen X. & Liu S. (2019). Optical Scatterometry for Nanostructure Metrology. In: Gao W. (eds.) Metrology. Precision Manufacturing. Springer.
3. Cui T., Li J., Wang Y., Nazarian S., & Pedram M. (2018). An Exploration of Applying Gate-Length-Biasing Techniques to Deeply-Scaled FinFETs Operating in Multiple Voltage Regimes. IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing, 6(2), 172-183.
4. Diebold A. C., Antonelli A., & Keller N. (2018). Perspective: Optical measurement of feature dimensions and shapes by scatterometry. APL Mater., 6(5), 058201.
5. Goodfellow I., Bengio Y., & Courville A. (2016). Deep learning, MIT.
6. Hu. C. C. (2009). Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits. Pearson College Div.
7. Jang I. Y., Huh S. M., Moon S. Y., Woo S. G., Lee J. K., Moon S. H., & Cho H. (2008). Control of the sidewall angle of an absorber stack using the Faraday cage system for the change of pattern printability in EUVL. SPIE Photomask Technology, Monterey, California, United States.
8. Langr J. & Bok V. (2019). GANs in Action - Deep learning with Generative Adversarial Networks, Manning Publications.
9. Liu S., Chen X., Yang T., Guo C., Zhang J., Ma J., Chen C., Wang C., Zhang C. & Liu S. (2022).

- Machine learning aided solution to the inverse problem in optical scatterometry. Measurement, 191, 110811.
10. Ma T. G., Tobah M., Wang H. Z., & Guo L. J. (2022). Benchmarking deep learning-based models on nanophotonic inverse design problems. Opto-Electronic Science, 1, 210012.
 11. Orji N. G., Badaroglu M., Barnes B. M., Beitia C., Bunday B. D., Celano U., Kline R. J., & Neisser M. (2018). Metrology for the next generation of semiconductor devices. Nat. Electron., 1, 532–547.
 12. Peralagu U., Li X., Ignatova O., Fu Y. C., Millar D. A. J., Steer M. J., Povey I. M., Hossain K., Jain M., & Golding T. G. (2015). Towards a Vertical and Damage Free Post-Etch InGaAs Fin Profile: Dry Etch Processing, Sidewall Damage Assessment and Mitigation Options. ECS Transactions, 69(5), 15-36.
 13. PyTorch Contributors (2023, 9). PyTorch Documentation. <https://pytorch.org/docs/stable/index.html>.

作者簡介

陳瀚 / 國立成功大學 光電科學與工程學系

藍永強 / 國立成功大學 光電科學與工程學系 / 指導老師

