使用变分自编码器进行器件图像-IV 映射，以实现逆向设计和正向预测

Thomas Lu、Albert Lu 和 Hiu Yung Wong，*IEEE* 高级会员

摘要—**本文展示了一种新颖框架：利用基于变分自编码器（VAE）的方法，将器件结构图像映射到相应的电流-电压（IV）特性，从而学习其底层器件物理。由于采用了VAE，无需领域专业知识，该框架也可快速部署于任何新器件和测量场景。当只有器件截面图像和电学特性可用时（例如新兴存储器），该方法有望用于新型器件的紧凑建模。本文使用技术计算机辅助设计（TCAD）生成的和手绘的金属-氧化物-半导体（MOS）器件图像，以及含噪声的漏极电流-栅极电压曲线（I_DV_G）进行演示。该框架由两个堆叠的VAE构成（一个用于图像流形学习，另一个用于I_DV_G 流形学习），二者通过潜变量相互通信。研究使用了五个强度各异的自变量。结果表明，该框架能够成功执行逆向设计（针对给定的I_DV_G生成设计结构）和正向预测（针对给定的结构图像预测I_DV_G；若将图像视为器件参数，则可用于紧凑建模）由于采用了流形学习，该机器能够抵抗输入噪声（即使用手绘图像和含噪声的I_DV_G曲线），也不会受到微弱且无关的自变量干扰。**

索引词—**紧凑建模、逆向设计、机器学习、流形学习、技术计算机辅助设计（TCAD）、变分自编码器**

I. 引言

随着机器学习技术日益强大，技术计算机辅助设计已成为一种经济高效的工具，能够提供丰富的数据，以增强半导体器件设计自动化中的机器学习（TCAD增强机器学习）。它已用于缺陷分析[1]-[6], 器件特性预测 [7][8], 器件/电路流形学习 [9]-[11], 逆向设计 [12], 以及代理模型开发 [13][14]。

然而，据我们所知，迄今为止的所有研究都将器件的电学特性（例如电流-电压（IV）曲线、电容-电压曲线（CV）、阈值电压 V_{TH}）或器件结构主要特性的数值描述（例如栅长 L_G）作为机器学习的输入，尚无研究探讨器件图像与其电学特性之间的关联。

对于任何尚未得到充分理解的新型器件，都很难从其结构图像中提取主要特性。此外，这些特性也可能难以轻易提取（例如光子学中经过优化的多路复用器的几何结构 [15]）。此外，一些在人眼看来很重要的参数（例如栅极多晶硅厚度）对于电流-电压特性而言，却是影响微弱且无关的自变量。因此，探究在不借助领域专业知识的情况下，能否利用图像学习器件背后的物理规律十分重要。如果这一方法取得成功，就能开辟一种新途径：将新型器件图像（而非 L_G 等参数）作为紧凑模型的输入，在尚未理解新型器件物理原理之前预测其电学特性，从而扩展传统紧凑建模。

本文表明，可以训练机器，使其理解底层的器件物理，并将结构图像与电学特性关联起来。我们证明，机器不会被影响微弱且无关的自变量所干扰，并且对噪声具有鲁棒性。数据预处理无需领域专业知识。该机器可用于执行逆向设计和正向预测。虽然本文以传统MOSFET结构及其I_DV_G特性作为演示，但预计这种方法有助于理解新型器件的物理学原理（例如，利用足够多的扫描电子显微镜/透射电子显微镜图像及相应的电流-电压特性，理解某种新型新兴存储器的行为）。

II. 数据生成与机器构建

本研究采用平面金属氧化物半导体场效应晶体管。这是因为，由于存在轻掺杂漏极且垂直方向缺乏对称性，平面金属氧化物半导体场效应晶体管的二维截面比鳍式场效应晶体管和纳米线的截面更复杂。因此，它能更好地检验该方法的能力。采用二维截面的原因在于三维图像

本材料基于美国国家科学基金会第 2046220 号资助项目的支持。(通讯作者：*Hiu Yung Wong*hiuyung.wong@sjsu.edu)。

Thomas Lu、Albert Lu 和 Hiu Yung Wong 隶属于圣何塞州立大学电气工程系 M-PAC 实验室，地址为美国加利福尼亚州圣何塞。Thomas Lu 还隶属于美国加利福尼亚州斯坦福在线高中。Albert Lu 还隶属于圣何塞州立大学计算机工程系，地址为美国加利福尼亚州圣何塞。Thomas Lu 和 Albert Lu 的贡献相同。

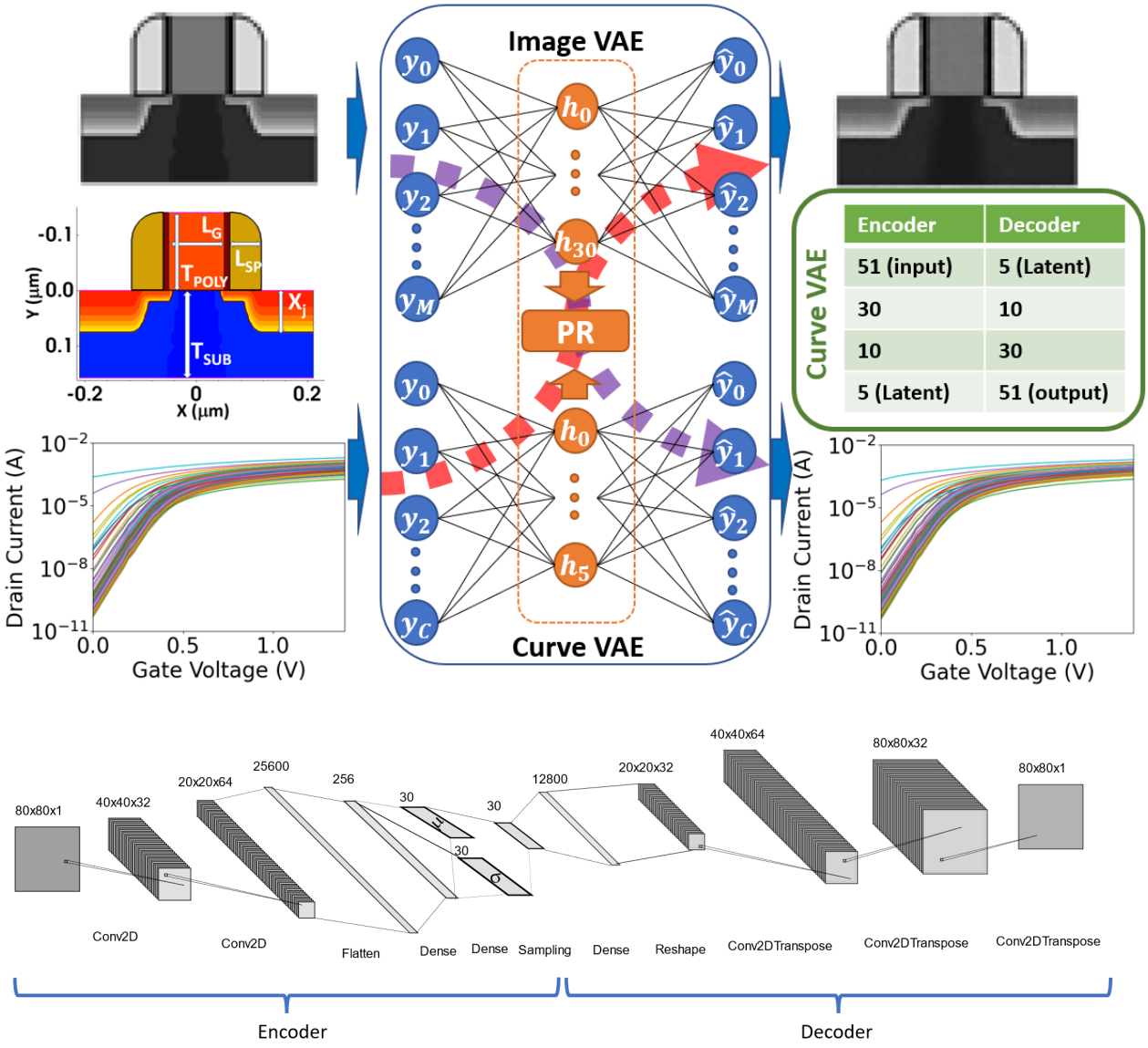


图 1. 上图：本研究使用的机器，结合了图像变分自编码器、曲线变分自编码器和 3rd 阶多项式回归器（PR）（蓝框内）。图像变分自编码器（曲线变分自编码器）使用相应的图像（I_DV_G 曲线）进行训练。为清晰起见，仅展示了 3 层。多项式回归器用于关联图像变分自编码器与曲线变分自编码器的潜变量（橙框内）。紫色（红色）粗虚线表示正向（逆向）预测路径。M = 6399 和 C = 50。图中以各层节点数量概述了曲线变分自编码器的结构（绿框）。下图：图像变分自编码器的完整结构。除最后一层外，激活函数均采用 RELU（图像变分自编码器采用 Sigmoid 函数，曲线变分自编码器采用线性激活函数）。上图分别展示了一个图像示例和一组随机选取的 100 条曲线，作为图像变分自编码器和曲线变分自编码器的输入与输出。

在实验中通常无法获得。此外，研究中使用了性能良好和漏电的平面金属氧化物半导体场效应晶体管。这是为了证明机器能够学习复杂的底层物理规律，而不只是学习性能良好的晶体管的简单紧凑模型，因此它有潜力学习非晶体管物理学。需要指出的是，与大多数针对性能良好的器件开发的紧凑模型不同，只要启用了适当的模型，技术计算机辅助设计（TCAD）仿真对性能良好和漏电的器件均有效。

8755 个 MOSFET（8000 个用于训练，755 个用于测试），其栅长（L$_G$ ∈ [25nm, 290nm]）、源/漏结深（X$_j$ ∈ [10nm, 90nm]）、间隔层宽度（L$_{SP}$ ∈ [10nm, 110nm]）、多晶硅栅厚度（T$_{POLY}$ ∈ [50nm, 150nm]）和衬底厚度（T$_{SUB}$ ∈ 各不相同

[100nm, 200nm]）采用均匀随机分布生成（图 1），使用 TCAD Sentaurus [16]。根据器件物理可知，L_G 和 X_j 是影响 I_{ON} 和 I_{OFF} 的强参数。L_{SP} 具有一定影响力，有时当 X_j/L_G 较大时也会影响 I_{OFF}。T_{POLY} 和 T_{SUB} 是较弱且无关的参数。加入弱参数是为了表明该框架不会受到无关自变量的干扰。栅氧化层厚度、多晶硅栅掺杂和衬底掺杂分别为 1.4 纳米、10^{20} cm^{-3}和 1.5×10^{18}cm^{-3}。晶体管宽度为 1μm。使用 SDevice 和标准设置对这些结构进行仿真，包括费米-狄拉克统计、用于量子修正的密度梯度、高场饱和以及 IALMob [16]，以生成饱和 I_DV_G 曲线，其中 V_G 从 0 V 到 1.4 V，V_D = 1为 .4 V。结构图像以单色便携式网络图形格式保存

（png），分辨率为 80×80 像素，I_DV_G 离散为 51 个点。最小 L_G 取 25nm，因为这在图中仅对应 5 个像素。

基于变分自编码器的机器经过训练，可执行逆向设计和正向预测。图 1显示，该机器由两个主要组件构成，即一个图像变分自编码器（顶部）和一个曲线变分自编码器（底部）[17]。与常规自编码器（AE）不同[4][9]，常规自编码器仅最小化输入与输出之间的差异（重构损失）；而变分自编码器还通过对编码分布（潜在空间中的数据分布）进行正则化来训练。具体做法是，将编码分布与高斯分布之间的库尔贝克-莱布勒（KL）散度加入损失函数 [17]。因此，变分自编码器较不易发生过拟合。由于本研究涉及图像特征提取，受使用变分自编码器生成手写数字的研究启发，我们选择变分自编码器，以避免过拟合导致的虚假图像预测[17]。

由于这些结构是通过改变 5 个参数（L_G，X_j、L_{SP}、T_{POLY} 和 T_{SUB}）生成的，因此 5 个潜在节点足以捕捉底层物理规律 [3][9]。然而，研究发现，增加潜在节点有助于在变分自编码器训练过程中找到全局最小值并提升训练性能。因此，图像变分自编码器包含 30 个潜变量。除 KL 损失外，图像变分自编码器和曲线变分自编码器分别使用二元交叉熵和均方误差损失作为重构损失。图 1显示，训练后的变分自编码器能够准确地在输出端（右侧）重建测试输入图像和曲线（左侧）。为连接图像变分自编码器和曲线变分自编码器，使用 h_i 表示它们的潜变量，并通过 3rd 阶多项式回归（图 1中的橙色框）进行双向回归。

请注意，由于有 5 个参数，要进行准确训练需要 8000 条数据。这意味着，平均而言，每个参数需要 $8000^{1/5} \sim 6$ 个变化才能学到底层物理规律。如果只考虑 3 个中等至强参数（L_G、X_j 和 L_{SP}），则预计只需 6^3=216 条数据。这与 [9] 中使用 AE 进行流形学习所得的发现一致。

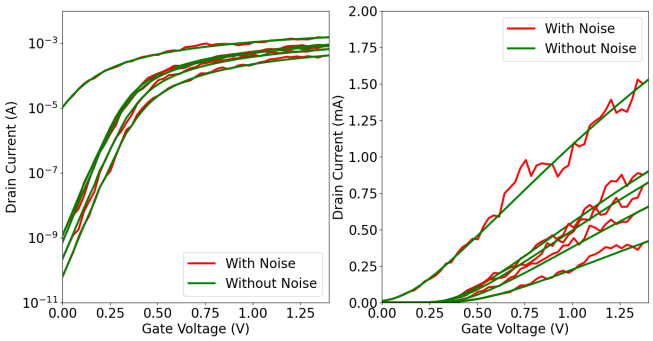


图 2. 逆向设计中使用的五条选定电流-电压曲线，包括有噪声和无噪声的情况。左：对数刻度。右：线性刻度。

III. 逆向设计

工程中的逆向设计通常是一个非常困难的问题[15]。在本研究中，逆向设计是指寻找一种 MOSFET结构，以重现给定的 I_D V_G。需要指出的是，逆向设计的目标并非重现某种特定的器件结构，而是生成具有特定 I_DV_G的器件。器件工程师通常需要设计晶体管，以满足电路设计师提出的 I

OFF G = 0 D = 1 4 ON G (V = 1 4 D = 1 4
V, V . V) 和 I (V . V, V . V) 要求。这对应于图 1中的“红色路径”。

为证明该框架能够执行逆向设计，并展示机器学到的是底层物理规律，而非单纯记忆训练数据，我们使用了“手绘”曲线。这些“手绘”曲线是通过向其此前未见过的电流$_D$电压$_G$ 曲线添加噪声构造而成。为保持开态电流$_{OFF}$ 和开态电流$_{ON}$ 不变（符合规格要求），端点处不添加噪声（V

G = V, .
0 0 028 1 372 1 4
V, . V, . V）。我们对 20 条含噪曲线进行了测试，图 2展示了测试集中 5 条随机电流$_D$电压$_G$ 曲线在有噪声和无噪声时的情况。这些曲线对应的原始结构如图 3所示（分别对应 L_G = 47.0纳米、92.0 纳米、114.0 纳米、135.0 纳米和 247.0 纳米）。逆向设计得到的结构是将这些曲线输入

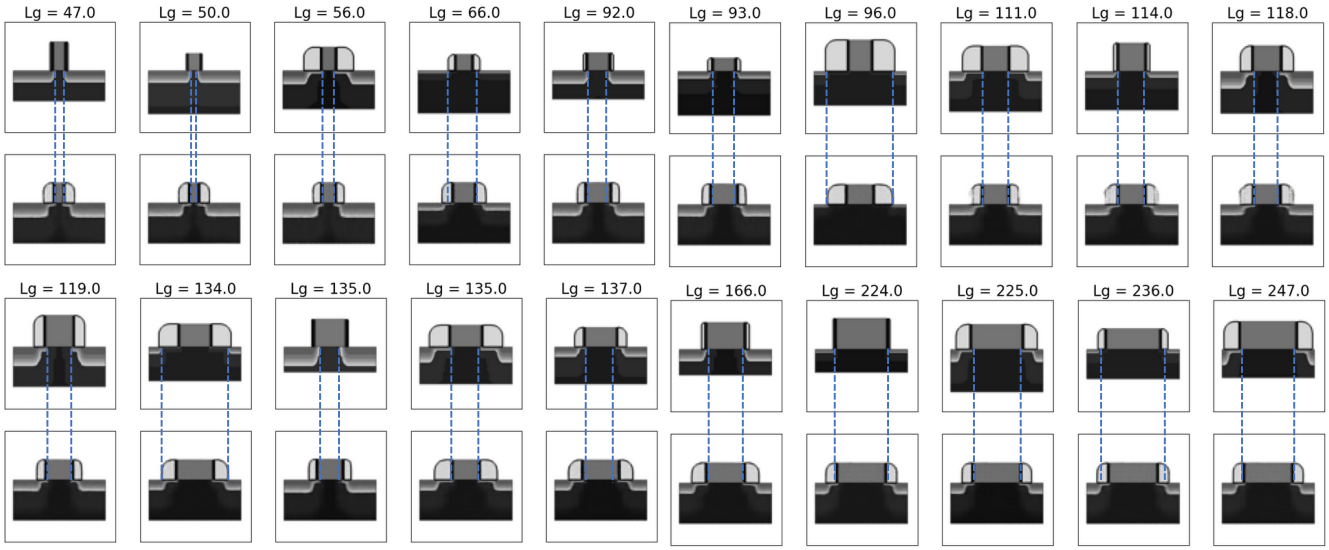


图 3. 展示了具有不同 L_g 的 20 种结构。每行上方为能够生成无噪声精确电流-电压$_D$电流-电压$_G$ 曲线的结构。每行下方为与含噪声电流-电压$_D$电流-电压$_G$ 曲线相对应的逆向设计结构。

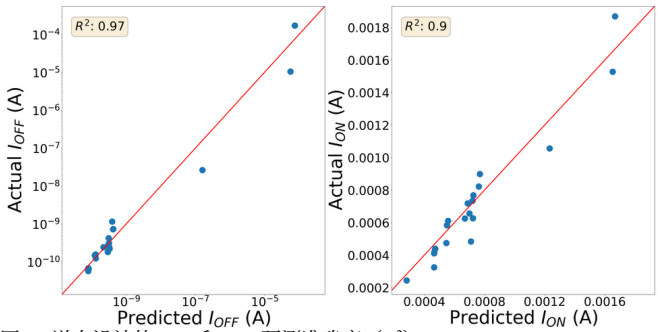


图4。逆向设计的 I_{OFF} 和 I_{ON} 预测准确率（R^2）。

含噪的“手绘”电流$_D$电压$_G$ 曲线输入图 2并送入图 1中的红色路径后得到的，显示在图 3每行底部。

研究发现，在红色路径之前将含噪曲线通过曲线变分自编码器处理 2 次，并在红色路径之后将最终图像通过图像变分自编码器处理 3 次，可以改善结果。

有几点观察结果。1）逆向设计得到的结构在有效 L_G（由蓝色虚线引导的轻掺杂漏极间距）方面呈现出正确的趋势，而有效 L_G 决定了 I_{ON} （注意，侧墙轻掺杂漏极对导通态电阻的影响不大）。由于有效 L_G 并未被提取并手动输入机器，机器成功地自行学会了底层物理规律。2）根据器件物理学，T_{POLY} 和 T_{SUB} 不会影响 I_DV_G。因此，机器学会了对所有器件均假设 T_{POLY} 和 T_{SUB} 为常数。3）对于 L_G = 135纳米，器件具有较大的 X_j，预计这会增大 I_{OFF}。然而，由于衬底接触位于底部且靠近源极/漏极，这显著减弱了短沟道效应。因此，机器预测得到的器件具有较小的 X_j，但 T_{SUB}较大。如前所述，逆向设计的目标并非复现原始结构，而是生成能够产生所需 I_DV_G的结构。第 3 点表明，这一目标已成功实现。

为确认其是否产生了预期的电学特性，随后使用逆向设计的结构进行

表I
I_{ON} 和 I_{OFF} 预测准确率（R^2）

机器	逆向设计		正向预测	
参数	I_{ON}	I_{OFF}	I_{ON}	I_{OFF}
R^2	0.90	0.97	0.97	0.96

电流-电压$_D$特性$_G$ 仿真，以提取开态电流$_{ON}$ 和开态电流$_{OFF}$。随后将其与所需值的开态电流$_{ON}$ 和开态电流$_{OFF}$ 进行对比绘图。R^2 分别为0.90和0.97（图4和表I），这表明其能够很好地捕捉物理学特性。

IV. 正向预测

还希望能够在不使用耗时的 TCAD 仿真的情况下，预测给定结构的 I_DV_G。当新型器件尚未得到充分理解时，这可作为一种增强紧凑建模的新方法。在这种情况下，图像可用作紧凑模型的输入参数，无需依赖领域专业知识来提取强参数（例如本例中的 L_G）。

这可以通过使用正向预测路径（图1中的紫色路径）来实现。为证明机器已经学习了物理学，使用了手绘结构。这些手绘结构是通过修改未见过的测试集结构获得的。图5展示了全部 10 个测试结构（上方）及其对应的手绘结构（中间）。请注意，手绘结构的绘制方式使其 5 个参数与原始结构相同，但其灰度不同（例如，间隔层具有不同的强度，且源极/漏极和衬底的掺杂梯度信息丢失），并且边界不平滑。

还提取了所有曲线相应的 I_{OFF} 和 I_{ON} 。随后将其与预期的 I_{OFF} 和 I_{ON} 进行对比绘制。

结果发现，对 I_{OFF} 和 I_{ON} 的预测效果良好，R^2 = 0分别为 0.96 和 0.97（图6和表I）。请注意，为了改善结果，在进入紫色路径之前，手绘图像会先经过图像变分自编码器处理一次。

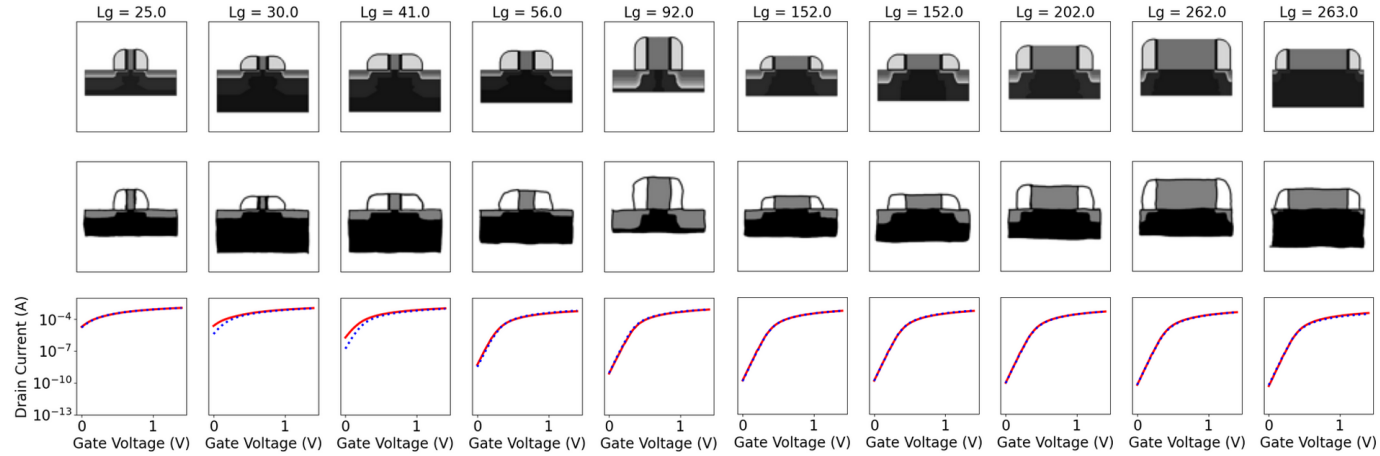


图5。用于测试正向预测过程的十种结构。上：由技术计算机辅助设计生成的结构。中：相应的手动修改的结构。下：基于技术计算机辅助设计生成结构的技术计算机辅助设计模拟 I_DV_G（蓝色点线），以及通过前向设计由手绘结构得到的 I_DV_G（红线）。L_G 单位为纳米。

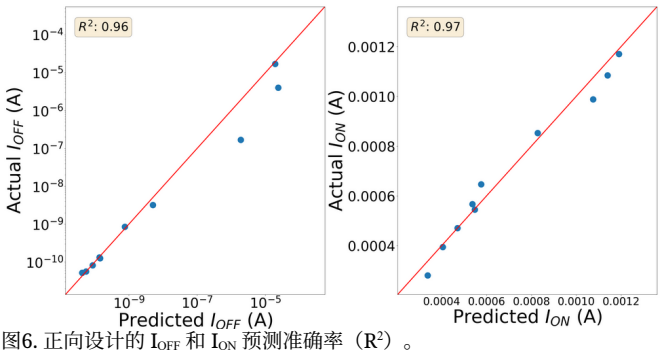


图6. 正向设计的 I_{OFF} 和 I_{ON} 预测准确率（R^2）。

V. 结论

研究展示了一种基于变分自编码器的新框架，该框架通过将器件图像映射到 I_DV_G 曲线，有效地学习了底层物理规律。即使面对含噪曲线和手绘图像，该框架在执行逆向设计和正向预测时也能取得良好结果。只要有图片，就可以利用该框架学习新型器件的物理特性。尤其是，正向预测可以通过将器件图像用作输入参数来增强传统紧凑建模，无需领域专业知识来提取强参数。对于尚未得到充分理解的新型器件，这将非常有用。

参考文献

[1] Y. S. Bankapalli 和 H. Y. Wong，《用于半导体器件故障排查与逆向工程的 TCAD 增强机器学习》，*2019* 年半导体工艺与器件仿真国际会议（*SISPAD*），意大利乌迪内，2019年，第 1-4 页，doi: 10.1109/SISPAD.2019.8870467. [2] C. Teo、K. L. Low、V. Narang 和 A. V. Thean，《利用 TCAD 赋能的机器学习预测缺陷，加速先进半导体器件故障分析》，*2019* 年半导体工艺与器件仿真国际会议（*SISPAD*），意大利乌迪内，2019年，第 1-4 页，doi: 10.1109/SISPAD.2019.8870440. [3] T. Lu、V. Kanchi、K. Mehta、S. Oza、T. Ho 和 H. Y. Wong，《利用 SPICE 增强机器学习且无需特征提取，快速从电路中提取 MOSFET 接触电阻》，载于 IEEE 电子器件汇刊，第 68 卷，第 12 期，第 6026-6032 页，2021 年 12 月，doi: 10.1109/TED.2021.3123092. [4] H. Dhillon、K. Mehta、M. Xiao、B. Wang、Y. Zhang 和 H. Y. Wong，《有无领域专业知识情况下的 TCAD 增强机器学习》，载于 IEEE 电子器件汇刊，第 68 卷，第 11 期，第 5498-5503 页，2021 年 11 月，doi: 10.1109/TED.2021.3073378. [5] S. S. Raju、B. Wang、K. Mehta、M. Xiao、Y. Zhang 和 H. -Y. Wong，《噪声在 TCAD 增强机器学习中避免过拟合的应用》，2020 年半导体工艺与器件仿真国际会议（SISPAD），日本神户，2020 年，第 351-354 页，doi: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241654. [6] H. Y. Wong、M. Xiao、B. Wang、Y. K. Chiu、X. Yan、J. Ma、K. Sasaki、H. Wang 和 Y. Zhang，《用于器件变化和工作温度分析的 TCAD-机器学习框架及其实验验证》，载于 *IEEE* 电子器件学会期刊，第 8 卷，第 992-1000 页，2020 年，doi: 10.1109/JEDS.2020.3024669. [7] J. Chen、M. B. Alawieh、Y. Lin、M. Zhang、J. Zhang、Y. Guo 和 D. Z. Pan，《Powernet：基于深度神经网络的绝缘体上硅横向功率器件击穿预测》，载于 *IEEE Access*，第 8 卷，第 25372-25382 页，2020 年，doi: 10.1109/ACCESS.2020.2970966.[8] H. Carrillo-Nuñez、N. Dimitrova、A. Asenov 和 V. Georgiev，《利用机器学习预测统计变异性对硅无结纳米线晶体管的影响》，载于 *IEEE* 电子器件快报，第 40 卷，第 9 期，第 1366-1369 页，2019 年 9 月。doi: 10.1109/LED.2019.2931839.

[9] K. Mehta 和 H. -Y. Wong，《利用带自编码器的机器学习预测鳍式场效应晶体管的电流-电压和电容-电压曲线》，载于 IEEE 电子器件快报，第 42 卷，第 2 期，第 136-139 页，2021 年 2 月，doi: 10.1109/LED.2020.3045064。[10] V. Eranki、N. Yee 和 H. Y. Wong，《使用改进的生成对抗网络生成超出训练范围的合成鳍式场效应晶体管与反相器数据》，载于 IEEE 电子器件快报，2022年，doi: 10.1109/LED.2022.3207784。[11] V. Eranki、T. Lu 和 H. Y. Wong，《比较流形学习算法，以便在 SPICE 增强机器学习中快速提取电路缺陷》，2022 年 IEEE 第 19 届微电子与电子器件年度研讨会（WMED），2022年，第 1-4 页，doi: 10.1109/WMED55302.2022.9758032。[12] K. Mehta、S. S. Raju、M. Xiao、B. Wang、Y. Zhang 和 H. Y. Wong，《利用自编码器改进 TCAD 增强机器学习，以实现半导体变化识别和逆向设计》，载于 *IEEE Access*，第 8 卷，第 143519-143529 页，2020 年，doi: 10.1109/ACCESS.2020.3014470。[13] R. Wang、C. Chen、Q. Huang、Y. Wang、C. Hu、D. Wu、J. Wang 和 R. Huang，《新一代设计-技术协同优化（DTCO）：机器学习辅助建模框架》，2019年硅纳米电子学研讨会（SNW），日本京都，2019年，第 1-2 页，doi: 10.23919/SNW.2019.8782897。[14] A. Lu、J. Marshall、Y. Wang、M. Xiao、Y. Zhang 和 H. Y. Wong，《通过快速 TCAD 仿真和机器学习赋能的替代模型实现垂直氮化镓二极管击穿电压最大化》，《固态电子学》，第 198 卷，2022年12月，108468，https://doi.org/10.1016/j.sse.2022.108468。[15] A. Piggott、J. Lu、K. G. Lagoudakis、J. Petykiewicz、T. M. Babinec 和 J. Vuckovic，《紧凑型宽带片上波长解复用器的逆向设计与演示》，Nature Photon 9，374–377（2015 10 1038 2015 69）。https://doi.org/. /[16] 2021 nphoton. . SentaurusTM 器件用户指南，版本 S- .06，2021 年 6 月。[17] Diederik P Kingma 和 Max Welling，“自编码变分贝叶斯”，arXiv 预印本 arXiv:1312.6114，2013年。