

펄스 레이저 증착법으로 성장된 ZnO 박막의 PL 특성에 대한 신경망 모델링

고영돈, 강홍성, 정민창*, 이상렬, 명재민*, 윤일구

연세대학교 전기전자공학과, 연세대학교 금속공학과*

Neural network based modeling of PL intensity in PLD-grown ZnO Thin Films

Young-Don Ko, Hong Seong Kang, Min-Chang Jeong*, Sang Yeol Lee, Jae-Min Myoung*, and Ilgu Yun
Yonsei Univ.

Abstract

The pulsed laser deposition process modeling is investigated using neural networks based on radial basis function networks and multi-layer perceptron. Two input factors are examined with respect to the PL intensity. In order to minimize the joint confidence region of fabrication process with varying the conditions, D-optimal experimental design technique is performed and photoluminescence intensity is characterized by neural networks. The statistical results were then used to verify the fitness of the nonlinear process model. Based on the results, this modeling methodology can be optimized process conditions for pulsed laser deposition process.

Key Words : process modeling; pulsed laser deposition; diffusion process; neural networks

1. 서론

수 많은 반도체 공정들이 장비에서 조정되는 인자들의 변위에 의해서 비선형적인 특성을 가지고 있다. 공정 변수들과 사이의 상관성을 파악하기 힘들기 때문에 공정을 최적화 하는 것이 반도체 공정 분야에서 하나의 중요한 문제점으로 대두되고 있다. 이러한 비선형 공정 모델을 연구하기 위해서 본 연구에서는 신경망 구조를 이용한 공정 모델을 연구하였다. I-, D-최적 계획을 사용하여 Microaccelrometer의 공정 변수를 최적화하는 모델링의 연구가 이루어졌으며 공학 응용분야에 대해서 원형 기준 함수(radial basis function : RBF), 표준화 원형 기준, 다층 퍼셉트론(multi-layer perceptron : MLP) 함수와 같은 3종류의 신경망 구조에 대해서 나타내었다[1][2]. 신경망 구조를 이용한 모델링 방법론들은 통계적 실험계획과 함께 플라즈마 에칭 공정 모형과 캐패시터의 공정을 최적화 하는 모형에 대한 연구도 이루어졌다[3][4].

본 논문에서는 RBFN과 MLP를 이용한 신경망 구조

를 펄스 레이저 증착법(pulsed laser deposition : PLD) 공정 모델링에 적용하였다. 반응 변수로서는 ZnO 박막의 중요한 특성중의 하나인 photoluminescence(PL)을 사용하기 위해서 측정하였다. 공정 변수들의 범위와 값을 고려한 D-최적 실험 계획이 효율적인 실험을 위해서 본 연구에 사용되었다. 단순 선형 회귀 모형과 신경망 모형간의 적합성 검증은 분산분석, 가설검정 그리고 통계적 가정의 확인을 통해서 이루어졌다. 본 논문에서는 모델링 방법론을 통해서 공정상의 특성들을 예측함으로써 비용절감과 생산성의 향상을 가져 올 수 있는 모형을 제시하고자 한다.

2. 실험

ZnO 박막의 증착을 위해서 n-type InP 기판을 사용하였다. InP 기판은 Zn로 도핑되어 대략 $3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 정도의 도핑 농도를 갖는다. PLD 공정이 n-type ZnO 박막의 증착을 위해서 사용되었다. 증착시 챔버는 기본 진공 $1 \times 10^{-6} \text{Torr}$ 로 진공상태를

만든 후에 진공상태를 유지하면서 증착될 온도로 가열하였다. Nd:YAG 레이저를 사용하였으며 사용된 파장은 355nm, 에너지 밀도는 2.5J/cm², 350 - 400℃의 기판온도와 250 - 350 mTorr의 분위기 산소압을 유지하였으며, 타겟과 기판간의 거리는 5cm이다[5]. PLD에 의해서 ZnO 박막이 증착된 이후에 확산 공정을 수행하였다. Zn 확산공정은 변화하는 공정조건을 가진 N₂ 가스의 흐름안에 495℃의 온도를 유지시킨 확산 노를 사용한 밀봉 앰플 기술(sealed ampoule technique)을 수행하였다[6]. 석영관안의 앰플은 선행가열지역에 실리고 확산전에 10분정도 대기한다. 정해진 시간만큼 확산공정이 수행된 후에 앰플은 확산 노밖으로 꺼내어지고, 앰플을 물 안에 넣어서 급속 냉각한다. 확산공정이후에 확산된 ZnO 상위 박막을 실버 페이스트로 덮은 뒤 PLD에 의해서 n-ZnO 박막을 확산된 ZnO 박막위에 증착시켰다.

3. 모델링 계획

PLD 공정을 특징짓기 위해서 고려되어지는 공정 변수들을 표 1에 나타내었다. 기판 온도(T)와 분위기 산소압(P)이 PLD 공정 변수들로서 선택되었다. 입력 변수들은 회귀 계수 벡터의 신뢰 구역 체적을 최소화할 수 있는 D-최적 실험 계획을 사용하였으며 17번의 시행횟수로서 결정하였다[7]. 표 2는 PLD 공정변수들의 최적 실험 계획을 나타내었다. 모든 실험계획은 각 요소들의 불확실한 관련성들을 배제하기 위해서 무작위로 시행되었다. PLD 공정 변수들을 최적화하기 위해서 RBFN과 MLP를 신경망 구조에서 사용되었다. RBFN에서의 오차거리는 유클리디언 방법에 의해서 계산되었으며 7개의 중심점의 수를 가진 spline 함수를 사용하였다. MLP는 입력층, 은닉층, 결과층으로 구성되어 있으며 D-최적 실험 계획에 의해서 정해진 입력변수들을 MLP의 입력층에 사용하였으며 은닉층의 첫 번째 층의 노드의 개수는 7개로서 sigmoid함수를 사용하였으며 두 번째 은닉층에는 2개의 노드에 hyperbolic tangent 함수를 사용하였다. 마지막 결과층은 선형함수를 사용하였다. 신경망 모델링은 0.7의 학습율과 0.4의 적률 계수를 가지고 14번의 시행횟수에 대해서 훈련되었으며 두 번의 시행회수는 테스트용으로 사용되었으며 나머지 한번은 확인용으로 사용되었다. 망 학습은 RMS(root mean square) training error와 validation error가 0.1%일 때 종료되었다.

표 1. 공정 변수의 값과 범위.

Table 1. Summary of process parameters.

요소	기호	단위	값	비고
기판 온도	T	℃	350 - 450	controllable
산소압	P	mTorr	250 - 450	controllable

표 2. D-최적 실험 계획.

Table 2. D-optimal design of pulsed laser deposition.

Run	T	P
	[℃]	[mTorr]
1	400	450
2	400	400
3	375	350
4	350	250
5	425	400
6	425	300
7	400	400
8	450	350
9	400	350
10	425	350
11	375	400
12	450	450
13	400	250
14	350	450
15	350	350
16	375	300
17	450	250

4. 결과 및 토의

분산 분석법에 의해서 계산되어진 단순 선형 회귀 모형과 신경망 모형 사이의 F 값과 R² 값을 표 3에 나타내었다. 통계적 유의성 검증은 반응 변수와 회귀 계수간의 선형적인 관련성의 여부를 결정짓는 하나의 방법이다. 본 모형에 대한 귀무 가설은 $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_k = 0$ 이며 대립 가설은 $H_1: \beta_j \neq 0$ 이다[7]. 단순선형회귀모형의 F 값이 F 통계량 보다 작으므로 귀무 가설이 통계적 유의수준 $\alpha=0.05$ 하에서 채택됨으로서 반응변수와 단순 선형 회귀 모형사이에는 어떠한 관련성이 없음을 나타내고 있다. 반면에 신경망 모형의 F 값이 F 통계량보다 큰 값을 가짐으로서 신경망 모형이 비선형 모형을 최적화하는데 단순 선형 회귀 모형보다 더 나은 모델임을 입증해주고 있다. R²는 반응 변수에 대한 모형의 설명력을 나타내준다. PL 특성에 대해서 신경망 모형이 단순 선형 회귀 모형보다 더 잘 설명해주고 있음을 보여주고 있다[7].

표 3. F 값과 R² 값.

Table 3. The values of F and R²

	단순 선형 회귀 모형	신경망 모형
F	0.1	2856.8
R ²	2.1 %	99.6 %

그림 1에 모형의 잔차도를 나타내었다. 잔차들이 0을 중심으로 특정한 경향 없이 무작위로 분포되어 있으므로 통계적 가정의 하나인 잔차의 특성과 일치함을 확인할 수 있다[7]. 예측치와 측정치와의 선형성의 관계도를 그림 2에 나타내었다. 두 값들의 관계가 아주 강한 선형성을 가지고 있음이 확인되었다. 검정된 결과들을 바탕으로 모형의 민감도 분석을 실시하였다. 그림 3은 압력이 350 mTorr이고 온도가 400 °C일 때의 민감도를 나타내며 실제 실험 결과들과 잘 일치함으로써 PLD 공정에서 PL 스펙트럼을 최적화 할 수 있는 공정 조건들을 확인할 수가 있다. 그림 4는 압력이 400 mTorr이고 온도가 425 °C일 때의 민감도를 나타낸다. 모델링 결과를 통해서 온도가 400°C에서 425°C로 증가할 때 MLP의 결과값으로 예측되어진 반응변수의 값이 686.2에서 111.7로 83.71% 증가하였음을 보여주고 있다. 그림 5는 모형의 반응 등고선을 나타내었다. PLD법에 의해서 증착된 ZnO 박막의 PL 스펙트럼 최적화 조건이 압력이 350 mTorr이고 온도가 400°C에서 이루어짐을 보여주고 있다. 두 번째 PL 스펙트럼의 최적조건으로서는 압력이 400 mTorr이고 온도가 425°C임이 확인되었다. 그림 6은 모형의 3차원 반응 등고선을 나타내었다. 첫 번째와 두 번째 최적 조건 사이에서 지역적인 최소점이 발생하지만 RBFN과 MLP를 이용한 신경망 모형이 PLD 공정의 ZnO 박막에 대한 PL 스펙트럼 특성을 종합적으로 잘 표현해주고 있음이 확인되었으며 모델링 결과들이 실제 실험결과와 잘 일치함을 보여주고 있다.

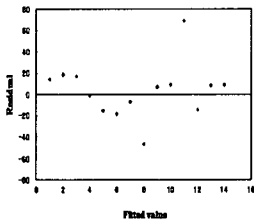


그림 1. 잔차도.
Fig. 1. Residuals plot.

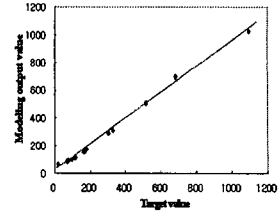


그림 2. 예측치와 측정값의 선형관계도.
Fig. 2. Linearity of predicted value vs. measured value.

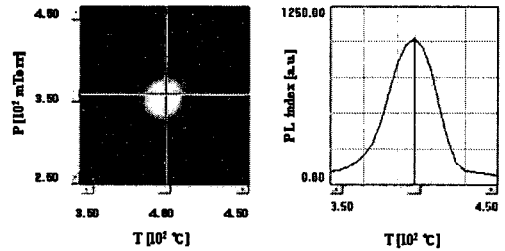


그림 3. 민감도 : 산소압 350 mTorr, 온도 400°C.
Fig. 3. Sensitivity at pressure is 350mTorr and temperature is 400°C.

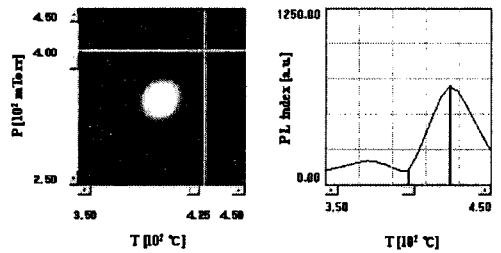


그림 4. 민감도 : 산소압 400 mTorr, 온도 425°C.
Fig. 4. Sensitivity at pressure is 400mTorr and temperature is 425°C.

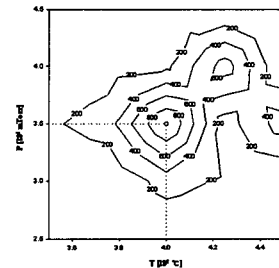


그림 5. 반응표면의 등고선도.
Fig. 5. Contour plot of response surface.

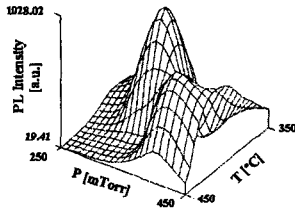


그림 6. 반응표면의 3차원 등고선도.
Fig. 6. 3-D Contour plot of response surface.

5. 결 론

PLD 공정을 특징짓기 위해서 D-최적 실험 계획과 RBFN과 MLP를 이용한 신경망 모델링을 수행하였다. D-최적 실험 계획은 회귀 계수 벡터상의 신뢰구역의 체적을 최소화하기 위해서 선택되었으며 신경망 모델링 방법론은 비선형적인 PLD 공정을 모델링 하기 위해서 실시하였다. 측정된 PL 스펙트럼과 신경망 모델로부터 공정 변수들의 다양한 조건에서의 PLD 공정의 최적의 조건을 찾을 수 있었다. 비선형성을 가지고 있는 대부분의 반도체 공정들에 대해서 본 논문에서 사용되어진 최적 실험 계획과 신경망 구조를 사용하여 공정 변수들의 상호 연관성을 확인함과 동시에 특정 반응 변수에 대한 최적의 조건을 도출함으로써 반도체 공정상의 생산성 향상과 비용 절감을 가져올 수 있을 것이다.

참고 문헌

[1] Yogesh B. Gianchandani, Selden B. Crazy, "Parametric Modeling of a Microaccelerometer: Comparing I- and D-Optimal Design of Experiments for Finite-Element Analysis", Journal of Microelectromechanical systems, Vol. 7, No. 2, p.274, 1998.

[2] M. Y. Rafiq, G. Bugmann, D. J. Easterbrook, "Neural Network design for engineering applications", Pergamon, Vol. 79, p.1541, 2001.

[3] Byungwhan Kim, Gary S. May, "An Optimal Neural Network Process Model for Plasma Etching", IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, Vol. 7, No.1, p.

12, 1994.

[4] Gary S. May, "Modeling and Optimization of Integral Capacitor Fabrication Using Neural Networks", 2000 IEEE/CPMT International Electronics Manufacturing Technology Symposium 47-54.

[5] Eun Sub Shim, Hong Seong Kang, Jeong Seok Kang, Jong Hoon Kim, Sang Yeol Lee, "Effect of the variation of film thickness on the structural and optical properties of ZnO thin films deposited on sapphire substrate using PLD", Applied Surface Science, Vol. 186, p. 474, 2002.

[6] I. Yun, K. Hyun, "Zinc diffusion process investigation of InP-based test structures for high-speed avalanche photodiode fabrication, Microelectronics Journal, Vol. 31, p.635, 2000.

[7] D. C. Montgomery, "Design and Analysis of Experiments", John Wiley & Sons, New York, 2001.