

유전자 알고리즘과 일반화된 회귀 신경망을 이용한 박막 전하밀도 예측모델

권상희, 김병환
 세종대학교, 전자공학과

Modeling of Charge Density of Thin Film Charge Density by Using Neural Network and Genetic Algorithm

Sanghee Kwon, Byungwhan Kim
 Sejong University

Abstract - Silicon nitride (SiN) 박막을 플라즈마 응용화학기상법을 이용하여 증착하였다. SiN박막의 전하밀도는 일반화된 회귀 신경망 (GRNN)을 이용하여 모델링하였다. PECVD 공정은 Box Wilson 실험계획표를 이용하여 수행하였다. GRNN 모델의 예측수행은 유전자 알고리즘 (GA)을 이용하여 최적화하였다. 최적화한 GA-GRNN 모델은 종래의 GRNN 모델과 비교하여, 약 55%정도의 예측성능의 향상을 보였다.

1. 서 론

태양전지의 Passivation 막에 이용되는 Silicon nitride (SiN) 박막은 Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) system을 사용하여 증착되어 왔다[1-2] PECVD를 사용한 SiN 박막 증착에는, Radio frequency (RF) 전력 또는 압력과 같은 다수의 공정변수가 관여하고 있다. 공정변수에 따라 박막특성은 달라지며, 공정메카니즘의 해석과 공정 최적화를 위해 컴퓨터 시뮬레이션 모델의 개발이 요구된다. 하지만, 플라즈마와 공정변수간의 복잡한 반응으로 플라즈마 예측모델을 개발하는 것은 매우 어렵다. 이러한 복잡성을 피하기 위해서, 신경망과 통계적 실험계획법을 결합해서 예측모델을 개발하려는 시도가 있었으며, PECVD-SiN 박막 특성 모델링에 적용되었다 [3-4]. 박막특성 중 높은 전하밀도는 태양전지의 표면 Passivation의 개선에 요구된다. 본 연구에서 SiN박막의 전하밀도 모델을 Generalized Regression Neural Network (GRNN) [5]과 Genetic Algorithm (GA) [6]를 이용하여 개발하였다. GA는 GRNN모델의 예측수행을 최적화하기 위해 사용하였다. SiN의 PECVD 공정은 통계적인 실험설계를 사용하여 수행되었다. 최적화한 GA-GRNN 모델의 예측성능은 종래의 GRNN 모델과 비교하였다.

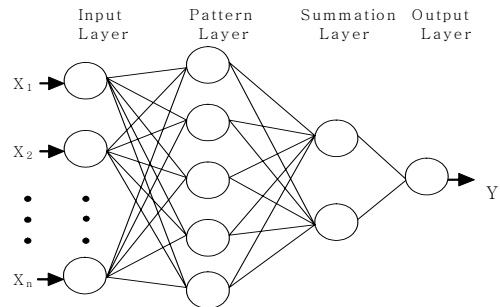
2. 본 론

2.1 실험적인 세부사항

SiN 박막은 13.56 MHz에서 동작하는 Plasma-Therm 700 series batch reactor를 사용하여 증착하였다. 전극사이의 거리는 2.29 cm 이고 직경은 11 inches이었다. PECVD 공정은 면 중심 Box Wilson 실험계획법 [7]을 이용하여 수행되었다. 이 실험계획법은 2^{6-1} 부분인자 실험계획법과 중심점에 해당하는 실험, 그리고 12 개의 면중심에 해당하는 실험으로 구성되었으며, 총 45번의 실험이 수행되었다. 첫 두 종류의 실험을 통해 33번의 실험이 수행되었고, 수집된 데이터는 신경망 모델을 학습하는데 이용되었다. 학습된 GRNN의 예측성능은 학습데이터가 포함되지 않은 면 중심에 해당하는 12번의 실험데이터로 평가하였다. 실험에 이용된 실험변수와 실험범위는 표 1에 나타나 있다. 4 inch, (100) 방향의 p-type Silicon 웨이퍼 위에 증착되었으며, 증착 중에 SiH₄ 가스는 2% N₂가스로 희석되었다. 전하밀도는 C-V 측정기술을 이용하여 측정하였다.

〈표 1〉 실험변수와 범위

| Parameters | Range | Unit |
|-----------------------|---------|------|
| Substrate Temperature | 200-400 | °C |
| Pressure | 0.6-1.2 | Torr |
| RF Power | 20-40 | W |
| NH ₃ Flow | 1-1.4 | sccm |
| SiH ₄ Flow | 180-260 | sccm |
| N ₂ Flow | 0-1000 | sccm |



〈그림 1〉 GRNN의 구조

2.2 모델최적화

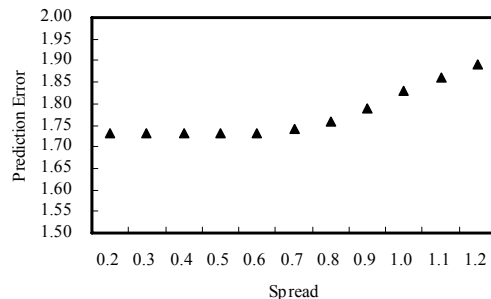
GRNN의 구조는 그림 1에 도시 되어 있다. 그림 1에 도시되어 있듯이, GRNN은 총 4개의 층, 즉 입력층, 패턴층, 합층 그리고 출력층으로 구성된다. 합 (Summation)층은 모델링 하고자 하는 각 출력변수에 대해, 2개의 S 와 D 뉴런으로 구성된다. 출력층에서의 예측치는 (1)식으로 구해진다.

$$\hat{y}_i(x) = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \exp[-D(x, x_i)]}{\sum_{i=1}^n \exp[-D(x, x_i)]} \quad (1)$$

여기서 x_i 는 저장된 i번째의 입력 학습패턴을 지칭하며, n 은 전체 학습데이터의 수를 의미한다. (1)에서 유사성을 판단하는 함수 D 는 (2)식으로 정의된다.

$$D(x, x_i) = \left(\frac{x_j - x_{ij}}{\zeta} \right)^2 \quad (2)$$

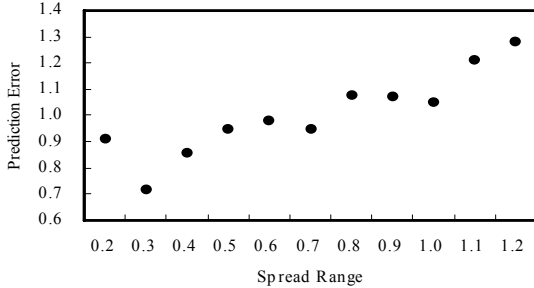
여기서 P는 각 입력패턴을 구성하는 전체 독립변수의 수를 지칭한다. x_j 와 x_{ij} 는 x_j 와 x_{ij} 의 j번째의 요소를 의미한다. 그리고 변수 ζ 는 spread라 불리며, GRNN의 성능을 결정하는 유일한 학습인자이다. 일반적으로 spread는 실험적으로 일정한 범위 내에서 결정하며, 결정된 spread를 그림 1의 패턴층을 구성하는 모든 가우시안 함수가 가지게 된다.



〈그림 2〉 Spread에 따른 GRNN 모델의 예측성능

2.2.1 종래의 모델 성능

GRNN 예측 성능은 spread 값을 0.2에서 1.2까지 0.1간격으로 증가시키면서 평가하였다. 모델의 예측 성능은 Root Mean-Squared Error (RMSE)으로 계산하였다. 각 spread에서의 모델의 RMSE가 그림 2에 도시되어 있다. 그림 2에서 작은 값의 spread에 대해서 RMSE의 변화는 없다가 0.7이상의 spread에서 RMSE가 선형적으로 증가하고 있다. 결국, 가장 작은 RMSE는 0.2-0.6 범위내의 모든 spread에서 동일한 값, 즉, $1.73 (\times 10^{12}/\text{cm}^2)$ 으로 결정되었다.



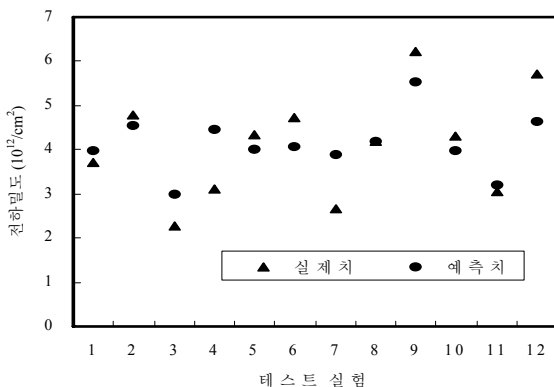
〈그림 3〉 Spread range에 따른 GA-GRNN 모델의 예측 성능

2.2.2 GA-GRNN 모델 성능

다음에, GA를 GRNN 모델의 예측 능력을 향상하는데 사용하였다. 패턴층 뉴런의 가우시안 함수들이 다변수화된 spreads를 가지고 있다고 하였을 때, 그 최적화된 값들을 GA를 이용하여 결정하였다. 종래의 GRNN과는 달리 GA-GRNN에서는 spread range (SR)를 이용하였으며, 그 범위는 GRNN 모델에 이용된 spread 범위와 일치한다. 즉 GA-GRNN에서는 주어진 SR 내에서 난수발생기 (Random Generator)가 이용하여 랜덤한 값들이 발생하고, 이 값들이 다변수 spreads의 초기 값이 되는 것이다. GA에 관여하는 초기 해의 규모는 100으로 설정하였으며, 교배와 돌연변이 확률은 각각 0.95와 0.05였다. 초기해의 적합도를 평가하기 위한 적합도 함수는 식 (5)로 정의되었다.

$$F = 1/(1+RMSE) \quad (5)$$

여기서 RMSE는 학습 에러를 의미한다. 세대 수는 100으로 설정하였으며, 따라서 유전자 동작은 세대수 100에서 종료된다. 전체 세대에서 발생한 모델 중 가장 작은 예측 에러를 보이는 모델을 결정하였다. 각 SR에서 결정된 GA-GRNN 모델의 예측 성능은 그림 3에 도시되어 있다. 그림 3에서와 같이, 가장 작은 RMSE는 0.3의 SR에서 얻어졌고, 해당 RMSE는 대략 $0.72 (\times 10^{12}/\text{cm}^2)$ 이다. 결정된 모델의 예측치와 실제치는 그림 4에 도시되어 있다. 그림 4에서처럼 모델 예측치가 실제치와 대부분의 경우에서 근접하고 있음을 확인할 수 있다.



〈그림 4〉 모델의 예측치와 실제치

한편, 종래의 방식으로 개발된 최적화된 GRNN 모델의 예측 에러와 비교해보면, 이 오차는 대략 58.4% 정도 향상된 수치이다. 이는 GA-GRNN 모델이 GRNN 모델의 예측 성능을 상당히 향상시켰음을 의미한다.

3. 결 론

본 연구에서는 PECVD를 이용해 증착된 SiN 박막의 전하밀도를 신경망을 이용하여 모델링하였다. GA-GRNN 모델은 GRNN 모델의 예측 성능을 50% 이상 향상시켰으며, 개발된 모델은 전하밀도의 정성적 해석과 최적화에 응용될 수 있다.

감사의 글

본 연구는 서울시 산학연 협력사업의 지원으로 수행되었음(과제번호 10583).

[참 고 문 헌]

- [1] P. Temple-Boyer, L. Jalabert, L. Masarotto, J. L. Alay, and J. R. Morante, "Properties of nitrogen doped silicon films deposited by low-pressure chemical vapor deposition from silane and ammonia," J. Vac. Sci. Technol. A 18 (2000) 2389.
- [2] H. Gleskova, S. Wagner, V. Gasparik, and P. Kovac, "Low-temperature silicon nitride for thin-film electronics on polyimide foil substrates," Appl. Surf. Sci. 175, 12 (2001).
- [3] B. Kim and W. S. Hong, "Use of neural network to characterize a low pressure temperature effect on refractive property of silicon nitride film deposited by PECVD," IEEE Trans. Plasma Sci. 32, 84 (2004).
- [4] B. Kim, K. Park, D. Lee, "Use of neural network to model a deposition rate of PECVD-silicon nitride films," Plasma Sour. Sci. Technol. 14, 83 (2005).
- [5] D. F. Specht, "A general regression neural network" IEEE Trans. Neural Network 2 (1991) 568.
- [6] D. E. Goldberg, Genetic Algorithms in Search, Optimization & Machine Learning, Addison Wesley, Reading, MA, 1989.
- [7] D. C. Montgomery, Design and Analysis of Experiments, John Wiley & Sons, Singapore, 1991.