

# 신경망과 유전 알고리즘을 이용한 광소자용 ZnO 박막 특성 공정 모델링 및 최적화

고영돈, 강홍성, 정민창\*, 이상렬, 명재민\*, 윤일구  
연세대학교 전기전자공학과, 연세대학교 금속공학과\*

## Process Modeling and Optimization for Characteristics of ZnO Thin Films using Neural Networks and Genetic Algorithms

Young-Don Ko, Hong Seong Kang, Min-Chang Jeong\*, Sang Yeol Lee, Jae-Min Myoung\*, Ilgu Yun.  
Dept. of Electrical and Electronic Engineering, Dept. of Metallurgical Engineering\*, Yonsei University.

### Abstract

The process modeling for the growth rate in pulsed laser deposition (PLD)-grown ZnO thin films is investigated using neural networks (NNets) and the process recipes is optimized via genetic algorithms (GAs). D-optimal design is carried out and the growth rate is characterized by NNets based on the back-propagation (BP) algorithm. GAs is then used to search the desired recipes for the desired growth rate. The statistical analysis is used to verify the fitness of the nonlinear process model. This process modeling and optimization algorithms can explain the characteristics of the desired responses varying with process conditions.

**Key Words** : process modeling, pulsed laser deposition, neural network, genetic algorithms

## 1. 서 론

반도체 분야의 많은 발전과 더불어서 이들을 이용한 수많은 응용 분야에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다. 광소자 분야 또한 응용 분야중의 하나로 여기에 사용되는 II-VI족 화합물 반도체 물질중의 하나인 ZnO 물질은 현재 우수한 광학적 특성을 지닌 물질로 조사되어 여러 종류의 다이오드 및 디스플레이 분야와 광소자 분야에서 두각을 나타내고 있는 물질중의 하나이다[1].

우수한 특성을 갖는 화합물 반도체 물질들을 생산하기 위해서는 수많은 조건들에 의한 공정 제어가 필수불가결한 하나의 요소로 여겨지고 있으며 공정변수들의 비선형적인 특성으로 인해서 이에 따른 최적화 공정 조건 도출 및 원하는 결과에 대한 예측이 어려운 실정이다.

본 논문에서는 이러한 모델링과 최적화 조건 도출을 위해서 D-최적 실험 설계를 바탕으로 역전파 알고리즘을 기반으로 한 신경망 모델링을 ZnO 박막의 성장률에 대한 공정모델링을 실시하였으며 유전 알고리즘을 통해서 특정 ZnO 박막 성장률에 대한 최적화 조건을 도출하였다. 예측된 결과와 도출된 최적화 공정 조건 결과를 검증하고자 통계적 검증을 실시하였다.

## 2. 실험

### 2.1 실험장치

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 사용되었

다. 증착시 챔버는 기본 진공  $1 \times 10^{-6}$  Torr로 진공 상태를 만든 후에 진공상태를 유지하면서 증착될 온도로 가열하였다. Nd:YAG 레이저를 사용하였으며 사용된 파장은 355 nm, 에너지 밀도는  $2.5 \text{ J/cm}^2$ , 350-400 °C의 기판온도와 250-350 mTorr의 분위기 산소압을 유지하였으며, 타겟과 기판간의 거리는 5cm이다. PLD에 의해서 ZnO 박막이 증착된 이후에 InP 기판 위의 ZnO 박막의 두께는 SEM(scanning electron microscopy)으로 측정하였다.

### 3. 모델링 계획

#### 3.1 D-최적 실험 계획

PLD 공정을 특징짓기 위해서 고려되어지는 공정 변수들을 표 1에 나타내었다.

표 1. 공정변수의 값과 범위.

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

기판온도(T)와 분위기 산소압(P)이 공정 변수들로서 선택되었다. D-최적 실험 계획[2]을 사용하였으며 시행횟수는 17번으로 표 2에 나타내었다.

표 2. D-최적 실험 계획.

Run	T[°C]	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

#### 3.2 신경망 모델링

신경망 알고리즘은 입력과 출력 요소들 사이에서 임의의 비선형 요소들 안에서 매우 효과적임을 보여준다. 신경망은 입력 변수들과 대응되는 반응들 사이의 연결에 따른 수신, 과정, 전송 임계 정보들의 많은 뉴런 레이어로 구성되어 있다. 각각의 뉴런은 활성화함수(activation function)를 통해서 나온 입력변수들의 가중치의 합으로 구성되어 있다. 망 외부와 서로 작용을 미치지 않는 뉴런들의 은닉층들로 결합되어 있다.

본 연구에서는 전형적인 전방향 신경망(feed-forward neural network)을 이용하였고 출력과 예측의 오차를 하위 계층으로 전파하여 가중치를 변화시켜 오차를 줄여나가는 오류 역전파 알고리즘을 이용하여 모형을 훈련시켰다.

전방향 신경망의 일반적인 정의는 다음과 같다.

$$f(v) = \sum_{i=1}^{M_i} \phi_i(v) \quad (1)$$

$v$  는 입력 변수 벡터,  $\phi_i$  는  $i$  번째 망의 활성화 함수이다. 은닉층의 활성화 함수는 다음과 같다.

$$\phi_i(v) = \psi(x_i) = \psi(w_i^T v + \theta_i) \quad (2)$$

$w_i$  는  $i$  번째 입력 가중치 벡터,  $\theta_i$  는  $i$  번째 은닉층의 스칼라 바이어스이다[3].

본 연구에서는 두개의 은닉층에 각각 9개의 뉴런들로 구성되었으며 학습률은 0.0025, 적률계수는 0.95를 사용하였으며 활성화함수로는 a nonlinear sigmoid transfer function을 사용하였다.

#### 3.3 유전 알고리즘

유전 알고리즘은 최적화 문제의 집합을 유한 길이의 문자열로서 변환하여 처리함으로써 기존의 알고리즘들이 경사 하강법(gradient decent method)을 사용하는 것과 달리 지역 극소에 빠지지 않는다는 것과 효율적인 최적화 탐색을 위해서 확률적 천이규칙을 사용한다는 점이 큰 장점이다.

일반적으로 유전 알고리즘은 다음과 같은 4단계로 이루어진다.

- 1) 문자열 개체의 생성
- 2) 각 문자열의 평가
- 3) 적합한 문자열의 선택
- 4) 유전자 조작에 의한 새 문자열 생성

유전 알고리즘은 초기 개체 집단으로부터 시작해서 선택(selection), 교배(crossover), 돌연변이(mutation)의 동작들을 수행하게 된다. 초기 개체

집단의 문자열은 다음 세대에서의 생존율이 가장 높은 순으로 결정하는데 이 과정을 선택이라고 하며, 이에 대한 확률은 다음과 같이 정의 된다[4].

$$P_{select.i} = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^n F} \quad (3)$$

선택된 유전자들을 통해서 교배지(mating pool)를 형성하게 되고 교배지에 형성된 유전자들은 교배 연산자와 돌연변이 연산자를 통해서 새로운 개체를 형성한다.

교배 연산자는 한 쌍의 유전자들이 염색체를 교환하는 과정이며, 돌연변이 연산자는 문자열 위치의 값을 임의로 변경하는 과정이다. 교배 연산과 돌연변이 연산을 그림 3에 나타내었다.

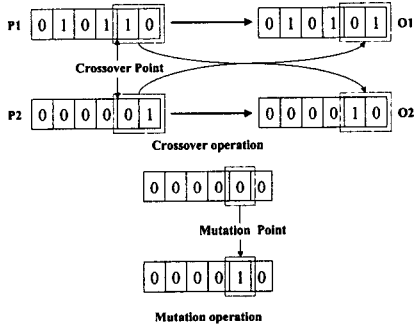


그림 3. 교배 연산과 돌연변이 연산.

유전 알고리즘에서 새로운 개체에 대한 적합도는 다음의 함수로서 정의하였다[4].

$$F_{fitness} = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^n (y_{measured.i} - y_{predicted.i})^2} \quad (4)$$

$n$ 은 반응변수의 갯수,  $y_{measured.i}$ 는 측정된 반응값,  $y_{predicted.i}$ 는 반응 예측값이다.

본 연구에서는 표본 크기 17, 교배 확률 0.95, 돌연변이 확률 0.03, 염색체 길이는 8로서 유전 알고리즘 파라미터로 사용하였다.

#### 4. 결과 및 토의

선형 회귀 모형과 신경망 모형에서의 오차 제곱합 (SSE:Sum of Squared Error)과 결정 계수 (R-squared) 값을 표 5에 나타내었다. 선형 회귀모형의 경우 0.34 %의 모형 설명력을 가지지 못하

는데 반해 신경망 모형의 경우 73.8 %의 모형 설명력을 나타냄으로서 상당히 우수한 모형의 적합성을 나타내고 있다.

신경망 모형 오차에 대한 잔차도를 그림 4에 나타내었다. 잔차는 주어진 선형 회귀 모형이 얼마나 잘 설명해 주며 적합한지를 측정하는데 사용된다. 모형에서 잔차의 가정을 토대로 보았을 때 잔차들이 0을 중심으로 무작위로 분포되어 있으며 어떠한 경향도 나타내지 않음으로서 통계적 가정에 일치함을 확인할 수가 있다.

신경망 모형의 결과 값을 그림 5에 나타내었다. 신경망 모형의 예측값과 실험값들이 선형성을 가지고 있음을 알 수가 있다. 이러한 결과는 신경망 모형이 좋은 예측 결과를 보여줌을 나타내고 있다.

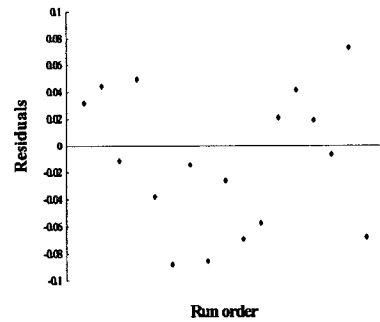


그림 4. 잔차도.

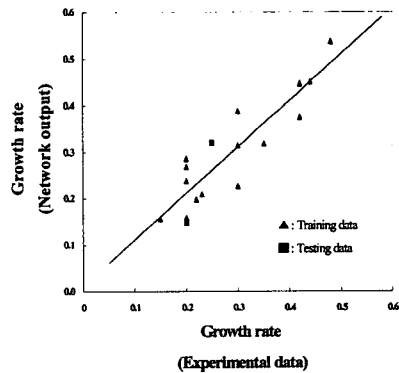


그림 5. 성장률에 대한 신경망 결과.

3-D 반응 표면 모형을 그림 6에 나타내었다. 온도 330~350 °C, 압력 390~410 mTorr에서 ZnO 박막의 성장률이 가장 두드러짐을 확인할 수가 있다. 산소압력이 공정 환경 속에서 증가할 때 박

막의 성장률이 점차 증가함을 보여주고 있으며, 반면에 산소의 압력과 기판의 온도가 계속 증가하면 제한된 공정 내에서의 산소 압력으로 인해서 박막의 성장률이 감소함을 보여주고 있다.

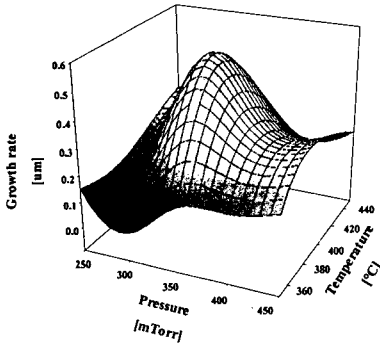


그림 6. 반응 표면도.

유전 알고리즘을 통해서 박막의 성장률이 3500Å 일 때의 최적화된 두 가지 경우의 공정 변수 조건들의 값과 적합도를 표 6에 나타내었다. 유전 알고리즘을 통해서 구한 최적화 조건의 예측 결과 값을 측정값과 비교하여 표 7에 나타내었다. 두 값을 비교해 보았을 때 유전 알고리즘을 이용한 최적화 조건들의 값을 사용한 예측 값이 실제 측정값과 근사함을 알 수 있다.

표 6. 유전 알고리즘 최적화 결과.

	T[°C]	P[mTorr]	적합도
1	400	398	0.996
2	380	390	0.998

표 7. 유전 알고리즘 최적화 결과 값과 측정 결과 값 비교.

	최적화			측정값		
	T [°C]	P [mTorr]	박막 두께 [Å]	T [°C]	P [mTorr]	박막 두께 [Å]
1	400	398	3540	400	400	3500
2	380	390	3536	375	400	3480

## 5. 결론

오류 역전파 알고리즘을 바탕으로 한 신경망 모

델링과 유전 알고리즘을 이용한 최적 조건 탐색법을 펄스 레이저 증착법에 의해서 만들어진 ZnO 박막 성장률에 적용하였다. 본 모델링의 결과들이 기존의 일반적인 방법론보다 향상된 예측력과 공정 조건을 도출할 수 있음을 확인하였다. 이러한 모델링 방법론을 통해서 반도체 소자 제작 공정상의 반응 변수 예측을 할 수 있으며 유전 알고리즘을 통한 특정 반응 변수에 대한 최적화 공정 조건을 도출함으로써 공정상의 비용 절감 및 수율 향상에 많은 영향을 가져 올수 있을 것이다.

## 감사의 글

이 논문은 2003년도 두뇌한국21사업에 의하여 지원되었음.

## 참고 문헌

- [1] T. Aoki, Y. Hatanaka, and D. C. Look. "ZnO diode fabricated by excimer-laser doping", Applied Physics Letter, Vol. 76, p.3257, 2000.
- [2] Yogesh B. Gianchandani, Selden B. Crary. "Parametric Modeling of a Microaccelerometer: Comparing I- and D-Optimal Design of Experiments for Finite-Element Analysis", J. of Microelectromech Sys., Vol. 7, p. 274, 1998.
- [3] Gordon Lightbody., George. W. Irwin. "Multi-layer perceptron based modeling of nonlinear systems", Fuzzy Sets and sys, Vol. 79, p.93, 1996.
- [4] Ilgu Yun, Lawrence A. Carastro, Ravi Poddar, Martin A. Brooke, Gary S. May, Kyung-Sook Hyun, Kwang Eui Pyun. "Extraction of Passive Device Model Parameters Using Genetic Algorithms", ETRI Journal, Vol. 22, No.1 p.38, 2000.