

HfO₂ 박막 특성에 대한 신경망 모델링

권경은, 이정환, 고영돈, 문태형*, 명재민*, 윤일구
연세대학교 전기전자공학과, 연세대학교 금속공학과*

Process Modeling for HfO₂ Thin Films using Neural Networks

Kyoung Eun Kweon, Jung Hwan Lee, Young-Don Ko, Tae-Hyoung Moon*, Jae-Min Myoung*, Ilgu Yun.
Dept. of Electrical and Electronic Engineering, Yonsei Univ., Dept. of Metallurgical Engineering, Yonsei Univ.*

Abstract : In this paper, Latin Hypercube Sampling based the neural network model for the electrical characteristics of HfO₂ thin films grown by metal organic molecular beam epitaxy was investigated. The accumulation capacitance and the hysteresis index are extracted to be the main responses to examine the characteristics of HfO₂ thin films. X-ray diffraction was used to analyze the characteristic variation for the different process conditions. The initial weights and biases are selected by Latin Hypercube Sampling method. This modeling methodology can allow us to optimize the process recipes and improve the manufacturability.

Key Words : HfO₂, process modeling, neural network, Latin Hypercube Sampling

1. 서 론

반도체 분야의 많은 발전과 더불어 고집적화 및 시스템 온 칩(System-On-Chip)에 관련된 산업들의 수요가 증가하고 있으며 동시에 반도체 소자에 대한 크기들이 소형화 되어 지고 있는 추세이다. 따라서 High-k 유전 물질들이 SiO₂ 같은 현재의 게이트 산화막을 대신할 수 있는 소재로 각광 받고 있다. 그 중에서도 HfO₂는 높은 에너지 밴드갭, 고유전 상수, 높은 breakdown field를 가정으로 인해서 두각을 나타내고 있는 유전 물질 중의 하나이다 [1].

본 논문에서는 이러한 HfO₂ 박막의 accumulation capacitance (Cacc) 와 hysteresis index (H)에 대하여 신경망 모델링을 실시하였다. 모델링의 초기 가중치와 바이어스를 생성하기 위해서 Latin Hypercube Sampling (LHS)기법을 사용하였다. 본 모형으로부터 HfO₂ 박막의 전기적 특성들을 예측함과 동시에 공정 조건에 따른 반응 변수의 변화를 분석할 수가 있다.

2. 실험

p-Si(100) 기판 위에 금속 유기 분자 빔 에피택시 방법을 이용하여 HfO₂ 박막을 성장시켰다. 박막을 성장시키기 전에 Si 기판 위에 존재하는 자연 산화막은 H₂O:Hf 용액을 이용하여 제거하였다. 금속 유기 선구 물질로 Hf-t-butoxide를 사용하였고 carrier gas로 높은 순도(6N)를 가진 O₂ 가스를 산화제로 선택하였다. 기본 압력과 작동 압력은 각각 10⁻⁹ Torr와 10⁻⁷ Torr 로 유지하였다. Si 기판과 HfO₂ 박막 사이의 계면 특성을 향상시키기 위해 N₂ 가스 환경에서 700 °C에서 2분간 어닐링을 수행하였다.

3. 모델링

3.1 실험 계획법

MOMBE 공정을 특징짓기 위해서 450~550 °C 기판온도, 3~5 sccm Ar flow, 그리고 3~5 sccm O₂ flow를 공정변수들로 지정하였다. 본 연구에서는 곡선 효과를 확인하기 위해서 중심점을 포함한 full factorial design matrix를 사용하였다 [2]. 반응 변수인 Accumulation capacitance는 accumulation region에서의 MOS 구조가 갖는 정전용량을 나타내며, hysteresis index는 bi-directionally voltage sweep에서의 hysteresis loop의 전압변위를 나타낸다.

3.2 신경망 모델링

오류 역전파 알고리즘을 사용하였으며 두개의 은닉층에 각각 4, 3개의 뉴런과 학습률은 0.0002, 적률계수는 0.04를 사용하였으며 활성화함수로는 a nonlinear sigmoid transfer function을 사용하였다. Accumulation capacitance와 hysteresis index에 대한 training data 의 root mean square error (RMSE)는 각각 0.76, 0.03 이고, testing data의 경우는 각각 0.76, 0.03 이다.

3.3 Latin Hypercube Sampling

LHS는 확률 변수들이 동일한 확률로 나누어진 구간 내에서 sampling 하는 기법이다. LHS는 N 포본 크기 내에서 n 개의 변수들을 생성한다. 1/N 확률변수들이 각 구간에서 무작위로 추출되며 이들의 값들은 중복되지 않는 N 구간들 안에서 분리된다.

4. 결과 및 토의

Accumulation capacitance와 hysteresis index에 대한 신경망 모델링 결과와 잔차도를 그림 1-2 에 각각 나타내었다. 반응 변수에 대한 신경망 모델링 예측 값과 측정된 HfO₂의 전기적 특성 값들이 선형적인 관계를 나타냄으로서 통계적 유의 수준 ($\alpha = 0.05$)하에서 좋은 결과를 보여주고

있음을 알 수 있다. 본 모형의 잔차들은 0을 중심으로 무작위로 분포되어있음으로서 모형이 적합함을 나타내고 있다.

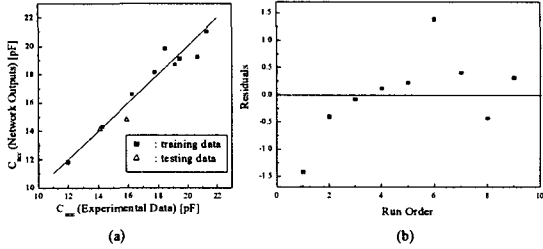


그림 1. Accumulation capacitance에 대한 신경망 모델링 결과:(a) 측정값 vs. 예측값, (b) 잔차도.

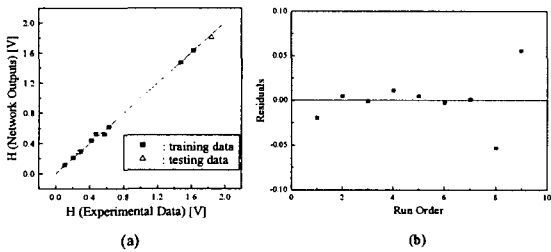


그림 2. Hysteresis index에 대한 신경망 모델링 결과:(a) 측정값 vs. 예측값, (b) 잔차도.

반응 변수에 대한 3-D 반응 표면도와 2θ XRD scan 을 그림 3-5 에 나타내었다. Accumulation capacitance는 유전 상수에 비례하고 equivalent oxide thickness(EOT)에 반비례 한다. 따라서 기판온도가 상승하면서 분해된 Hf 소스들은 많은 양의 hydrocarbon을 생성하며 혼합된 이들로 인해서 박막의 결정 크기는 제한을 받고 tetragonal phase 결정성이 강하게 나타난다. O₂/Ar가 작을수록 결정 크기의 제한과 hydrocarbon이 많아지므로 accumulation capacitance는 증가하게 된다. 또한, 기판온도의 상승으로 oxide의 두께는 줄어들고 accumulation capacitance는 증가한다. 온도가 450°C에서 500°C로 상승하면서 tetragonal phase의 강도는 증가하였다. 이것은 tetragonal phase가 oxide 두께에 영향을 준다는 것을 나타내고 있다. Oxide layer들의 우수한 결정 구조로 인해서 interface trap density(D_{it})에 비례하는 hysteresis는 O₂/Ar의 감소와 함께 D_{it}가 줄어들기 때문에 증가한다.

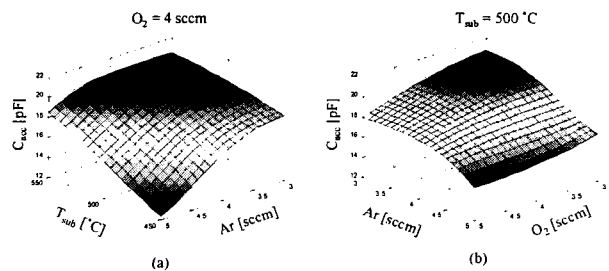


그림 3. Accumulation capacitance에 대한 반응 표면도:(a) O₂=4 sccm, (b) Tsub=500 °C.

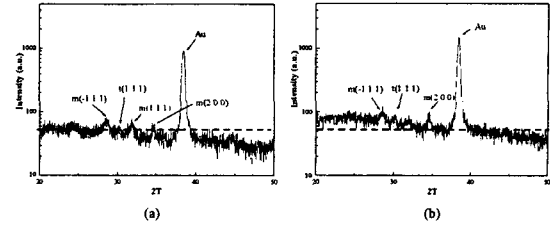


그림 4. 2θ XRD scan:(a) Tsub= 450 °C, Ar=5 sccm, and O₂=5 sccm and (b) Tsub= 550 °C, Ar=5 sccm, and O₂=5 sccm.

그림 5 (b)를 보면, 충분한 oxygen vacancy mobility는 SiO₂의 interfacial layer를 분해시키며 interfacial silicate를 만든다. 이러한 반응은 기판 온도가 500°C 일 때 활발히 일어나며 bi-directional voltage sweep을 함으로서 trapped charge들에 의해서 interfacial trap density와 hysteresis는 증가하게 된다.

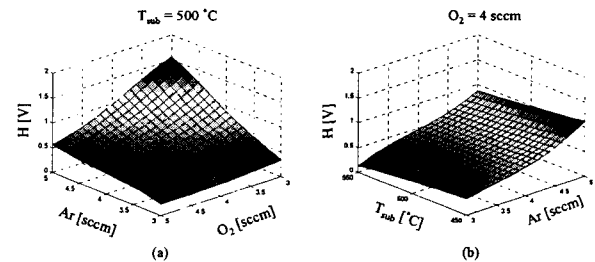


그림 5. Hysteresis index에 대한 반응 표면도:(a) Tsub= 500 °C and (b) O₂=4 sccm.

5. 결론

Latin Hypercube Sampling을 이용한 신경망 모형은 반응 변수에 대한 다양한 공정조건에 따른 HfO₂ 박막의 특성들을 예측할 수 있으며 이러한 예측을 통해서 실제 공정상의 생산성 향상을 가져올 수 있다.

감사의 글

이 논문은 2005년도 두뇌한국21사업에 의하여 지원되었음.

참고 문헌

[1] J. Zhu, Y. R. Li, and Z. G. Liu, "Fabrication and characterization of pulsed laser deposited HfO₂ films for high-k gate dielectric applications," J. Phys. D: Applied Phys. Vol. 37, P. 2896, 2004.
 [2] R. H. Mayers, and D. C. Montgomery, Response Surface Methodology, New York:Wiley, 1995.