

논문 19-7-5

신경회로망을 이용한 RF 스퍼터링 ZnO 박막 증착 프로세스 모델링

Modeling of RF Sputtering Process for ZnO Thin Film Deposition using Neural Network

임근영^{1,a}, 이상극², 박춘배¹
(Keun-Young Lim^{1,a}, Sang-Keuk Lee², and Choon-Bae Park¹)

Abstract

ZnO deposition parameters are not independent and have a nonlinear and complex property. To propose a method that could verify and predict the relations of process variables, neural network was used. At first, ZnO thin films were deposited by using RF magnetron sputtering process with various conditions. Si, GaAs, and Glass were used as substrates. The temperature, work pressure, and RF power of the substrate were 50~500 °C, 15 mTorr, and 180~210 W, respectively : the purity of the target was ZnO 4 N. Structural properties of ZnO thin films were estimated by using XRD (0002) peak intensity. The structure of neural network was a form of 4-7-1 that have one hidden layer. In training a network, learning rate and momentum were selected as 0.2, 0.6 respectively. A backpropagation neural network were performed with XRD (0002) peak data. After training a network, the temperature of substrate was evaluated as the most important parameter by sensitivity analysis and response surface. As a result, neural network could capture nonlinear and complex relationships between process parameters and predict structural properties of ZnO thin films with a limited set of experiments.

Key Words : ZnO thin films, RF sputtering, Neural network, Back-propagation

1. 서론

ZnO는 우수한 전기적, 광학적 그리고 압전 특성을 가지고 있는 재료로써 많은 연구가 수행되고 있으며, 다양한 분야에서 그 응용가능성이 매우 크다[1-6]. 특히 상온에서 3.37 eV의 wide band gap을 가지고 있으며, 현재 단파장 영역의 LED(light emitting diode)나 LD(laser diode)에 널리 사용되고 있는 GaN와 구조적으로나 광학적으로 비슷한 특성을 가지고 있어, 보다 안정적이고 경제적으로

저렴한 ZnO 기반의 광소자 개발에 대한 연구가 최근 활발히 이루어지고 있다[1-5]. ZnO 박막의 고품위 에피 성장을 위해 장치가 단순하고 높은 증착률과 대면적 증착이 가능하며, 우수한 방향성(c축 우선배향)을 갖는 양질의 막을 얻을 수 있을 뿐만 아니라, 투명하고 치밀한 막을 얻을 수 있는 장점을 가지고 있는 스퍼터링법이 많이 사용되고 있다[1,3,5]. 스퍼터링법을 이용한 ZnO 박막 제조에 있어 증착 변수에 따라 박막의 품질이 결정되므로 가스압, 기판온도, 가스혼합비, 기판과 타겟과의 거리, RF power, 기판의 종류 등 증착조건에 적절한 선정이 안정적 프로세스에 대한 선결조건이 되고 있으나, 이들의 복잡한 상호작용에 의해 비선형특성을 보이므로 결과를 예측하기가 어려워 주로 경험을 바탕으로한 최적화 공정이 수행되어져 왔다. 따라서 생산성 증대를 위해서는 모델링 및 예측시스템이 필요하게 되었다[7-14].

1. 원광대학교 전기전자 및 정보공학부
(전북 익산시 신용동 344-2)
2. 광운대학교
a. Corresponding Author : limky7@paran.com
접수일자 : 2006. 5. 12
1차 심사 : 2006. 6. 5
심사완료 : 2006. 6. 15

최근에는 원자빔 에피택시 (molecular beam epitaxy) 공정이나 PLD(pulsed laser deposition)공정의 모델링이 신경망을 이용하여 이뤄지고 있으며, 반도체 장비공정의 최종 목표인 양질의 막질을 얻기 위해서 그 평가 결과인 XRD(x-ray diffraction) 강도 값이나 PL(photoluminescence)값을 출력치로 학습하여 좋은 결과값을 얻은 사례가 보고 되고 있다[7,10].

따라서 본 연구에서는 RF 마그네트론 스퍼터링 방법을 이용한 ZnO 박막 제조 공정에 있어서 박막의 특성을 결정짓는 각종 공정변수의 영향을 조사하고, 그 결과를 이용하여 신경회로망 모델링을 수행하고자 한다. 모델링결과로부터 공정변수간 상호의존 관계를 예측, 규명함으로써 궁극적으로 공정 최적화를 이루고 공정수율 향상과 비용감소를 실현할 수 있는 기법을 제안하고자 한다.

2. 실험

2.1 실험장치 및 방법

박막증착을 위한 기판은 n-type Si(100), GaAs(100), Glass의 3 종류로 현재 반도체 공정에 사용되고 있는 재료를 선택하였으며, 비정질 재료인 Glass 기판은 결정질 재료인 다른 기판과의 비교를 위해 사용하였고, 4N ZnO를 타겟으로 사용하여 증착공정을 수행하였다.

기판 온도와 ZnO 증착 특성의 연관성을 보기 위하여 기판 온도를 각각 50 °C, 100 °C, 150 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C, 500 °C로 변화시켜가며 실험하였다. 이 때 초기 진공도와 작업 진공도는 3×10^{-6} Torr와 15 mTorr로 하였으며, RF power는 210 W, Ar 가스와 O₂ 가스의 비율은 100:0(%)로 하였다. 다음으로, RF power와 ZnO 증착 공정과의 관계를 살펴보기 위해 기판온도 50 °C에서 Ar 가스와 O₂ 가스의 비율은 100:0(%)로 고정하고, RF power는 180, 210 W로 변화시켜가며 각 기판별로 실험하였다. 최종적으로 Ar 가스와 O₂ 가스의 비율을 100:0(%), 80:20(%), 60:40(%)로 차례로 변화시키고 기판온도는 50 °C, RF power는 210 W, 초기 진공도와 작업 진공도는 3×10^{-6} Torr와 15 mTorr로 유지시키며 실험을 진행하여 가스 혼합비가 ZnO 증착 공정 변수으로써 어떻게 작용하는지를 조사하였다. 각 공정별 pre-sputtering시간은 10분으로 하였고, 증착시간은 3시간으로 하였다. 표 1에 실험조건을 표시하였다. 실험 후 XRD 분석을 이용하여 ZnO 박막의 결정성을 조사하였다.

표 1. ZnO 박막 증착을 위한 RF 스퍼터링 조건.

Table 1. Conditions of RF sputtering to deposit ZnO thin films. Sputtering condition.

Parameters	Process conditions
substrate	n-type Si(100), GaAs(100), Glass
target	2 inch ZnO (4 N)
base pressure	3×10^{-6} Torr
work pressure	15 mTorr
RF Power	180, 210 W
pre-sputtering time	10 min
deposition time	3 hr
substrate temperature(°C)	50, 100, 150, 200, 300, 400, 500
ambient gas	4 N high purity Ar, O ₂
Ar/O ₂ gas ratio(%)	100/0, 80/20, 60/40
target-substrate distance	178 mm

ZnO 박막의 XRD (0002) peak 위치에서의 강도값이 클수록 c축 배향특성이 좋은 것으로 판단하여 막질의 평가에 반영하였다.

2.2 신경회로망 모델링

RF 스퍼터링에 의해 얻어진 ZnO 박막의 XRD 분석값과 각 공정조건은 신경회로망의 학습을 위한 입력데이터가 된다. 본 연구에서 입력변수로 설정한 각 공정조건에서 기판의 종류는 문자형 데이터이고, 각 온도와 RF power, 가스비 등은 숫자형이지만 그 스케일이 매우 다르다. 따라서 그대로 신경회로망에 입력하는 것이 불가능하고 입력한다 하더라도 처리속도가 매우 느려져 모델링에 의한 효과를 기대하기 어려우므로, 전처리과정을 거쳐 입력이 가능한 값으로 변환되게 된다.

먼저 기판의 종류에 따라 n-type Si(100), GaAs(100), Glass는 각각 0.5, 0.75, 1로 설정하게 된다. 온도(T)와 RF power(P), O₂/Ar 가스비(R)는 본 연구를 위해 작성한 다음의 식 (1)~(3)에 의해 처리되어 신경망 데이터로써 의미 있는 입력값으로 변경된다.

$$T = \frac{t}{400} \quad (1)$$

(t: 온도값의 실험 조건 값)

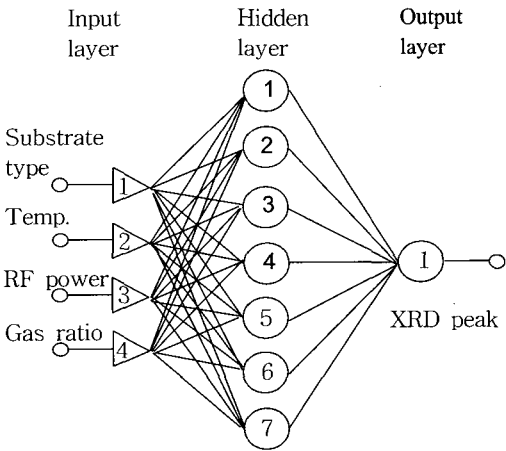


그림 1. 사용된 신경회로망의 구조(4-7-1).

Fig. 1. Structure of neural network used in this study(4-7-1).

$$P = \frac{p}{210} \quad (2)$$

(p : RF-power값의 실험조건값)

$$R = (100 - r) \times 0.01 \quad (3)$$

(r : 가스비값(%의 실험조건값)

또한 전처리 과정을 거치게 되면 신경망에 의한 학습 및 데이터 처리시 시간을 단축시키고 보다 정확한 결과를 얻을 수 있는 장점이 있으며, 통상 그 결과치가 0~1사이의 값이 나오도록 전처리 과정을 만든다.

본 실험에서 사용된 신경회로망의 구조는 한 개의 은닉층을 가지는 4-7-1 구조로써 4개의 입력노드와 7개의 노드로 구성된 한 개의 은닉층과 XRD의 peak 데이터를 1개의 출력노드로 가지는 신경망으로 구성하였다. 신경망의 학습은 역전파(back-propagation) 알고리즘[12,14]을 사용하여 이뤄졌으며 이때 학습율은 0.2, 모멘텀은 0.6을 사용하였고 이들값의 선정과정은 실험결과부분에서 다시 정리하였다.

그림 1은 이번 실험에 사용된 신경망의 구조를 나타내고 있다.

3. 결과 및 고찰

그림 2는 GaAs 기판위에 증착된 ZnO 박막의

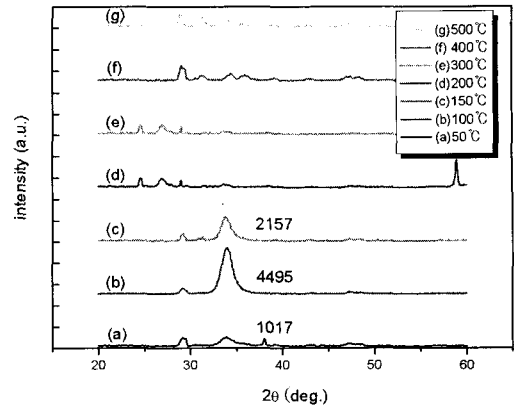


그림 2. GaAs기판위에 증착된 ZnO의 XRD 패턴.
Fig. 2. XRD patterns of ZnO films on GaAs substrate.

XRD 패턴을 보여주고 있다. 온도변화에 따라서 100 °C 정도에서 (0002) peak의 강도값이 가장 높은 값을 보이다가 온도가 더 올라가면 XRD 강도값이 급격히 감소하며 결정성은 더욱 더 나빠졌다. 이러한 현상은 기판의 온도가 상승하면 기판표면 부근에 있는 스퍼터링 된 Zn 입자와 O 입자와의 반응이 촉진되어 증착물이 상승하게 되나 온도가 계속 상승할 경우 ZnO의 증착속도가 너무 빨라져 결정성측면에서는 나빠지게 되는 현상에 기인한다. 다른 기판의 실험에서도 Glass 기판의 경우에 50 °C에서 (0002) peak 값이 가장 크게 나왔고, Si 기판의 경우에는 50 °C와 100 °C에서 증착된 샘플에서만 (0002) peak 가 나타났으며 그 이상의 온도에서는 Si 기판의 고유 특성인 (100) peak만 강하게 나타났다. 이상과 같이 기판온도의 증가에 따른 ZnO 박막의 결정성은 선형적이지 않으며 불규칙한 특성을 가지고 있음을 알 수 있었다.

본 연구에서는 RF power, 가스비 등에 대해서도 각 기판에 대해 실험을 수행하였다. RF power에 의한 실험에서는 RF power가 증가함에 따라 증착속도가 증가함을 알 수 있었으며, 이는 스퍼터링 된 ZnO 분자들의 수가 늘어남에 기인한 것이며 비교적 선형적인 증가를 보였다. 그림 3은 GaAs 기판에 챔버 내 O₂ 가스의 비율을 0 %, 20 %, 40 %로 변화시켜가며 ZnO 박막 증착 공정을 진행한 결과를 도시한 것이다. XRD 강도값을 보면 O₂ 가스 농도가 20 %일 때 가장 높은 peak 값을 가지지만 다시 40 %로 증가하면 다시 감소하는 것을 알 수 있으며, 이로써 가스농도의 증가와 XRD 강

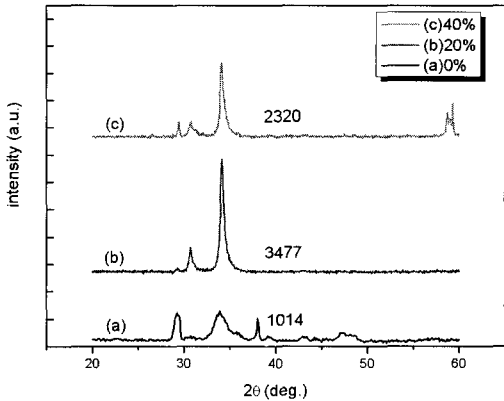


그림 3. GaAs 기판과 산소 혼합비 변화에 의한 ZnO 박막의 XRD 패턴.

Fig. 3. XRD patterns of ZnO films on GaAs substrate with various O₂ gas ratio.

표 2. 신경망 학습과정에서의 변수의 영향.

Table 2. The effect of variables to train a network.

No.	Learning rate	Momentum	Epoch (cnt)	RMSE	Time (sec)
1	0.1	0.5	80,000	0.01729	16
2	0.2	0.6	80,000	0.01321	12
3	0.3	0.5	280,000	0.03139	56
4	0.3	0.6	440,000	0.1184	66
5	0.4	0.6	-	divergence	-

도값은 서로 비선형적인 관계가 있음을 알 수 있었다. 한편, Glass와 Si 기판에서도 이와 유사한 패턴이 나타났으며 특정한 경향을 보이지 않는 매우 복잡한 특성을 가지고 있는 것이 확인되었다.

실험을 통해 수집된 데이터들은 전처리과정을 거쳐 모든 데이터가 0~1사이의 값을 가지게 하여 학습용 data set으로 작성되었다. 총 30개의 데이터를 선별하여 신경망 학습에 사용하였고, 역전파 알고리즘을 이용하였으며 신경망의 최적화를 위해 학습률과 모델의 값을 변경시켜가며 학습을 수행하였다. 학습을 수행한 결과 표 2에서 보이는 바와 같이 학습률 0.2, 모델 0.6의 조건에서 최적의 수렴조건을 얻을 수 있었으며 출력값과 목표값의 차이를 제공근하여 평균을 취한 값인 RMSE(root mean square error)는 0.01321이었다.

표 3. 모델링에 의한 값과 실제값의 비교.

Table 3. Comparison of actual data with output of neural network.

No.	Actual value	Output	Error	Error rate(%)
1	20244	19971	273	1.35
2	20307	19971	336	1.65
3	3486	3381	105	3.01
4	2310	2247	63	2.73
5	2163	2100	63	2.91
6	4200	4074	126	3.00
7	4221	4074	147	3.48
8	1428	1365	63	4.41
9	4263	4179	84	1.97
10	4494	4305	189	4.21

표 3은 모델링 후 신경망을 통한 출력값이 적절 한지를 보기 위해 결과값을 알고 있는 임의의 데이터를 입력하여 목표값과 출력값을 비교한 표이다.

본 연구에서는 예비실험과 선행연구 결과들을 통해 인지하고 있는 측정오차, 작업자간 오차, 장비 상태에 대한 오차값등의 수준을 고려하여 오차 범위를 5 % 선정하여 적정성을 평가하였으며 표 3과 같이 수용가능한 수준의 결과를 보여주었다.

표 4는 신경망 모델링에 의한 ZnO 공정 변수의 민감도(sensitivity) 분석 결과를 보여주고 있다. 민감도는 전체 네트워크에 미치는 영향이 큰 정도를 나타내는 것으로서 전체 네트워크 수행시의 오차 값인 base line error와 특정 입력변수를 제외한 네트워크 오차값을 계산함으로써 구할 수 있다. 본 연구에서는 출력값 및 목표값으로 XRD peak 강도 값을 이용하여 분석하였다. 분석결과에서 rank는 민감도가 높은 순서를 의미하며 이는 오차값에 의해 결정된다. 즉, 오차가 크다는 것은 신경망의 처리에 있어서 결과값에 가장 큰 영향을 끼치는 것이며 결과적으로 전체 처리 과정에서 가장 큰 비중을 차지하게 되는 것으로 판단할 수 있기 때문이다.

표에서 보여지듯이 기판의 온도와 종류가 ZnO 증착공정에 큰 영향을 끼치는 것으로 나타났으며 이는 앞서의 실험에서 나타난 결과와 일치하는 것으로 신경망에 의한 모델링이 ZnO 증착 프로세스에 유용하게 사용될 수 있음을 보여주는 것이다.

표 4. 신경망 모델링에 의한 공정변수 민감도 분석.

Table 4. Sensitivity analysis by using trained neural network modeling.

	Substrate	Temp.	RF power	Ar gas ratio
Rank	2	1	4	3
Error	0.237352	0.265688	0.15912	0.174237
Ratio	6.898583	7.722176	4.62479	5.06416

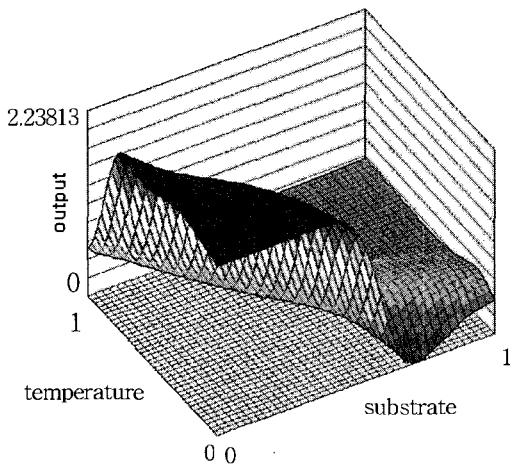


그림 4. 기관종류와 기관온도간 연관성에 의한 응답 표면도.

Fig. 4. Response surface between substrate and temperature condition.

표에서 비율은 오차값과 base line error의 비율을 의미하며 base line error는 전체 네트워크를 수행했을 때의 오차값으로 0.034406이었다.

신경망을 이용한 모델링에서 다음으로 예측 가능한 것은 각 변수간 상호작용에 대한 분석이며, 본 연구에서는 신경망 결과치에 대한 반응표면도(response surface)의 구현으로 직관적인 예측 가능성을 알아보았다. 그림 4는 기관의 종류와 온도간의 반응표면도로서 기관의 종류가 Si이면서 온도는 50 °C 부근일 때의 출력이 가장 높게 나오므로 좋은 박막을 가질 수 있는 공정조건임을 예측하게 함과 동시에 출력값이 2에 근접하는 높은 값을 보임으로써 상관성이 가장 높은 변수임을 보여준다. 이는 앞서의 민감도 분석에서 기관의 온도

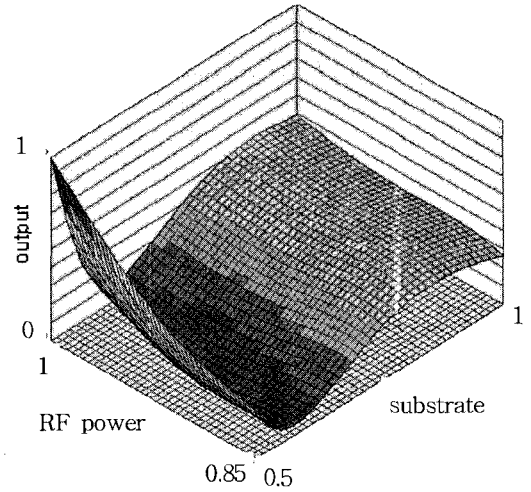


그림 5. 기관종류와 RF power간 연관성에 의한 응답 표면도.

Fig. 5. Response surface between substrate and RF power condition.

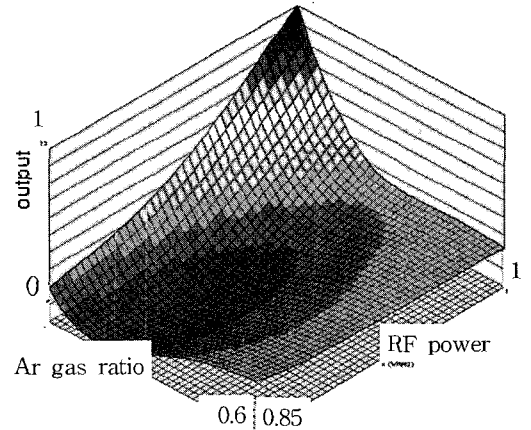


그림 6. RF power와 Ar 가스비간 연관성에 의한 응답 표면도.

Fig. 6. Response surface between RF power and Ar gas ratio condition.

와 기관의 종류가 높은 순위를 갖는 것과 무관하지 않다고 판단되며, 신경망 모델링의 신뢰성을 다시 한번 검증한 것으로 생각된다.

그림 5는 RF power에 대한 의존성을 예측할 수 있는 것으로 기관의 종류값이 0.5근처이고 RF power는 1에 근접할수록 높은 출력을 보임을 알

수 있다. 그림 6은 가스비와 RF power와의 상호작용을 예측할 수 있는 반응표면도 그림이다. 여기에서 RF power가 1에 근접하고 가스비가 1에 근접할 때 좋은 결과를 얻을 수 있는 것으로 나타났다. 따라서, 이상과 같은 결과로부터 공정변수 상호간의 의존성과 최적화된 공정조건을 수립할 수 있음을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 스퍼터링법을 이용한 ZnO 박막 증착 공정에 대하여 다양한 공정 변수를 도입하여 실험하고 그 결과를 가지고 ZnO 박막 증착 공정의 모델링을 제안하였다. 각 공정변수에 대한 증착 결과는 XRD 데이터를 이용한 결정성 분석을 통해 얻었으며, 모델링은 역진과 알고리즘으로 학습한 신경망에 의해 이루어 졌다. 본 연구를 통해 다음과 같은 결과를 얻을 수 있었다.

- 1) 스퍼터링법에 의한 ZnO 박막 증착 공정 수행 시 기판온도에 따라 다양한 막질을 얻을 수 있었으며, 온도에 대한 특성은 온도조건의 증감에 따라 박막의 (0002) XRD peak의 강도의 변화가 일치하지 않는 비선형적인 관계를 가지고 있었음을 알 수 있었다.
- 2) 분위기 가스인 Ar과 O₂의 비율에 대한 연구 결과에서 O₂의 비율이 높아질수록 증착속도가 느려지고 (0002) peak의 강도가 약해지는 현상을 보였으나, 각 기판의 종류에 따라 완전히 일치되는 경향을 볼 수 없었다.
- 3) 학습이 끝난 신경회로망은 결과를 알고 있는 값들을 대입하여 그 결과값을 목표값과 비교하여 검증과정을 거쳤다. 본 연구에서는 예비 실험과 선행연구 결과들을 통해 인지하고 있는 측정오차, 작업자간 오차, 장비 상태에 대한 오차값등의 수준을 고려하여 오차범위를 5 %로 선정하여 적정성을 평가하였으며, 결과를 알고 있는 데이터를 이용한 신경회로망 처리에서 오차범위이내의 신뢰성 있는 결과를 얻을 수 있었다.
- 4) 민감도 분석을 통해 기판의 온도가 가장 중요한 인자임을 알 수 있었고, 응답 표면분석을 통해 기판의 종류와 온도가 상호의존성이 가장 큰 것으로 평가 되었다.
- 5) 결론적으로 본 논문에서 제안한 방법에 의해 반도체 공정의 다양한 비선형적이며 복잡한 특성을 고려한 모델링 수행이 가능하며 공정

변수의 모든 조합에서 나온 실험 수 보다 훨씬 적은 횟수의 실험으로도 최적의 공정조건을 도출하여 공정수율 향상과 비용감소의 목적을 달성 할 수 있음을 보여주었다.

감사의 글

이 논문은 산업자원부에서 시행하는 대학전력연구센터 육성·지원사업(I-2004-0-074-0-00)에 의해 작성되었습니다.

참고 문헌

- [1] S.-J. So and C.-B. Park, "Diffusion of phosphorus and arsenic using ampoule-tube method on undoped ZnO thin films and optical properties of P-type ZnO thin films", J. Cryst. Growth, Vol. 285, No. 4, p. 606, 2005.
- [2] J. Lu, Y. Zhang, Z. Ye, L. Wang, B. Zhao, and J. Huang, "p-type ZnO films deposited by DC reactive magnetron sputtering at different ammonia concentrations", Materials Letters, Vol. 57, p. 3311, 2003.
- [3] 유인성, 소순진, 박춘배, "기판의 결정구조에 따른 RF 스퍼터링 ZnO 박막의 성장과 미세구조 분석", 전기전자재료학회논문지, 19권, 5호, p. 461, 2006.
- [4] Y. R. Ryu, S. Zhu, J. D. Budai, H. R. Chandrasekhar, P. F. Miceli, and H. W. Hite, "Optical and structural properties of ZnO films deposited on GaAs by pulsed laser deposition", J. Appl. Phys., Vol. 88, No. 1, p. 201, 2000.
- [5] 박용욱, 윤석진, 최지원, 김현재, 정형진, 박창엽, "RF 마그네트론 반응성 스퍼터링으로 제작된 ZnO/Glass 박막 특성", 전기전자재료학회논문지, 11권, 10호, p. 833, 1998.
- [6] 유인성, 정종엽, 박춘배, "ZnO 나노파우더 바리스터의 제작과 전기적 특성", 전기전자재료학회지논문지, 18권, 12호, p. 1117, 2005.
- [7] Y.-D. Ko, H. Kang, M. Jeong, S. Lee, J. Myoung, and I. Yun, "Neural network based modeling of PL intensity in PLD-grown ZnO thin films", Journal of Materials

Processing Technology, Vol. 159, p. 159, 2005.

- [8] G. Krokidis, J. P. Xanthakis, and A. A. Iliadis, "A modeling of the optical properties of the zinc oxide-zinc magnesium oxide double barrier system", *Solid-State Electronics*, Vol. 48, p. 2099, 2004.
- [9] Sanjay R. Bhatikar and Roop L. Mahajan, "Artificial neural-network-based diagnosis of CVD barrel reactor", *IEEE trans. semi. manufac.*, Vol. 15, No. 1, p. 71, 2002.
- [10] K. K. Lee, T. Brown, G. Dagnall, R. Bicknell-Tassius, A. Brown, and G. S. May, "Using neural networks to construct models of the molecular beam epitaxy process", *IEEE trans. semi. manufac.*, Vol. 13, No. 1, p. 34, 2000.
- [11] M. Marwah and R. L. Mahajan, "Building neural network equipment models using model modifier techniques", *IEEE trans. semi. manufac.*, Vol. 12, No. 3, p. 377, 1999.
- [12] B. W. Kim and G. S. May, "An optimal neural network process model for plasma etching", *IEEE trans. semi. manufac.*, Vol. 7, No. 1, p. 12, 1994.
- [13] S. Tazawa, S. Matsuo, and K. Saito, "A general characterization and simulation method for deposition and etching technology", *IEEE trans. semi. manufac.*, Vol. 5, No. 1, p. 27, 1992.
- [14] 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 Science*, Vol. 32, No. 1, p. 84, 2004.