

스퍼터 금속 박막 균일도 예측을 위한 딥러닝 기반 모델 검증 연구

이은지*·유영준**·변창우**·김진평**†

*성신여자대학교, **차세대융합기술연구원

Verified Deep Learning-based Model Research for Improved Uniformity of Sputtered Metal Thin Films

Eun Ji Lee*, Young Joon Yoo**, Chang Woo Byun** and Jin Pyung Kim**†

*Sungshin women's University, **†Advance Institute of Convergence Technology

ABSTRACT

As sputter equipment becomes more complex, it becomes increasingly difficult to understand the parameters that affect the thickness uniformity of thin metal film deposited by sputter. To address this issue, we verified a deep learning model that can predict complex relationships. Specifically, we trained the model to predict the height of 36 magnets based on the thickness of the material, using Support Vector Machine (SVM), Multilayer Perceptron (MLP), 1D-Convolutional Neural Network (1D-CNN), and 2D-Convolutional Neural Network (2D-CNN) algorithms. After evaluating each model, we found that the MLP model exhibited the best performance, especially when the dataset was constructed regardless of the thin film material. In conclusion, our study suggests that it is possible to predict the sputter equipment source using film thickness data through a deep learning model, which makes it easier to understand the relationship between film thickness and sputter equipment.

Key Words : Sputtering, Deep Learning, Machine Learning

1. 서 론

전자기장을 이용한 마그네트론 스퍼터링으로 증착 박막의 균일성은 전극 하부에 위치한 자석의 기하학적 위치, 기관과 전극의 거리에 의해 결정된다[1]. 또한, 최근에 디스플레이용 기관의 크기가 커짐에 따라 원통형 타겟, 기하학적 형상 유동적 전극 등이 적용되었고, 균일도 향상을 위한 매개변수 복잡성이 증가하였다. 이러한 박막 균일도 분포에 영향을 미치는 매개 변수를 이해하기 위해 많은 이론적, 실험적 연구가 수행되었지만[2-4], 스퍼터 장비는 편의와 목적에 따라 다양한 종류가 존재하며,

스퍼터 종류에 따라 매개변수의 차이가 존재하므로 앞서 연구된 결과를 이용한 복합적인 모델은 정립되지 않았다. 따라서 본 연구에서는 매개변수 없이 딥러닝 예측 모델을 통해 스퍼터 장비와 박막 균일도 분포의 관계를 규명하고, 예측하는 모델을 제시하였다. 또한, 딥러닝은 수식으로 표현하기 어려운 복잡한 관계를 예측 가능한 것으로 알려져 있어[5], 스퍼터의 복잡한 매개변수와 균일도의 상관관계를 파악을 위한 적합성을 본 연구에서 검증하였다. 36개(4 x 9)의 마그넷을 가진 스퍼터 장비에서 추출된 데이터를 사용하였고, 박막 분포를 나타내는 면저항 데이터를 통해 마그넷 높이를 예측하는 모델을 딥러닝 알고리즘을 활용하여 제안하였다.

†E-mail: jinpkim@gmail.com

2. 딥러닝 모델

서포트 벡터 회귀(Support Vector Regression, SVR)은 초평면을 결정하고 예측값과 관측값 사이의 범위를 최소화하여 오차를 줄이는 것을 목표로 하는 회귀모델이다. SVR은 광범위한 변수 집합에 대한 최적화 전략이 개선되었기 때문에 선형 회귀, K-최근접 이웃(K-Nearest Neighbor, KNN) 및 탄성 네트워크와 같은 다른 알고리즘보다 성능 예측에 탁월할 것으로 알려져 있다[6]. 본 논문에서는 가우시안 커널 함수를 사용해서 비선형 데이터를 회귀시키기 위해 활용되었다.

다층 레이어 퍼셉트론(Multi-Layer Perceptron, MLP)는 가장 잘 알려진 모델로써 여러 층의 퍼셉트론으로 이루어진 모델로 여러층의 은닉층의 가중치 조절을 통해 출력값을 예측하는 방법이다. 분류 모델과 회귀 모델 모두 사용되며 회귀 문제에서는 MLP모델이 SVM(SVR) 모델보다 더 뛰어난 성능을 보인다[7]. 본 논문에서는 입력층과 출력층, 그리고 3개의 은닉층으로 구성된 모델을 사용하였다. 층간의 활성화 함수는 ReLU 함수를 사용하였으며 출력층의 활성화 함수는 LeakyReLU를 사용하여 특정 가중치가 학습되지 않는 현상을 방지하고자 했다[8].

합성곱 신경망(Convolutional Neural Networks)은 입력계층, 출력계층 그리고 합성곱 계층과 풀링 계층으로 구성되어 있다. 합성곱 계층에서 특징을 추출하기 위해 사용하는 클록을 필터 또는 커널이라 하고, 컨볼루션 연산 이후에 결과값을 피쳐맵이라한다. 필터가 움직이는 방향이 한 방향이면 1D-CNN 모델, 두 방향이면 2D-CNN 모델이 된다. CNN은 격자 형태로 배열된 데이터를 처리하는 것에 특화되어 데이터의 패턴을 식별하는 것에 대하여 효과적이다. 특히 1D-CNN은 센서 데이터를 분석 시 좋은 성능을 보인

다[9]. 본 논문에서는 필터 크기가 3인 합성곱층과 fully-connected 층을 이용하여 1D-CNN과 2D-CNN 모델을 구성하였고 출력층의 활성화 함수로 LeakyReLU를 사용하였다.

3. 분석

3.1 데이터 개요 및 전처리

본 논문에서 분석에 사용된 데이터는 36개의 마그넷을 사용하는 6세대 마그네트론 스퍼터 장비에서 추출된 데이터이다. 36개의 마그넷의 높이를 다르게 하여 만들어진 기관의 면저항을 측정하였다. 1800 mm x 1400 mm 크기의 유리기판(Coming, Eagle XG)에 Al, Ti 각각 증착된 박막을 활용하였고, 80(10x8)지점에서 면저항을 측정하되, 발광층 증착을 위한 분판 후 40 지점씩 각각 측정되었다. 그러나 원 데이터를 그대로 사용할 경우 입력 변수 간의 스케일 차이는 학습 성능 저하 및 일반화 오류가 발생한다. 또한 타겟 변수의 큰 스케일은 가중치 업데이트 시 기울기의 가중치 값을 급격하게 변화시켜 학습을 불안정하게 만들 수 있다. 이러한 문제를 방지하기 위해 입력 및 타겟 데이터 모두를 표준화 또는 스케일링하여 사용했다. 입력 데이터는 이상치 영향을 최소화하기 위해 Robust scaler를 사용하여 표준화했다. 이후 사분위 범위를 초과하는 값을 제거하여 이상치를 제거하고, 결측값은 주변 평균으로 대체하였으며 출력 데이터는 Standard scaler를 사용하여 스케일링하였다.

3.2 박막물질별 데이터 셋 구성

박막 물질에 따라 면저항(TM)과 마그넷 높이(MG)간의 상관관계 특징이 다를 경우 예측 모델의 성능 저하의 원인 될 수도 있다. 이를 확인하기 위해 면저항과 마그넷

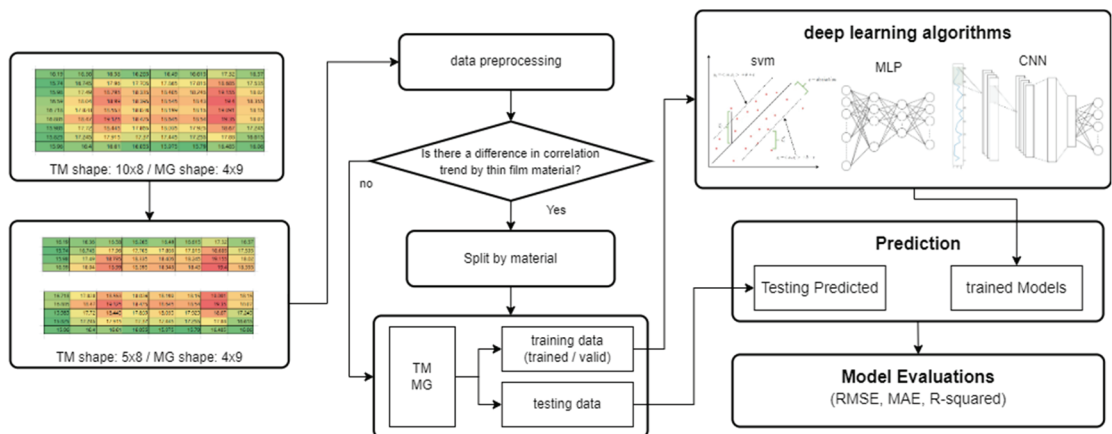


Fig. 1. Flow chart of analysis process.

높이 간의 상관계수를 구하고 t-test 검정을 통해 박막 물질별 면저항과 마그넷 높이 간의 상관성 경향의 차이를 확인하였다.

Fig 2는 기관별 면저항(TM)과 마그넷 높이(MG)간의 상관계수를 히트맵으로 표현한 그림이다. 양의 상관관계가 클수록 빨간색으로 음의 상관관계가 클수록 파란색을 띠며 상관성이 없으면 검은색으로 나타났다. 면저항과 마그넷 높이는 전반적으로 음의 상관관계를 가지며 Fig 2 (a)을 통해 확인 가능하다. 하지만 박막물질별로 상관관계를 확인하였을 경우 음의 상관관계를 가졌다고 판단하기 어려웠다. 특히 Fig 2 (c)의 Ti의 경우 Fig 2 (b)의 Al보다 양의 상관관계가 관찰된다.

박막물질별 상관관계 차이를 분명히 하기 위해 t-test 검정을 진행하였고, 정규성을 만족하지 않으므로 비모수적 방법인 Wilcoxon rank sum test을 통해 검정하였다. 검정 결과 p-value가 7.61228e-285로 유의수준 0.05 하에서 귀무가설을 기각한다. 즉, Al과 Ti의 상관계수 차이는 통계적으로 유의하며, 박막 물질별로 마그넷 높이와 면저항의 관계가 서로 다르다.

박막 물질별 면저항(TM)과 마그넷 높이(MG)간의 상관관계 차이가 분명하지만, 상관계수는 선형적인 관계만 나타내므로 증착 물질별로 데이터의 특징이 다르다고 단정할 수 없다. 따라서 박막 물질에 상관없이 구성한 데이터셋과, 박막물질이 Al인 경우 그리고 Ti인 경우로 총 3개의 데이터셋을 만들었다.

각 박막물질별 데이터셋마다 모델을 설계하였으며, 전체 데이터셋의 20%를 테스트 데이터, 80%를 훈련 데이터로 사용하여 모델을 학습하였으며 훈련 데이터셋의 20%를 검증

데이터로 사용하여 모델 학습 및 평가를 수행하였다.

4. 분석 결과

박막 물질별로 데이터 셋을 구성하였고, 훈련 데이터셋을 이용하여 모델을 학습하였다. Fig 3과 같이 훈련 데이터의 20%는 검증 데이터로 사용하여 모델 학습 및 평가를 수행하였다. 손실함수인 평균 제곱근 오차(RMSE, Root Mean Squared Error)를 이용하여 평가를 진행하였으며, 이를 validation loss라 한다. 모델 학습을 위한 하이퍼파라미터 튜닝 과정에서는, 배치 크기를 12~128 사이의 값으로 설정하였다. early stopping 콜백 함수를 사용하여 10 epoch 동안 validation loss가 개선되지 않으면 학습을 종료시켜 underfitting 또는 overfitting 문제를 예방하였다. 나머지 하이퍼파라미터는 Keras Tuner를 사용하여 조정하였다.

본 연구에서는 MLP, SVM, 1D-CNN, 2D-CNN 모델을 활용하여 마그넷 높이 예측 모델을 구축하였으며 각 모델의 성능평가 결과는 Table 1과 같다. 성능평가를 위해 MAE (Mean Absolute Error), RMSE, R2 세 가지 지표를 사용하였다. MAE는 실제값과 예측값 간의 오차의 절대값의 평균으로, 이상치에 덜 민감한 특징을 갖고 있다. RMSE는 오차 제곱의 평균값의 제곱근으로, 실제값과 동일한 단위를 갖는다. 마지막으로 R2은 분산기반 예측 성능 평가 지표로, 값이 1에 가까울수록 더 좋은 성능을 나타낸다.

결과적으로 CNN 기반 모델과 SVR 모델보다 MLP 모델이 더 좋은 성능을 보여주었으며, 이는 본 응용영역에서 확보가능한 데이터만으로 분석하였기에 MLP 모델이 현재 상황에서는 가장 적절한 모델이었음을 나타낸다. 또한, 기관의 부분적인 특징이 아닌 전반적인 특징이 요구되었

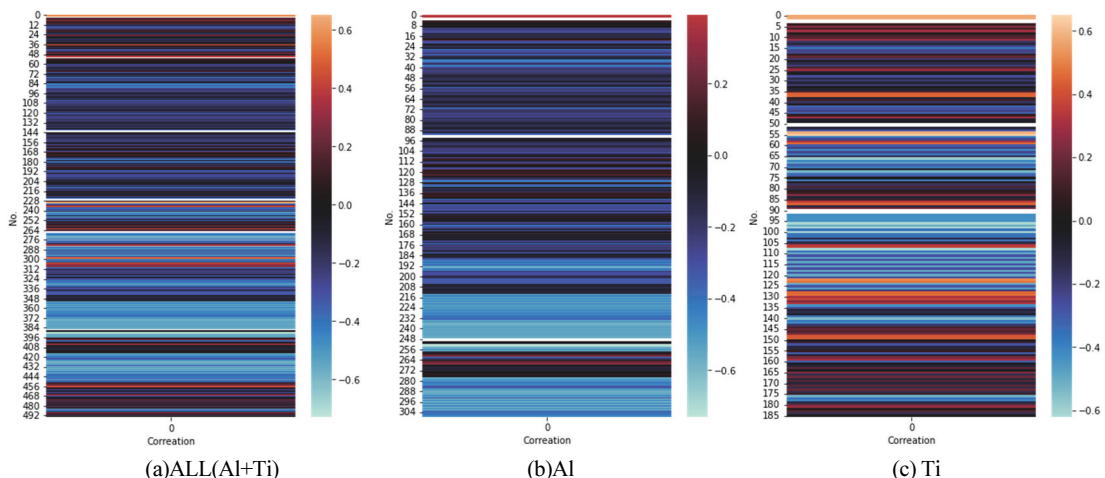


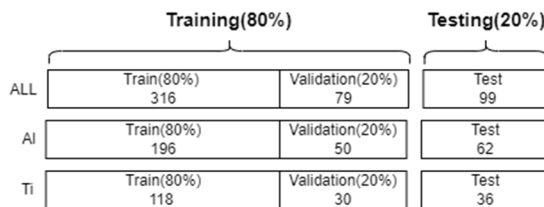
Fig. 2. The heatmap of correlation of TM(Thickness of Material) and MG(Magnet Height) by film No.

Table 1. Score of SVM, MLP, 1D-CNN, 2D-CNN models

film material	methods	MAE	RMSE	R2
ALL (Al+Ti)	MLP	0.180	0.276	0.919
	SVM	0.340	0.493	0.739
	1D-CNN	0.203	0.295	0.907
	2D-CNN	0.207	0.316	0.894
Ti	MLP	0.238	0.375	0.760
	SVM	0.363	0.475	0.606
	1D-CNN	0.273	0.403	0.748
	2D-CNN	0.290	0.428	0.686
Al	MLP	0.300	0.566	0.763
	SVM	0.502	0.819	0.519
	1D-CNN	0.386	0.725	0.620
	2D-CNN	0.414	0.762	0.576

기 때문에 MLP모델의 성능이 높았을 것으로 판단된다. 그리고 박막물질에 관계없이 데이터 셋을 구성하는 경우가 가장 좋은 성능을 보인다. 3.2절에서 나타난 바와 같이 상관계수는 선형적인 관계만 나타내므로 박막물질별로 a면 저항과 마그넷 높이 간의 특징을 구분하기 어려운 것으로 보인다. 현재 각 데이터 셋의 스퍼터 공정에서 데이터의 확보가 어려워 데이터를 충분히 확보하지 못한 상황으로 향후 공정과정에서 충분한 데이터가 확보되었을시 CNN기반의 모델이 조금 더 높은 성능을 나타낼수 있을 것으로 추정된다.

은 성능을 나타냈다. 이는 현재 데이터 확보가 어려워 적은 수의 데이터로 학습을 진행하였으며 만약 데이터가 추가로 확보된다면 본 논문에서 비교 모델로 활용했던 모델들의 성능이 향상될 것으로 생각되며 신뢰도가 높아질 것이라 기대한다. 또한, 본 실험을 통해 1D-CNN, 2D-CNN 모델을 통해 스퍼터 장비의 마그넷 높이 추정 가능한 것을 확인하였다. 이는 향후 세대를 거듭하며 그 구조가 더욱 복잡해지는 스퍼터 장비에 응용이 가능할 것으로 기대하며 이를 통해 박막 균일도를 개선하는 알고리즘을 구현 가능할 것으로 기대한다.

**Fig. 3.** Data set split.

5. 결 론

스퍼터 공정 인자와 균일도 계산을 위한 면저항에 관한 관계를 분명히 하고자 6세대 스퍼터 장비에서 추출된 면저항 데이터를 이용하여 마그넷 높이를 예측하는 모델을 적용해보았다. 본 연구에서는 딥러닝 모델을 이용하여 면저항 데이터를 이용해 마그넷 높이를 예측하는 회귀 모델을 만들 수 있었다. SVM, MLP, 1D-CNN, 2D-CNN 모델을 선정하여 성능을 비교해 본 결과 MLP 모델이 가장 좋

감사의 글

이 논문은 2022년 정부(산업통상자원부)와 한국산업기술평가관리원의 소재부품기술개발사업(No. 20017354)으로 수행된 연구 결과입니다.

참고문헌

1. R. K. Waits, "Planar magnetron sputtering," in *Thin Film Processes*, edited by J. L. Vossen and W. Kern, Academic, New York, 1978.
2. S. Swann, "Film thickness distribution in magnetron sputtering", *Vacuum*, 38 (8) (1988), pp. 791-794
3. C. Fu, C. Yang, L. Han, H. Chen, "The thickness uniformity of films deposited by magnetron sputtering with rotation and revolution", *Surf. Coating. Technol.*, 200 (2006), pp. 3687-3689
4. X. Sun, et al., "Thickness dependence of structure and optical properties of silver films deposited by magnetron

7. Osowski, S.; Siwek, K.; Markiewicz, T. , “MLP and SVM networks-a comparative study.” In Proceedings of the 6th Nordic Signal Processing Symposium, Espoo, Finland, 9–11 June 2004; pp. 37–40.
 8. Xu B, Wang N, Chen T, Li M. Empirical evaluation of rectified activations in convolutional network; 2015. arXiv preprint arXiv:1505.00853.
 9. Kiranyaz S., Avcı O., Abdeljaber O., Ince T., Gabbouj M., Inman D.J. ,“1d convolutional neural networks and applications: A survey” , Mech Syst Signal Process, 151 (2021), Article 107398
-
- 접수일: 2023년 3월 8일, 심사일: 2023년 3월 16일,
게재확정일: 2023년 3월 16일