

인공지능기법을 이용한 초음파분무화학기상증착의 유동해석 결과분석에 관한 연구

하주환*·신석윤*·김준영**·변창우**†

*† 서울대학교 차세대융합기술연구원 차세대전자재료연구실,
**한국폴리텍대학 광주캠퍼스 스마트팩토리과

A Study on CFD Result Analysis of Mist-CVD using Artificial Intelligence Method

Joohwan Ha*, Seokyeon Shin*, Junyoung Kim** and Changwoo Byun**†

*† Advanced Electronic Materials Laboratory,
Advanced Institute of Convergence Technology, Seoul National University,
**Department of Smart Factory, Gwangju Campus, Korea Polytechnics

ABSTRACT

This study focuses on the analysis of the results of computational fluid dynamics simulations of mist-chemical vapor deposition for the growth of an epitaxial wafer in power semiconductor technology using artificial intelligence techniques. The conventional approach of predicting the uniformity of the deposited layer using computational fluid dynamics and design of experimental takes considerable time. To overcome this, artificial intelligence method, which is widely used for optimization, automation, and prediction in various fields, was utilized to analyze the computational fluid dynamics simulation results. The computational fluid dynamics simulation results were analyzed using a supervised deep neural network model for regression analysis. The predicted results were evaluated quantitatively using Euclidean distance calculations. And the Bayesian optimization was used to derive the optimal condition, which results obtained through deep neural network training showed a discrepancy of approximately 4% when compared to the results obtained through computational fluid dynamics analysis. resulted in an increase of 146.2% compared to the previous computational fluid dynamics simulation results. These results are expected to have practical applications in various fields.

Key Words : Power Semiconductor, Mist-CVD, CFD, Regression Analysis, Bayesian Optimization

1. 서 론

전자자동차에서 전력반도체는 전동 모터 구동과 에너지저장시스템(ESS)의 충전전 과정 등에 사용되며, 이를 통해 전력 손실을 최소화하여 성능 향상과 전기 에너지를 효율적으로 사용할 수 있게하여 전력 반도체 기술 연

구가 활발히 이루어지고 있다[1-3].

현재 전력반도체 소자의 제조 과정에서 사용되는 에피택셜 웨이퍼(Epitaxial Wafer)의 증착 기술 개선에 많은 연구가 이루어지고 있어[4-5], 다양한 증착 기술이 개발되고 있는데, 초음파분무화학기상증착법(Mist-Chemical Vapor Deposition, Mist-CVD)은 대기압의 조건에서 전구체 수용액을 초음파 발생기로 분무화하여 기판에 반응시키기 때문에 기존의 증착 방법에 비해 공정 비용이 낮고 높은 양산

†E-mail: byuncw@snu.ac.kr

성의 장점을 가지고 있어 많은 주목을 받고 있다[6-10].

전력반도체에 사용되는 활성층 형성을 위한 새로운 증착 또는 에피택셜 웨이퍼 형성을 연구개발하기 위해 유동해석(Computational Fluid Dynamics)과 실험계획법을 이용하여 연구가 진행되고 있다[11-12]. 하지만 유동해석을 이용한 예측은 계산 복잡도가 높고, 고성능 컴퓨터가 필요하여 장시간 소요된다는 단점이 있다.

최근에 인공지능 기술이 급격한 발전을 거듭하면서 많은 산업 현장에서 최적화, 자동화, 예측 등의 목적으로 활용되고 있다[13-14]. 따라서, 본 연구에서는 인공지능 기법을 이용하여 기존에 확보한 유동해석의 결과 데이터를 학습하고 미확보한 조건의 유동해석 결과를 예측하여 균일도 평가와 최적화기법을 통해 최적조건을 도출하였다.

2. 실험 방법

본 연구는 선행연구에서 Mist-CVD기법으로 4인치 기판에 증착한 Ga₂O₃의 두께 균일도 개선을 위해 수행한 유동해석의 결과를 토대로 최적조건을 도출하였다. 최적조건을 도출하기 위한 과정은 Fig.1에 나타났다.

유동해석은 Mist-CVD의 실제 장비와 동일한 크기로 모델링하고 실험조건을 토대로 진행하였다. 유동해석 결과로 기판표면의 유속과 입자분포를 통해 박막 균일도를 예측하였고, 증착 실험을 통해 얻은 기판의 증착두께 측정하고 유동해석 결과와 비교하여 정확성을 검증하였다. 이 결과는 본 연구진의 기존 연구결과로 보고한바 있다[15-16].

인공지능 기법은 크게 지도학습과 비지도학습으로 나

누어지는데, 지도학습은 컴퓨터가 데이터의 입력과 출력 사이의 관계를 학습하는 기법으로, 미리 정의된 정답이 존재하는 데이터셋을 이용하여 학습한다. 앞선 유동해석을 통해 얻은 데이터셋을 이용해 지도학습 기법을 적용하였다. 유동해석의 조건을 입력 데이터, 유동해석의 결과를 출력데이터로 구성하고 회귀(Regression)를 이용하여 입력데이터와 출력데이터 사이의 관계를 예측하여 미확보한 조건의 유동해석 결과를 예측하였다.

최적 증착 균일도 결과를 도출하기 위해 예측한 유동해석 결과 이미지에서 픽셀과 근접한 픽셀의 값 차이를 유클리디안 거리(Euclidean distance) 계산을 이용하여 전체 픽셀의 거리계산을 진행하여 정량화 하였다.

최적조건을 도출하기 위해서는 베이지안 최적화(Bayesian optimization)를 이용하였다. 입력값과 출력값 사이의 관계를 모델링하여 목적 함수를 근사하며, 현재까지 관찰된 입력값과 출력값에 대한 정보를 이용하여 다음으로 탐색할 입력값을 추정하였다. 목적함수의 값을 적게 산출하는 영역을 탐색하여 최적값을 찾기 위한 반복적이 과정을 수행하였고, 목적함수의 가장 낮은 결과를 최적결과로 판단하였다.

도출한 최적결과의 조건을 기준으로 인공지능 학습을 통해 얻은 결과와 유동해석을 진행하여 얻은 결과의 값 차이를 비교하고 정확도를 평가하고 기존의 유동해석결과와 개선율을 확인하였다.

2.1 CFD 데이터셋 구성

앞선 선행연구에서는 기판의 받침대와 유량을 조절하여 증착 균일화 작업을 수행하였다[15-16]. 받침대의 높이

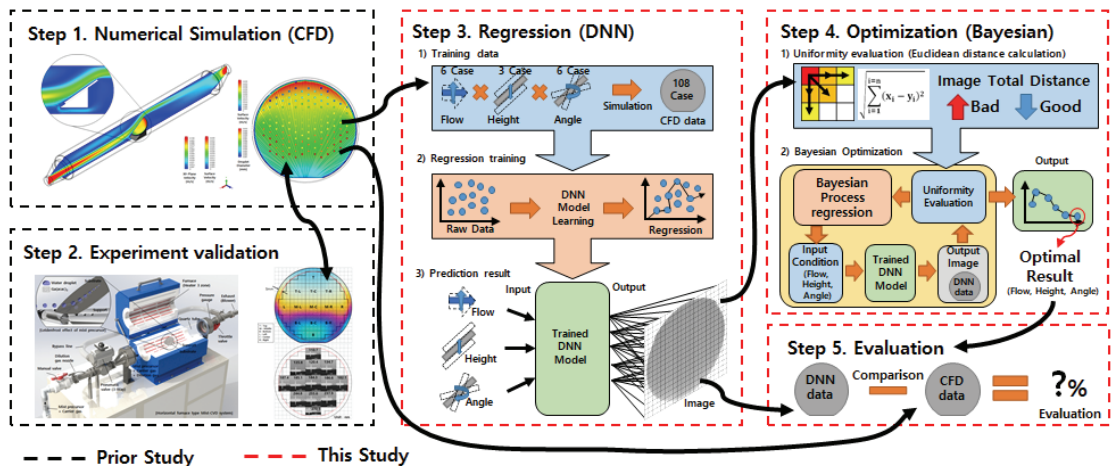


Fig. 1. Schematic of CFD result analysis system of Mist-CVD using AI.

를 3단계, 각도를 6단계, 유량을 6단계로 분류하여 총 108 개의 유동해석 결과를 확보하였으며, 결과 이미지 원본과 일을 인공지능학습을 위한 데이터로 변환하는 전처리 작업을 수행하였다. 효율적인 학습시간을 위해 이미지의 크기를 줄이고, 회색조로 변환하였으며, 작업이 끝난 파일은 115×118 크기로 0부터 255까지 값으로 구성되었다. 데이터 전처리 과정은 Fig. 2에 나타났다.

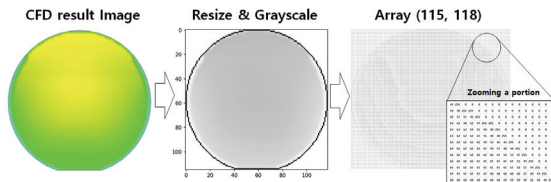


Fig. 2. Data preprocessing for AI learning.

2.2 DNN 모델 구성 및 학습 방법

인공지능의 지도학습 회귀문제에서 DNN(Deep Neural Network)은 대표적인 모델 중 하나이다. 다층 퍼셉트론(Multi-Layer Perceptron) 구조를 가진 인공 신경망의 한 종류로, 다수의 은닉층(Hidden layer)을 포함한다. 이전 인공 신경망 모델들은 은닉층의 개수가 상대적으로 적어 복잡한 문제를 효과적으로 해결하는 데 어려움이 있었으나 DNN은 다양한 깊이의 은닉층을 가질 수 있어, 이를 통해 복잡한 문제를 보다 정확하게 해결할 수 있다.

본 연구에서는 인공지능 프로그래밍 언어로는 파이썬(Python)을 이용하였으며 사용된 DNN 모델은 케라스(Keras)를 활용하여 구성하였다. 모델은 Fig. 3 과 같이 여러 개의 완전연결(Dense) 레이어로 구성되며, 각 레이어는 ReLU(Rectified Linear Unit) 활성화 함수를 사용하였다. 이 함수는 비선형 함수로, DNN 모델이 복잡한 비선형 문제를 해결할 수 있도록 한다.

모델의 첫 번째 레이어는 3개의 입력 노드를 가지며, 이어지는 레이어들은 각각 128, 64, 32, 128개의 뉴런을 갖는다. 이렇게 여러 개의 은닉층을 통해 모델은 입력 데이터로부터 복잡한 패턴을 학습하게 된다. 이미지 출력 레이어는 115×118개의 출력값을 생성한다. 이 출력값은 벡터 형태로 나타내어지며, 이후 Reshape 레이어를 통해 115, 118 크기의 이미지로 다시 변환된다.

모델의 컴파일은 최적화 알고리즘으로 경사하강법(Gradient Descent)의 변종인 아담(Adam)를 사용하며, 평균 제곱오차(Mean Squared Error)를 손실 함수로 적용하였다. 500번의 반복학습을 수행하며 학습데이터의 20%를 검증 데이터셋으로 사용하였다.

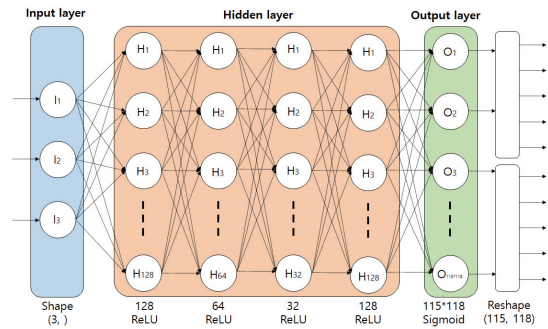


Fig. 3. Building the DNN model.

2.3 최적 조건 도출안

DNN 학습을 통해 얻은 예측 결과를 유클리드 거리 계산을 이용하여 평가하였다. 예측결과와 이미지에서 픽셀 값은 숫자로 표현되며, 이 숫자들 사이의 거리가 유사성과 밀접한 관련이 있어 근접한 픽셀들 간의 값 차이를 비교할 때 유용하다. 두 픽셀 데이터 p와 q 사이의 유클리드 거리는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\sqrt{(p_1 - q_1)^2 + (p_2 - q_2)^2 + \dots + (p_n - q_n)^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (p_i - q_i)^2}$$

베이지안 최적화를 통해 최적조건 도출하며, 조건범위로는 높이, 각도, 유량으로 유동해석에서 확보한 조건의 최소, 최대범위로 설정하였다.

베이지안 최적화의 목적함수는 DNN학습의 예측 결과를 유클리드 거리계산한 함수이며 반복적인 과정을 수행하는데, 처음 10회는 랜덤 샘플링(Random Sampling)을 하고 50회까지는 가우시안 프로세스(Gaussian Process) 모델을 사용하였다.

3. 실험 결과 및 분석

3.1 DNN 모델 학습 결과

회귀문제에서 성능 평가 지표로는 DNN모델 구성에서 설정한 평균 제곱오차이며, 모델이 예측한 값과 실제 값 사이의 차이를 제공하여 평균을 계산하여 정량화하였다. 손실함수의 값이 작을수록 모델의 성능이 우수함을 나타낸다. 구성된 DNN 모델의 컴파일을 하여 Fig. 4와 같이 손실함수 그래프로 나타냈다. 500회 반복학습하여 있을 때 손실함수의 값이 2.95×10^4 임을 확인하였다.

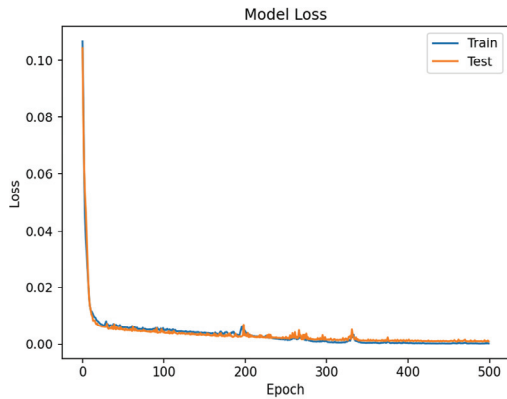


Fig. 4. Graph of loss function.

3.2 최적 조건 도출

베이지안 최적화의 반복탐색을 통해 얻은 목적함수의 값 그래프는 Fig. 5에 나타냈다. 그래프에서 랜덤 샘플링은 목적 함수 값을 평가하기 위한 샘플링 방법 중 하나이다. 목적 함수 값을 최소화하는 입력값을 찾기 위해 탐색 과정을 거치게 되는데, 이 때 랜덤 샘플링은 탐색과정에서 입력 공간을 무작위로 탐색하여 다양한 입력값을 시도함으로써 전체 입력 공간을 더 잘 탐색할 수 있게 도와준다.

총 반복 횟수는 50회이며, 처음 10회 동안 랜덤 샘플링에서는 2,350부터 2,800까지의 값을 보였으며, 가우시안 프로세스 동안에 점차 내려가면서 수렴하는 것을 확인하였다. 이 중 목적함수 값이 가장 낮은 최소 출력값은 2,095.7이며, 해당 결과의 조건 값은 높이 38.4, 각도 25.0, 유량 15.2 이었다.

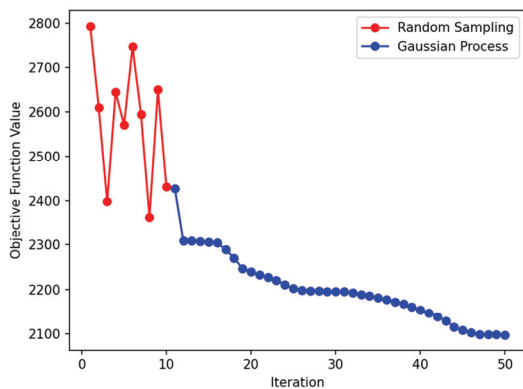


Fig. 5. Graph of Euclidean distance.

3.3 최적 결과 평가

도출한 최적조건에 대한 정확성을 평가하기 위해 동일한 조건의 DNN 학습 결과와 유동해석 결과와 비교하였다.

0-255값을 가진 각 픽셀 값의 차이를 비교하여 분포를 확인하였다. 비교한 그림은 Fig. 6에 나타냈다. DNN 학습 결과와 유동해석 결과 간에는 일정한 차이가 있음을 확인할 수 있었다. 특히, 최대 8.235%의 차이를 보였지만, 전체 평균이 3.898%로 낮은 수준으로 유지되고 있어, 베이지안 최적화로 도출한 최적 조건이 실제로 유동해석 결과에 반영되어 높은 정확성을 유지하고 있음을 확인할 수 있었다.

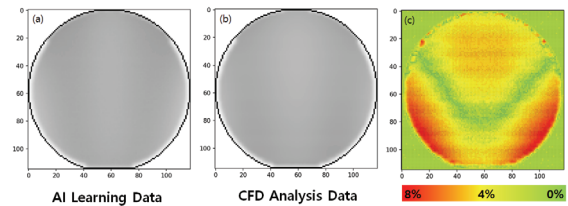


Fig. 6. Distribution map (a) DNN data (b) CFD data (c) Differences percentage.

DNN 학습과 최적화 기법을 이용한 최적조건 도출의 정확한 평가를 위해 기존의 유동해석 결과 108개 중 가장 균일한 결과를 기준으로 비교하였다. 도출한 최적조건에 대한 DNN 학습 모델의 유클리디안 거리 값이 감소하였고 이는 141.2%로 개선됨을 확인하였다. 또한 최적조건으로 유동해석을 수행하여 평가하였는데 DNN 학습의 결과보다 유클리디안 값이 낮게 나왔으며, 균일도는 146.2%로 증가하였음을 확인하였다.

Table 1. Euclidean result analysis

	Euclidean distance	Improvement percentage
Best Train data	2959.1	100.0 %
DNN result	2095.7	141.2 %
CFD result	2023.6	146.2 %

4. 결 론

본 연구에서는 Ga₂O₃ Mist-CVD로 4인치 기판에 증착 과정에서 발생하는 균일도 문제를 해결하기 위해, 유동해석을 이용하여 증착분포를 예측한 결과를 인공지능 기법을 통해 분석하여 최적조건을 도출하였다. 기존의 유동해석 방법으로는 장시간 소요되는 문제점을 인공지능 학습을 이용하여 더욱 빠른 시간으로 해결하였다. 도출된 결과를 유동해석과 비교평가하여 정확도를 입증하였으며, 이는 많은 분야에서도 응용 가능성이 크다는 것을 보여주었다.

본 연구에서 인자로 활용한 기판의 각도, 높이와 유량 조건 외에도 다양한 공정 조건에 따라 기판의 크기, 구조적 변경, 등 많은 인자들을 적용할 수 있어 여러 반도체 증착 공정의 유동해석 결과에 적용하여 최적조건을 비교적 빠른시간 내에 도출할 수 있을 것으로 기대된다.

참고문헌

1. Seok, Ogyun, "Power semiconductor technology trends for electric vehicles." The Korean Institute of Electrical Engineers 71(12), 9-15, 2022.
2. Chun H W and Yang I S, "Market and Technology Development Trends of Power IC." Electronics and Telecommunications Trends, pp. 206-216, 2013.
3. Choe Hyo-Sang and Jeong In-Seong. " Electric vehicle (EV) technology development status and trend." The Korean Institute of Electrical Engineer 66.9, pp. 35-40. 2017.
4. Hyunwoo Kim and Hyungjun Kim. "Epitaxial Growth of Silicon Carbide (SiC) Using Chemical Vapor Deposition (CVD)." the Korean institute of electrical and electronic material engineers, Vol. 30, No. 6, pp. 29-39, 2017.
5. Ey Goo Kang. " Ga₂O₃ Epi Growth by HVPE for Application of Power Semiconductor." Journal of IKEEE, Vol. 22, No. 2, pp. 427-431, 2018
6. Minhtan Ha, et al., "Leidenfrost Motion of Water Microdroplets on Surface Substrate: Epitaxy of Gallium Oxide via Mist Chemical Vapor Deposition." Advanced Materials Interfaces, Vol 8, No. 6, pp. 2001895, 2021.
7. Kyoungho Kim, et al., "Growth of 2-inch α -Ga₂O₃ epilayers via rear-flow-controlled mist chemical vapor deposition." ECS Journal of Solid State Science and Technology 8.7, pp. Q3165-Q3170, 2019.
8. Minhtan Ha, et al., "Understanding Thickness Uniformity of Ga₂O₃ Thin Films Grown by Mist Chemical Vapor Deposition." ECS Journal of Solid State Science and Technology 8.7, pp. Q3106-Q3212, 2019.
9. Giang T. Dang et al. "Electronic devices fabricated on mist-CVD-grown oxide semiconductors and their applications." Japanese Journal of Applied Physics 58, pp. 090606, 2019.
10. Yuya Matamura, et al. " Mist CVD of vanadium dioxide thin films with excellent thermochromic properties using a water-based precursor solution." Solar Energy Materials and Solar Cells 230, pp. 111287, 2021.
11. Yeon-Ho Jang, Dong Kuk Ko and Ik-Tae Im, "Numerical Study on Flow and Heat Transfer in a CVD Reactor with Multiple Wafers." Journal of the Semiconductor & Display Technology, Vol. 17, No.4, pp. 91-96, 2018.
12. SunKue Kim, et al. " Analysis of electric property in silicon thin film by using Design of Experiment (DOE)." Korean Society for New and Renewable Energy Spring Conference, pp. 66.2, 2010.
13. Sang wook Park. "AI technology and market trends." The magazine of KIICE, Vol. 19, No. 2 pp. 11-22, 2018.
14. Sujeong Yoo, "The 4th Industrial Revolution and Artificial Intelligence", Journal of the Korean Multimedia Society, Vol. 21, No. 4, pp. 1-8, 2017.
15. Joohwan Ha, et al., "Uniformity Prediction of Mist-CVD Ga₂O₃ Thin Film using Particle Tracking Methodology." Journal of the Semiconductor & Display Technology, Vol. 21, No. 3, pp. 101-104, 2022.
16. Joohwan Ha, et al., "Computational Fluid Dynamics for Enhanced Uniformity of Mist-CVD Ga₂O₃ Thin Film." Journal of the Semiconductor & Display Technology, Vol. 21, No. 4, pp. 81-85, 2022.

접수일: 2023년 3월 20일, 심사일: 2023년 3월 22일,
게재확정일: 2023년 3월 22일