

HfO₂ 박막 특성에 대한 주성분 분석을 이용한 신경망 모델링 PCA-based Neural Network Modeling for HfO₂ Thin Film Characteristics

고영돈, 이정환, 함문호*, 명재민*, 윤일구
연세대학교 전기전자공학과, 연세대학교 금속공학과*

1. 서론

고집적화 및 시스템 온 칩(System-On-Chip)에 관련된 산업들의 수요가 증가와 함께 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 가짐으로 인해서 두각을 나타내고 있는 유전 물질 중의 하나이다 [1].

본 논문에서는 HfO₂ 박막의 특성인 accumulation capacitance (C_{acc})와 hysteresis index (H)에 대하여 주성분 분석을 이용한 신경망 모델링을 실시하였다. Latin Hypercube Sampling (LHS)을 이용하여 생성된 가중치과 바이어스를 신경망 모델링에 사용하였으며 주성분 분석을 이용한 신경망 모형으로부터 HfO₂ 박막의 전기적 특성들을 예측함으로써 반도체 공정 조건의 변화에 따른 박막의 특성을 예측하는데 좋은 결과를 가져올 수가 있음을 확인하였다.

2. 본론

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 Torr로 유지하였다. Si 기판과 HfO₂ 박막 사이의 계면 특성을 향상시키기 위해 N₂ 가스 환경에서 700 °C에서 2분간 어닐링을 수행하였다.

450~550 °C 기판온도, 3~5 sccm Ar flow, 그리고 3~5 sccm O₂ flow를 공정변수들로 지정하였다. 중심점을 포함한 full factorial design matrix를 표 1에 나타내었다[2]. 반응 변수인 Accumulation capacitance는 accumulation region에서의 MOS 구조가 갖는 정전용량을 나타내며, hysteresis index는 bi-directionally voltage sweep에서의 hysteresis loop의 전압변위를 나타낸다. 오류 역전과 알고리즘을 사용하였으며 두개의 은닉층에 각각 4개의 뉴런을 사용하였으며 학습률은 0.008과 0.0004, 적률계수는 0.005와 0.007을 각각 사용하였다. 활성화함수로는 a nonlinear sigmoid transfer function을 사용하였다. Accumulation capacitance와 hysteresis index에 대한 주성분 분석에 대한 cumulative variance와 모델링 결과를 표 2에 나타내었다.

3. 결과

Accumulation capacitance와 hysteresis index에 대한 주성분 분석을 이용한 신경망 모델링 결과를 그림 1에 나타내었다. 그림으로부터 알 수 있듯이 실험 데이터와 신경망 모델링 결과의 데이터들이 선형적인 경향을 보여주고 있음으로서 좋은 결과의 모형이 형성되었음을 알 수 있다. 이렇듯, Latin

Hypercube Sampling과 주성분 분석을 이용한 신경망 모형은 다변량 데이터로부터 새로운 형태의 작은 규모의 데이터를 생성하여 모형을 예측함으로써 반응 변수에 대한 다양한 공정조건에 따른 HfO₂ 박막의 특성들을 예측할 수 있으며 이를 통해서 실제 공정상의 생산성 향상과 수율 향상을 가져올 수 있다.

감사의 글

본 연구는 정보통신부 및 정보통신연구진흥원의 대학 IT연구센터 육성·지원사업의 연구결과로 수행되었음(IITA-2006-(C1090-0603-0012)).

참고문헌

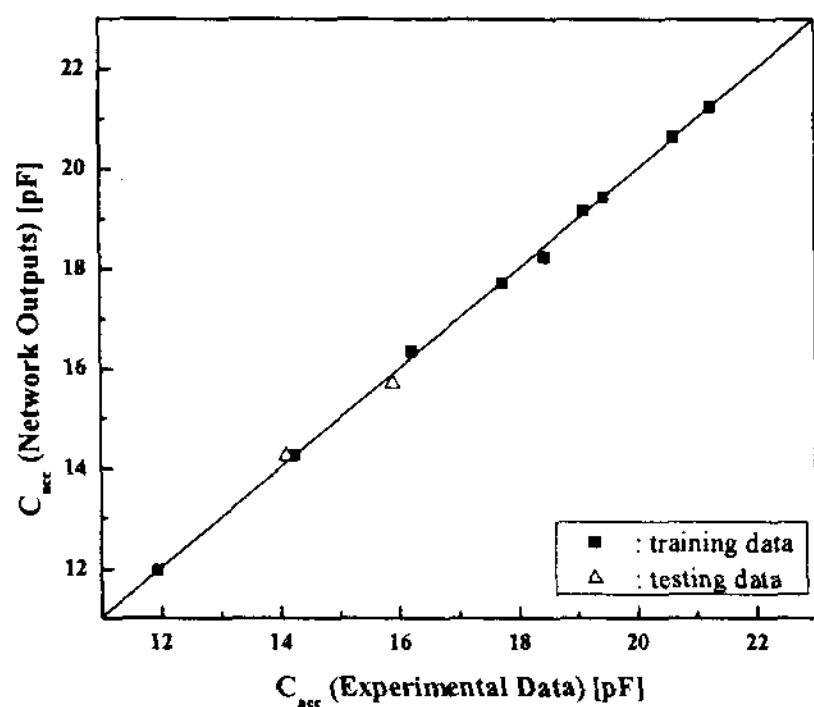
- [1] J. Zhu, Y. R. Li, and Z. G. Liu, "Fabrication and characterization of pulsed laser deposited HfO₂ films for high-k gate dielectric applications," J. Phys. D: Applied Phys. Vol. 37, P. 2896, 2004.
- [2] R. H. Mayers, and D. C. Montgomery, Response Surface Methodology, New York:Wiley, 1995.

표 1. D-optimal design matrix

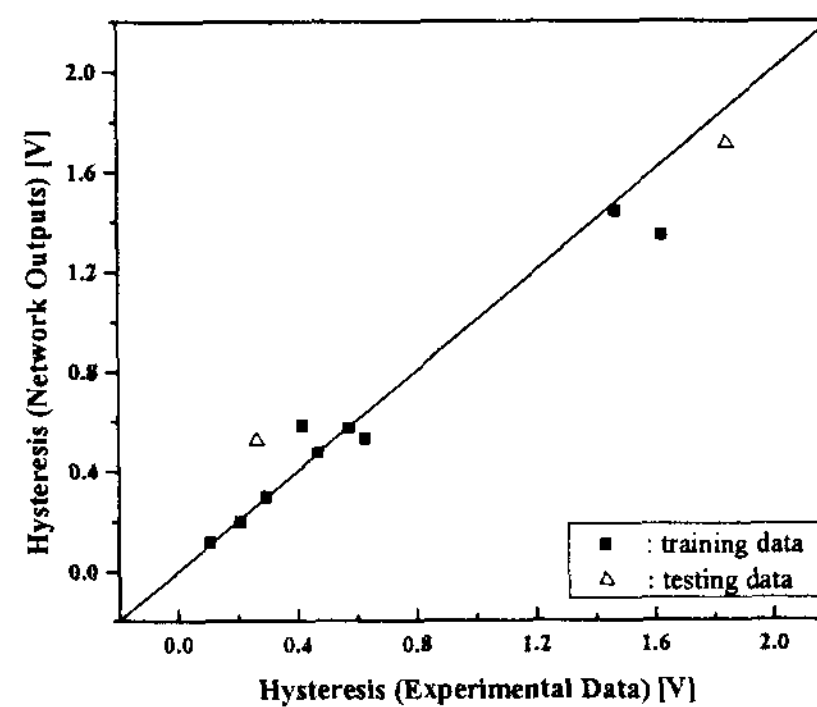
Run	T _{sub} [°C]	Ar [sccm]	O ₂ [sccm]	Remark
1	450	3	3	Full Factorial Design
2	450	3	5	
3	450	5	3	
4	450	5	5	
5	550	3	3	
6	550	3	5	
7	550	5	3	
8	550	5	5	
9	500	4	4	Center point

표 2. The summary of the cumulative variance and neural network results

Characteristics	PCs	Cumulative variance [%]	Training			Testing		
			SSE	RMSE	R-squared [%]	SSE	RMSE	R-squared [%]
Accumulation capacitance	6	91.48	0.06330	0.08895	99.91	0.05510	0.23473	96.51
Hysteresis	6	91.48	0.11938	0.12216	94.90	0.08442	0.29055	93.22



(a)



(b)

그림 1. PCA-based neural network modeling results : (a) the accumulation capacitance and (b) the hysteresis index