



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0107322
(43) 공개일자 2025년07월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06N 3/08 (2023.01) C23C 16/455 (2006.01)
C23C 16/52 (2018.01)
(52) CPC특허분류
G06N 3/08 (2023.01)
C23C 16/45553 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2024-0001460
(22) 출원일자 2024년01월04일
심사청구일자 2024년01월04일

(71) 출원인
한국기술교육대학교 산학협력단
충청남도 천안시 동남구 병천면 충절로 1600 (한국기술교육대학교내)
(72) 발명자
김영철
충청남도 천안시 동남구 청당4로 60, 108동 1403호 (청당동, 청당동 한양수자인 블루시티)
김재선
경상북도 경주시 안강읍 피일길 86-17, 402동 506호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 강인

전체 청구항 수 : 총 9 항

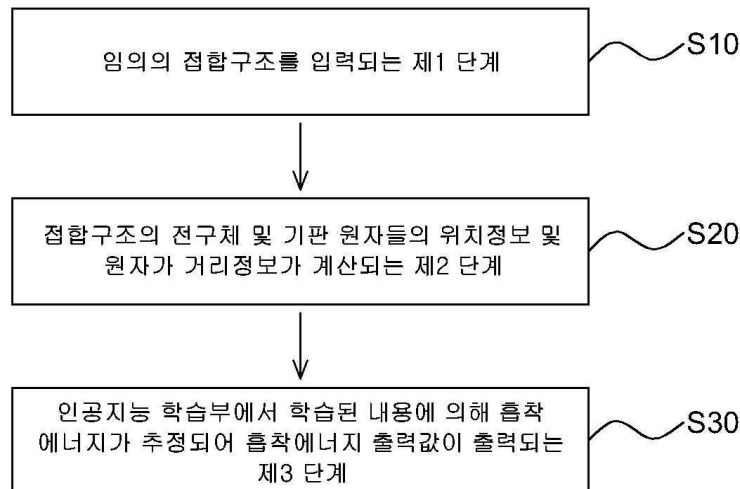
(54) 발명의 명칭 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템 및 이에 의한 접합구조 추정 방법

(57) 요약

본 발명은 접합구조의 전구체/기판 원자 위치 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관관계를 추정하는 인공지능 경망 기반 모델을 구현해 학습하고, 학습된 모델에 임의의 접합구조 입력 및 추정 흡착에너지 출력을 반복하여 최적의 적합구조 및 흡착에너지를 탐색하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템 및 이에 의한 접합구조 추정 방법을 개시한다.

본 발명의 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템은, 원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 접합구조가 입력되는 접합구조 입력부; 접합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 학습에 의해 추정하는 인공지능 학습부; 및 상기 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지가 출력되는 흡착에너지 출력부;를 포함한다.

대표도 - 도5



(52) CPC특허분류

C23C 16/52 (2018.01)

(72) 발명자

김선희

전라북도 정읍시 복면 화평길 236

이나영

경기도 김포시 유현로 19, 102동 503호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1345370812

과제번호 2021RIS-004

부처명 교육부

과제관리(전문)기관명 한국연구재단

연구사업명 지자체대학협력기반지역혁신사업

연구과제명 (대전세종충남지역혁신플랫폼)충남대학교

과제수행기관명 (대전세종충남지역혁신플랫폼)충남대학교

연구기간 2023.04.01 ~ 2024.02.29

명세서

청구범위

청구항 1

원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 접합구조가 입력되는 접합구조 입력부;

접합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 학습에 의해 추정하는 인공지능 학습부; 및

상기 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지가 출력되는 흡착에너지 출력부;를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템.

청구항 2

청구항 1에 있어서,

상기 접합구조 입력부는,

전구체 원자 위치정보가 입력되는 전구체 원자 위치 입력부,

기판의 원자들의 위치정보가 입력되는 기판 원자 위치 입력부 및

상기 전구체의 평행이동 및 회전이동 후 상기 전구체 원자의 위치정보가 계산되는 이동 전구체 원자 위치 계산부를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템.

청구항 3

청구항 2에 있어서,

상기 인공지능 학습부는,

상기 이동 전구체 원자 위치 계산부에서 계산된 전구체 원자의 위치정보 및 상기 기판 원자 위치 입력부에 입력된 기판 원자 위치정보에 대해 DFT(Density Functional Theory) 계산하여 산출된 흡착에너지가 입력되는 흡착에너지 입력부 및

상기 전구체와 기판의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계를 학습하는 상관 관계 학습부를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템.

청구항 4

청구항 1 내지 3의 어느 한 항의 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템에 의한 접합구조 추정 방법에 있어서,

임의의 접합구조가 입력되는 제1 단계;

상기 접합구조의 전구체 및 기판 원자들의 위치정보 및 원자간 거리정보가 계산되는 제2 단계; 및

인공지능 학습부에서 학습된 내용에 의해 흡착에너지가 추정되어 상기 흡착에너지 출력값이 출력되는 제3 단계;를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템에 의한 접합구조 추정 방법.

청구항 5

청구항 4에 있어서,

상기 제1 단계 내지 제3 단계는 출력된 흡착에너지가 증착이 가능한 출력값이 출력될 때까지 반복되어 실행되는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템에 의한 접합구조 추정 방법.

청구항 6

청구항 4에 있어서,

상기 인공지능 학습부에서 학습이 이루어지는 과정은,

전구체 원자 위치정보 및 기관의 원자 위치정보가 입력되는 제1 단계,

상기 전구체가 평행이동 및 회전이동 후 상기 전구체의 원자 위치정보가 획득되어 집합구조가 선정되는 제2 단계,

상기 제2 단계의 집합구조의 흡착에너지가 계산되어 입력되는 제3 단계 및

상기 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계가 학습되는 제4 단계를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 집합구조 추정 시스템에 의한 집합구조 추정 방법.

청구항 7

청구항 6에 있어서,

상기 제1 단계에서 상기 전구체 원자 위치정보 및 상기 기관의 원자 위치정보에는 주기경계조건(periodic boundary condition)이 추가되는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 집합구조 추정 시스템에 의한 집합구조 추정 방법.

청구항 8

원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 집합구조가 입력되는 집합구조 입력부; 집합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 학습에 의해 추정하는 인공지능 학습부; 및 상기 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지가 출력되는 흡착에너지 출력부;를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 집합구조 추정 시스템을 구동하기 위하여 프로그래밍이 저장된 저장 매체.

청구항 9

원자층 증착용 전구체의 원자와 피증착용 기관의 원자의 위치, 거리 및 흡착 에너지에 대한 인공지능 학습을 통하여 원자층 증착용 전구체의 집합구조를 추정하는 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 원자층 증착용 전구체의 집합구조 추정 시스템 및 이에 의한 집합구조 추정 방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는 집합구조의 전구체/기관 원자 위치 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관관계를 추정하는 인공지능망 기반 모델을 구현해 학습하고, 학습된 모델에 임의의 집합구조 입력 및 추정 흡착에너지 출력을 반복하여 최적의 적합구조 및 흡착에너지를 탐색하는 원자층 증착용 전구체의 집합구조 추정 시스템 및 이에 의한 집합구조 추정 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 반도체 제조공정 중 증착 공정은 증발(evaporation) 또는 스퍼터링(sputtering)과 같이 물리적인 방법을 이용하는 물리기상증착법(Physical Vapor Deposition, PVD)과 기관의 표면에서 일어나는 화학반응을 이용하는 화학기상증착법(Cheical Vapor Deposition, CVD)으로 크게 구분할 수 있다. 화학기상증착법은 물리기상증착법에 비하여 막질이 우수하고 균일도가 높은 박막을 증착할 수 있는 장점을 가지고 있고, 계단도포성(step coverage) 또한 우수하기 때문에 반도체 제조공정에 널리 사용되고 있다.

[0003] 최근에는 이러한 종래의 증착방법에 비하여 막질이 우수하고, 막의 균일도와 계단 도포성이 매우 뛰어난 박막증착이 가능한 원자층 증착법(Atomic Layer Deposition, ALD)의 적용 범위가 넓어지고 있다. 특히 원자층 증착법은 결함이 적은 막질이 요구되는 게이트 산화층, 커패시터 유전층 및 확산방지막 등의 증착공정에 이용되고 있다.

[0004] 원자층 증착법은 4가지 단계로 구성된다. 첫째 단계는 1차 소스인 전구체(precursor)를 투입하여 표면과 반응하여 표면에 흡착되는 단계이다. 둘째 단계는 2차 소스인 반응체(reactant)를 투입하여 표면에 흡착된 물질과 화학적 치환이 일어나는 단계이다. 셋째 단계는 둘째 단계의 결과로 신규 물질인 새로운 막이 단일층으로 생성되는 단계이다. 넷째 단계는 잔류 가스들이 배출되면서 단일층만 표면에 흡착되게 되는 단계이다. 첫째 단계에서,

전구체의 흡착에너지가 기관과 반응하는데 요구되는 활성화에너지보다 상대적으로 크고, 흡착에너지보다 상대적으로 낮으면서 증착 가능한 충분한 에너지가 공급될 경우 전구체는 기관과 반응하여 증착될 수 있다. 여기서, 흡착에너지는 전구체 원자 위치정보와 기관 원자 위치정보 기반으로 DFT(Density Functional Theory) 계산을 통해 구하게 되는데, DFT 계산이 복잡하고 시간이 오래 걸려 이를 개선하는 방법에 대한 연구가 필요한 실정이다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0005] (특허문헌 0001) 대한민국 등록특허공보 제10-1347962호
(특허문헌 0002) 대한민국 등록특허공보 제10-2580742호
(특허문헌 0003) 대한민국 등록특허공보 제10-1149811호
(특허문헌 0004) 대한민국 공개특허공보 제10-2016-0109589호

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0006] 본 발명은 상기와 같은 문제점을 해결하기 위한 것으로, 접합구조의 전구체/기관 원자 위치 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관관계를 추정하는 인공지능망 기반 모델을 구현해 학습하고, 학습된 모델에 임의의 접합구조 입력 및 추정 흡착에너지 출력을 반복하여 최적의 적합구조 및 흡착에너지를 탐색하는 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템 및 이에 의한 접합구조 추정 방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

- [0007] 상기한 목적을 달성하기 위하여 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템은, 원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 접합구조가 입력되는 접합구조 입력부; 접합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 학습에 의해 추정하는 인공지능 학습부; 및 상기 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지가 출력되는 흡착에너지 출력부;를 포함한다.
- [0008] 상기 접합구조 입력부는, 전구체 원자 위치정보가 입력되는 전구체 원자 위치 입력부, 기관의 원자들의 위치정보가 입력되는 기관 원자 위치 입력부 및 상기 전구체의 평행이동 및 회전이동 후 상기 전구체 원자의 위치정보가 계산되는 이동 전구체 원자 위치 계산부를 포함한다.
- [0009] 상기 인공지능 학습부는, 상기 이동 전구체 원자 위치 계산부에서 계산된 전구체 원자의 위치정보 및 상기 기관 원자 위치 입력부에 입력된 기관 원자 위치정보에 대해 DFT(Density Functional Theory) 계산하여 산출된 흡착에너지가 입력되는 흡착에너지 입력부 및 상기 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계를 학습하는 상관 관계 학습부를 포함한다.
- [0010] 또한, 상기한 목적을 달성하기 위하여 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템에 의한 접합구조 추정 방법은, 임의의 접합구조가 입력되는 제1 단계; 상기 접합구조의 전구체 및 기관 원자들의 위치정보 및 원자간 거리정보가 계산되는 제2 단계; 및 인공지능 학습부에서 학습된 내용에 의해 흡착에너지가 추정되어 상기 흡착에너지 출력값이 출력되는 제3 단계;를 포함한다.
- [0011] 상기 제1 단계 내지 제3 단계는 출력된 흡착에너지가 증착이 가능한 출력값이 출력될 때까지 반복되어 실행되는 것을 특징으로 한다.
- [0012] 상기 인공지능 학습부에서 학습이 이루어지는 과정은, 전구체 원자 위치정보 및 기관의 원자 위치정보가 입력되는 제1 단계, 상기 전구체가 평행이동 및 회전이동 후 상기 전구체의 원자 위치정보가 획득되어 접합구조가 선정되는 제2 단계, 상기 제2 단계의 접합구조의 흡착에너지가 계산되어 입력되는 제3 단계 및 상기 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계가 학습되는 제4 단계를 포함한다.
- [0013] 상기 제1 단계에서 상기 전구체 원자 위치정보 및 상기 기관의 원자 위치정보에는 주기경계조건(periodic boundary condition)이 추가되는 것을 특징으로 한다.

[0014] 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템을 구동하기 위하여 프로그래밍이 저장된 저장 매체는 원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 접합구조가 입력되는 접합구조 입력부; 접합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 학습에 의해 추정하는 인공지능 학습부; 및 상기 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지가 출력되는 흡착에너지 출력부;를 포함한다.

[0015] 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조를 추정하는 방법은 원자층 증착용 전구체의 원자와 피증착용 기판의 원자의 위치, 거리 및 흡착 에너지에 대한 인공지능 학습을 사용한다.

발명의 효과

[0016] 상술한 바와 같이 본 발명은 원자층 증착용 전구체와 기판 사이의 상관관계를 학습하여 직접 DFT 계산하지 않고 계산값을 빠르게 추정할 수 있다.

[0017] 또한, 본 발명은 학습된 모델을 이용해 미지의 접합구조에 대한 흡착에너지를 추정함으로써 최적 접합구조 및 흡착에너지를 탐색할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0018] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템의 구성도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 의한 접합구조 입력부의 구성도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 의한 인공지능 학습부의 구성도이다.

도 4(a)는 실시예의 DTF 계산 흡착에너지(홍색 점선) 및 인공지능 학습부에서 추정된 흡착에너지(검은색 점)를 나타내고, 도 4(b)는 실시예의 DTF 계산 대비 인공지능 학습부 추정 흡착에너지 오차를 나타낸다.

도 5는 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템에 의한 접합구조 추정 방법의 순서도이다.

도 6은 본 발명의 일 실시예에 의한 인공지능 학습부에서 학습이 이루어지는 과정을 나타내는 순서도이다.

도 7(a) 및 도 7(b)는 전구체 및 기판의 접합구조 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0019] 본 개시의 다양한 실시예에서 사용될 수 있는 "포함한다." 또는 "포함할 수 있다." 등의 표현은 개시(disclosure)된 해당 기능, 동작 또는 구성요소 등의 존재를 가리키며, 추가적인 하나 이상의 기능, 동작 또는 구성요소 등을 제한하지 않는다. 또한, 본 개시의 다양한 실시예에서, "포함하다." 또는 "가지다." 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0020] 본 개시의 다양한 실시예에서 "또는" 등의 표현은 함께 나열된 단어들의 어떠한, 그리고 모든 조합을 포함한다. 예를 들어, "A 또는 B"는, A를 포함할 수도, B를 포함할 수도, 또는 A와 B 모두를 포함할 수도 있다.

[0021] 본 개시의 다양한 실시예에서 사용된 "제1", "제2", "첫째", 또는 "둘째" 등의 표현들은 다양한 실시예들의 다양한 구성요소들을 수식할 수 있지만, 해당 구성요소들을 한정하지 않는다. 예를 들어, 상기 표현들은 해당 구성요소들의 순서 및/또는 중요도 등을 한정하지 않는다. 상기 표현들은 한 구성요소를 다른 구성요소와 구분하기 위해 사용될 수 있다. 예를 들어, 제1 사용자 기기와 제2 사용자 기기는 모두 사용자 기기이며, 서로 다른 사용자 기기를 나타낸다. 예를 들어, 본 개시의 다양한 실시예의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.

[0022] 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "연결되어" 있다거나 "접속되어" 있다고 언급된 때에는, 상기 어떤 구성요소가 상기 다른 구성요소에 직접적으로 연결되어 있거나 또는 접속되어 있을 수도 있지만, 상기 어떤 구성요소와 상기 다른 구성요소 사이에 새로운 다른 구성요소가 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다. 반면에, 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "직접 연결되어" 있다거나 "직접 접속되어" 있다고 언급된 때에는, 상기 어떤 구성요소와 상기 다른 구성요소 사이에 새로운 다른 구성요소가 존재하지 않는 것으로 이해될 수 있어야 할 것이다.

[0023] 본 개시의 실시 예에서 "모듈", "유닛", "부(part)" 등과 같은 용어는 적어도 하나의 기능이나 동작을 수행하는

구성요소를 지칭하기 위한 용어이며, 이러한 구성요소는 하드웨어 또는 소프트웨어로 구현되거나 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현될 수 있다. 또한, 복수의 "모듈", "유닛", "부(part)" 등은 각각이 개별적인 특정한 하드웨어로 구현될 필요가 있는 경우를 제외하고는, 적어도 하나의 모듈이나 칩으로 일체화되어 적어도 하나의 프로세서로 구현될 수 있다.

[0024] 본 개시의 다양한 실시예에서 사용한 용어는 단지 특정일 실시예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 개시의 다양한 실시예를 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.

[0025] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 개시의 다양한 실시예가 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다.

[0026] 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 개시의 다양한 실시예에서 명백하게 정의되지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

[0028] 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)에 대해 도면을 참조하여 설명한다. 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)의 구성도이다. 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)은 접합구조 입력부(100), 인공지능 학습부(200) 및 흡착에너지 출력부(300)를 포함하여 구성될 수 있다.

[0029] 접합구조 입력부(100)에는 원자층 증착용 전구체의 흡착에너지 출력을 위해 임의의 접합구조가 입력된다. 원자층 증착을 위한 최적의 접합구조를 도출하기 위해서는 흡착에너지를 산출하는 것이 필요하다. 임의의 접합구조를 접합구조 입력부(100)를 통해 입력하는데, 접합구조 입력부(100)는 이를 위해 입력장치를 구비한다. 본 발명의 입력장치로는 키보드, 마우스, 스캐너, 전자펜, 디지털 카메라, 터치스크린 중에서 하나 또는 복수로 선택하여 사용할 수 있다. 도 2는 본 발명의 일 실시예에 의한 접합구조 입력부(100)의 구성도이다. 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 의한 접합구조 입력부(100)는 전구체 원자 위치 입력부(110), 기관 원자 위치 입력부(120) 및 이동 전구체 원자 위치 계산부(130)를 포함하여 구성될 수 있다.

[0030] 전구체 원자 위치 입력부(110)에는 전구체 원자 위치정보가 입력된다. 전구체는 흡착에너지 계산을 진행하기 위한 접합구조 생성을 위해 기관과 충분히 가깝게 배치된다. 우선, 전구체의 평행이동 및 회전이동의 기준이 되는 전구체의 자세를 하나 선정한다. 기준 자세는 전구체를 구성하는 모든 원자가 기관을 구성하는 모든 원자와 너무 가깝게 위치하지 않아야 한다. 시뮬레이션 프로그램에 의한 DFT 계산 시 원자간 거리가 너무 가까우면 너무 큰 반발력으로 인한 계산 오류가 발생할 수 있기 때문이다. 사용자는 입력장치를 이용하여 전구체의 원자 위치 정보를 전구체 원자 위치 입력부(110)에 입력할 수 있다.

[0031] 기관 원자 위치 입력부(120)에는 기관의 원자들의 위치정보가 입력된다. 흡착에너지 계산을 위해서는 전구체의 평행이동 및 회전이동 후의 위치정보 및 기관 원자의 위치정보가 필요하다. 사용자는 입력장치를 이용하여 기관의 원자 위치정보를 전구체 원자 위치 입력부(110)에 입력할 수 있다.

[0032] 이동 전구체 원자 위치 계산부(130)는 전구체가 평행이동 및 회전이동 후의 전구체 원자의 위치정보를 계산한다. 전구체의 기준 자세에서 전구체를 구성하는 원자들의 위치는 하기의 식 1과 같이 표현할 수 있다,

[0033] (식 1)

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{N_p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{N_p} & y_{N_p} & z_{N_p} \end{bmatrix}$$

[0034] 여기서 $\mathbf{a}_i = [x_i, y_i, z_i]$ 는 전구체의 'i-번째 원자의 3차원 좌표, N_p 는 전구체를 구성하는 원자들의 개수이다.

[0036] 기관을 구성하는 원자들의 위치는 하기의 식 2와 같이 표현할 수 있다,

[0037] (식 2)

$$B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 & Y_1 & Z_1 \\ X_2 & Y_2 & Z_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ X_{N_s} & Y_{N_s} & Z_{N_s} \end{bmatrix}$$

[0038]

[0039] 여기서 $b_j = [X_j, Y_j, Z_j]$ 는 기관의 j -번째 원자의 3차원 좌표, N_s 는 기관을 구성하는 원자들의 개수이다.

[0040] 전구체가 X , Y , Z 축 방향으로 각각 (x, y, z) [Å] 만큼 평행이동하고, X , Y , Z 축을 기준으로 각각 (θ, ϕ, ψ) [rad] 만큼 회전하였을 경우, 전구체를 구성하는 원자들의 위치는 하기의 식 3와 같이 계산할 수 있다,

[0041] (식 3)

$$A'(x, y, z, \theta, \phi, \psi) = R_Z R_Y R_X (A - 1 p_{\text{cog}}) + 1 \left(p_{\text{cog}} + \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}^T \right)$$

[0042]

[0043] R_X , R_Y , R_Z 는 하기 식 4 내지 식 6과 같이 계산할 수 있다.

[0044] (식 4)

$$R_X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

[0045]

[0046] (식 5)

$$R_Y = \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix}$$

[0047]

[0048] (식 6)

$$R_Z = \begin{bmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

[0049]

[0050] 여기서, 1 은 $N_p \times 1$ 크기의 모든 원소가 1 로 이루어진 행렬이고, N_p 는 전구체의 원자수이며, p_{cog} 는 기준 자세의 전구체를 구성하는 원자들의 좌표에 대한 무게중심이다. T 는 transpose 함수를 나타낸다. 최적의 접합구조를 추정하기 위해 전구체는 다양한 방법으로 평행운동 및 회전운동을 수행할 수 있다.

[0051] 인공지능 학습부(200)는 접합구조와 흡착에너지 사이의 상관관계를 인공신경망 학습에 의해 추정한다. 도 3은 본 발명의 일 실시예에 의한 인공지능 학습부(200)의 구성도이다. 도 3을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 의한 인공지능 학습부(200)는 흡착에너지 입력부(210) 및 상관 관계 학습부(220)를 포함하여 구성될 수 있다. 본 발명의 인공지능 학습부(200)는 원자의 위치정보 학습을 담당하는 5개의 fully connected layer, 원자간 거리정보 학습을 담당하는 5개의 fully connected layer, 최종 흡착에너지 계산을 담당하는 3개의 fully connected layer로 구성된 인공신경망 모델로 구성된다.

[0052] 흡착에너지 입력부(210)에는 이동 전구체 원자 위치 계산부(130)에서 계산된 전구체 원자의 위치정보 및 기관 원자 위치 입력부(120)에 입력된 기관 원자 위치정보에 대해 DFT(Density Functional Theory, 밀도범함수이론) 계산하여 산출된 흡착에너지가 입력된다. 본 발명에서는 전구체의 원자위치정보 A' 와 기관의 원자 위치정보 B 로 구성된 접합구조에 대해 DFT 계산하여 해당 접합구조의 흡착에너지를 계산할 수 있다. 밀도범함수이론은 양자역

학적인 모형 방법론으로, 특히 원자, 분자, 그리고 응집 물질에서의 다체 상태의 전자 구조를 다룬다. 즉, 다른 함수의 함수인 범함수(functional)를 통해서 공간적으로 분포되어 있는 전자의 밀도를 기술한다. 흡착에너지 계산은 DFT 계산을 수행하는 시뮬레이션 프로그램에 의해 수행하는데, 시뮬레이션 프로그램은 원자, 분자, 고체 등을 포함하는 다체 슈뢰딩거 방정식(Schrodinger equation)을 컴퓨터를 이용하여 계산할 수 있는 코드를 내장하고 있으며, 이러한 코드를 이용하여 원자, 분자, 고체 등의 전기적, 자기적, 광학적 성질을 조사할 수 있는 프로그램이다. 본 발명의 실시예에서는 원자의 전자 파동 함수는 PAW(projector augmented wave) 방법이 사용되었고, 교환 상관 에너지는 GGA(generalized gradient approximation)에 기초한 PBE(Perdew, Burke, Ernzerhof)에 의해 설명된 방법이 사용되었다. 아울러, 흡착에너지 계산을 위한 원자 포텐셜은 시뮬레이션 프로그램에 내장된 코드에 포함되어 있으며, 스미어링(smering)을 위해 가우시안(Gaussian) 법을 사용하였다.

[0053] 상관 관계 학습부(220)는 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계를 학습한다. 상관 관계 학습부(220)는 전구체와 기관의 원자 위치정보, 전구체와 기관 원자간 거리 및 흡착에너지 사이의 상관 관계를 상당한 양의 데이터셋에 의해 학습하여 DFT 계산이 없이도 상관 관계에 대해 추정이 가능하게 된다. 예를 들어, 전구체 원자와 기관 원자의 위치 정보, 전구체 원자와 기관 원자 사이의 거리, 전구체 원자와 기관 원자 사이의 흡착 에너지에 대한 관계를 학습 하게 된다. 본 발명에서는 전구체의 평행이동 및 회전 이동은 grid search 또는 random search 등으로 샘플링할 수 있다. 도 4(a)는 실시예의 DTF 계산 흡착에너지(홍색 점선) 및 인공지능 학습부(200)에서 추정된 흡착에너지(검은색 점)를 나타내고, 도 4(b)는 실시예의 DTF 계산 대비 인공지능 학습부(200) 추정 흡착에너지 오차를 나타낸다. 본 발명의 실시예에서는 grid search를 통해 10,000개 내지 20,000개의 접합구조들을 구성하였고 각 접합구조의 흡착에너지를 DFT 계산하여, 상관 관계를 인공지능이 추정하도록 하였다. 상관 관계 학습부(220)는 접합구조 입력부(100)에 입력된 접합구조에 대해 DFT 계산없이 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계를 추정하여 흡착에너지를 도출한다. 학습 결과 인공지능으로 출력한 흡착에너지와 DFT 계산된 흡착에너지와 사이의 오차가 0.03% 이하가 되도록 최적화되었다.

[0054] 흡착에너지 출력부(300)는 인공지능 학습부(200)에서 추정된 흡착에너지를 출력한다. 흡착에너지 출력부(300)는 상관 관계 학습부(220)에서 추정한 흡착에너지를 출력한다. 흡착에너지 출력부(300)는 디스플레이 장치를 구비하는데, 디스플레이 장치로는 CRT(Cathode Ray Tube), VFD(Vacuum Fluorescent Display), FED(Field Emission Display), PDF(Plasma Display Panel), ELD(Electroluminescent Display), OLED(Organic Light Emitting Diode), LED(Light Emitting Diode), LCD(Liquid Crystal Display) 중에서 선택하여 사용할 수 있다.

[0056] 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)에 의한 접합구조 추정 방법에 대해 도면을 참조하여 설명한다. 도 5는 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)에 의한 접합구조 추정 방법의 순서도이다. 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 의한 원자층 증착용 전구체의 접합구조 추정 시스템(10)에 의한 접합구조 추정 방법은 하기의 세 단계로 구성될 수 있다.

[0057] 제1 단계(S10)는 임의의 접합구조를 입력하는 단계이다. 기관 원자에 대한 전구체 원자의 최적의 흡착에너지를 찾기 위해 임의의 접합구조가 접합구조 입력부(100)에 입력된다. 임의의 접합구조의 입력은 최적의 흡착에너지를 찾을 때까지 반복될 수 있다.

[0058] 제2 단계(S20)는 접합구조의 전구체 및 기관 원자들의 위치정보가 입력되고 원자간 거리정보가 계산되는 단계이다. 임의의 접합구조에 대해 전구체 원자의 위치정보 및 기관 원자의 위치정보가 입력된다. 접합구조는 전구체 원자의 위치정보 및 기관 원자의 위치정보가 있는 경우에 사용되고, 전구체 원자의 위치정보 및 기관 원자의 위치정보가 없는 접합구조는 사용하지 않는다. 전구체 원자의 위치정보 및 기관 원자의 위치정보가 입력되면 전구체를 평행이동 및 회전운동 후의 전구체 위치정보를 계산한다. 평행이동 및 회전운동 후의 전구체 위치정보의 계산은 상기의 식 1 내지 식 6에 의한다.

[0059] 제3 단계(S30)는 인공지능 학습부(200)에서 학습된 내용에 의해 흡착에너지가 추정되어 흡착에너지 출력값이 출력되는 단계이다. 인공지능 학습부(200)에서는 다량의 데이터셋에 의해 전구체와 기관의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계가 학습되었다. 따라서, DFT 계산 없이 상관 관계 학습부(220)는 접합구조의 전구체 및 기관 원자들의 위치정보, 원자간 거리정보에 의해 흡착에너지를 추정하여 출력한다. 흡착에너지가 출력되면 활성화에너지와 비교하여 최적의 흡착에너지를 가지는 접합구조를 추정할 수 있다.

- [0060] 여기서, 제1 단계(S10) 내지 제3 단계(S30)는 출력된 흡착에너지가 증착이 가능한 출력값이 출력될 때까지 반복되어 실행되는 것이 바람직하다. 전구체가 실리콘 기판에 흡착되는 요인은 반데르발스(Van der Waals) 힘과 원자 간의 전기음성도 차이, 산소, 질소 등과 같은 특정 원자들의 고립전자쌍(lone pair electrons)과 관련이 있는데, 전구체의 흡착에너지가 실리콘 기판과 반응하는데 요구되는 활성화에너지보다 상대적으로 크고, 흡착에너지보다 상대적으로 낮으면서 증착 가능한 충분한 에너지가 공급될 경우 전구체는 실리콘 기판과 반응하여 증착될 수 있다. 따라서, 제1 단계(S10) 내지 제3 단계(S30)는 흡착에너지가 활성화에너지보다 큰 값이 나와 기판에 증착이 가능한 흡착에너지가 출력될 때까지 반복된다.
- [0061] 도 6은 본 발명의 일 실시예에 의한 인공지능 학습부(200)에서 학습이 이루어지는 과정을 나타내는 순서도이다. 도 6을 참조하면, 인공지능 학습부(200)에서 학습이 이루어지는 과정은 하기의 네 단계로 구성될 수 있다.
- [0062] 제1 단계(R10)는 전구체 원자 위치정보 및 기판의 원자 위치정보가 입력되는 단계이다. 도 7(a) 및 도 7(b)는 전구체 및 기판의 접합구조 예시도이다. 실리콘 원자와 원자층 증착용 전구체 화합물을 구성하는 원자 간의 본드에너지가 상대적으로 작은 값을 가져야만 원자층 증착 특성을 향상시킬 수 있는데, 전구체 화합물의 설계 시에 전구체의 실리콘 원자와 전구체를 구성하는 다른 원소와의 본드에너지가 약한 부분을 고려할 수 있다. 또한, 전구체 화합물의 설계 시에 실리콘 표면에서 물리 흡착하면서 전구체 화합물 원자들의 본드에너지는 약해지게 되는데, 깨져야 할 원자 사이의 본드에너지는 다른 원자 사이의 본드에너지보다 상대적으로 더 약해지는 것이 바람직하다. 이 단계에서는 전구체 및 기판 원자들의 위치정보를 알고 있는 임의의 초기 자세를 선정하고, 전구체 및 기판 원자들의 위치정보를 입력한다.
- [0063] 여기서, 제1 단계(R10)에서 전구체 원자 위치정보 및 판의 원자 위치정보에는 주기경계조건(periodic boundary condition)이 추가되는 것이 바람직하다. 주기경계조건은 DFT 계산이 이루어지는 계산영역을 빠져나간 전구체 원자가 반대쪽에서 다시 유입되는 것으로 설정하여 계산영역 내의 전구체 원자의 수를 유지시키는 방법이다. DFT 계산에는 해당 정보를 이용해 주기경계조건을 고려가 가능한 반면, 인공신경망 모델은 이 조건을 직접적으로 고려할 수 없다. 따라서, 본 발명에서는 인공신경망 모델의 정확한 학습을 위해 주기경계조건이 고려된 전구체 및 기판 원자간의 거리 정보를 추가로 제공하였다. 주기경계조건 추가를 통해 인공신경망 모델은 접합구조의 전구체와 기판의 위치정보와 원자간 거리정보를 입력받아 흡착에너지를 출력하도록 설계되었고, 출력된 흡착에너지와 DFT 계산된 흡착에너지 사이의 오차가 최소화되도록 최적화 학습되었다.
- [0064] 제2 단계(R20)는 전구체를 평행이동 및 회전이동 후 전구체의 원자 위치정보가 획득되어 접합구조가 선정되는 단계이다. 전구체를 평행이동 및 회전이동 후 전구체의 위치정보는 상기의 식 1 내지 식 6에 계산된다. 평행이동 및 회전이동 후 전구체의 위치정보가 계산이 끝나면 인공지능에 의한 학습을 위해 상기 전구체의 접합구조가 선정된다.
- [0065] 제3 단계(R30)는 제2 단계(R20)의 접합구조의 흡착에너지가 계산되어 입력되는 단계이다. 전구체의 원자위치정보 A'와 기판의 원자 위치정보 B로 구성된 접합구조에 대해 시뮬레이션 프로그램에 의해 DFT 계산하여 해당 접합구조의 흡착에너지를 계산하고 이를 흡착에너지 입력부(210)에 입력한다.
- [0066] 제4 단계(R40)는 전구체와 기판의 원자 위치정보 및 원자간 거리와 흡착에너지 사이의 상관 관계가 학습되는 단계이다. 상기 제1 단계(R10) 내지 제3 단계(R30)를 반복하여 인공지능이 상당한 양의 데이터셋에 의해 학습하게 하여 전구체와 기판의 원자 위치정보, 전구체와 기판 원자간 거리 및 흡착에너지 사이의 상관 관계를 DFT 계산이 없어도 상관 관계에 대해 추정이 가능하게 된다.
- [0068] 이상에서 설명된 시스템은 하드웨어 구성요소, 소프트웨어 구성요소, 및/또는 하드웨어 구성요소 및 소프트웨어 구성요소의 조합으로 구현될 수 있다. 예를 들어, 실시예들에서 설명된 시스템 및 구성요소는, 예를 들어, 프로세서, 콘트롤러, ALU(arithmetic logic unit), 디지털 신호 프로세서(digital signal processor), 마이크로컴퓨터, FPGA(field programmable gate array), PLU(programmable logic unit), 마이크로프로세서, 또는 명령(instruction)을 실행하고 응답할 수 있는 다른 어떠한 장치와 같이, 하나 이상의 범용 컴퓨터 또는 특수 목적 컴퓨터를 이용하여 구현될 수 있다. 처리 장치는 운영 체제(OS) 및 상기 운영 체제 상에서 수행되는 하나 이상의 소프트웨어 어플리케이션을 수행할 수 있다. 또한, 처리 장치는 소프트웨어의 실행에 응답하여, 데이터를 접근, 저장, 조작, 처리 및 생성할 수도 있다. 이해의 편의를 위하여, 처리 장치는 하나가 사용되는 것으로 설명된 경우도 있지만, 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는, 처리 장치가 복수 개의 처리 요소(processing element) 및/또는 복수 유형의 처리 요소를 포함할 수 있음을 알 수 있다. 예를 들어, 처리 장치는 복수 개의

프로세서 또는 하나의 프로세서 및 하나의 컨트롤러를 포함할 수 있다. 또한, 병렬 프로세서(parallel processor)와 같은, 다른 처리 구성(configuration)도 가능하다.

[0069] 소프트웨어는 컴퓨터 프로그램(computer program), 코드(code), 명령(instruction), 또는 이들 중 하나 이상의 조합을 포함할 수 있으며, 원하는 대로 동작하도록 처리 장치를 구성하거나 독립적으로 또는 결합적으로(collectively) 처리 장치를 명령할 수 있다. 소프트웨어 및/또는 데이터는, 처리 장치에 의하여 해석되거나 처리 장치에 명령 또는 데이터를 제공하기 위하여, 어떤 유형의 기계, 구성요소(component), 물리적 장치, 가상 장치(virtual equipment), 컴퓨터 저장 매체 또는 장치, 또는 전송되는 신호 파(signal wave)에 영구적으로, 또는 일시적으로 구체화(embody)될 수 있다. 소프트웨어는 네트워크로 연결된 컴퓨터 시스템 상에 분산되어서, 분산된 방법으로 저장되거나 실행될 수도 있다. 소프트웨어 및 데이터는 하나 이상의 컴퓨터 판독 가능 기록 매체에 저장될 수 있다.

[0070] 실시예에 따른 방법은 다양한 컴퓨터 수단을 통하여 수행될 수 있는 프로그램 명령 형태로 구현되어 컴퓨터 판독 가능 매체에 기록될 수 있다. 상기 컴퓨터 판독 가능 매체는 프로그램 명령, 데이터 파일, 데이터 구조 등을 단독으로 또는 조합하여 포함할 수 있다. 상기 매체에 기록되는 프로그램 명령은 실시예를 위하여 특별히 설계되고 구성된 것들이거나 컴퓨터 소프트웨어 당업자에게 공지되어 사용 가능한 것일 수도 있다. 컴퓨터 판독 가능 기록 매체의 예에는 하드 디스크, 플로피 디스크 및 자기 테이프와 같은 자기 매체(magnetic media), CD-ROM, DVD와 같은 광기록 매체(optical media), 플롭티컬 디스크(floptical disk)와 같은 자기-광 매체(magneto-optical media), 및 롬(ROM), 램(RAM), 플래시 메모리 등과 같은 프로그램 명령을 저장하고 수행하도록 특별히 구성된 하드웨어 장치가 포함된다. 프로그램 명령의 예에는 컴파일러에 의해 만들어지는 것과 같은 기계어 코드뿐만 아니라 인터프리터 등을 사용해서 컴퓨터에 의해서 실행될 수 있는 고급 언어 코드를 포함한다. 상기된 하드웨어 장치는 실시예의 동작을 수행하기 위해 하나 이상의 소프트웨어 모듈로서 작동하도록 구성될 수 있으며, 그 역도 마찬가지이다.

[0071] 이상과 같이 실시예들이 비록 한정된 실시예와 도면에 의해 설명되었으나, 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 상기의 기재로부터 다양한 수정 및 변형이 가능하다. 예를 들어, 설명된 기술들이 설명된 방법과 다른 순서로 수행되거나, 및/또는 설명된 시스템, 구조, 장치, 회로 등의 구성요소들이 설명된 방법과 다른 형태로 결합 또는 조합되거나, 다른 구성요소 또는 균등물에 의하여 대치되거나 치환되더라도 적절한 결과가 달성될 수 있다.

[0072] 그러므로, 다른 구현들, 다른 실시예들 및 특허청구범위와 균등한 것들도 후술하는 특허청구범위의 범위에 속한다.

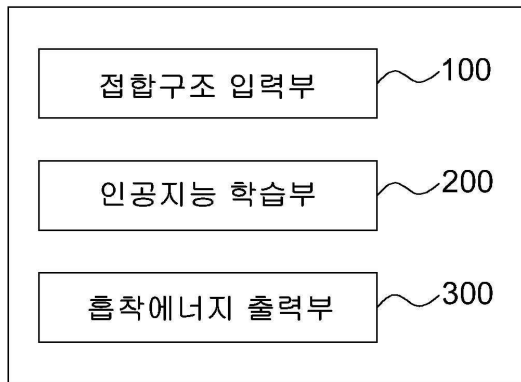
부호의 설명

[0073] 10 : 접합구조 추정 시스템
 100 : 접합구조 입력부
 110 : 전구체 원자 위치 입력부
 120 : 기관 원자 위치 입력부
 130 : 이동 전구체 원자 위치 계산부
 200 : 인공지능 학습부
 210 : 흡착에너지 입력부
 220 : 상관 관계 학습부
 300 : 흡착에너지 출력부

도면

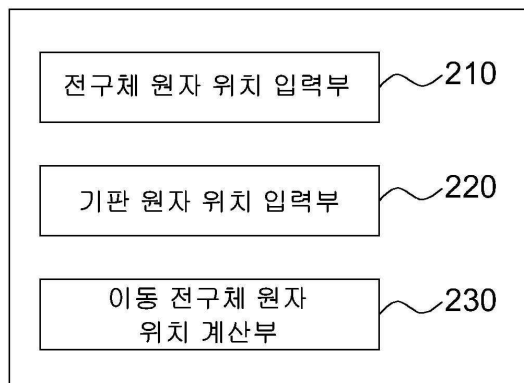
도면1

10



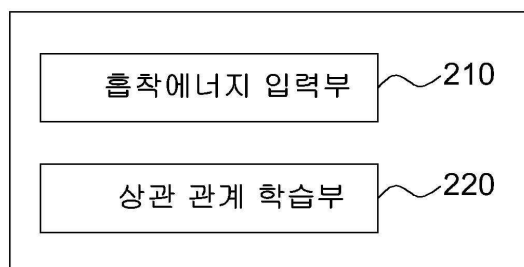
도면2

100

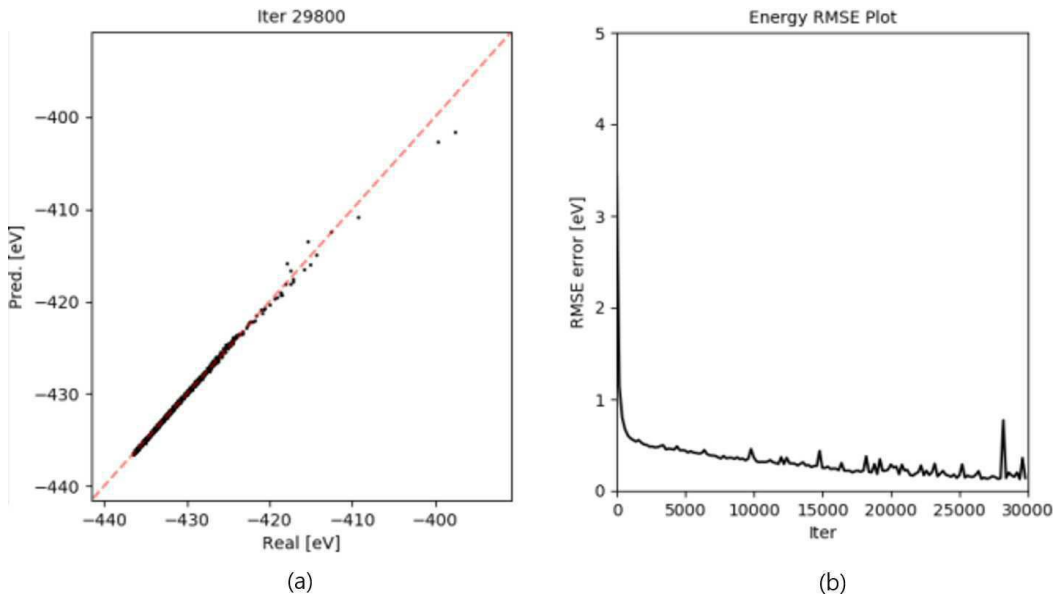


도면3

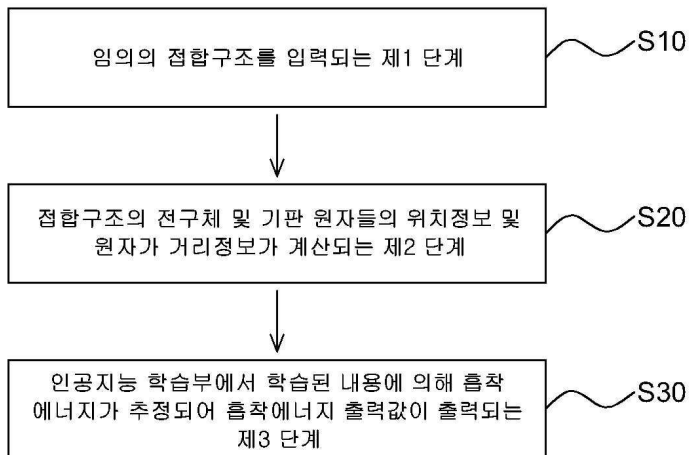
200



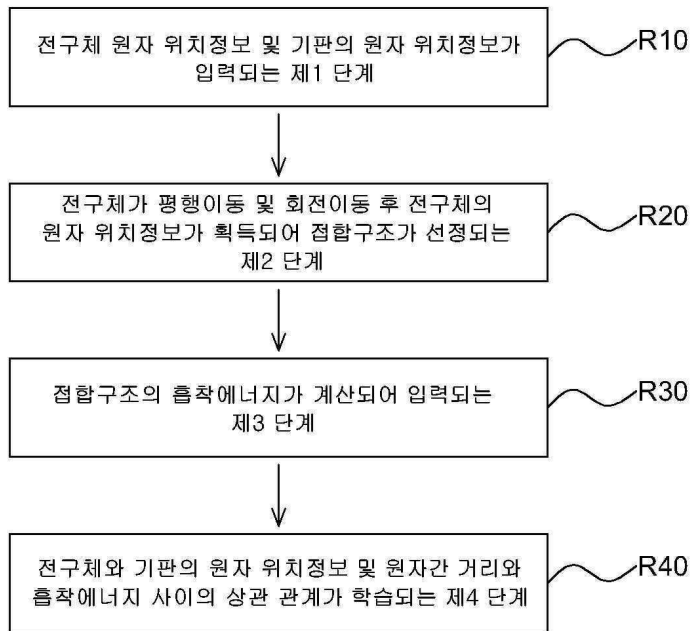
도면4



도면5



도면6



도면7

