

크롬박막의 레이저 어블레이션에서 열적·기계적 해석에 관한 연구

윤경구*, 장원석*, 이성국*, 김재구*(한국기계연구원 자동화연구부), 나석주(한국과학기술원 기계공학과)

A Study on Thermomechanical Analysis of Laser Ablation on Cr thin film

K. K. Yoon, W. S. Chang, S. K. Lee, J. G. Kim(Automation Eng. Dept., KIMM), S. J. Na(Mech. Eng. Dept., KAIST)

ABSTRACT

Single-shot laser damage of thin Cr films on glass substrates has been studied to understand the cracking and peeling-off mechanism. A numerical model is developed for the calculation of transient heat transfer and thermal stresses in Cr films during excimer laser irradiation and cooling, the transient temperature, and the stress-strain fields are analyzed by using a three-dimensional finite-element model of heat flow. According to the numerical analysis for the experimentally determined cracking and peeling-off conditions, cracking is found to be the result of the tensile brittle fracture due to the excessive thermal stresses formed during the cooling process, while peeling-off is found to be the combined result of films bulging from the softened glass surface at higher temperature and the tensile brittle fracture during the cooling process.

Key Words : Laser ablation (레이저 어블레이션), Cr thin film (크롬박막), Thermomechanical analysis (열적·기계적 해석), Brittle fracture (좌성파괴)

1. 서론

CO₂나 YAG 레이저에 비해서 짧은 펄스지속시간과 파장을 갖는 엑사이머 레이저 펄스는 높은 정밀도와 적은 열적 손상을 갖는 가공이 가능하므로, 기판 위에 증착된 금속박막의 제거에 의한 패턴의 형성은 여러 가지 응용 가능한 분야 중에서도 가장 유망한 응용의 한 분야로서 제작된 IC 포토 마스크, TFT LCD의 전극막 및 각종 회로기판의 수정에도 적용이 가능할 것으로 생각된다. 좋은 품질로 제거될 수 있는 재료의 엑사이머 레이저 펄스에 의한 직접식 패터닝은 포토레지스트를 사용하지 않는 "resistless" 가공이며, 단지 레이저 펄스의 조사에 의해서 패턴이 일어지는 단 공정이므로 습식 화학적 또는 포토 리소그라피 공정을 요구하는 플라즈마 에칭과 같은 표준 패터닝기술들에 비해서 상당한 비용과 시간의 절약을 가능하게 할 뿐만 아니라 환경오염이 거의 없다는 측면에서 매우 큰 장점을 갖고 있다.

본 연구에서는 IC 포토마스크, 로티리 엔코더의 슬릿 디스크 등에 사용되는 고전적인 재료인 유이위에 증착된 크롬박막을 대상으로 전자현미경을 이용한 레이저가 조사된 표면형상의 관찰을 통해서 KrF 엑사이머 레이저의 펄스에 의한 제거 메카니즘을 규명하고, 제거과정에 동반되는 크랙이나 박리와 같은 금속박막의 손상 메카니즘을 규명하고자 하였다.

2. 수치해석

2.1 열해석 모델링

본 연구에서는 두께 1.3mm의 유리기판 위에 0.1, 0.2, 0.3μm의 두께로 크롬이 코팅된 재료에 폭 10μm, 길이 20μm 크기의 패턴을 제거하는 공정을 모델링

하였다. 본 수치해석의 목적은 레이저 조사부 주위의 온도분포와 열 영향에 의한 응력 분포 및 변형률을 조사하는 것이므로 3차원으로 모델링하여 레이저가 조사되는 코팅층 주위와 유리 모재의 온도 분포와 응력 분포의 해석에 관심을 두었으며, 레이저가 조사되는 코팅층의 온도를 먼저 해석하고 이것을 입력으로 하여 ABAQUS에서 sequentially coupled analysis방식으로 열응력 해석을 진행하였다.

2.1.1 열전달 지배 방정식

레이저 펄스 조사에 의한 박막의 가열 메카니즘은 표면층에서의 레이저 에너지 흡수와 내부로의 열전달로 이루어지는데 이를 수식으로 나타내면 다음과 같다.

$$F_{film} : (\rho C)_{film} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [k_{film} \frac{\partial T}{\partial x}] + (1-R)Q(t) \quad (1)$$

$$Substrate \quad (\rho C)_{substrate} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [k_{substrate} \frac{\partial T}{\partial x}] \quad (2)$$

식(1), (2)의 해를 구하기 위한 해석영역 내부의 경계조건과 초기조건은 다음과 같다.

$$B.C \quad k_{film} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=h} = k_{substrate} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=h} \quad (3)$$

$$I.C \quad T(x, 0) = 0, \quad T(\infty, t) = 0 \quad (4)$$

경계조건은 레이저 빔이 조사되는 표면에 대한 입열과 대기와의 대류로 인한 열전달로 크게 구별하여 모든 면에서 대기와 노출된 면과 상온의 대기 사이에 대류 열전달 현상이 일어나는 것으로 하였다.

2.1.2 열원

마스크를 통과하고 축소 투영 시스템에 의해서 시편의 표면에 조사되는 레이저 빔은 균일한 에너지 밀도 분포를 갖지 못하고 프레넬 회절패턴을 갖게 되지만 수치해석에서는 균일한 분포를 갖는 빔으로 모델링하고 여기에 흡수율을 곱한 것을 열원으로 하였다. 이때 빔의 크기는 표면에 조사되는 빔의 FWHM에 해당하는 크기를 대입하였으며, 열원은 크롬 코팅층 표면에 외부에서 가해지는 heat flux로 모델링 하였다. 표면에 입사되는 액사이며 레이저 빔은 삼각파 모양의 프로파일을 가지고 조사되므로 해석에서 이것을 고려하기 위하여 (1)식의 Q(t)를 다음과 같은 시간의 함수로 하여 모델링 하였다.

$$I_0(t) = (E_d/t_p)(t/t_m) \quad 0 \leq t \leq t_m \quad (5)$$

$$I_0(t) = (E_d/t_p)((t_d-t)/(t_d-t_m)) \quad t_m \leq t \leq t_d$$

$$I_0(t) = 0 \quad t \geq t_d$$

여기서 E_d 는 입사 레이저 에너지밀도, t_p 는 펄스의

FWHM, t_d 는 펄스지소시간, t_m 은 펄스의 피크가 나타나는 시간을 나타낸다. 이때 빔은 사각형으로 하여 x축과 y축의 좌표 방향에 대하여 고른 강도 분포를 갖는 빔으로 모델링하였으며 펄스 지속시간은 44ns, FWHM 펄스폭은 22ns로 대입하였다.

2.2 열응력 해석

2.2.1 지배방정식

재료가 등방성, 열타소성, 가공변화 등의 거동을 한다고 가정하면 가공물이 열을 받아 변형할 때 발생하는 전변형률은 탄성변형률, 소성변형률, 열변형률 등으로 나누어 생각할 수 있다.

$$\epsilon_v = \epsilon_v^e + \epsilon_v^p + \epsilon_v^{th} \quad (6)$$

여기서 각각에 대한 식은 다음과 같다.

$$\epsilon_v^e = \frac{1+\nu}{E} \sigma_v - \frac{\nu}{E} \sigma_{kk} \delta_v \quad (7)$$

$$\epsilon_v^p = \int_0^t \epsilon_v^p dt \quad (8)$$

$$\epsilon_v^{th} = \alpha(T - T_i) \quad (9)$$

2.2.2 경계조건 및 Mesh 형성

Fig.1은 모델링한 레이저 어플레이션의 경계조건으로 레이저가 가해지는 부분은 x축과 y축에 대칭이므로 레이저에 의해 가열되는 곳을 4분의 1부분만 해석의 편의를 위하여 해석영역으로 고려하였다.

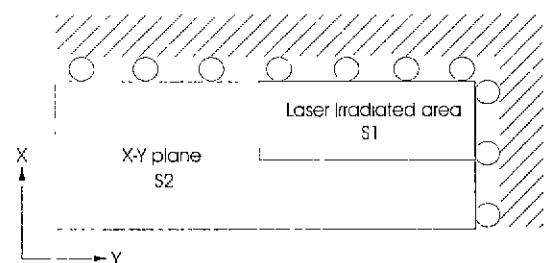


Fig.1 Boundary conditions used for the analysis of stress distribution

레이저 빔이 조사되는 가공부의 열영향 및 열응력과 변형을 조사하기 위한 것이 목적이므로 가공부 주위의 요소(element)는 보다 조밀하게 하였으며 코팅층에서의 영향을 조사하기 위하여 코팅층은 2겹으로 요소를 형성하였다. 이때 유리의 경우 크롬에 비하여 열전도도가 낮으므로 유리 모재 방향으로의 열전도는 거의 일어나지 않을 것으로 보고 요소 생성의 간격 변화를 코팅층에서 횡방향으로의 요소 생성 간격 변화보다 넓게 하였다.

3. 결과 및 고찰

Fig.2는 크랙킹 ($0.159\text{J}/\text{cm}^2$)과 peel off ($0.203, 0.283\text{J}/\text{cm}^2$)의 조건에 대해서 $0.2\mu\text{m}$ 크롬박막표면의 레이저 스팟 중심부의 온도변화를 계산한 결과이다. 크랙킹의 경우 박막표면의 온도는 레이저 펄스의 끝에서 약 740°C 까지 상승한 후 유리의 낮은 열전도도에 기인하여 천천히 냉각되고 있다. 비록 박막표면의 온도는 유리의 연화점(721°C) 보다는 높지만 계면의 온도는 연화점 보다 낮은 온도를 유지하고 있다. 따라서 크롬박막의 접착상태는 레이저 조사에 의해 영향을 받지 않는 것으로 추측할 수 있다.

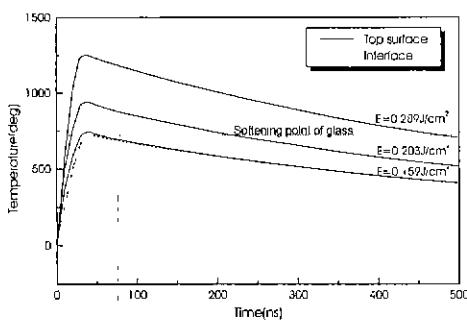


Fig.2 The calculated temperature histories of $0.2\mu\text{m}$ thick Cr films irradiated at the indicated fluences of cracking and peeling off conditions

Fig.3은 $0.159\text{J}/\text{cm}^2$ 의 조건으로 조사된 $0.2\mu\text{m}$ 크롬박막표면의 온도분포의 시간적 변화를 보여주는 것으로 시간이 경과함에 따라 레이저 조사부 경계에서의 온도구배가 점차 감소하는 것을 볼 수 있다. 코너부의 온도가 열전도의 기하학적 효과에 기인하여 사각형 빔에 의해 조사된 면적의 다른 부분보다 낮음을 볼 수 있는데 이 결과로 인하여 부분 및 완전 제거된 스팟의 코너에는 항상 라운드가 존재하고 있다.

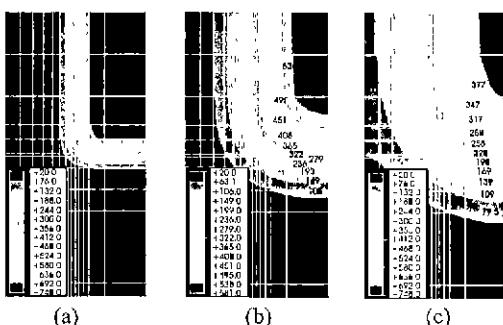


Fig.3 The temporal variation of the calculated temperature distributions on the surface of $0.2\mu\text{m}$

thick Cr films irradiated at the fluence of $0.159\text{J}/\text{cm}^2$; (a)time=40ns; (b)200ns; (c)500ns

Fig.4는 $0.159\text{J}/\text{cm}^2$ 의 조건으로 조사된 $0.2\mu\text{m}$ 크롬박막에 형성되는 응력과 변형률의 최대값의 시간적 변화를 보여주는 것이다. 가열과정에서는 레이저 조사 스팟의 내부에는 압축응력이 형성되고 있고 외부에는 이와는 반대로 인장응력이 형성되고 있다. 이와 같은 응력분포의 주원인은 높은 온도영역의 선형열팽창이 낮은 온도상태에 있는 주위에 의해서 제한을 받기 때문이다. 비록 비슷한 응력상태가 레이저 펄스의 개시로부터 약 150ns 까지 유지되고 있지만 점차 응력의 크기는 감소하고 있다. 전도와 대류에 의해서 냉각이 진행됨에 따라 응력분포는 급격한 변화를 보이는데 레이저 조사 스팟의 내부에는 강력한 인장응력이 형성되고 주위에는 압축응력이 형성된다. 응력파는 반대로 변형률은 가열과정의 끝에서 최대값에 도달한 후 시간이 지나면서 온도가 내려감에 따라 점진적으로 감소하고 있다. 압축에서 인장으로의 급격한 응력상태의 반전은 크롬박막 파괴의 개시에 영향을 주는 중요한 인자중의 하나로 생각된다.

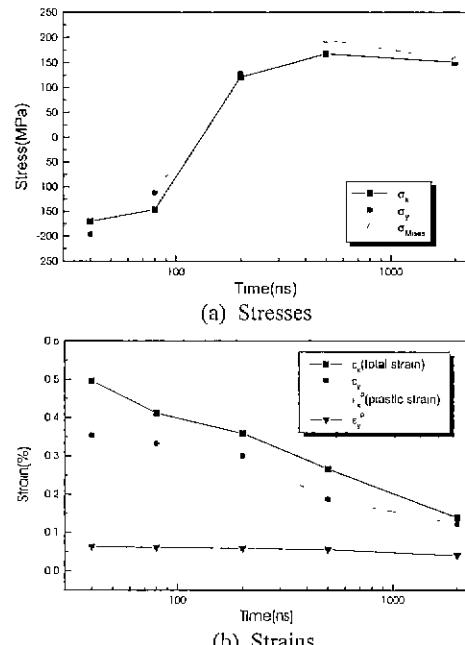


Fig.4 The temporal variation of the calculated stresses and strains on the surface of $0.2\mu\text{m}$ thick Cr films irradiated at the fluence of $0.159\text{J}/\text{cm}^2$

Fig.5는 $0.159\text{J}/\text{cm}^2$ 의 조건으로 조사된 $0.2\mu\text{m}$ 크롬박막의 레이저 조사 스팟에서 최대 Mises equivalent stress이 형성될 때의 응력과 변형률 성분들의 분포

를 나타낸 것이다. 응력 σ_x 는 스팟의 중심에서 y -축 방향으로 멀어질수록 증가하고 heat flux의 경계부근의 영역에서 최대값을 갖는 반면에 응력 σ_y 는 스팟의 중심부에서 최대값을 갖는다. Fig.5(c)에서와 같이 Mises equivalent stress σ_M 은 σ_x 와 σ_y 에 비해서 균일한 분포를 가지며, 스팟의 중앙부와 코너부에서 최대값을 가진다. 196Mpa의 최대값은 크롬의 인장강도와 비슷하며 항복강도보다 훨씬 높은 값이다. 그러므로 크롬박막 파괴는 heat flux의 경계부근에서 먼저 일어날 것으로 예상할 수 있다. 전변형률 ε_x 와 ε_y 는 중앙선을 따라 세 군데의 최대점을 갖는 복잡한 패턴을 가지며, Fig 5(f)에서와 같이 ε_x 와 ε_y 의 소성변형률 성분은 매우 낮으며 중앙부에서만 인장성분을 갖는다.

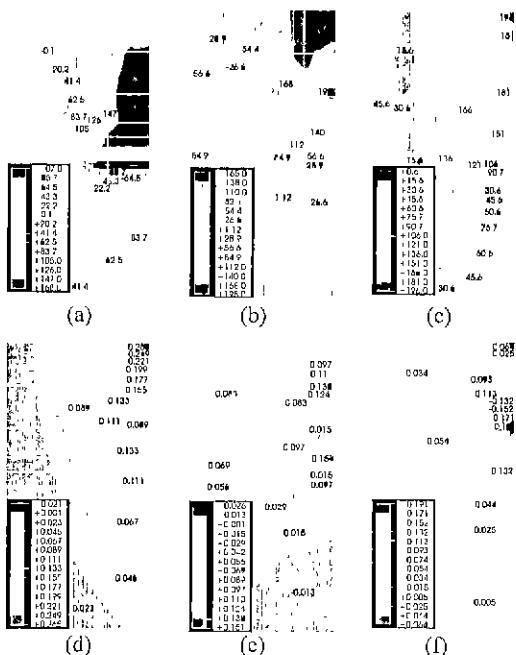


Fig 5 Stress and strain distributions at $t=500\text{ns}$ on the $0.2\mu\text{m}$ thick Cr films surface irradiated at the fluence of $0.159\text{J}/\text{cm}^2$: (a) σ_x (b) σ_y (c) σ_{mises} (MPa) ; (d) ε_x (e) ε_y (d) $\varepsilon_x\%$ (%)

$0.1\mu\text{m}$ 과 $0.3\mu\text{m}$ 두께 박막의 경우에도 $0.2\mu\text{m}$ 두께 박막과 비슷한 온도 및 응력분포를 가지며, 응력과 변형률 성분의 최대값은 레이저 에너지밀도가 증가 할수록 커지고 있다. 실험과 해석의 결과로부터 크롬박막의 크랙킹은 냉각과정동안에 소성변형은 없이 취성파괴에 의해서 일어나며 또한 경계부근에서 먼저 크랙킹이 발생할 것으로 예측된다. Siegel[4]에 의해서 재안된 취성-연성 천이(brITTLE to ductile transition)는 Fig.2에서 볼 수 있듯이 계산된 온도가 취성-연성 천이온도로 제시한 1950K 보다는 매우

낮으므로 크랙킹의 주요 요인은 아닐 것으로 생각된다. 한편 peeling off 메카니즘은 고온에서의 유리의 연화가 크롬박막의 부착력에 영향을 미칠 것으로 생각되므로 크랙킹과는 다를 것으로 예측할 수 있다. 높은 레이저 에너지밀도의 조건에서는 제거과정의 초기에 압축상태에 있는 박막이 연화된 유리로부터 박리되고 냉각과정동안에 스팟의 경계부근에서 크랙이 형성되면서 최종적으로 고체 파편의 형태로 크롬박막은 제거되는 것으로 예측할 수 있다.

4. 결론

크롬박막의 크랙킹은 냉각과정 동안에 형성되는 항복강도 이상의 인장응력에 의해 소성변형은 없이 파괴가 일어나는 인장취성 파괴에 의해서 크랙킹이 일어나는 것으로 해석된다. 한편 peeling off 메카니즘은 제거과정의 초기에 압축상태에 있는 박막이 연화된 유리로부터 부분적으로 박리되고, 냉각과정 동안에 스팟의 경계부근에서 크랙이 형성되면서 최종적으로 고체 파편의 형태로 크롬박막이 제거되는 것으로 해석되며, 압축에서 인장으로의 급격한 응력상태의 반전도 파괴의 개시에 영향을 주는 중요한 인자로 작용한다.

참고문현

- Lee, S. K., Chang, W. S., Na, S. J., "Numerical and experimental study on the thermal damage of thin Cr films induced by excimer laser irradiation", J. Appl. Phys., Vol. 86, pp. 4282-4289, 1999.
- Schmatjko, K. J., Durchholz, H Endres, G., "Precision machining of coating layers by irradiation with a high energy excimer laser", SPIE, Vol. 1023, pp 135-143, 1988.
- Toth, Z., Solis, J., et. al., "Time resolved reflectivity and transmission measurements during laser induced blow-off of thin metal films", Appl. Surface Sci., Vol. 69, pp. 330-334, 1993.
- Siegel, J., Ettrich, K., et. al., "UV-laser ablation of ductile and brittle metal films", Appl. Phys. A, Vol. 64, pp. 213-218, 1997.
- 이성국, "KrF 엑사이머 레이저를 이용한 크롬박막 제거특성 및 패턴형성에 관한 연구" 한국과학기술원, 박사학위논문, 2000.