

# MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치 추출 시스템과 다결정 재료의 적용

정향남\* · 최재환\*\* · 정희택\*\*\* · 이준기\*\*\*\*

## Elastic Property Extraction System of Polycrystalline Thin-Films for Micro-Electro-Mechanical System Device and Application to Polycrystalline Materials

H. N. Jung, J. H. Choi, H. T. Chung and J. K. Lee

### Abstract

A numerical system to extract effective elastic properties of polycrystalline thin-films for MEMS devices is already developed. In this system, the statistical model based on lattice system is used for modeling the microstructure evolution simulation and the key kinetics parameters of given micrograph, grain distributions and deposition process can be extracted by inverse method proposed in the system. In this work, the effective elastic properties of polysilicon, BaTiO<sub>3</sub> and ZrSiO<sub>4</sub> are extracted using this system and by employing the fraction of the potential site( $f_p$ ) as a kinetics parameter for the microstructure evolution, the statistical tendency of these materials is studied.

Key Words: MEMS, Polycrystalline thin-film(다결정 박막), Monte-Carlo method(몬테카를로 법), Elasticity(탄성), Property(물성치), Microstructure(미세구조)

### 1. 서 론

MEMS 부품에 사용되는 다결정 박막의 기계적 성능은 MEMS 분야의 성장으로 인해 중요한 논제 중 하나가 되었다. MEMS 부품을 위한 실험 기법으로 주로 beam-bending 테스트와 직접 인장 테스트법이 이용된다. Johansson 등<sup>(1)</sup>은 선형 beam 이론을 이용하여 SEM chamber 내에서 단결정 silicon의 파단강도를 측정하였다. Jones 등<sup>(2)</sup> 또한 bending 테스트를 이용하여 polysilicon의 파단 변형률을 구하는 실험을 수행하였다.

Sharpe Jr. 등<sup>(3)</sup>은 인장 시험을 통해 처음으로 직접적으로 변형률을 측정하는 데 성공하였다. 이들의 측정에는 간접계의 변형률/변위 게이지가 사용되었다. Tsuchiya 등<sup>(4)</sup>은 MEMS 부품의 직접 인장 테스트에 있어서 획기적 방법인 정전기력을 이용한 시편의 gripping 방법을 개발하였다.

MEMS 부품을 위한 실험과 시편에 대한 어떠한 확립된 표준도 없기 때문에 각 실험적 접근에서 다양한 기법과 장치를 사용하고 있고 그 결과 또한 넓은 범위에 걸쳐 나타난다. 이러한 실험적 다양성을 감소시키기 위해 Sharpe Jr. 등<sup>(5)</sup>은 round-robin 테스트법을 제시한 바 있다.

그러나 micro-length scale의 MEMS 부품에 대해서는 많은 수의 그레인을 가지는 다결정 재료의 각각의 그레인의 방향성을 고려하여야만 한다. 따라서 다결정 재료의 탄성 물성치의 통계적 분산은 기계적 성능 문제의 설명에 반드시 포함되어야 한다.

\* 경상대학교 대학원 기계공학과

\*\* 오하이오주립대 대학원 기계공학과

\*\*\* 경상대학교 기계공학과

\*\*\*\* 오하이오주립대 기계공학과

## 2. 시스템 소개

### 2.1 시뮬레이션의 흐름

여기서는 탄성 물성치의 예측을 위하여 시스템에 적용된 Monte-Carlo 시뮬레이션<sup>(6)</sup>의 주요 흐름을 보여준다. Fig. 1에 그 흐름도가 나타나 있다. 이 시스템은 ① kinetics 매개변수 추출, ② 미세구조 전개 시뮬레이션, ③ 그레인 상의 mesh 생성, ④ 유한요소 해석 그리고 ⑤ 통계적 수렴조사의 5개 주요부분으로 구성되어 있다.

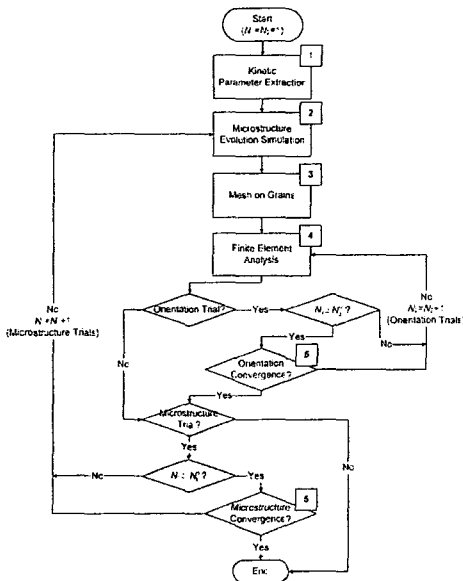


Fig. 1 Flow chart of the Monte-Carlo simulation process

### 2.2 미세구조 전개 시뮬레이션

이 시스템에서의 미세구조의 전개 시뮬레이션은 실험에서 시편제작에 해당하는 작업이다. 실제 시편제작 방법은 LPCVD(Low Pressure Chemical Vapor Deposition)이다. 결정핵 형성과 성장 메커니즘이 이 제작과정을 잘 묘사하기 때문에 이 시스템에서는 미세구조 전개 시뮬레이션을 위해 결정핵 형성과 성장 메커니즘을 적용하였다.

주어진 micrograph의 미세구조를 바탕으로 매개변수를 추출하여 미세구조를 재구성하거나 알려진 매개변수 값을 지정하여 미세구조를 재구성할 수 있다. 전자의 경우 micrograph의 치수와 도메인의 크기, 그리고 scale factor 등을 먼저 계산

하여 역추출법에 의해 결정 성장확률, 결정핵 형성확률( $p_N$ ), 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율( $f_P$ ) 등이 결정된다. 이들 추출된 매개변수들을 바탕으로 하여 미세구조가 재구성된다. 후자의 경우는 주어진 매개변수를 바탕으로 같은 작업이 수행된다.

### 2.3 Mesh 생성과 유한요소 해석

2.2절에서 재구성된 미세구조에 대하여 2차원 유한요소 mesh를 생성하고 이를 바탕으로 유한요소 해석을 수행한다.

유한요소 mesh의 생성을 위해 재구성된 미세구조의 기하학적 정보를 바탕으로 von-Neumann의 주변 이론<sup>(7)</sup>과 pixel-by-pixel marching scheme, Delaunay Triangulation 알고리즘 등의 수치적 방법을 적용하여 삼각형 요소가 생성된다. 생성된 삼각형 요소는 그레인 경계의 불규칙성으로 인해 개선이 필요할 수 있다. 이 시스템에서는 요소의 면적과 최소 내부각을 인자로 사용하여 mesh의 개선을 수행한다.

유한요소 해석을 위해 경계조건, 그레인에 부여된 무작위 방향, 그리고 미세구조를 구성하는 단일결정들의 이방성 탄성상수 등으로 구성된 입력파일이 만들어진다. 해석을 위해 시스템 내부적으로 유한요소 해석코드가 구축되었다. 이 코드는 해의 빠른 계산을 위해 skyline solver를 적용하였고 계산 효율을 최대화하기 위해 Sloan<sup>(8)</sup>의 profile reduction 알고리즘을 사용하였으며 경계조건 처리를 위해 penalty법<sup>(9)</sup>이 사용되었다. 이 코드의 정확성은 동일한 해석대상에 대하여 상업적 유한요소 해석 패키지인 ABAQUS를 이용한 결과와 비교함으로써 이미 검증되었다.

### 2.4 통계적 수렴조사

이 시스템에 사용된 Monte-Carlo 법은 사용되는 매개변수들에 대해 무작위 시도에 기초한 통계적 접근 방법이다. 따라서 이러한 무작위 시도의 수가 모든 가능한 범위를 다루기에 충분한가의 여부를 결정하기 위해 통계적 테스트는 필수적이다. 이 시스템에서는 통계적 수렴 이론으로서 Chi-square test<sup>(10)</sup>를 사용하였다. 이를 위해 Chi-square 분포의 신뢰구간과 자유도가 결정되었다. Chi-square 분포의 신뢰구간은 타당한 검증을 통해 0.5의 값으로 고정되었다. 모집단의 분포를

정규분포로 가정하고 이 기대분포와 표본분포가 일치한다고 간주할 수 있을 때 표본추출이 중단된다. 즉, 미세구조의 시뮬레이션 진행 중 계산된 탄성 물성치의 분포가 Chi-square 분포의 신뢰구간 내에서 정규분포로 간주될 수 있을 때 시뮬레이션은 종료된다.

### 3. 다결정 박막 재료의 적용

#### 3.1 다결정 재료의 결정구조와 해석모델

사용된 다결정 재료의 결정구조는 Fig. 2와 같다.

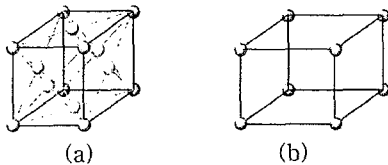


Fig. 2 Crystallographic structure; (a) polysilicon and BaTiO<sub>3</sub>(cubic), (b) ZrSiO<sub>4</sub>

Polysilicon은 면심입방체 구조를, ZrSiO<sub>4</sub>은 단순입방체 구조를 갖는다. BaTiO<sub>3</sub>의 경우 Curie 온도 이하에서는 정방정계 구조를, 그 이상에서는 입방체 구조를 가진다. 여기서는 입방체 구조만을 고려하였다. 이들 재료 모두 [100] plane normal texture에 대해서만 해석을 수행하였다.

이들 다결정 재료에 시스템을 적용하기 위해 Fig. 3의 간단한 해석모델이 사용되었다. 이 모델은 일정 변형률을 가지는 직사각형 모델로 실제 치수는 10×10 μm<sup>2</sup> 이고 100×100 픽셀의 도메인으로 설정되었다.

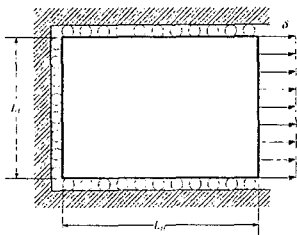


Fig. 3 Constant strain model for the effective elastic constant extraction

미세구조 재구성의 주요 매개변수들 중 결정핵 형성확률( $p_N$ )을 1.0으로 고정하고 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율( $f_P$ )의 값을 변화시키면서 유효

탄성상수들을 추출하였다.

#### 3.2 해석결과

Polysilicon, BaTiO<sub>3</sub> 그리고 ZrSiO<sub>4</sub>의 재료로 Fig. 3의 모델을 적용하여 해석을 수행한 결과가 각각 Fig. 4, Fig. 5 그리고 Fig. 6에 나타나 있다. 각 그래프에 표시된 원 하나는 각각 한번의 iteration 결과이고 사각형은 해당 시뮬레이션의 평균을 나타낸다. 세 경우 모두  $f_P$ 가 증가함에 따라 추출된 유효 탄성상수의 평균값에는 크게 영향을 미치지 않고 통계적 산포를 감소시킬 수 있다. 이는  $f_P$ 의 증가에 따라 미세구조의 그레인 수가 증가하기 때문이다.

세 결과를 살펴보면 polysilicon과 ZrSiO<sub>4</sub>에 비해 BaTiO<sub>3</sub>가 상대적으로 큰 산포를 가짐을 알 수 있다.

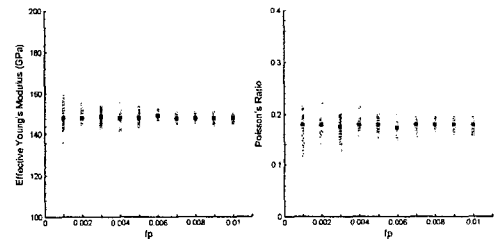


Fig. 4 Extracted effective elastic properties of polysilicon relative to  $f_P$

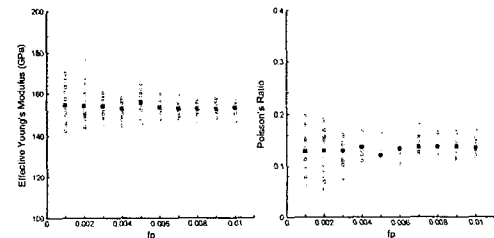


Fig. 5 Extracted effective elastic properties of BaTiO<sub>3</sub> relative to  $f_P$

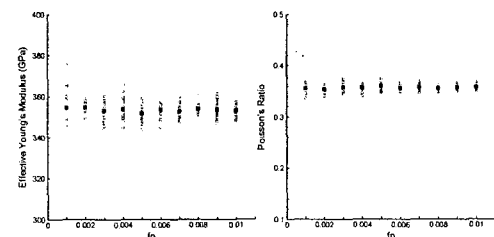


Fig. 6 Extracted effective elastic properties of ZrSiO<sub>4</sub> relative to  $f_P$

#### 4. 결론

MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치의 예측을 위하여 이미 개발된 수치 시스템을 소개하였다. 그리고 이 시스템을 이용하여 polysilicon, BaTiO<sub>3</sub> 그리고 ZrSiO<sub>4</sub>의 유효 탄성물성치를 추출하였다. 세 경우 모두 잠재적 결정해형성가능 격자비율의 증가에 따라 산포의 감소를 보이며 이는 그레인 수의 증가에 의한 것이다. 다른 두 재료에 대한 BaTiO<sub>3</sub>의 더 큰 산포는 온도에 따른 결정구조의 불안정성 때문으로 판단된다.

#### 후 기

이 논문은 한국과학재단에서 지원한 해외공동연구과제 수행결과입니다.

#### 참고문헌

- (1) Johansson, S., Schweitz, J. A., Tenerz, L. and Tiren, J., Tlustý, J., "Fracture testing of silicon microelement in situ in a scanning electron microscope, " *J. Appl. Phys.*, Vol. 63, No. 10, pp. 4799-4803, 1988
- (2) Jones, P. t., Johnson, G. C. and Howe, R. T., "Micromechanical structures for fracture testing of brittle thin films, " *Proc. MEMS DSC-Volume 59 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Atlanta, GA, Vol. 59, pp. 325-330, 1996*
- (3) Sharpe Jr., W. N., Yuan, B. and Edwards, R. L., "A New Technique for Measuring the Mechanical Properties of Thin Films, " *J. MicroElectroMechanical Syst.*, Vol. 6, No. 3, pp. 193-199, 1997
- (4) Tsuchiya, T., Tabata, O., Sakata, J. and Yasunori, T., "Specimen size effect on tensile strength of surface-micromachined polycrystalline silicon thin-films, " *J. MicroElectroMechanical Syst.*, Vol. 7, No. 1, pp. 106-103, 1998
- (5) Sharpe Jr., W. N., Brown, S., Johnson, G. C. and Knauss, W., "Round-Robin Tests of Modulus and Strength of Polysilicon, " *Mat. Res. Soc. Symp. Proc., San Francisco, CA, Materials Research Society, Vol. 518, pp. 57-65, 1998*
- (6) Mullen, R. L., Ballarini, R., Yin, Y. and Heuer, A. H., "Monte Carlo simulation of effective elastic constants of polycrystalline thin films, " *Acta Materialia, Vol. 45, No. 6, pp. 2247-2255, 1997*
- (7) Weisstein, E. W., "von Neumann Neighborhood, " A Wolfram Web Resource, <http://mathworld.solfram.com/Multichoose.html>
- (8) Sloan, S. W., "An algorithm for profile and wavefront reduction of sparse matrices, " *Int. J. Numer. Meth. Engng, Vol. 23, pp. 239-251, 1986*
- (9) Chandrupatla, T. R. and Belegundu, A. D., "Penalty Approach, " in 'Introduction to Finite Elements in Engineering', Prentice Hall, pp. 69-72, 1997
- (10) Fry, T. C., "Probability and Its Engineering Uses, " Princeton, D. Van Nostrand Company, Inc., 1965
- (11) Choi, J., Kim, H. and Lee, J. K., "Lattice Based Microstructure Evolution Model for Monte Carlo Finite Element Analysis of Polycrystalline Materials, " *Materials Processing and Design: Modeling, Simulation and Applications, Columbus, OH, Proc. NUMIFORM 2004, American Institute of Physics, pp. 1824-1829, 2004*
- (12) Choi, J. and Lee, J. K., "Lattice based microstructure evolution simulation with kinetics parameters extraction for the polycrystalline thin-film, " to be published, 2004
- (13) Choi, J., "Statistical Approach to the Elastic Property Extraction and Planar Elastic Response of Polycrystalline Thin-Films, " Ph.D. Dissertation, The Ohio State University, Mechanical Engineering, 2004