

# MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치 추출 시스템과 적용

정향남<sup>#</sup>, 최재환\*, 정희택\*\*, 이준기\*\*\*

## Elastic Property Extraction System of Polycrystalline Thin-Films for Micro-Electro-Mechanical System Device and Its Applications

Hyang Nam Jung<sup>#</sup>, Jae Hwan Choi\*, Hee Taeg Chung\*\* and June Key Lee\*\*\*

### ABSTRACT

A numerical system to extract effective elastic properties of polycrystalline thin-films for MEMS devices is 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, effects of kinetics parameters on the extraction of effective elastic properties of polycrystalline thin-films are studied by using statistical method. Effects of the fraction of the potential site( $f_p$ ) among the parameters for deposition process of microstructure on the extraction of effective elastic properties of polycrystalline thin-films are investigated. For this research, polysilicon is applied to this system as the polycrystalline thin-films.

**Key Words** : Micro-Electro-Mechanical System(마이크로 전자기계시스템), Polycrystalline thin-film(다결정 박막), Monte-Carlo method(몬테카를로 법), Elasticity(탄성), Property(물성치), Microstructure(미세구조)

### 기호설명

$p_N$  = nucleation probability  
 $f_p$  = fraction of the potential site

### 1. 서론

MEMS 부품에 사용되는 다결정 박막의 기계적

성능은 MEMS 분야의 성장으로 인해 중요한 논제 중 하나가 되었다. MEMS 부품을 위한 실험 기법으로 주로 보-굽힘시험(*beam-bending test*)과 직접 인장 시험법이 이용된다. Johansson<sup>1</sup> 등은 선형 보 이론을 이용하여 SEM 챔버 내에서 단결정 실리콘(*silicon*)의 파단강도를 측정하였다. Jones<sup>2</sup> 등 또한 굽힘시험을 이용하여 다결정 실리콘(*polysilicon*)의 파단 변형률을 구하는 실험을 수행하였다. Sharpe

<sup>\*\*\*</sup> 접수일: 2005 년 6 월 3 일; 게재승인일: 2005 년 10 월 7 일

<sup>#</sup> 교신저자: 경상대학교 공학연구원

E-mail: ryang@hanmail.net Tel. (055) 758-0473

\* ABAQUS, Inc.

\*\* 경상대학교 기계·항공공학부

\*\*\* 오하이오 주립대 기계공학과

Jr.<sup>3</sup> 등은 인장 시험을 통해 처음으로 직접적으로 변형률을 측정하는 데 성공하였다. 이들의 측정에는 간접계의 변형률/변위 게이지가 사용되었다. Tsuchiya<sup>4</sup> 등은 MEMS 부품의 직접 인장 시험에 있어서 획기적 방법인 정전기력을 이용한 시편의 체결(gripping) 방법을 개발하였다. 한편 오충석<sup>5</sup> 등은 레이저 간섭 변위계(ISDG)를 이용하여 탄성계수의 변화를 측정한 바 있다.

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.<sup>6</sup> 등은 라운드 로빈 시험(round-robin test)법을 제시한 바 있다.

그러나 마이크로 스케일(micro-length scale)의 MEMS 부품에 대해서는 많은 수의 입자(grain)를 가지는 다결정 재료의 각각의 입자의 방향성을 고려하여야만 한다. 따라서 다결정 재료의 탄성 물성치의 통계적 분산은 기계적 성능 문제의 설명에 반드시 포함되어야 한다.

본 논문에서는 MEMS 부품을 위한 다결정 박막(polycrystalline thin-film)의 탄성 물성치를 예측하기 위한 수치적 방법을 제시하고 이를 다결정 실리콘에 적용하여 시스템의 매개변수 중 하나인 잠재적 결정핵 형성 가능 격자비율( $f_p$ )이 탄성 물성치의 예측에 미치는 영향을 조사하였다.

## 2. 시스템 소개

### 2.1 시뮬레이션의 흐름

탄성 물성치의 예측을 위하여 시스템에 적용된 Monte-Carlo 모사<sup>7</sup>의 주요 흐름이 Fig. 1에 나타나 있다.

### 2.2 미세구조 전개와 유한요소 해석

이 시스템에서의 미세구조의 전개 모사는 실험에서 시편제작에 해당하는 작업이다. 실제 시편제작 방법은 LPCVD(Low Pressure Chemical Vapor Deposition)<sup>8</sup>이다. LPCVD에서의 미세구조 전개 기구인 결정핵 형성과 성장 기구(mechanism)가 다결정 미세구조의 적층(deposition) 과정을 잘 묘사하기 때문에 이 시스템에서는 미세구조 전개 모사(simulation)를 위해 결정핵 형성과 성장 기구를 적용하였다. 주어진 미세조직사진(micrograph)의 미세

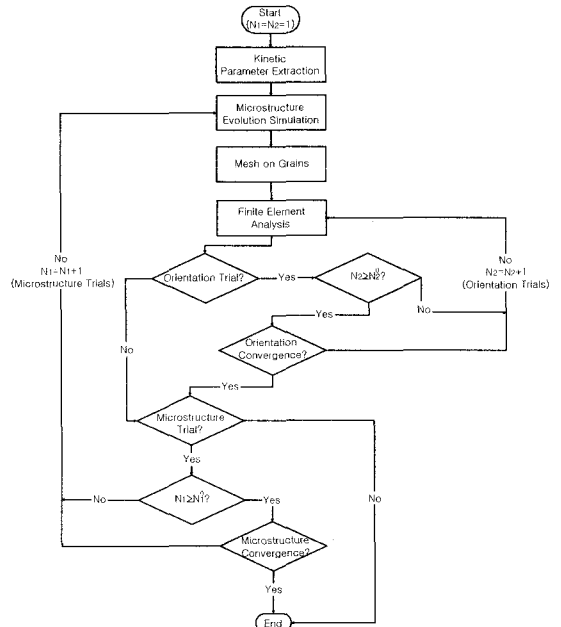
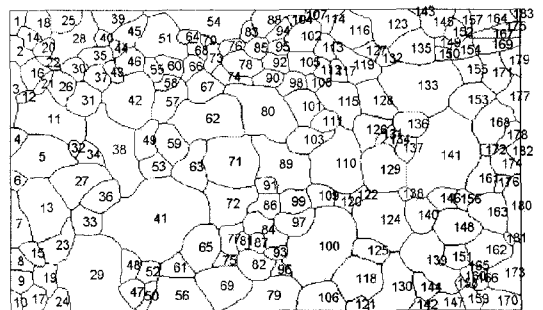
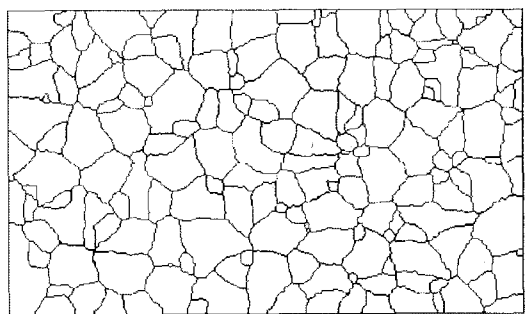


Fig. 1 Flow chart of the Monte-Carlo simulation process



(a) Given microstructure of nickel



(b) Reconstructed microstructure of nickel

Fig. 2 Binary images of reconstructed microstructure by the microstructure evolution simulation

구조를 바탕으로 매개변수를 추출하여 미세구조를 재구성하거나 알려진 매개변수 값을 지정하여 미세구조를 재구성 할 수 있다. Ilzhofer<sup>9</sup> 등에 의해 주어진 실제 니켈의 미세구조와 이를 바탕으로 재구성한 미세구조를 Fig. 2 에 나타내었다. 본 연구의 미세구조 전개 모사는 실제 구조와 유사한 수준의 미세구조 전개가 가능함을 보여준다.

재구성된 미세구조에 대하여 2 차원 유한요소 격자를 생성하고 이를 바탕으로 유한요소 해석을 수행한다. 이 코드의 정확성은 동일한 해석대상에 대하여 상업적 유한요소 해석 패키지인 ABAQUS 를 이용한 결과와 비교함으로써 이미 검증되었다.<sup>10</sup> 다결정 박막은 필름 표면에서 2 차원 모사를 가능하게 하는 열 구조를 가진 것으로 가정할 수 있으므로 박막의 두께효과는 고려하지 않기로 한다.

### 2.3 통계적 수렴조사

이 시스템에 사용된 몬테카를로(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>11</sup> 를 사용하였다. 미세구조의 모사 진행 중 계산된 탄성 물성치의 분포가 Chi-square 분포의 신뢰구간 내에서 정규분포로 간주될 수 있을 때 미세구조 모사는 종료된다.

## 3. 매개변수의 영향

### 3.1 다결정 재료의 결정구조와 해석모델

사용된 다결정 실리콘의 결정구조는 Fig. 3 과 같이 면심입방체 구조를 갖는다. 해석 시에는 평면 수직구조(plane normal texture)를 [100]으로 고정하여 해석을 수행하였다.

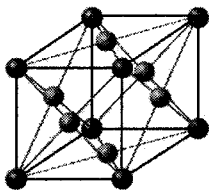


Fig. 3 Crystallographic structure of polysilicon

다결정 실리콘에 시스템을 적용하기 위해 Fig. 4 의 간단한 해석모델이 사용되었다. 이 모델은 일정 변형률을 가지는 직사각형 모델로 실제 치수는 10×10 이고, 100×100 픽셀의 도메인으로 설정되었다. 미세구조 재구성의 주요 매개변수들 중 결정핵 형성확률( $p_N$ )을 1.0 으로 고정하고 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율( $f_p$ )의 값을 변화시키면서 유효 탄성상수들을 추출하였다. 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이란 전체 도메인 내에서 결정핵을 형성할 수 있는 격자의 비율을 말한다. 이 값이 1.0 이면 도메인의 전체 격자가 결정핵 형성이 가능한 것으로 간주된다.

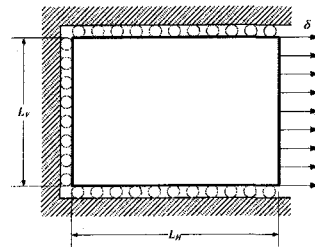


Fig. 4 Constant strain model for the effective elastic constant extraction

### 3.2 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 영향

시스템에서 일차적으로 추출 가능한 응력, 변형률, 반력, 변위 등을 바탕으로 유효 탄성계수와 포아송비 등의 유도된 변수를 계산 할 수 있다.<sup>12</sup> 본 연구에서는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 유효 탄성계수와 포아송비의 추출에 미치는 영향을 조사하였다. 결정핵 형성확률을 1.0 으로 고정하고 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 값을 0.001 에서 0.01 까지 변화시키면서 결과를 추출하였다. Fig. 5 는 일곱 번째 모사과정의 첫 번째 계산에서 재구성된 미세구조와 그에 따라 생성된 유한요소 격자를 나타낸 것이다.

전체 모사의 결과가 Fig. 6 에 나타나 있다. 각 그래프에 표시된 원 하나는 각각 한 번의 계산 결과이고 사각형은 해당 모사과정의 평균을 나타낸다. 각각의 계산에 대한 평균과 산포가 Table 1 에 나타나 있다. 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 변화에 따른 유효 탄성상수들의 평균값의 변화는 탄성계수의 경우 0.05%미만, 포아송비의 경우 0.5%미만으로 둘 다 변화가 없다고 판정할 수 있

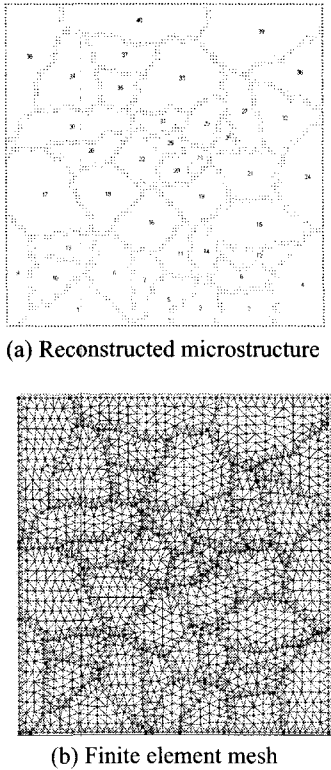
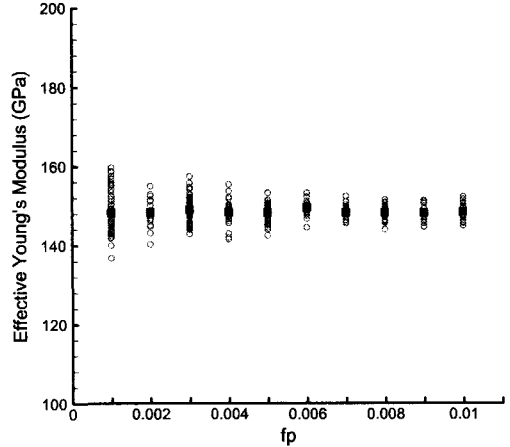


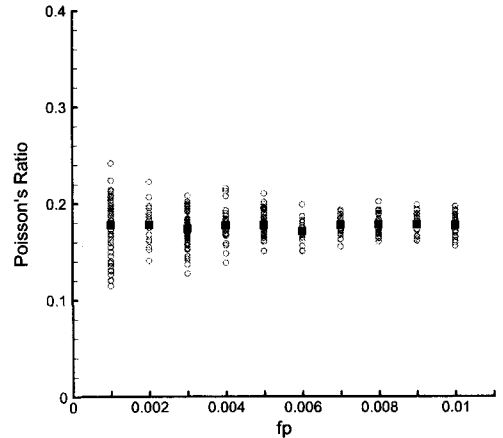
Fig. 5 Reconstructed microstructure and finite element mesh of simulation #7, iteration #1

Table 1 Averages and standard deviations of effective elastic properties for polysilicon

$f_p$	Young's modulus		Poisson's ratio	
	Average	Standard deviation	Average	Standard Deviation
0.001	148.2852	5.4854	0.1776	0.0304
0.002	148.2875	3.5526	0.1776	0.0197
0.003	148.9577	3.1522	0.1738	0.0175
0.004	148.3713	3.2225	0.1771	0.0179
0.005	148.2828	2.4254	0.1776	0.0135
0.006	149.4687	2.1258	0.1710	0.0118
0.007	148.2696	1.8369	0.1776	0.0102
0.008	148.2253	1.7053	0.1784	0.0098
0.009	148.2370	2.0212	0.1778	0.0112
0.010	148.3490	1.8094	0.1772	0.0100



(a) Young's modulus



(b) Poisson's ratio

Fig. 6 Extracted effective elastic properties of polysilicon relative to the fraction of the potential site ( $f_p$ )

으나 표준편차는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 증가함에 따라 탄성계수와 포아송비 모두 67%이상의 감소를 보여 그 통계적 산포는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율에 종속되어 있음을 알 수 있다.

잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 증가함에 따른 유효 탄성상수들의 평균변화는 나타나지 않으나 그 결과값의 통계적 산포를 감소시키기를 확인할 수 있다. 이는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 증가가 각 미세구조의 입자 수를 증가시키기 때문이다. 정해진 도메인 내에서의 입자 수의 증가는 구성 단일결정의 이방성을 감소시켜 유효 탄

성상수들의 통계적 산포를 감소시킨다.

#### 4. 결론

MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치의 예측을 위하여 이미 개발된 수치 시스템을 소개하였다. 그리고 이 시스템을 이용하여 미세구조의 모사에 주요 변수로 작용하는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 결과에 미치는 영향에 대해 조사하기 위해 다결정 실리콘을 적용하여 유효 탄성계수와 포아송비를 추출하였다.

잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 증가는 추출된 유효 탄성물성치의 통계적 산포를 감소시킨다. 이는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 재구성된 미세구조의 입자 수를 증가시키기 때문이다. 그러나 이 매개변수는 추출된 유효 탄성물성치의 평균값에는 영향을 미치지 않는다.

#### 후 기

이 논문은 한국과학재단에서 지원한 해외공동연구과제 수행결과입니다.

#### 참고문헌

- Johansson, S., Schweitz, J. A., Tenerz, L. and Tiren, J., Tlusty, J., "Operation Planning Based on Cutting Process Model," *J. Appl. Phys.*, Vol. 63, No. 10, pp. 4799-4803, 1988.
- 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.
- Sharpe Jr., W. N., Yuan, B. and Edwards, R. L., "A New Technique for Measuring the Mechanical Properties of Thin Films," *J. Micro-Electro-Mechanical Syst.*, Vol. 6, No. 3, pp. 193-199, 1997.
- Tsuchiya, T., Tabata, O., Sakata, J. and Yasunori, T., "Specimen size effect on tensile strength of surface-micromachined polycrystalline silicon thin-films," *J. Micro-Electro-Mechanical Syst.*, Vol. 7, No. 1, pp. 106-103, 1998.
- Oh, C. S. and Sharpe Jr., W. N., "Techniques for Measuring Mechanical Properties of Polysilicon using an ISDG," *Journal of the Korean Society of Precision Engineering*, Vol. 21, No. 7, pp. 171-178, 2004.
- 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.
- 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.
- Zellama, K., Germain, P., Squelard, S. and Bourgoin, J. C., "Crystallization in amorphous silicon," *Appl. Phys.*, Vol. 50, No. 11, pp. 6995-7000, 1979.
- Ilzhofer, A., Schneider, H. and Tsakmakis, C., "Tensile testing device for microstructured specimens," *Microsystem Technologies*, Vol. 4, No. 1, pp. 46-50, 1997.
- 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.
- Fry, T. C., "Probability and Its Engineering Uses," Princeton, D. Van Nostrand Company, Inc., 1965.
- den Toonder, J. M., van Dommelen, J. A. W. and Baaijens, F. P. T., "The relation between single crystal elasticity and the effective elastic behavior of polycrystalline materials: theory, measurement and computation," *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 7, pp. 909-928, 1999.