

## MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치 추출 시스템의 매개변수의 영향

정향남\*(경상대학교), 최재환(The Ohio State University), 정희택(경상대학교),  
이준기(The Ohio State University)

Parametric Effects of Elastic Property Extraction System of Polycrystalline Thin-Films for  
Micro-Electro-Mechanical System Devices

H. N. Jung(Mechanical Eng. Dept., GSNU), J. H. Choi(Mechanical Eng. Dept., OSU),  
H. T. Chung(Mechanical Eng. Dept., GSNU), J. K. Lee(Mechanical Eng. Dept., OSU)

### 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 effects of kinetics parameters on the extraction of effective elastic properties of polycrystalline thin-films are studied by using statistical method. The effects of the fraction of the potential site( $f_p$ ) and the nucleation probability( $p_N$ ) among the parameters for deposition process of microstructure on the extraction of effective elastic properties of polycrystalline thin-films are studied.

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

### 1. 서론

다결정 박막의 MEMS 에서의 역할과 MEMS 분야의 자체 성장으로 인해 다결정 박막의 기계적 성능이 중요한 논제중 하나가 되었다. MEMS 기계부품의 재료로서 실리콘의 우수성을 입증한 Petersen<sup>(1)</sup> 이후 지난 수십년 동안 MEMS 와 그 부품에 대한 수많은 광범위한 연구가 있어왔다. MEMS 부품을 위한 수많은 실험 기법들 중 주로 beam-bending 테스트와 직접 인장 테스트법이 이용된다. Johansson 등<sup>(2)</sup>은 선형 beam 이론을 이용하여 SEM chamber 내에서 단결정 실리콘의 파단강도를 측정하였다. Jones 등<sup>(3)</sup> 또한 bending 테스트를 이용하여 폴리실리콘의 파단 변형률을 구하는 실험을 수행하였다. 그리고 Wilson 과 Beck<sup>(4)</sup>은 FEM 을 연산시켜 단결정 실리콘의 파단강도를 측정하였다.

Sharpe Jr. 등<sup>(5)</sup>은 처음으로 직접적으로 변형률을

측정하는 데 성공하였다. 이들의 측정에는 간접계의 변형률/변위 게이지가 사용되었다. Tsuchiya 등<sup>(6)</sup>은 MEMS 부품의 직접 인장 테스트에 있어서 획기적 방법인 정전기적으로 시편을 고정하는 방법을 개발하였다. 이를 이용하여 시편 크기가 작아짐에 따라 인장강도가 증가함을 보였다.

MEMS 부품을 위한 실험적 접근은 실험과 시편에 대한 어떤 표준도 없기 때문에 다양한 기법과 장치를 사용하고 있고 그 결과 또한 넓은 범위에 걸쳐 나타난다. 이를 해결하기 위해 Sharpe Jr. 등<sup>(7)</sup>이 연속 테스트법을 제시한 바 있다.

그러나 MEMS 부품이 micro-length scale 이기 때문에 많은 수의 그레이를 가지는 다결정 재료의 각각의 그레이의 방향성을 고려하여야만 한다. 따라서 다결정 재료의 탄성 물성치의 통계적 분산은 기계적 성능 문제의 설명시에 필수적으로 포함되어야 한다.

## 2. 시스템의 소개

### 2.1 시뮬레이션의 흐름

여기서는 통계적으로 분산된 탄성 물성치들의 예측을 위하여 적용된 Monte-Carlo 시뮬레이션<sup>(8,9)</sup>의 주요 흐름을 보여준다. Fig. 1 에 그 흐름도가 나타나 있다. 이 시뮬레이션은 다음과 같이 5 개의 주요부분으로 구성되어 있다.

- 1) kinetics 매개변수 추출
- 2) 미세구조 전개 시뮬레이션
- 3) 그레인 상의 mesh 생성
- 4) 유한요소 해석
- 5) 통계적 수렴조사

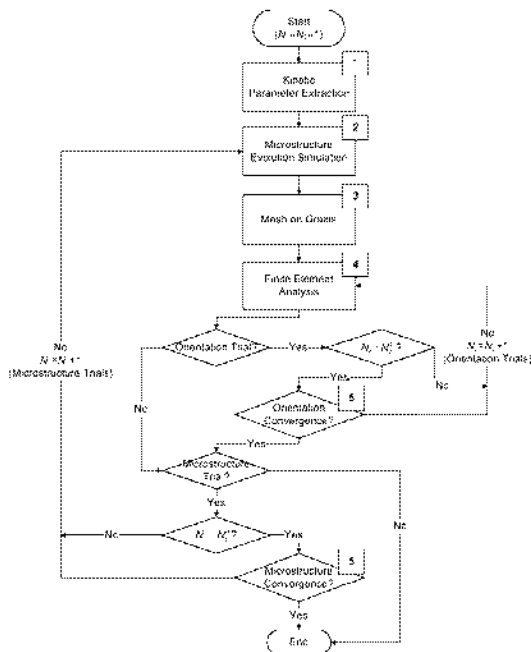


Fig. 1 Flow chart of the Monte-Carlo simulation process

### 2.2 미세구조 전개 시뮬레이션

이 시스템에서는 역추출법을 이용하여 kinetics 매개변수를 추출하고 미세구조의 전개 시뮬레이션에 이용한다. 이는 실험에서 시편제작에 해당하는 작업이다. 실제 시편제작 모델은 LPCVD(Low Pressure Chemical Vapor Deposition)이다. 이 과정을 잘 묘사하는 메커니즘이 결정핵 형성과 성장 메커니즘이다. 따라서 이 시스템에서는 미세구조 전개 시뮬레이션을 위해 이 메커니즘을 사용하였다.

미세구조 전개를 위한 kinetics 매개변수를 알 수 없고 micrograph 가 존재할 경우 이 micrograph 의 미세구조를 바탕으로 매개변수를 추출한다. 먼저 micrograph 의 치수와 격자 바탕의 픽셀단위의

도메인의 크기, 그리고 scale factor 등이 즉시 계산된다. 그리고 표준화된 그레인 수와 그레인 크기 분포를 마스터 맵으로 사용하는 역추출법에 의해 결정 성장확률, 결정핵 형성확률, 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율 등이 결정된다. 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율은 전체 도메인 내에서 형성 가능한 핵의 비율을 나타낸다. 이 값이 1.0 이면 전체 도메인의 픽셀들이 결정핵 형성이 가능한 것으로 간주된다. 그리고 결정 성장확률은 독립된 그레인의 성장 시뮬레이션의 결과로 0.7 로 고정되었다. 이들 추출된 매개변수들을 바탕으로 하여 미세구조가 재구성된다.

### 2.3 Mesh 생성과 유한요소 해석

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

유한요소 mesh 의 생성을 위해 재구성된 미세구조의 기하학적 정보를 바탕으로 vertex 를, von-Neumann 의 주변 이론<sup>(10)</sup>을 적용하여 그레인 경계를 추출하고 pixel-by-pixel marching scheme 을 사용하여 경계 픽셀들을 정렬한다. 이러한 정렬과 함께 각 node 들의 위치가 정해진다. 이후 Delaunay Triangulation 알고리즘으로 위에서 위치된 node 를 이용하여 삼각형 요소가 생성된다. 생성된 삼각형 요소와 이를 구성하는 node 를 그룹화하여 동일한 ID 를 부여하면 유한요소 meshing 은 완성된다. 그러나 그레인 경계의 불규칙적인 형태로 인해 그 주위의 mesh 또한 불규칙적일 수 있다. 따라서 정확한 유한요소 계산을 위해 mesh 의 개선이 필요하다. 여기서는 mesh 의 개선을 위해 요소의 면적과 최소 내부각을 인자로 사용하였다.

유한요소 해석을 위해 경계조건, 통계적 수렴 계산을 위한 추적, 각각의 그레인에 부여된 무작위 방향, 그리고 미세구조를 구성하는 단일결정들의 이방성 탄성상수들로 구성된 입력파일이 만들어진다. 해석을 위해 시스템 내부적으로 유한요소 해석 코드가 구축되었다. 이 코드는 해의 빠른 계산을 위해 skyline solver 를 적용하였고 계산 효율을 최대화하기 위해 Sloan<sup>(11)</sup>의 profile reduction 알고리즘을 사용하였으며 경계조건 처리를 위해 penalty 법<sup>(12)</sup>이 사용되었다. 이 코드의 정확성은 동일한 해석대상에 대하여 상업적 유한요소 해석 패키지인 ABAQUS 를 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>(13)</sup>를 사용하였다. 이를 위해 Chi-square 분포의 신뢰구간과 자유도가 결정되었다. Chi-square 분포의 신뢰구간은 타당한 검증을 통해 0.5 의 값으로 고정되었다. 모집단의 분포를 정규분포로 가정하고 이 기대분포와 표본분포가 일치한다고 간주할 수 있을 때 표본추출이 중단된다. 이 시스템에서의 모집단은 주어진 미세구조의 모든 가능한 경우의 탄성 물성치로 간주될 수 있으며 표본추출은 미세구조 시뮬레이션의 각 iteration 을 의미한다. 즉, 미세구조의 시뮬레이션 진행 중 계산된 탄성 물성치의 분포가 Chi-square 분포의 신뢰구간 내에서 정규분포로 간주될 수 있을 때 시뮬레이션은 끝난다.

### 3. 매개변수의 영향

#### 3.1 적용모델

미세구조 전개 시뮬레이션 시스템의 매개변수가 폴리실리콘의 유효 탄성물성치에 미치는 영향을 조사하기 위해 Fig. 2 의 간단한 모델이 적용된다. 이 모델은 일정 변형률을 가지는 직사각형 모델로 실제 치수는  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$  이고  $100 \times 100$  픽셀의 도메인으로 설정되었으며 [100]방향의 plane normal texture 를 가지는 폴리실리콘을 재료로 적용하였다.

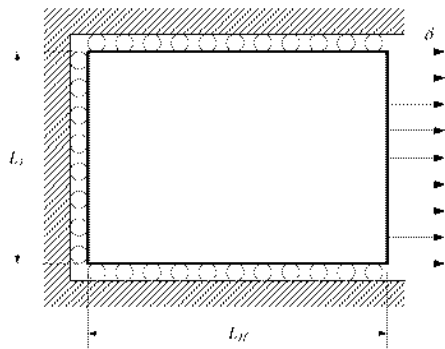


Fig. 2 Constant strain model for the effective elastic constant extraction

#### 3.2 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 영향

잠재적 결정핵 형성가능 격자비율( $f_p$ )이란 전체 도메인 내에서 결정핵을 형성할 수 있는 격자의 비율을 말한다. 이 매개변수가 유효 Young's modulus 와 Poisson's ratio 의 추출에 미치는 영향이 각각 Fig. 3 과 Fig. 4 에 나타나 있다. 여기서 결정핵 형성확률( $p_N$ )은 1.0 의 값으로 고정되었다. 그림에서 작은 원 하나는 각각 하나의 iteration 의 결

파이고 사각형은 각각의 시뮬레이션 결과의 평균값이다. 그림에서 보듯이 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 증가함에 따라 유효 탄성물성치의 평균값에는 크게 영향을 미치지 않지만 그 산포는 점점 감소함을 알 수 있다. 이는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 증가함에 따라 각 미세구조의 그레인 수의 증가하기 때문이다. 정해진 도메인 내에서의 그레인 수의 증가는 구성 단일결정의 이방성을 감소시켜 유효 탄성물성치의 산포를 감소시킨다.

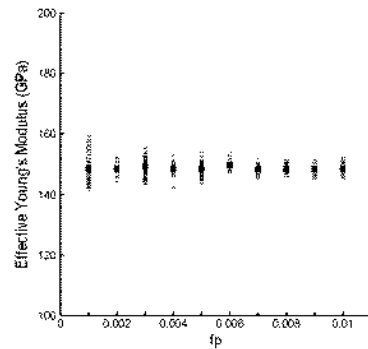


Fig. 3 Effective Young's moduli for polysilicon with [100] plane normal texture relative to the fraction of the potential site( $f_p$ )

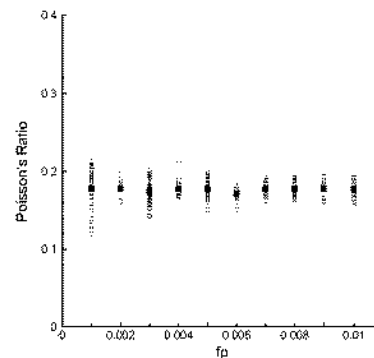


Fig. 4 Effective Poisson's ratios for polysilicon with [100] plane normal texture relative to the fraction of the potential site( $f_p$ )

#### 3.3 결정핵 형성확률의 영향

이 절에서는 결정핵 형성확률( $p_N$ )이 폴리실리콘의 유효 탄성상수들에 미치는 영향을 조사하였다. 이 시뮬레이션은 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율의 값을 1.0 으로 고정하여 수행되었다. 그 결과를 Fig. 5 와 Fig. 6 에 나타내었다. 결정핵 형성확률이 폴리실리콘의 탄성상수들의 평균값에 미치는 영향은 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율과 마찬가지로 미소하다. 그리고 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율이 증가함에 따라 각 시뮬레이션의 결과값의 산포가 감소하는데 반해 결정핵 형성확률의 경우에는

산포의 감소가 나타나지 않는다. 이는 결정핵 형성 확률의 증가폭을 0.000005 로 설정하여 산포에 주 영향을 미치는 그레인의 수가 미소하게 증가하기 때문인 것으로 판단된다. 실제로 잠재적 결정핵 형성가능 격자 비율이 0.001 에서 0.01 로 증가함에 따라 미세구조의 그레인의 수는 10 개에서 100 개로 증가한다. 그러나 결정핵 형성확률의 경우에는 0.000105 에서 0.000150 으로 증가함에 따른 그레인 수의 증가는 10 개에서 19 개까지로 그 차이가 명백하다.

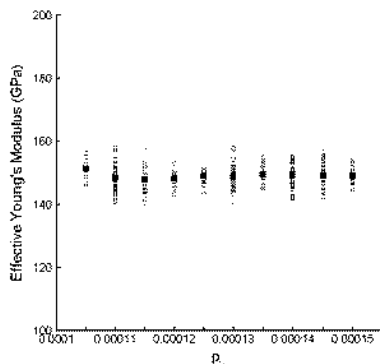


Fig. 5 Effective Young's moduli for polysilicon with [100] plane normal texture relative to the nucleation probability( $p_n$ )

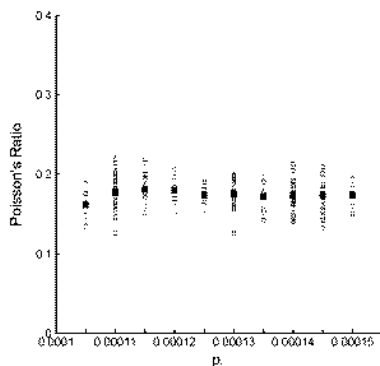


Fig. 6 Effective Poisson's ratios for polysilicon with [100] plane normal texture relative to the nucleation probability( $p_n$ )

#### 4. 결론

MEMS 부품을 위한 다결정 박막의 탄성 물성치의 예측을 위하여 이미 개발된 수치 시스템을 소개하였다. 그리고 이 시스템을 이용하여 미세구조의 시뮬레이션에 주요 변수로 작용하는 잠재적 결정핵 형성가능 격자비율과 결정핵 형성확률이 시뮬레이션 결과에 미치는 영향에 대해 조사하였다. 잠재적

결정핵 형성가능 격자비율과 결정핵 형성확률 모두 재구성된 미세구조의 그레인 수에 영향을 미침으로써 탄성상수들의 통계적 산포에 영향을 미친다는 점을 알 수 있다. 동일한 도메인 내에서 두 매개변수의 증가는 그레인의 수를 증가시키고 이는 탄성상수들의 통계적 산포를 감소시킨다. 그러나 이들 매개변수는 평균값에는 영향을 미치지 않음도 알 수 있다.

#### 후 기

이 논문은 한국과학재단에서 지원한 해외공동연구과제 수행결과입니다.

#### 참고문헌

- Petersen, K. E., "Silicon as a Mechanical Material," Proc. IEEE, Vol. 70, No. 5, pp. 420-457, 1982
- 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
- 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
- Wilson, C. J. and Beck, P. A., "Fracture testing of bulk silicon microcantilever beam subjected to a side load," J. MicroElectroMechanical Syst., Vol. 5, No. 3, pp. 142-150, 1996
- 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
- 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
- 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

9. Yin, Y., "Monte Carlo Simulation of Effective Constants of Polycrystalline Thin Films, " M.Sc Thesis, Case Western Reserve University, Civil Engineering, 1997
10. Weisstein, E. W., "von Neumann Neighborhood, " A Wolfram Web Resource, <http://mathworld.wolfram.com/Multichoose.html>
11. Sloan, S. W., "An algorithm for profile and wavefront reduction of sparse matrices, " Int. J. Numer. Meth. Engng, Vol. 23, pp. 239-251, 1986
12. Chandrupatla, T. R. and Belegundu, A. D., "Penalty Approach, " in 'Introduction to Finite Elements in Engineering', Prentice Hall, pp. 69-72, 1997
13. Fry, T. C., "Probability and Its Engineering Uses, " Princeton, D. Van Nostrand Company, Inc., 1965
14. 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
15. Choi, J. and Lee, J. K., "Lattice based microstructure evolution simulation with kinetics parameters extraction for the polycrystalline thin-film, " to be published, 2004
16. 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