

# 나노인덴테이션을 이용하여 극미세 패턴을 제작하기 위한 나노 변형의 유한요소해석(I)

이정우\*, 윤성원#, 강충길\*\*

## Finite Element Analysis of Nano Deformation for the Hyper-Fine Pattern Fabrication by using Nanoindentation

Jung Woo Lee\*, Sung Won Youn# and Chung Gil Kang\*\*

### ABSTRACT

In this study, to achieve the optimal conditions for mechanical hyper-fine pattern fabrication process, deformation behavior of the materials during indentation was studied with numerical method by ABAQUS S/W. Polymer (PMMA) and brittle materials (Si, Pyrex glass) were used as specimens, and forming conditions to reduce the elastic restoration and pile-up was proposed. The indenter was modeled a rigid surface. Minimum mesh sizes of specimens are 1-10nm. The result of the investigation will be applied to the fabrication of the hyper-fine pattern and mold.

**Key Words :** Hyper-fine pattern (극미세 패턴), pile-up (버), Elastic restoration (탄성복원), Nanoindentation (나노인덴테이션), Tip design (팁설계)

### 기호설명

- $\alpha$  = Half angle of nanoindenter tip (Cone shape)
- $\beta$  = Half angle of nanoindenter tip (Berkovich shape)
- R = radius of Sphere
- D = Distance between tip and tip
- Radius = Tip radius

### 1. 서론

나노인덴테이션 장비는 원래 벌크재료와 얇은

박막의 기계적 특성 즉 탄성계수와 경도를 측정하고, 또한 스크래치 공정을 이용하여 마찰계수를 측정하는 것이 목적이다.<sup>1-2</sup> 여기서 나노인덴테이션의 스크래치 공정은 수 nm의 두께를 가진 박막까지 마찰계수 측정이 가능하다. 이 공정을 응용하여 극미세 패턴을 제작하려고 한다.

현재 가장 많이 사용되고 있는 미세패턴 및 구조물 제작기술로서는 LIGA, 광학이나 고에너지 이온빔, X선 등을 이용하는 리소그래피 기술을 들 수 있다.<sup>3-4</sup> 이러한 리소그래피 기술들은 자외선, X선, 레이저 등의 광시스템 및 aligner 등 시설에 대한 초기 투자비용이 너무 높고, 공정특성상 다단

<sup>1</sup> 2002년 10월 28일 접수  
\* 부산대학교 대학원 정밀기계공학과  
# 교신저자, 부산대학교 정밀기계공학과  
Email wonny@hitel.net Tel. (051) 510-1455  
\*\* 부산대학교 기계공학부, 정밀정형 및 금형가공연구소

계의 마스크 공정과 에칭공정 중 복잡한 공정을 필요로 하며 제작시간이 많이 소요될 뿐만 아니라, 패턴변경 등 디자인 변화를 위해서는 새로 마스크를 제작해야 하는 문제가 있어 단품종 생산에는 적합하나 다품종 생산에는 부적합하다. 또한, 가공 가능한 재료가 대부분 실리콘 기반재료에 한정되어 있다는 단점을 가진다. 리소그래피 기술에 의하여 제작 가능한 최소선폭의 물리적 한계로 인하여 마찰력현미경(FFM)이나 원자력현미경(AFM) 등의 기계적 방법을 이용한 반도체 표면 위에 극미세 패턴을 제작하기 위한 많은 실험들이 행해져 왔다.<sup>5-8</sup>

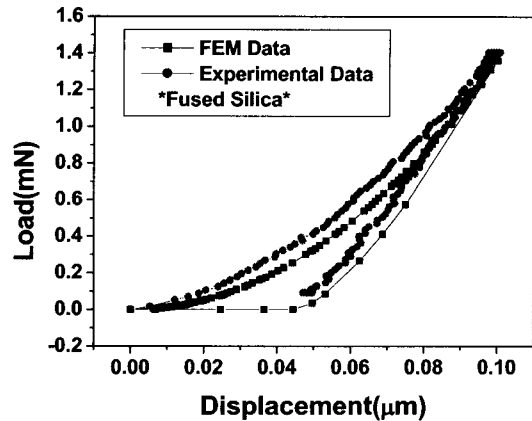
극미세 패턴의 제작공정에서 나노인덴테이션의 스크래치 공정을 이용할 경우 원자력현미경을 이용했을 때에 비하여 수직하중의 조절범위가 넓으며(max. 1N), 가공면이 넓고(2cm<sup>2</sup>), 수평하중의 조절이 가능하다는 장점이 있다. 그러나 공정의 cycle time 이 느리고 가공시 발생하는 탄성복원이나 버(pile-up)가 심하여 패턴의 재현성과 정밀도가 나쁘다는 단점이 있다.<sup>9</sup>

본 연구는 나노인덴테이션 스크래치 공정으로 극미세 패턴을 제작하기 전 나노인덴테이션 압입 공정의 유한요소해석을 이용하여 소재의 변형을 예측 보다 나은 패턴 제작을 위한 기초 연구이다. 나노인덴테이션 스크래치 공정은 압입, 스크래치, 언로딩 순서로 진행된다. 여기서 압입 공정이 먼저 이루어지기 때문에 압입 공정의 소재거동을 우선적으로 연구하였다.

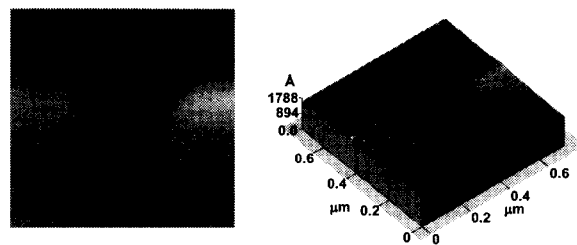
유한요소해석은 FEM 패키지인 ABAQUS 6.2 를 사용하였고, 압입 공정시 생기는 탄성복원이나 버 발생을 예측하기 위해 팁형상과 압입깊이, 팁라운드, 소재의 변화를 변수로 하여 해석하였다. 본 연구결과는 나노인덴테이션의 스크래치 기능을 활용하여 극미세 패턴을 제작할 때 기초연구로써 활용되어질 것이다.

## 2. FEM 모델링

본 연구에서 사용한 소재는 반도체나 바이오 분야에 가장 많이 쓰이고 가장 흔한 재료로써 실리콘, PMMA 및 파이렉스 글라스 소재를 이용하였다. 이 재료에 대한 나노인덴테이션 공정을 해석한 다음 한 소재를 선택하여 극미세 몰드 및 패턴 제작 시 공정을 줄이기 위해 팁 두개를 동시에 압



(a) Comparison with experiment data and FEM data



(b) AFM images of fused silica (100nm indentation)

Fig. 1 Verification for analysis data

입 하였을 경우 팁 사이에 생기는 버를 감소시키기 위한 방법을 조사하였다. 나노 압입 공정 해석에는 세가지 팁 형상을 사용하여 해석하였다. 두 팁 사이의 버 해석에는 내각이 130°인 콘 모양의 팁을 사용하였다.

나노인덴테이션 공정을 묘사한 유한요소해석과 Nanoindenter XP(MTS)장비를 이용한 실험의 비교는 Fig. 1(a)에 나타내었다. Fig. 1(b)는 Fused Silica 시편에 100nm 압입했을 때의 압흔을 AFM 을 이용하여 나타낸 이미지들이다. Fig. 1(a)를 보면 해석과 실험 데이터가 거의 유사함을 알 수 있다. 오차가 생기는 이유는 실험환경, 시편의 표면거칠기, 팁마모, 소재의 가공경화 등이 있다.

### 2.1 나노압입공정의 축대칭 모델

나노인덴테이션 공정을 해석하기 위하여 축대칭 모델을 사용하여 해석을 실시하였다. 팁은 Fig. 2 에서 보여주는 바와 같이 콘형상, 반구형상,

Berkovich 형상 세가지로 콘은 반쪽의 각이  $\alpha = 65^\circ$ 이고, 구는  $R = 2 \mu\text{m}$ , Berkovich 는 2D 로 하였기 때문에 팁 형상함수만 같게 한  $\beta = 70.30^\circ$  로 하였다. 해석을 할 때 팁은 강체로 하고, 시편은 Table 1 과 같이 세가지 벌크소재를 이용하였다.

Table 1 Elastic and plastic properties of silicon<sup>10</sup>, PMMA<sup>11</sup> and pyrex glass

Materials	Young's modulus (Gpa)	Yield strength (Gpa)	Poisson's ratio
Silicon wafer 100	180±2(XP)	4.4	0.278
PMMA	3.0±0.5(XP)	0.138	0.40
Pyrex glass (JMC glass Co. INC)	63±2(XP)	6.1	0.17

\*(XP) : Nanoindenter XP(MTS) experiment value

시편 모델은 4-노드 1281 개, 축대칭요소 (CAX4R element type<sup>12</sup>) 1200 개로 구성하였다. 메쉬의 최소크기는 1~10nm 이고 대칭축에 가까워질수록 작아지며, 해석단계는 로딩단계와 언로딩단계로 나뉘어진다. 여기서 메쉬 최소크기가 100nm 이상이 될 경우 시편의 변형을 볼 수 없고, 50nm 이상 100nm 미만 사이에는 소재의 변형을 볼 수 있으나 정확한 비 예측이 불가능하다. 그리고 하중-변위 데이터의 양이 적어져서 실험데이터와의 비교가 불가능하다. 그 결과 최적의 메쉬 최소크기는 1~10nm 로 결정하였다.

Fig. 3 은 인텐테이션 공정에 대한 경계조건과 노드와 요소 구성을 나타낸 그림이다. 축대칭 부위에는 y 축 이동 가능하게 하고, x 축 고정을 했다. 시편의 바닥부위에는 모든 방향으로 완전고정을 했다. 또한 강체인 팁도 y 축 이동 가능하게 하고 x 축을 고정했다. 팁과 시편표면 사이에는 접촉조건을 사용하였고, 미세한 오차는 있지만 해석의 편리를 위해 마찰력은 1 로 가정하여 해석을 실시하였다. 나노인텐테이션 공정 해석은 탄성복원과 가공 후 버를 알아보기 위해 ABAQUS/Standard 를 사용한 탄소성 해석으로 하였으며, 탄성복원과 버에 대한 해석으로써 압입깊이, 팁형상, 팁 라운드를 변경하여 해석을 하였다. 첫번째, 압입깊이(100,

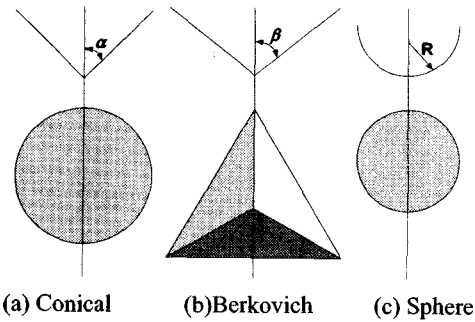
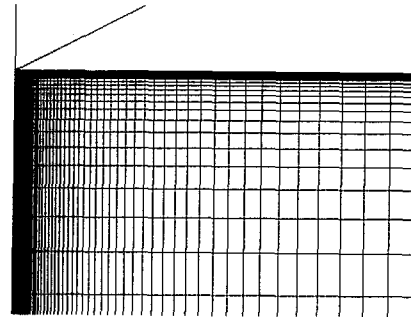
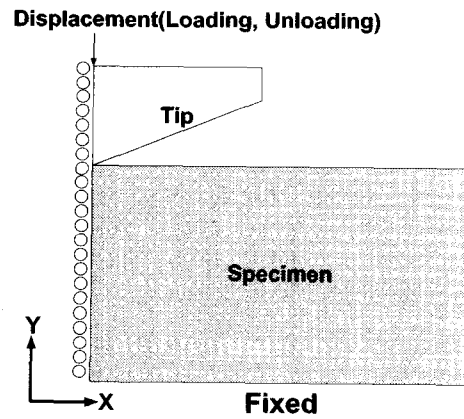


Fig. 2 Shape of Indenters<sup>8</sup>



(a) Two-dimensional model of nanoindentation process



(b) Boundary conditions

Fig. 3 FEM model and Boundary condition

200, 300nm)에 따른 탄성복원. 두번째, 팁형상에 따른 탄성복원. 세번째, 콘형상 팁을 사용할 경우 팁의 반경(40, 100, 200nm)에 따른 탄성복원을 조사해보았다. 시편의 두께는  $5 \mu\text{m}$  이고, 폭은  $6 \mu\text{m}$  로 하였다.

실리콘을 제외한 나머지는 소재의 변형만 알아보고 팁형상이나 깊이변화에는 이용하지 않았다.

### 2.1 나노 스크래치 공정 위한 멀티팁

멀티 팁은 기계적인 가공법에 의한 패턴 제작 시 동시에 여러 채널을 만드는데 사용할 수 있다. 멀티 팁 작업시 생기는 팁과 팁 사이의 시편표면의 버를 줄이기 위해 멀티 팁 모델을 제안하였다.

Fig. 4 는 시편표면의 버를 예측하기 위해 만든 멀티 팁 해석모델이다. 경계조건은 나노인덴테이션 축대칭 모델과 유사하지만 축대칭은 아니다. 팁은 강체로 하였고, 로딩 단계와 언로딩 단계의 2 스텝으로 해석하였다. 축대칭 모델과 같이 팁과 시편 표면사이는 접촉조건을 사용하였고, 마찰력은 1로 가정하였다. Fig. 4 의 모델은 실리콘소재로 4-노드 5151 개, plane strain 요소(CPE4R element type<sup>12</sup>) 5000 개로 구성하였다. 팁은 내각이 130°인 콘형상을 사용하였고, 팁 라운드는 0 으로 하였다. 시편의 두께는 10  $\mu\text{m}$ , 폭을 20  $\mu\text{m}$  로 모델링하였다. 멀티 팁 모델의 시편표면에서 버를 줄이기 위한 변수로써 팁 사이 간격을 변화 시켜 해석하였다. 차후 3 차원 스크래치 공정 모델에서는 팁형상, 팁 라운드, 팁 각도, 스크래치 압입 깊이와 패턴간격의 관계 등을 변수로 하여 연구할 것이다.

## 3. 검토 및 결과

### 3.1 소재 변화에 대한 해석

실리콘, PMMA, 파이렉스 글라스 소재에 대하여 300nm 를 압입하였을 때 하중-변위 그래프를 구해보았다. 하중-변위 그래프를 이용하여 경도 및 탄성계수 등을 계산하는 것이 목적이지만 본 연구에서는 극미세 패턴의 가공 정밀도 문제를 예측하기 위하여 탄성복원을 조사해 보았다.

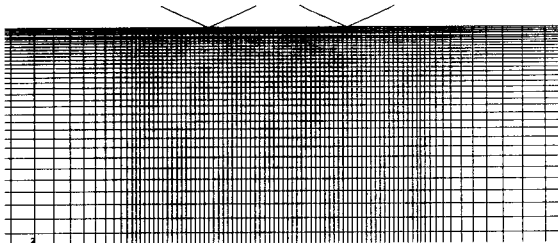
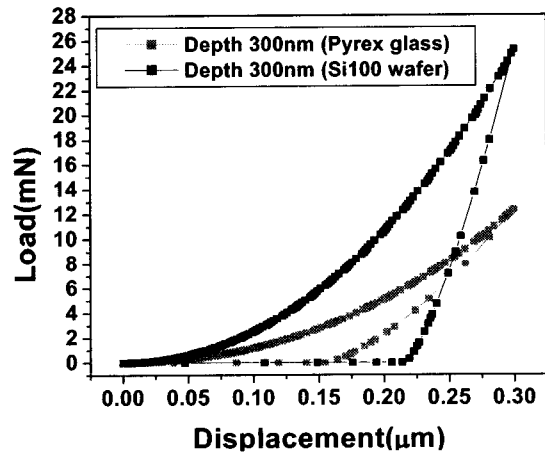


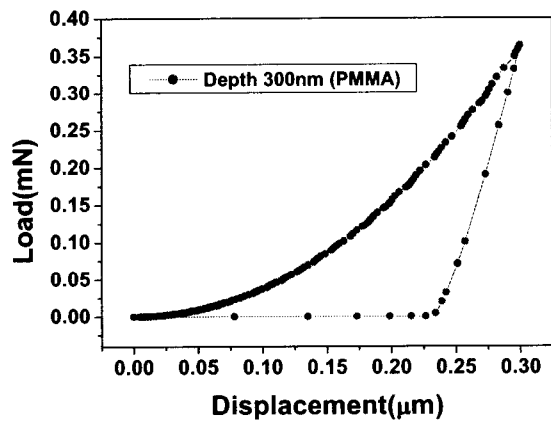
Fig. 4 Two-dimensional model of multi-tip nanoindentation process

Berkovich 팁을 사용하여 압입 하였을 때 세가지 소재에 대한 결과는 Fig. 5 에 나타내었다.

Fig. 5 (a)는 실리콘과 파이렉스 글라스의 하중-변위 그래프인데 언로딩부분에서 탄성복원을 알 수 있다. 실리콘의 탄성복원은 총 압입 깊이에 26%정도임을 알 수 있고, 파이렉스 글라스는 총 압입 깊이에 약 50%정도 탄성 복원 됨을 알 수 있다. Fig. 5 (b)는 PMMA 의 하중-변위 그래프이다. 로딩시 많은 하중을 요하지 않음을 알 수 있다. 이 그래프에서 PMMA 는 총 압입 깊이에 약 24% 정도 탄성 복원됨을 알 수 있다.



(a) Load-displacement curve of Silicon and Pyrex glass



(b) Load-displacement curves of PMMA

Fig. 5 Load-displacement curves for each materials

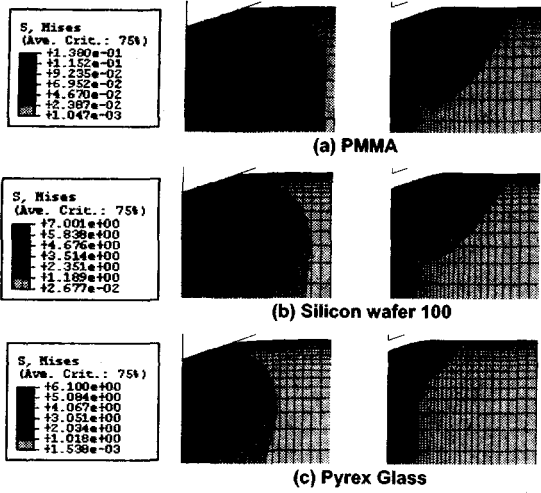


Fig. 6 Von-mises stress distribution for each materials

Fig. 6 은 로딩과 언로딩시 각 시편에 생기는 응력 분포를 나타낸 것이다. 재료마다 탄성복원의 차이를 보이는 것은 탄성계수 대 항복강도 비 ( $E/\sigma_y$ )가 작을수록 탄성복원량이 커지기 때문이다.<sup>13</sup>  $E/\sigma_y$  값은 실리콘 24, PMMA 25.3, 파이렉스 글라스 10.3 이다. 따라서 탄성복원이 가장큰 재료는 파이렉스 글라스이다.

나노인덴테이션 스크래치 공정 시 입력해야 할 수치는 하중과 스크래치 길이인데 여기서 소재에 따른 하중을 예측할 수 있고, 또한 이 하중으로 스크래치를 할 경우 소재의 탄성복원까지 예측할 수 있다.

해석시 메쉬 변형으로 시편표면의 버를 프로파일 할 수 있지만 Berkovich 팁은 2 차원에서 형상함수만 같게 모델링 하였으므로 실제 실험의 프로파일과 다르다. 2 차원 Berkovich 팁을 사용한 해석에는 버의 프로파일을 조사하지 않았고, 차후 연구할 나노인덴테이션 공정 3 차원 해석에서 정확하게 조사할 것이다.

### 3.2 깊이 변화에 대한 해석

이번에는 팁형상은 같고 압입깊이에 따른 실리콘 소재의 특성 즉 탄성복원을 조사해 보았다. 팁은 Berkovich 를 사용하였고, 압입깊이는 100, 200, 300nm 로 하였다.

Fig. 7 은 압입깊이의 변화에 따른 하중-변위 그래프를 나타낸 것이다. 각 깊이에 대한 탄성복원을 보면 100nm 일 때 약 27%, 200nm 일 때 약

30%, 300nm 일 때 약 27%의 탄성복원이 일어남을 알 수 있었고, 실리콘 소재는 압입이 깊어질수록 점점 탄성복원량이 감소하게 됨을 알 수 있었다. 또한 여기서 알 수 있는 것은 깊이에 대한 하중 값들로써 스크래치 공정에 사용할 하중 값들을 미리 예측할 수 있었고, 예측한 하중 값을 기초로 차후 스크래치 공정 해석과 실험에 적용할 것이다.

Fig. 8 은 실리콘소재의 압입 깊이에 따른 응력 분포를 나타낸 것이다.

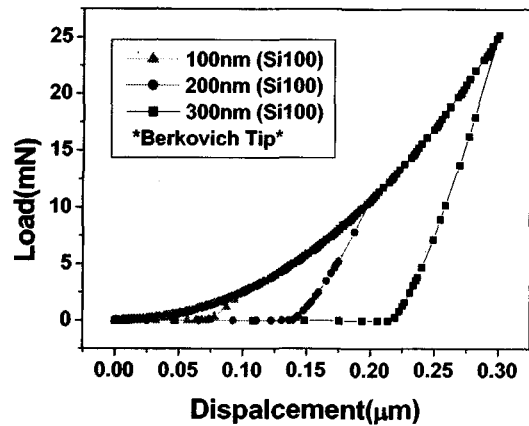


Fig. 7 Load-Displacement curves on silicon with different indentation depth

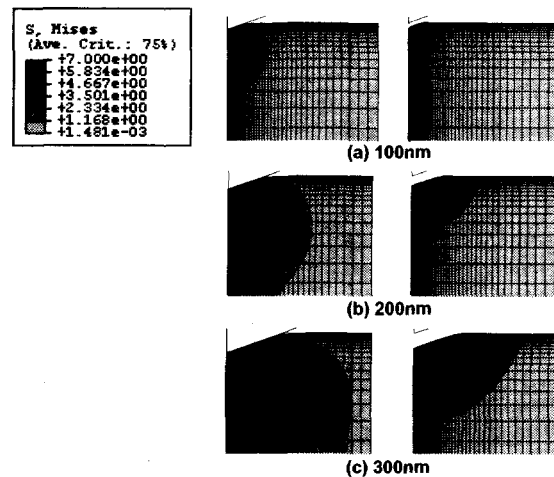


Fig. 8 Von-mises Stress distributions on silicon with different indentation depth

### 3.3 팁 형상 변화에 대한 해석

팁형상 즉 콘형상( $\alpha=65^\circ$ ), 구형상, Berkovich 형상을 이용하여 실리콘 소재의 특성을 조사하였다. 압입깊이는 100nm로 하였으며 팁의 형상은 Fig. 2에서 보여주는 바와 같다.

Fig. 9는 팁형상에 따른 실리콘 시편의 하중-변위 그래프를 나타낸 것이다. 구형상이 다른 형상들보다 하중이 높고, 탄성복원 또한 심하다. 콘형상은 26%, Berkovich는 32%이고, 구형상은 53%의 탄성복원을 보이고 있다.

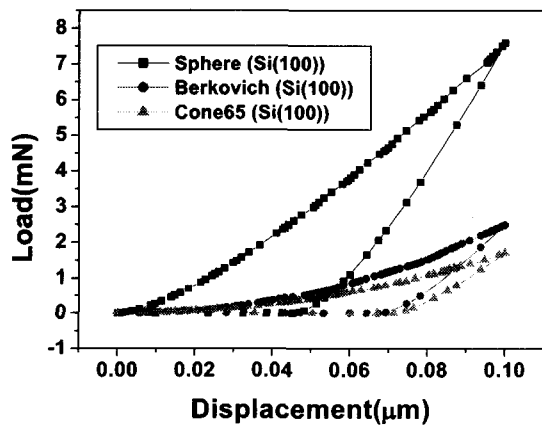


Fig. 9 Load-Displacement curves on silicon with different tip shape (Silicon wafer 100)

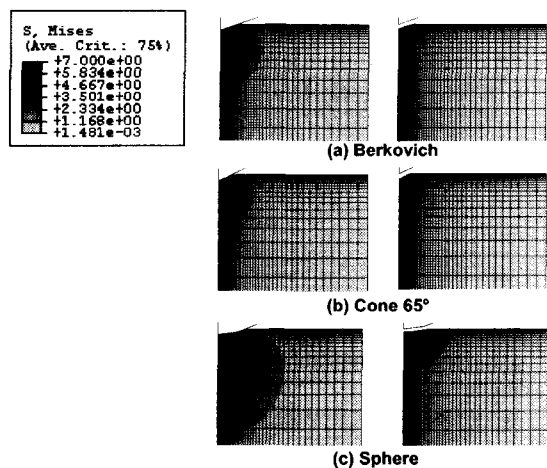


Fig. 10 Von-mises stress distribution for different tip shape (Silicon wafer 100)

Fig. 10은 팁형상 변화에 따른 로딩과 언로딩시의 응력분포이다. 구형상은 다른 팁들보다 넓은 응력분포를 보이고 있다. 접촉면적이 크므로 응력분포가 넓게 발생하게 된다.

Fig. 9의 그래프와 Fig. 10의 응력분포를 보면 구형상 팁의 하중과 탄성 복원이 너무 크기에 정밀한 패턴이나 구조물을 스크래치 공정으로 제작할 때는 Berkovich 팁이나 콘팁을 사용하는 것이 좋을 것으로 예측된다. 또한 탄성복원이 적은 콘팁을 사용하는 것이 보다 정밀한 패턴을 제작할 수 있을 것으로 예측된다.

### 3.4 팁 라운드 변화에 대한 해석

팁 라운드 변화에 대한 소재의 특성을 알아보기 위해서 Berkovich 형상의 뾰족한 부위에 라운드를 40nm, 100nm, 200nm로 변화시켜 해석하였다. 압입깊이는 100nm이며 라운드의 크기에 따라서 탄성복원이 얼마만큼 생기는지를 예측하였다.

Fig. 11은 팁 라운드에 따른 하중-변위 그래프로써 라운드가 커질수록 하중이 증가함을 알 수 있었고, 탄성복원도 증가함을 알 수 있었다. Fig. 10의 그래프는 Lu와 Bogy<sup>10</sup> 결과와 유사한 형태를 보이고 있다. Fig. 12는 팁 라운드에 따른 로딩, 언로딩시 발생하는 응력분포를 나타낸 것이다. 팁 라운드가 커질수록 시편의 응력분포가 점점 커짐을 알 수 있다. 반경이 커질수록 시편과 팁 사이의 접촉면적이 커지기 때문에 넓은 응력분포를 보이고 있다.

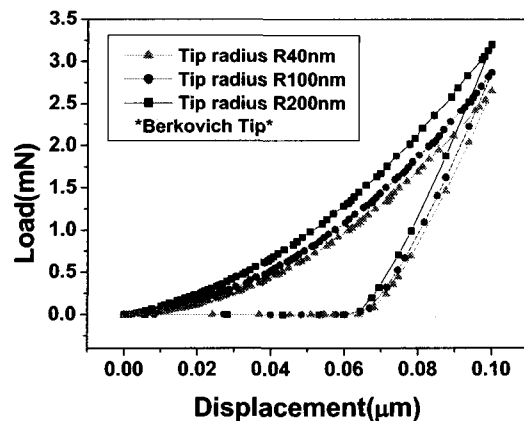


Fig. 11 Load-Displacement curves on silicon with different tip radius

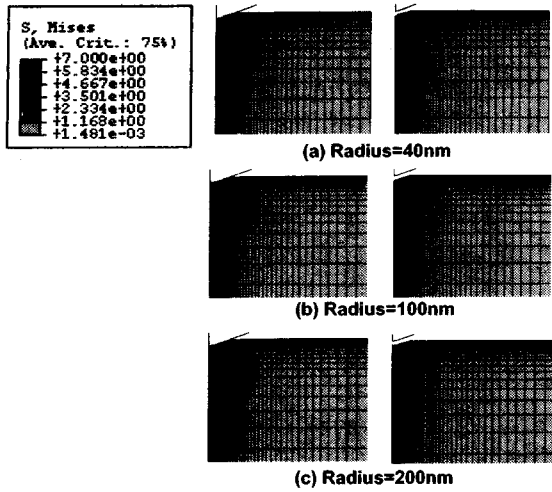


Fig. 12 Von-mises stress distribution for different tip radius

그래프와 응력분포를 보면 팁 라운드가 적을수록 스크래치 공정을 이용한 극미세 패턴 제작시 탄성복원이 적고, 보다 정밀한 패턴 제작이 가능하다고 판단된다.

3.5 멀티 팁을 이용한 소재의 변형 조사

패턴 제작을 위한 스크래치 공정시 패턴 간격이 탄성복원이나 버에 미치는 영향을 팁 두개 이상의 멀티 팁 나노인덴테이션 공정 해석으로 조사해 보았다. 그 결과 스크래치 공정 실험시 탄성복원이나 버의 영향이 미치지 않는 패턴 간격을 알 수 있었다.

Fig. 13 은 두개 팁 이상으로 패턴을 제작했을 때 생기는 시편의 버를 예상하여 그림으로 나타낸 것이다. 멀티 팁 해석에서는 D 를 각각 2000nm, 1000nm, 500nm 로 변화시켜 탄성복원이나 버를 예측하였다. 압입 깊이는 100nm 로 하였고, 소재는 실리콘으로 하였다.

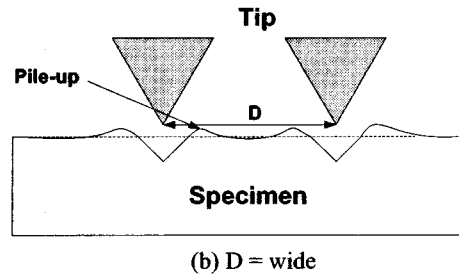
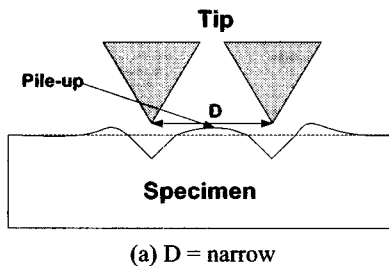


Fig. 13 Schematic of pile-up region

Fig. 14 는 팁 간격 조건에 따른 멀티 팁 압입시 생기는 탄성복원과 버를 그래프로 나타낸 것이다. 팁 간격 D 가 좁아질수록 탄성복원양이 증가하고, 팁과 팁 사이의 버가 높아짐을 알 수 있었다. Fig. 15 는 멀티 팁 간격 조건에 따른 응력분포를 나타낸 것인데 간격이 좁아 질수록 응력들이 서로 만나는 것을 알 수 있다. 압입시 각각의 팁에서 생긴 변형들이 서로 만나 생기는 현상이다.

따라서 스크래치 공정으로 패턴 제작시 어느 정도의 간격이 있어야지만 정밀하게 원하는 패턴을 만들 수 있다고 할 수 있고, 압입깊이를 작게 하면 그만큼 팁 간격도 좁힐 수가 있다.

이 해석은 나노인덴테이션 공정으로 패턴 간격을 결정하는 단순 모델이지만 차후 3 차원 스크래치 공정 해석으로 보다 정확한 공정 변수(스크래치 하중, 길이, 속도)를 이용해 정밀한 패턴 제작시 패턴 간격을 결정할 예정이다.

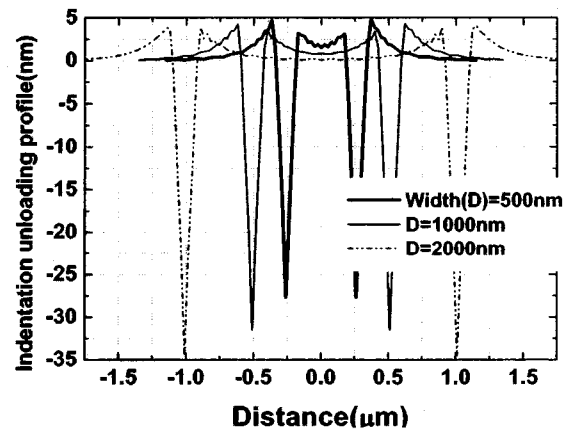


Fig. 14 Unloading indentation profiles for different multi-tip width

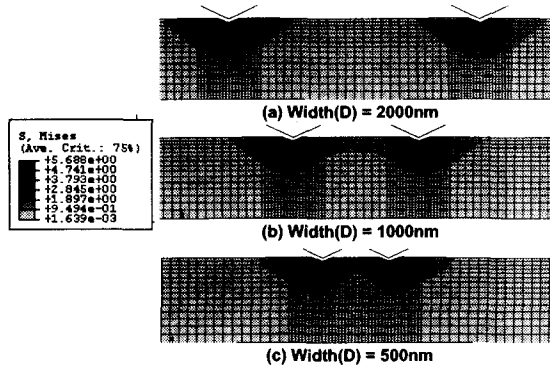


Fig. 15 Von-mises stress distribution and pile-up of different multi-tip width(D)

#### 4. 결론

본 연구는 극미세 패턴 제작시 시편의 탄성복원과 버의 크기를 수치적으로 묘사하였다. 수치해석결과는 실험결과와 거의 일치함을 알 수 있었다.

1. 극미세 패턴 제작을 위한 스크래치 공정의 입력하중 값을 소재 변화와 압입깊이 변화에 대한 해석 결과로 예측할 수 있었다.

2. 극미세 패턴 제작에는 탄성복원양이 적은 콘팁이 적합하다는 것을 팁형상 변화에 대한 해석 결과로 알 수 있었다.

3. 팁 라운드가 작을수록 탄성복원이 적고, 정밀한 패턴을 만들 수 있음을 팁 라운드 변화에 대한 해석 결과로 알 수 있었다.

4. 멀티 팁 모델을 만들어 극미세 패턴 제작시 패턴 간격을 예측할 수 있었고, 소재 변형 형태를 예측할 수 있었다.

향후 3 차원 나노인덴테이션 공정해석으로 2 차원에서 알 수 없었던 팁 형상에 대한 버를 예측할 것이고, 나노인덴테이션 실험과 AFM 이미지로 예측한 버를 검증할 것이다. 또한 3 차원 스크래치 공정 해석 모델을 만들어 정확한 공정변수를 적용시켜 보다 정밀한 패턴 제작 조건을 조사할 것이다.

#### 참고문헌

1. Oliver, W. C., Pharr, G. M., "An Improved Technique for Determining Hardness and Elastic Modulus using Load and Displacement Sensing Indentation Experiments," J. Mater. Res., Vol. 7, No. 6, pp. 1564-1583, 1992.
2. Han, J. H., Lee, K. R., Kim, K. S., Lee S. Y., "Principal and Applications of Nanoindentation Test," J. KSPE, Vol. 19, No. 3, pp. 19-26, 2002.
3. Menz, W., "LIGA and Related Technologies for Industrial Application," Sensor. Actuat. A-phys., Vol. 54, pp. 785-789, 1997.
4. Sung, I. H., Kim, J. S., Kim, D. E., "Non-lithography Micro-structure Fabrication Technology and Its Application," J. KSPE, Spring, pp. 956-959, 2002.
5. Ashida, K., Morita, N. and Toshida, Y., "Study on Nano-machining Process using Mechanism of a Friction Force Microscope," JSME International Journal Series C, Vol. 44, No. 1, pp. 51-60, 2001.
6. Minne, S. C., Adams, J. D., Yarlioglu, G., Manalis, S. R., Atalar, A. and Quate, C. F., "Centimeter Scale Atomic Force Microscope Imaging and Lithography," Appl. Phys. Lett., Vol. 73, pp. 1742-1744, 1998.
7. Hamamaka, H., Ono, T. and Esashi, M., "Fabrication of Self Supported Si Nano-Structure with STM," Proc. IEEE MEMS '97, pp. 153-156, 1997.
8. Snow, E. S., Campbell, P. M., "Fabrication of Si Nanostructure with an Atomic Force Microscope," Appl. Phys. Lett., Vol. 64, pp. 1932-1934, 1994.
9. MTS, Nanoindenter XP Manual, 2002.
10. Lu, Chung-Jen, Bogy, D. B., "The Effect of Tip Radius on Nano-indentation Hardness Tests," Int. J. Solid Structures, Vol. 32, No. 12, pp. 1759-1770, 1995.
11. Gad-el-Hak, M., The MEMS Handbook, CRC PRESS, pp. 18-11,12, 2001.
12. Hibbitt, Karlsson and Sorensen, ABAQUS Standard/Explicit rel. 6.2, 2001.
13. Lichnichi, M., Lenardi, C., Haupt, J., Vitali, R., "Simulation of Berkovich Nanoindentation Experiments on Thin Films using Finite Element Method," Thin Solid Films, Vol. 333, pp. 278-286, 1998.