

나노 인덴테이션 공정의 유한요소해석 및 실험적 검증

이정우* · 윤성원* · 강충길**
(2003년 5월 15일 접수)

Finite Element Analysis of Nanoindentation Process and its Experimental Verification

J. W. Lee, S. W. Youn and C. G. Kang

Abstract

In this study, to achieve the optimal conditions for mechanical hyper-fine pattern fabrication process, deformation behaviors of the materials during indentation were studied with numerical method by ABAQUS S/W. Brittle materials (Si Pyrex glass 7740) were used as specimens, and forming conditions to reduce the elastic recovery and pile-up were proposed. The indenter was modeled a rigid surface. Minimum mesh sizes of specimens are 1-10nm. Comparisons between the experimental data and numerical result demonstrated that the finite element approach is capable of reproducing the loading-unloading behavior of a nanoindentation test.

Key Words : Nanoindentation, Hyper-Fine Pattern, Pile-Up, Elastic Recovery, Berkovich Indenter

1. 서론

광 리소그래피 기술에 의하여 제작가능한 최소 선폭의 물리적 한계로 인하여 주사터널현미경 (STM)이나 원자력간 현미경 (AFM)을 이용한 산화물 나노구조체 형성 기술들이 국내외에서 다양하게 연구되고 있다. 나노가공에서 초미세 프로브 기반기술이 유용하게 사용되는 이유는 10nm 이하 정밀도의 구조체의 제작이 가능하고, 공정이 간단하며 초기장비 설치 및 장비가동에 드는 비용이 매우 저렴하기 때문이다. 나노프로브 기반 리소그래피 기술의 예로는 나노양극산화기술(nano oxidation)과 정적/동적나노 스크래치 기술등을 들 수 있다. 또한 다이아몬드 팁을 이용한 실리콘의 가

공시 소재표면에 형성된 비정질 산화층 및 전위 밀집층의 식각 특성을 이용한 마스크리스 나노가공기술도 소개 된 바가 있다.⁽¹⁻²⁾ 이러한 가공변질층은 기계적 나노가공 공정시 표면에 부하되는 응력 및 변형을 분포와 밀접한 관련을 가진다. 따라서, 가공변질층을 식각공정을 위한 음성 및 양성 마스크로 사용하기 위해서는 가공조건에 따른 응력 및 변형을 분포를 예측해야 한다.

본 연구는 나노인덴터에 의하여 형성된 가공변질층의 각마스크 효과를 이용한 마스크리스 극미세 패턴의 제작을 위한 기초연구의 일환으로 FEM 패키지인 ABAQUS 6.2 를 이용하여 유한요소해석을 수행하였다. 가공조건에 따른 응력 및 변형률 분포, 파일-업 등을 조사하는 것이 목적이므로, 단

* 부산대학교 대학원 정밀기계공학과
** 부산대학교 기계공학부 정밀정형 및 금형가공 연구소

설정 소재의 방향성에 따른 가공특성의 차이를 배제하기 위하여 소재는 비정질 실리콘과 비정질 브로실리케이트 (Pyrex 7740)를 사용하였다. 유한요소해석은 압입깊이, 팁라운드, 소재 종류에 따라 수행하였고, 각각의 해석조건에 대한 언로딩시의 응력 분포 및 파일-업 발생 양상을 예측하였다.

2. FEM 모델링

2.1 나노인덴테이션 유한요소해석 모델

본 연구에서는 나노인덴테이션 팁 종류 중에 사각형 피라미드 형태인 Berkovich 만을 사용하였고, 입체적으로 파일업이나 탄성회복을 보기위해 3 차원으로 모델을 만들어 해석하였다. 저자는 나노변형에 필요한 소재의 변형거동을 2 차원 유한요소법으로 해석하여 실험데이터와 비교 검토하였고 해석 결과의 타당성을 검증하였다. 하지만 2 차원 나노인덴테이션 공정 모델에 사용한 팁은 Berkovich 팁의 면적함수를 같게한 축대칭 콘 (Conical) 팁으로 하였기 때문에 정확한 파일업이나 탄성회복을 예측하기 힘들었다.⁽³⁾

3 차원 해석은 2 차원 해석에 비해 시간은 많이 걸리지만 입체적 측 여러 방향으로 파일업을 프로파일(profile)하여 소재의 정확한 변형을 알 수 있는 장점이 있다. Fig. 1은 팁들의 3 차원 형상으로 Nano-indenter XP(MTS) 메뉴얼의 치수정보를 참고하여 모델링하였다. Fig. 1(a)는 Berkovich 팁으로써 $\beta = 77.05^\circ$, $\psi = 65.3^\circ$ 이고, Fig. 1(b)는 2 차원해석에 사용된 Berkovich 팁의 면적함수만 같게한 축대칭 Conical 팁으로써 $\gamma = 70.3^\circ$ ⁽⁴⁾이다. Fig. 1(c)는 콘팁으로써 $\alpha = 65^\circ$ 이고, Fig. 1(d)는 구형 팁으로써 $R = 2 \mu\text{m}$ 이다. 해석에는 모델링된 팁을 표면(surface) 정보만 가지고 있는 iges 파일로 변환하여 ABAQUS 6.2/CAE 로 인터페이스하여 사용했다. 그리고 시편은 모델링하기 쉬운 회전체로 하였다. 시편의 반지름은 $10\mu\text{m}$ 이고, 높이는 $5\mu\text{m}$ 이다. 콘이나 구형 팁일 경우는 축대칭이 가능하므로 1/6 축대칭으로 모델링하였다.

Fig. 2는 자세한 모델링 정보와 해석에 사용할 Mesh 정보, 경계조건을 알 수 있다. Fig. 2(a), (b)는 2 차원 나노인덴테이션 해석에 사용한 Mesh 정보와 경계 조건을 나타낸 그림이다. 축대칭 부위에는 Y 축으로만 움직이게 X 축을 고정시켰고, 시편의 아래부위에는 모든 방향으로 완전고정시켰다. 또한, 강제인 팁은 Y 축으로 압입할 수 있게 X 축

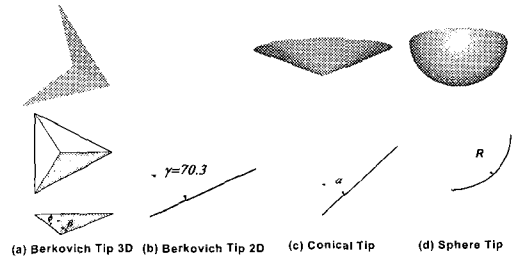


Fig. 1 Schematic of indenters

만 고정시켰다. 2 차원 모델의 시편은 노드 1281 개, 축대칭요소 (CAX4R element type⁽⁵⁾) 1200 개로 구성하였고, Mesh 최소크기는 1~10nm 로 대칭축에 가까워질수록 작아지게 하였다. Fig. 2(c)는 Berkovich 팁해석으로써 축대칭이 어려워 전체로 모델링하였고, Mesh 는 12320 개 8 노드 reduced integration 요소(C3D8R element type⁽⁵⁾)와 14728 개 노드를 사용하였다. 또한 팁이 압입되는 부분만 Mesh 크기를 작게 한 Local Mesh 를 사용하였고, 시편 중심에서 멀어질수록 해석에 거의 영향을 미치지 않으므로 Mesh 를 크게 하였다. 팁은 663 개 강제요소(R3D4 element type⁽⁵⁾)를 사용한 강제이다. 시편의 바닥은 회전 및 이동의 6 자유도를 완전고정하였고, 팁은 Y 축이동만 가능하게 하였다. Fig. 2(d)는 콘과 구형 팁 해석으로써 축대칭이 가능하므로 1/6 축대칭으로 모델링하였다. 이 모델은 축대칭 조건과 Mesh 정보만을 제외하고는 Fig. 2(c)와 같다. Mesh 는 6950 개 8 노드 reduced integration 요소(C3D8R element type⁽⁵⁾)와 7500 개 노드를 사용하였고, 팁은 120 개 강제요소(R3D4 element type⁽⁵⁾)를 사용한 강제이다. Mesh 의 최소 크기는 약 1~10 nm 정도이다. 나노인덴테이션 공정 해석을 위해서 팁을 Master, 시편을 Slave 로 한 접촉조건을 사용하였고, 접촉에 대한 마찰계수를 해석의 편의를

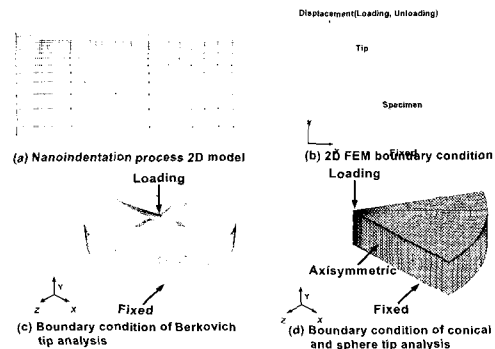


Fig. 2 Finite element model

위해 0 으로 가정하였다. 그리고 이 해석은 로딩과 언로딩의 2 단계로 해석하였고, ABAQUS/Standard 를 이용한 탄소성 해석을 하였다.

Table 1 은 나노인덴테이션 공정해석에 입력될 기계적 성질로써 탄성계수와 경도는 나노인덴테이션 실험으로 구한 값들이고, 항복강도와 프와송비는 참고문헌을 인용하였다. Table 1 의 두가지 재료 중 실리콘은 반도체공정에 많이 사용되고, 파이렉스 글라스 7740 은 MEMS 부품을 만들 때 실리콘 재료를 본딩하는데 사용한다.

Table 1 Elastic and plastic properties of silicim⁽⁶⁾ and Pyrex glass 7740 (JMC)

Material	Young's Modulus (GPa)	Hardness (GPa)	Yield strength (GPa)	Poisson's ratio
Silicon	168± 2	13± 1	7	0.278
Pyrex glass 7740	63± 2	10± 0.5	6.1	0.17

3. 결과 및 검토

3.1 해석적 데이터와 실험적 데이터 비교

해석의 검증은 나노인덴터의 calibration 에 사용되는 시편인 Fused Silica 로 검증하였다. 해석에 입력될 Fused Silica 의 물성치는 탄성계수 73GPa, 프와송비 0.17, 항복강도 7.1GPa 을 사용하였다.⁽⁴⁾

실험에는 Berkovich 팁을 사용하였고, 100nm 를 압입하였다. Fig. 3 은 나노인덴테이션 공정을 묘사한 2 차원, 3 차원 유한요소해석과 실험의 비교를 나타낸 하중-변위 그래프이다. Fig. 4(a)는 유한요소 해석 결과로써 언로딩을 마친 후 압흔을 등가소성변형영역으로 나타내었다. Fig. 4(b)는 나노인덴테이션 실험을 마친 후 AFM(원자력현미경)으로 측정된 이미지이다. Fig. 5 는 유한요소 해석으로 Fused silica 를 100nm 압입하였을때 생기는 파일업의 프로파일과 인덴테이션 실험함 다음 AFM 으로 측정된 프로파일을 비교한 그래프이다. 이 결과에 대한 오차가 생기는 이유는 유한요소 해석시 팁 라운드와 표면거칠기를 0 으로 가정하였으나 실제 실험에서 존재하였고, 가공경화를 고려하지 않았기 때문이다. 이렇게 해서 유한요소 해석 모델의 정당성을 검증하였다.

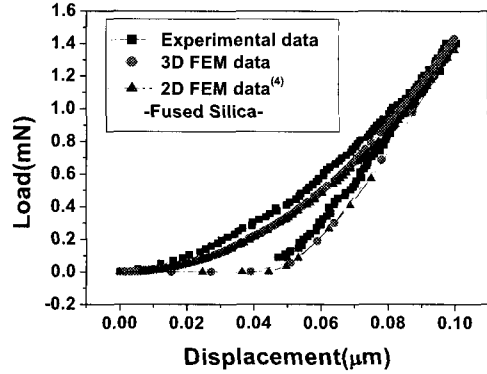
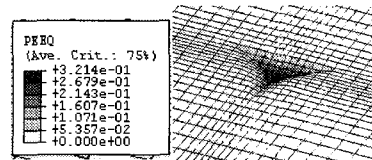
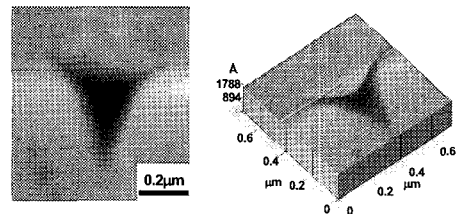


Fig. 3 Comparison of finite element analysis result With experimental data for fused silica material



(a) FEM analysis result of equivalent plastic strain distribution for fused silica (indentation depth 100nm)



b) AFM image for fused silica (indentation depth 100nm)

Fig. 4 Comparison of FEM indent image with experiment indent image

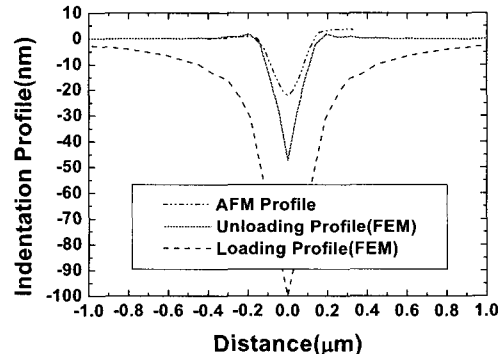


Fig. 5 Comparison of FEM profile with experimental profile Fused silica

3.2 나노인덴테이션 공정 유한요소해석

Fig. 6 는 실리콘과 파이렉스 글라스 7740 의 유한요소해석 하중-변위 결과로써 언로딩 부분에서 탄성회복을 알 수 있다. 실리콘, 파이렉스 글라스의 탄성회복은 총 압입 깊이에 각각 26%, 50% 정도임을 알 수 있었고, 재료마다 탄성회복의 차이를 보이는 것은 탄성계수 대 항복강도 비(E/σ_y)가 작을수록 탄성회복이 커지기 때문이다.⁽⁷⁾ 실리콘, 파이렉스 글라스 7740 의 E/σ_y 는 각각 24, 10.3 이다. 재료에 대한 100 nm 압입까지의 하중을 알 수 있었다. Fig. 7 는 로딩과 언로딩시 실리콘, 파이렉스 글라스 시편에 생기는 응력 분포를 나타낸 것이다.

압입 할때마다 경도와 탄성계수값이 변하는 것은 팁 라운드 즉 팁 면적함수 변화 때문이다. 보통 팁 라운드 때문에 Indentation Size Effect (ISE)⁽⁶⁾가 발생하게 된다. Fig. 8 은 팁 라운드에 따른 하중-변위 그래프로써 팁 라운드가 커질수록 하중이 증가하고, 탄성회복도 증가함을 알 수 있었다.

Fig. 9 는 팁 라운드에 따른 파이렉스 글라스 7740 표면의 파일업을 프로파일한 결과이다. 이 결

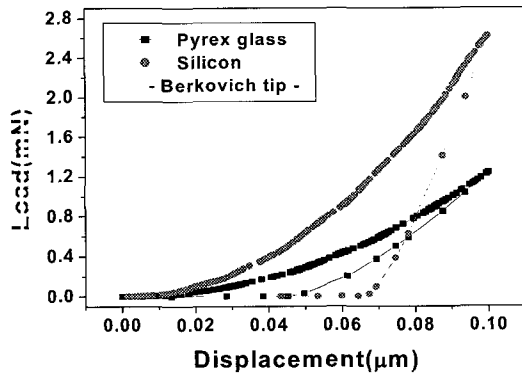


Fig. 6 Load-displacement curve of silicon and pyrex glass 7740

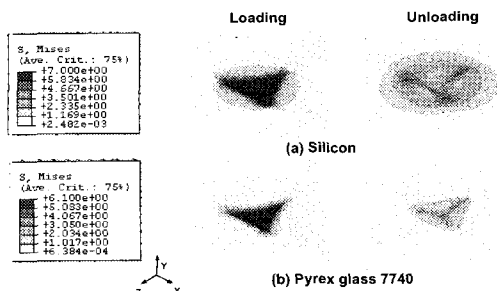


Fig. 7 Von-mises stress distribution of each materials (Depth 100 nm)

과 팁 라운드에 대한 파일업은 라운드 크기별로 미세한 차이를 보이고 있다. 탄성회복이 가장 적은 팁라운드 40nm 일 때 가장 파일업이 높음을 알 수 있고, 압입 폭은 팁라운드가 커질수록 넓어짐을 알 수 있었다.

Fig. 10 은 파이렉스 글라스 7740 소재에 Berkovich 팁을 100, 200, 300nm 압입시 발생하는 하중-변위 그래프이다. 압입깊이가 점점 커질수록 탄성회복이 감소함을 알 수 있었다. 탄성회복량은 100nm, 200nm, 300nm 깊이에 대해 각각 총 압입 깊이에 50%, 48%, 45%의 탄성회복을 보였다. Fig. 11 은 압입깊이 변화에 대한 파일업을 프로파일한 결과이다. 압입 깊이가 깊어질수록 파일업의 높이가 커짐을 알 수 있었다. 따라서, 탄성회복이 감

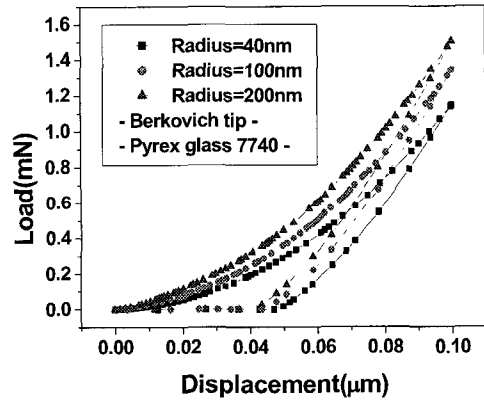


Fig. 8 Load-displacement curves on pyrex glass 7740 with different tip radius obtained by 3D FEM

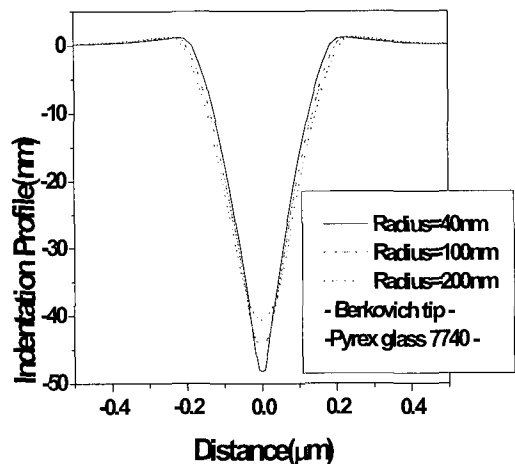


Fig. 9 Indentation unloading after profiles on pyrex glass 7740 with different tip radius obtained by 3D FEM

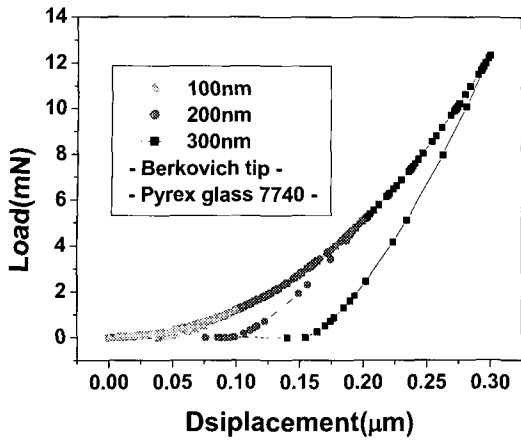


Fig. 10 Load-displacement curves on pyrex glass 7740 with different indentation depth obtained by 3D FEM

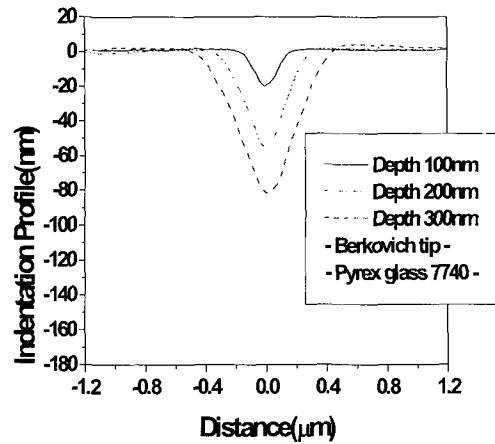


Fig. 12 Indentation unloading after profiles on pyrex glass 7740 with different indentation depth obtained by 3D FEM

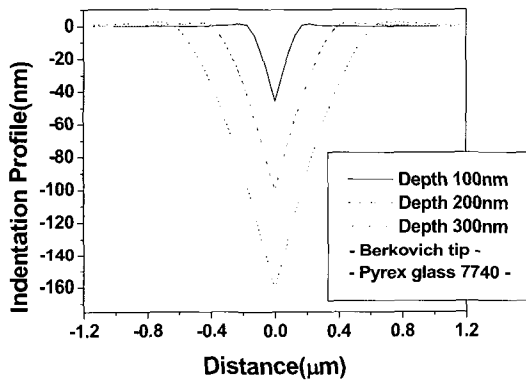


Fig. 11 Indentation unloading after profiles on pyrex glass 7740 with different indentation depth obtained by 3D FEM

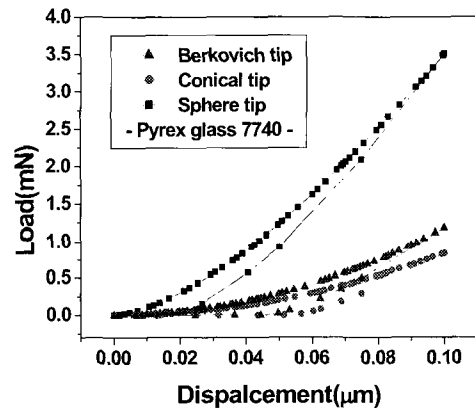


Fig. 13 Load-displacement curves on pyrex glass 7740 with different tip geometry obtained by 3D FEM

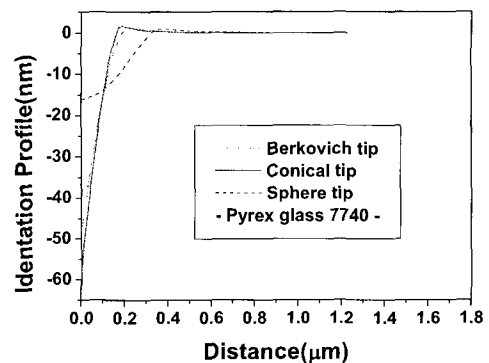


Fig. 14 Indentation unloading after profiles on pyrex glass 7740 with different tip geometry obtained by 3D FEM

소하면 파일업의 높이는 증가함을 알 수 있었다.

Fig. 12 는 유한요소해석으로 구한 파이렉스 글라스 7740 의 하중-변위 곡선을 이용하여 압입깊이 100, 200, 300nm 에 해당하는 하중을 선택하여 파이렉스 글라스 7740 을 나노인덴테이션 실험 후 AFM 으로 측정한 파일업 프로파일이다. Fig. 11 과 Fig. 12 즉 해석 데이터와 실험데이터를 비교해보면 탄성회복에서는 많은 차이를 보인다. 그 이유는 해석시 파이렉스 글라스 7740 은 등방성, 균일소재라 가정하였고, 초기 잔류응력, 표면 거칠기, 팁라운드, 가공경화, 공기저항 등이 없다고 가정하였기 때문이다. 하지만 그래프의 전반적인 탄성회복 형상이나 파일업 형상이 비슷함을 알 수 있다.

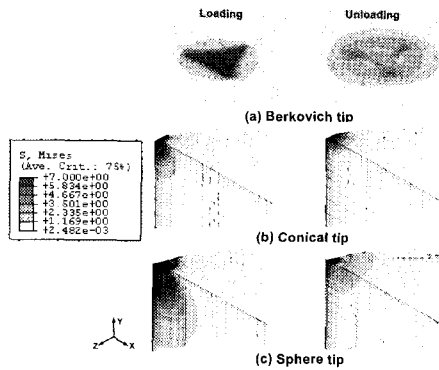


Fig. 15 Von-Mises stress distribution on Silicon With different tip geometry

Fig. 13 은 팁형상에 따른 파이렉스 글라스 7740 시편의 하중-변위 그래프를 나타낸 것이다. 구형상이 콘형상, Berkovich 형상보다 하중이 높고, 탄성회복 또한 심하다. 콘형상, Berkovich 형상, 구형상의 탄성회복은 각각 45 %, 32 %, 53 %이다.

Fig. 14 는 팁형상에 대한 파일업을 프로파일한 그래프이다. 파일업은 콘형상이 가장 높고, 그 다음은 Berkovich 형상, 파일업이 가장 낮은 것은 구형상이다. Fig. 13 과 Fig. 14 의 결과로 파일업의 높이와 탄성회복은 반비례관계를 알 수 있었다.

Fig. 15 는 팁형상에 대한 3 차원 유한요소해석의 로딩과 언로딩시의 응력 분포이다. 3 개의 팁중 구형상은 다른 팁들보다 넓은 응력분포를 보이고 있다. 접촉면이 크므로 응력이 분산된다.

팁라운드, 압입깊이와 팁형상 변화에 대한 해석 결과로 파이렉스 글라스 7740 은 탄성회복과 파일업 높이의 관계는 반비례함을 알 수 있었다. 이러한 결과들로 스크래치 공정에 사용할 하중 값과 파일업 높이, 탄성회복을 예측하여 스크래치 공정으로 나노패턴 제작 시 기초 데이터로 활용할 것이다. 나노인덴테이션 공정 중 마찰계수, 표면거칠기, 초기잔류응력, 단결정 재료의 이방성, 폴리머 재료의 점탄성 등을 고려한 해석이 향후 수행 될 것이다.

4. 결론

본 연구는 극미세 패턴 제작시 생기는 시편의 탄성회복이나 파일업을 나노인덴테이션 유한요소

해석으로 예측해보는 기초 연구로써 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 나노인덴테이션 공정의 유한요소해는 Berkovich 팁을 이용하여 Fused silica 에 압입한 실험의 하중-변위 그래프와 비교하여 해석의 타당성을 검증하였다.

(2) 소재의 E/σ_y 가 적을수록 탄성회복이 증가하고, 커질수록 탄성회복은 감소하였다.

(3) Berkovich 팁, 콘팁, 구형팁과 실리콘, 파이렉스글라스 7740 을 이용하여 압입하중, 탄성회복, 파일업 높이를 예측하였고, 그 결과 탄성회복과 파일업 높이의 관계는 반비례함을 알 수 있었다.

참고 문헌

- (1) Ashida, K., Chen, L., and Morita, N., 2001, "New Maskless micro-fabrication technique of single-crystal silicon using the combination of nanometer-scale machining and wet Etching," Proc. of 2nd euspen Int. Conf., Turin, Italy, May, pp. 78~81.
- (2) Chen, L., Morita, N., and Ashida, K., 2000, "Maskless pattern formation which used alkaline etching and nano-scale cutting by using friction force microscope", Jpn. Prec. Eng., Vol. 66, No. 11, pp. 23~27.
- (3) 이정우, 윤성원, 강충길, 2003, "나노인덴테이션을 이용하여 극미세 패턴을 제작하기 위한 나노변형의 유한요소해석", 한국정밀공학회지, Vol. 20, No. 5, pp. 210~217.
- (4) J. A. Knapp, D. M. Follstaedt, S. M. Myers, J.C. Barbour, T. A. Friedmann, 1999, "Finite-element modeling of nanoindentation", J. Appl. Phys., Vol. 85, No. 3, pp. 1460~1474.
- (5) Hibbitt, Karlsson and Sorensen, 2001, ABAQUS Standard/Explicit rel. 6.2.
- (6) Lu, C.J., Bogy, D.B., 1995, "The effect of tip radius on nano-indentation hardness tests," Int. J. Solid Struct., Vol. 32, No. 12, pp. 1759~1770.
- (7) Lichnichi, M., Lenardi, C., Haupt, J., Vitali, R., 1998, "Simulation of Berkovich nanoindentation experiments on thin films using finite element method," Thin Solid Films, Vol. 333, pp. 278~286.