

3 차원 유한요소해석을 이용한 나노인덴테이션 공정에서의 소재거동해석 및 실험적 검증

이정우*(부산대 대학원 정밀기계공학과), 윤성원*(부산대 대학원 정밀기계공학과),
강충길** (부산대 기계공학부)

Analysis of Material Deformation Behavior in Nanoindentation Process by using 3D Finite Element Analysis and its Experimental Verification

J. W. Lee(Precision Mecha. Eng. Dept. PNU), S. W. Youn(Precision Mecha. Eng. Dept., PNU)
C. G. Kang(School of Mecha. Eng. PNU)

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 recover and pile-up was proposed. The indenter was modeled a 3D rigid surface. Minimum mesh sizes of specimens are 1-10nm. Comparison 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. The result of the investigation will be applied to the fabrication of the hyper-fine pattern.

Key Words : Nanoindentation(나노인덴테이션), Pile-Up(파일업), Elastic recover(탄성복원), Hyper-fine pattern(극미세 패턴)

1. 서론

나노인덴테이션 장비는 원래 벌크재료와 얇은 박막의 기계적 특성 즉 탄성계수와 경도를 측정하고, 또한 스크래치 공정을 이용하여 마찰계수를 측정하는 것이 목적이다¹. 여기서 나노인덴테이션의 스크래치 공정은 수 nm 의 두께를 가진 박막까지 마찰계수 측정이 가능하다. 이 공정을 응용하여 극미세 패턴을 제작하려고 한다.

저자는 나노변형에 필요한 소재의 변형거동을 유한요소법으로 해석하여 실험데이터와 비교 검토하였고 해석 결과의 타당성을 검증하였다. 그러나 2차원해석에서는 3차원적 미세구조체의 변형거동을 예측할 수 없었다². 따라서 본 연구는 나노인덴테이션 스크래치 공정으로 극미세 패턴을 제작하기 전 나노인덴테이션 압입 공정의 3차원 유한요소해석을 이용하여 소재의 변형을 예측 보다 나은 패턴 제작

을 위한 기초 연구이다. 3차원 해석은 2차원 해석에 비해 시간은 많이 걸리지만 입체적으로 버를 프로파일하여 소재의 정확한 변형을 알 수 있는 장점이 있다. 그리고 차후에 조사할 스크래치 해석의 스크래치방향이나 하중을 결정할 수 있는 토대가 될 것이다. 나노인덴테이션 스크래치 공정은 압입, 스크래치, 언로딩 순서로 진행된다. 여기서 압입 공정이 먼저 이루어지기 때문에 압입 공정의 소재거동을 우선적으로 연구하였다.

Berkovich 형과 콘형, 구형의 세종류의 팁을 사용하고, 실리콘 웨이퍼 100 과 파이렉스 글라스 7740, 폴리머인 PMMA 재료를 사용하여 FEM 패키지인 ABAQUS 6.2 로 3 차원 유한요소해석을 했다. 이 해석은 소재 종류에 따른 탄성복원과 파일업의 영향과 팁형상 변화에 따른 탄성복원과 파일업의 영향, 콘형팁의 내각 변화에 따른 탄성복원과 파일업의 영향을 조사하였다. 본 연구결과는 나노인덴

테이션의 스크래치 기능을 활용하여 극미세 패턴을 제작할 때 기초연구로서 활용되어질 것이다.

2. FEM 모델링

2.1.3 3차원 나노인덴테이션 모델

본 연구에서는 소재 종류에 따른 탄성복원과 파일업의 영향과 팁형상 변화에 따른 탄성복원과 파일업의 영향, 콘형팁의 내각 변화에 따른 탄성복원과 파일업의 영향을 조사하였다.

Fig. 1은 팁들의 3차원 형상으로써 Nano-indenter XP(MTS) 매뉴얼³의 치수정보를 참고하여 모델링하였다. Fig. 1(a)는 Berkovich 팁으로써 $\beta = 12.95^\circ, \phi = 65.3^\circ$ 이다. Fig. 1(b)는 콘팁으로써 $\alpha = 65^\circ$ 이고 (c)는 구형팁으로써 $R = 2\mu\text{m}$ 이다.

Fig. 2은 자세한 모델링 정보와 해석에 사용할 Mesh 정보, 경계조건을 알 수 있다. Fig. 2(a)는 Berkovich 팁해석으로써 축대칭이 어려워 전체로 모델링하였고, Mesh는 12320개 8노드 reduced integration 요소(C3D8R element type⁴)와 14728개 노드를 사용하였다. 또한 팁이 압입되는 부분만 Mesh 크기를 작게 한 Local Mesh를 사용하였고, 시편 중심에서 멀어질수록 해석에 거의 영향을 미치지 않으므로 Mesh를 크게 하였다. 팁은 663개 강체요소(R3D4 element type⁴)를 사용한 강체이다. 시편의 바닥은 회전 및 이동의 6자유도를 완전고정하였고, 팁은 Y축이동만 가능하게 하였다.

Fig. 2(b)는 콘과 구형 팁 해석으로써 축대칭이 가능하므로 1/6 축대칭으로 모델링하였다. Table 1은 나노인덴테이션 공정해석에 입력될 기계적 성질이다. 탄성계수와 경도는 나노인덴테이션 실험으로 구한 값들이고, 항복강도와 프와송비는 참고문헌을 인용하였다. Table 1의 세가지 재료 중 실리콘 웨이퍼는 반도체공정에 많이 사용되고, PMMA는 독성이 없고 가격이 저렴하므로 바이오분야에 많이 사용된다. 최근에는 나노패턴제작에 폴리머재료를 이용하여 연구가 되어지고 있다.⁵ Pyrex glass는 MEMS 부품을 만들 때 실리콘 재료를 본딩하는데 사용한다.

팁형상 변화에 따른 탄성복원의 영향을 조사하는 해석에는 실리콘웨이퍼 100 재료를 사용하여

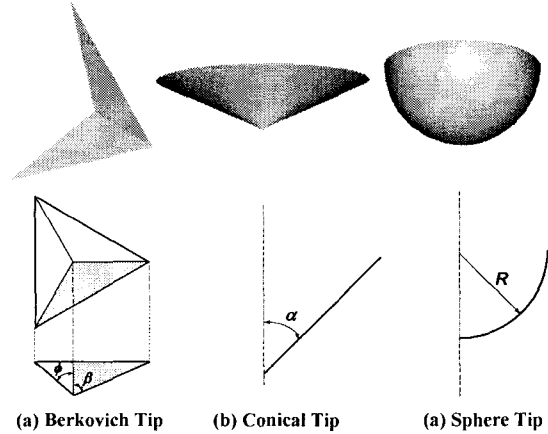


Fig. 1 Schematic of indenters

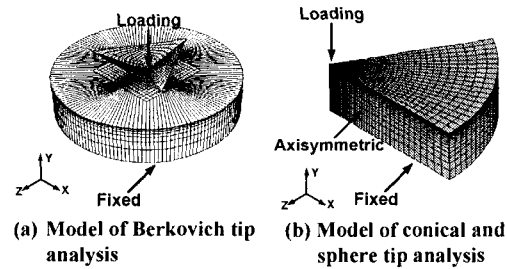


Fig. 2 Finite element model

Berkovich와 콘, 구형 팁으로 100nm 압입하였다. 그리고, 소재 종류에 따른 탄성복원의 영향에는 Berkovich 팁을 이용하여 Table 1의 세가지 재료에 100nm 압입하였다. 팁의 내각변화에 따른 탄성복원의 영향은 콘팁의 내각 α 를 각각 $65^\circ, 60^\circ, 55^\circ$ 로 하여 실리콘웨이퍼 100에 압입하였다.

3. 결과 및 검토

3.1.3 3차원 나노인덴테이션 해석의 검증

해석의 검증은 나노인덴테이션의 캘리브레이션 사용되는 시편인 Fused Silica로 검증하였다. Table 1의 Fused Silica 물성치를 해석시 입력하였고, 탄성계수와 경도는 나노인덴테이션 실험으로 구하였다. Fig. 3은 깊이 100nm 압입시 2차원, 3차원 유한요소

Table 1 Elastic and plastic properties of silicon wafer 100⁶, PMMA⁷ and Pyrex glass, Fused silica⁸

| Materials | Young's modulus (Gpa) | Hardness(Gpa) | Yield Strength(Gpa) | Poisson's ratio |
|-------------------|-----------------------|---------------|---------------------|-----------------|
| Silicon wafer 100 | 168±2 | 13±1 | 7 | 0.278 |
| Pyrex glass 7740 | 63±2 | 10±0.5 | 6.1 | 0.17 |
| PMMA | 3.0±0.5 | 0.30±0.05 | 0.138 | 0.40 |
| Fused Silica | 72±2 | 9.5±0.5 | 7.1 | 0.180 |

해석결과와 나노인덴테이션 실험결과를 비교한 것이다. Fig. 4는 유한요소해석으로 fused silica를 100nm 압입하였을 때 생기는 파일업의 프로파일과 인덴테이션 실험한 다음 AFM으로 측정된 프로파일을 비교한 결과이다. Fig. 3과 Fig. 4의 결과들을 보면 약간의 오차가 생기는 것을 알 수 있다. 그 이유는 유한요소해석시 팁라운드와 표면거칠기를 0으로 가정하여 해석하였으나 실제 실험에서 존재하였고, 가공경화 또한 고려하지 않았기 때문이다. 이렇게 해서 유한요소 해석 모델의 정당성을 검증하였다.

3.2 소재에 대한 나노인덴테이션

Fig. 5는 로딩과 언로딩시 각 시편에 생기는 응력 분포를 나타낸 것이다. 왼쪽은 로딩, 오른쪽은 언로딩의 응력 분포이다. 언로딩의 응력 분포를 보면 탄성복원을 시각적으로 볼 수가 있다. 재료마다 탄성복원의 차이를 보이는 것은 탄성계수 대 항복강도 비 E/σ_y 가 작을수록 탄성복원이 커지기 때문이다⁹. 실리콘웨이퍼 100, PMMA, 파이렉스 글라스의 E/σ_y 는 각각 24, 25.3, 10.3이다. 따라서 10.3인 파이렉스 글라스가 탄성복원이 크게 나타난다.

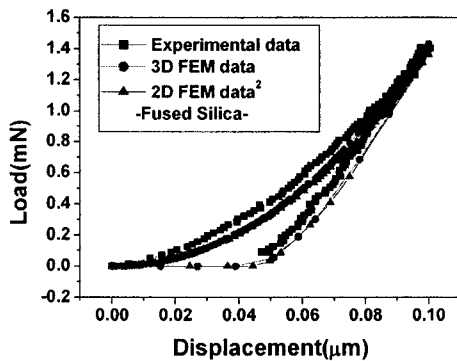


Fig. 3 Comparison of finite element analysis result with experimental data for fused silica material

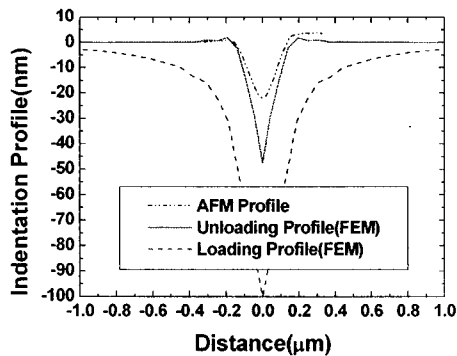


Fig. 4 Comparison of FEM profile with experiment profile for Fused silica

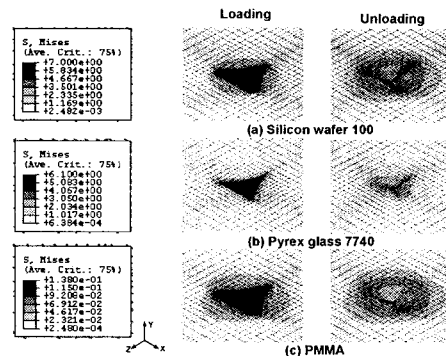


Fig. 5 Von-mises stress distribution of each materials

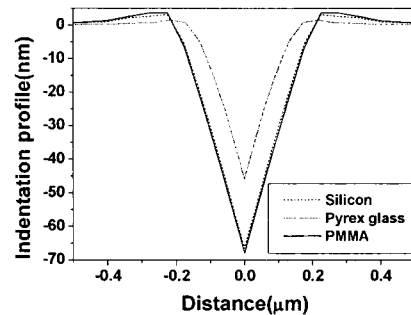


Fig. 6 Indentation profile of each materials

Fig. 6은 실리콘, 파이렉스 글라스, PMMA에 100nm 압입시 생기는 파일업을 프로파일한 그래프이다. 이 결과 알 수 있는 것은 탄성복원이 클수록 버의 높이가 적어짐을 알 수 있다. 즉, 파일업의 높이와 탄성복원은 반비례관계임을 알 수 있었다.

3.3 팁형상에 대한 나노인덴테이션

Fig. 7은 팁형상에 따른 실리콘 웨이퍼 100시편의 하중-변위 그래프를 나타낸 것이다. 구형상이 큰형상, Berkovich 형상보다 하중이 높고, 탄성복원 또한 심하다. 큰형상, Berkovich 형상, 구형상의 탄성복원은 각각 26%, 32%, 53%이다.

Fig. 8은 팁형상에 따른 실리콘 웨이퍼 100시편의 파일업을 프로파일한 그래프를 나타낸 것이다.

파일업은 큰형상이 가장 높고, 그 다음 Berkovich 형상, 가장 낮은 팁은 구형상이다. 이 결과로 파일업의 높이와 탄성복원은 반비례관계임을 알 수 있었다.

3.4 팁 내각 변화에 대한 나노인덴테이션

팁 형상 변화 중 팁 내각은 콘팁을 사용하여 실리콘 웨이퍼 100에 압입시 생기는 탄성복원과 파일업 예측 해석이다. 팁 내각은 각각 65°, 60°, 55°하였으며 압입 깊이는 100nm로 하여 해석하였다.

Fig. 9는 팁 내각변화에 대한 시편 표면의 파

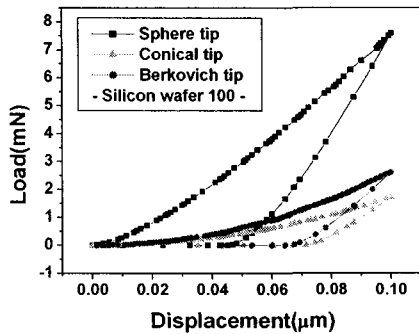


Fig. 7 Load-displacement curves on silicon wafer 100 with different tip geometry

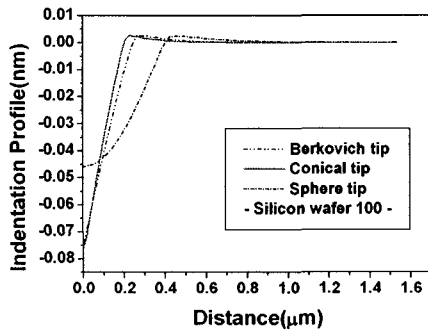


Fig. 8 Indentation profile on silicon wafer 100 with different tip shape

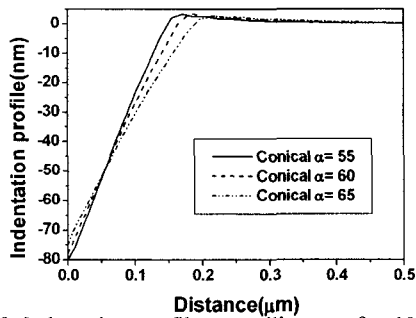


Fig. 9 Indentation profiles on silicon wafer 100 with different angles of conical tip

일업을 프로파일한 그래프이다. 이 결과 내각이 좁아질수록 파일업의 높이는 증가하고, 탄성복원은 감소함을 알 수 있었다. 그러므로 탄성복원과 파일업 높이의 관계는 반비례 관계임을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구는 극미세 패턴 제작시 생기는 시편의 탄성복원이나 파일업을 나노인덴테이션 유한요소해석으로 예측해보는 기초 연구이다. 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) 나노인덴테이션 3D 유한요소해석은 Berkovich 팁을 이용하여 Fused Silica 에 압입한 실험의 하중-변위 그래프와 AFM 이미지, 프로파일을 이용하여 해석의 타당성을 검증하였다.
- (2) Berkovich, 큰, 구형 팁과 실리콘 웨이퍼 100, PMMA, 파이렉스 글라스 소재를 이용하여 탄성복원과 파일업 높이의 차이점을 알아보았다. 그 결과 콘팁을 사용하고, 팁 내각이 감소할수록 탄성복원이 작음을 알 수 있었고, 파일업의 높이는 탄성복원에 반비례함을 알 수 있었다.
- (3) 3 차원 나노인덴테이션 공정 해석으로 스크래치 공정시 입력하는 하중, 팁 방향, 탄성복원, 파일업 높이, 팁 종류등을 선택할 수 있는 기초 데이터를 제시하였다.

향후 3차원 스크래치 공정해석 모델을 만들어 정확한 공정 변수를 적용시켜 보다 정밀한 패턴 제작 조건을 조사할 것이다.

참고문헌

1. 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.
2. Lee, J. W., Youn, S. W., Kang, C. G., "Finite Element Analysis of Nano Deformation for the Hyper-fine Pattern Fabrication by using Nanoindentation," J. KSPE, Vol. 20, No. 5, 2003.
3. MTS, Nanoindenter XP Manual, 2002.
4. Hibbitt, Karlsson and Sorensen, ABAQUS Standard /Explicit rel. 6.2, 2001.
5. Du, B., Mark, R., Vanlandingham, Zhang, Q., He, T., "Direct Measurement of Plowing Friction and Wear of a Polymer Thin Film the Atomic Force Microscope," J. Mater. Res., Vol. 16, No. 5, pp 1487~1492, 2001.
6. Lu, Chung-Jen., Bogy, D. B., "The Effect of Tip Radius on Nano-indentation Hardness Tests," Int. J. Solid Struct., Vol. 32, No. 12, pp. 1759-1770, 1995.
7. Gad-el-Hak, M., The MEMS Handbook, CRC PRESS, pp. 18-11,12, 2001.
8. Knapp, J. A., Follstaedt, D. M., Myers, S. M., Barbour, J. C., Friedmann, T. A., "Finite-Element Modeling of Nanoindentation," Journal of Applied Physics, Vol. 85, No. 3, pp. 1460~1474, 1999.