

격자식 미세구조 성장 모델을 이용한 다결정 박막 소재의 유한 요소 해석

최재환* · 김한성* · 이준기* · 나경환**

(2004년 2월 25일 접수)

Lattice based Microstructure Evolution Model for Monte Carlo Finite Element Analysis of Polycrystalline Materials

Jaehwan Choi, Hansung Kim, J. K. Lee and K. H. Na

Abstract

The mechanical properties of polycrystalline thin-films, critical for Micro-Electro-Mechanical Systems (MEMS) components, are known to have the size effect and the scatter in the length scale of microns by the numbers of intensive investigation by experiments and simulations. So, the consideration of the microstructure is essential to cover these length scale effects. The lattice based stochastic model for the microstructure evolution is used to simulate the actual microstructure, and the fast and reliable algorithm is described in this paper. The kinetics parameters, which are the key parameters for the microstructure evolution based on the nucleation and growth mechanism, are extracted from the given micrograph of a polycrystalline material by an inverse method. And the method is verified by the comparison of the quantitative measures, the number of grains and the grain size distribution, for the actual and simulated microstructures. Finite element mesh is then generated on this lattice based microstructure by the developed code. And the statistical finite element analysis is accomplished for selected microstructure.

Key Words : Nucleation and Growth, Kinetics Parameter, Grain Size Distribution, Polycrystalline Thin-Film, Lattice Model

1. 서 론

다결정 박막 소재의 기계적 특성의 중요성은 MEMS(Micro-Electro-Mechanical System) 분야의 성장과 함께 증대되고 있다. 이러한 다결정 박막 소재의 기계적 특성에 대하여 실험적⁽¹⁻³⁾, 그리고 수치 해석적⁽⁴⁻⁵⁾ 연구가 활발히 진행되었는데, 그 결과로 MEMS 부품의 경우 기계적 특성이 크기^(1-2,4)와 가공 공정^(1,3)에 좌우되는 것을 알 수 있었다. 뿐만 아니라, 동일 가공 공정을 통해 만들

어진 같은 크기 및 재질의 시편의 경우에도 그 기계적 특성의 산포가 매우 크다.⁽¹⁾ 따라서 마이크로 미터 단위, 또는 그레인 크기 수준, 의 부품의 경우에는 결정론적인 기계적 특성의 산출이 불가능하다.

본 연구에서는 이러한 연구 결과를 바탕으로 하여 다결정 박막소재의 미세구조(microstructure)를 고려한 통계적 유한 요소 해석법을 개발하였다. 먼저, 다결정 박막 소재 가공 공정의 현상학적 모델인 결정핵 형성(nucleation) 및 성장(growth)

* 오하이오 주립대, 기계공학과
** 한국생산기술연구원

모델을 바탕으로 미세구조 성장 모사 프로그램을 개발하였으며, 구성된 미세구조의 유한 요소 해석을 위한 요소 분할 프로그램을 개발하였다.

또한 미세구조 성장 모사 프로그램에 필요한 인자의 실험적 추출의 어려움을 해결하기 위해 미세구조의 정량적 특성(그레인 개수, 도메인 크기, 그레인 크기 분포⁽⁹⁻¹⁰⁾)으로부터 인자를 추출하는 이론적 근거를 제공하였으며, 이를 통해 결정핵 형성 속도 인자(nucleation speed parameter), β , 를 도입하였다.

본 연구에서 개발된 프로그램의 모듈과 각 모듈의 입/출력 변수를 정리하면 Fig. 1 과 같다.

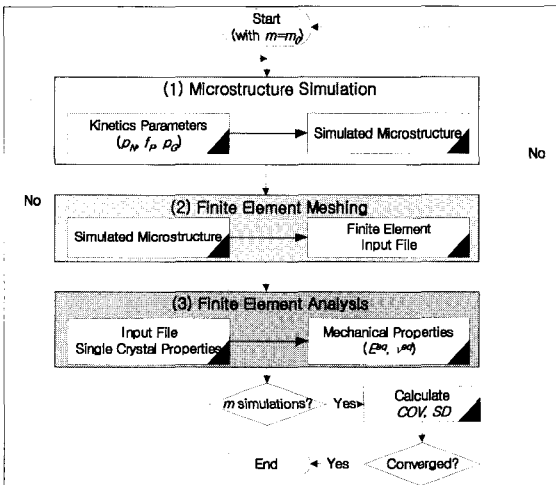


Fig. 1 Flow Chart of Program Modules

2. 박막소재의 미세구조 성장 모사

2.1 박막소재 가공 공정

다결정 박막 소재 형성의 대표적인 공정으로 LPCVD 공정이 있는데, 이 과정을 도식화하면 Fig. 2 와 같다. 단결정 모재를 튜브 내의 가열판에 놓고, 성장시키기를 원하는 단결정 가스를 입구로부터 투입하고, 출구에서는 펌프를 통해 순환시킨다. 이 공정은 모재와 투입 가스 성분간의 화학적 반응과 접합을 이용하는 것으로 모재에 접근하는 투입 가스의 원자군 중에 결정핵 형성 (nucleation) 및 성장 (growth) 에너지를 초과하는 원자군은 모재에 부착된다.⁽⁷⁾ 이러한 부착의 연속으로 박막이 형성된다. 결정핵의 부착시 평면내 국부 방향은 정해지지 않으며, 평면에 수직인 방향만 공정 온도에 따라 결정된다.⁽⁴⁾

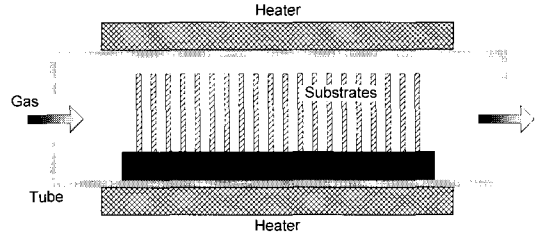


Fig. 2 Schematic diagram of LPCVD process

2.2 박막 미세구조 모사 모델

다결정 박막소재의 성장은 주로 결정핵 형성 (nucleation) 과 그 성장(growth)의 메커니즘으로 모델링한다. 본 연구에서는 격자 모델(lattice model)⁽⁸⁾ 을 이용한 결정핵 형성 및 성장 모델을 사용하였다. 즉, 미세구조 성장이 이루어질 도메인 영역을 미리 설정된 $L \times M$ 격자로 설정하고, 이를 채워가는 것이다. 도메인 영역 L 과 M 은 각각 식 (1a)와

$$L = \frac{L_H}{S_c D_{cr}} \quad (1a)$$

$$M = \frac{L_V}{S_c D_{cr}} \quad (1b)$$

(1b)로 결정되며, 여기서 S_c 는 scale factor, L_H 와 L_V 는 각각 시편의 가로, 세로 길이를 나타낸다. 식 (1a)와 (1b)의 D_{cr} 은 형성 결정핵의 임계 직경으로 다음과 같이 산출된다.

$$D_{cr} = 2\gamma^* = \frac{\gamma}{\Delta g} \quad (2)$$

여기서 γ 는 표면장력을, Δg 는 비결정질과 결정질 사이의 자유 에너지 차이를 나타낸다.

이와 같이 정의된 도메인을 채워가는 과정에서 격자모델 인자(kinetics parameter)가 필요한데, 격자 모델에서는 결정핵 형성 확률(nucleation probability), p_N , 성장 확률(growth probability), p_G , 그리고 모재의 특성인 잠재적 결정핵 비율(the fraction of the potential sites), f_p , 등이 필요하다. 결정핵 형성 확률, p_N ,은 결정핵 형성/성장 에너지와 관련되며⁽⁸⁾, 성장 확률, p_G ,은 성장하는 그래인의 형상을 결정하는데, 본 연구에서는 그 값을 0.7로 고정하였다.

3. 격자 모델 인자 역추출

앞서 기술한 격자 모델을 이용한 미세구조 성장 모사에는 격자 모델 인자(p_N, p_G, f_p)가 필요한데, 이는 실험을 통해 추출할 수 있다.⁽⁷⁾ 그러나 이러한 실험적 추출은 많은 시간과 비용을 필요로 한다. 따라서 본 연구에서는 미세구조의 현미경 사진(micrograph)으로부터 격자 모델 인자를 추출하는 방법을 개발하였다.

미세구조의 현미경 사진을 이미지 처리를 하게 되면, 미세구조의 정량적 특성(그레인 개수, 그레인 크기 분포)을 추출할 수 있는데, 본 연구에서는 MATLAB의 이미지 처리 기능을 사용하였다.

3.1 그레인 개수

정해진 도메인 내의 그레인 개수는 결정핵 형성 속도, α 와 그 성장 속도, G ,에 의해 결정되는데, α 는 격자 모델 인자중 p_N, f_p 과, G 는 p_G 와 연관된다. 결정핵 형성 속도 측면에서 본 결정핵 형성 및 성장 조건에서 양 극한의 경우는 결정핵 형성 속도가 가장 빠른 경우와 가장 느린 경우로 구분할 수 있다. 가장 빠른 경우는 성장 시작 전에 모든 잠재적 결정핵이 결정핵으로 형성되는 것이고, 가장 느린 경우는 공정 전체에 걸쳐 결정핵 형성이 이루어지는 경우이다. 이 양 극한의 경우에는 그레인 개수 관계가 잘 정립되어 있다. 즉, 가장 빠른 경우에는 잠재적 결정핵 개수 자체가 그레인 개수가 되고, 가장 느린 경우에는 다음과 같이 주어진다.⁽¹¹⁾

$$N_g = 0.8794 \left(\frac{\alpha}{G} \right)^{3/2} \quad (3)$$

그러나 실제 가공 공정의 경우에는 위의 양 극한 사이에 놓이게 되므로, 식 (3)과 같은 이론식이 존재하지 않는다. 따라서 본 연구에서는 개발된 미세구조 성장 모사 프로그램을 이용하여, 격자 인자의 파라메터 스텐디를 통해 Fig. 3과 같은 그레인 개수 도표를 작성하였다. Fig. 3에서 등고선은 $N_g' = N_g / (LM)$ 이 동일한 것을 나타낸다.

Fig. 3을 보간하여, 동일 그레인 개수를 생성하는 p_N 과 f_p 의 조합을 구할 수 있다.

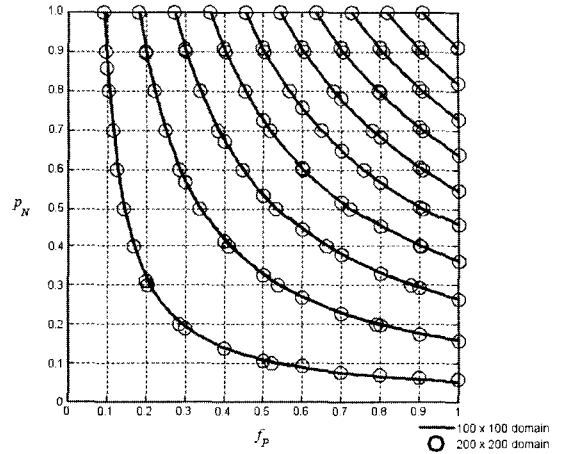


Fig. 3 Contour plot of the reduced number of grains as a result of parametric study by numbers of simulations

3.2 그레인 크기 분포

그레인 크기 분포 (Grain Size Distribution, GSD)라 함은 각 그레인 크기가 일정한 형태로 분포된다는 것인데, 이 역시 양 극한의 결정핵 형성 조건에 대해서는 이론식이 존재한다. 즉, 결정핵 형성 속도가 가장 빠른 경우에는

$$P(A') = \frac{\beta^\beta}{\Gamma(\beta)} A'^{\beta-1} e^{-\beta A'}, \quad \beta = 3.65 \quad (4)$$

그리고 결정핵 형성 속도가 가장 느린 경우에는

$$P(A') = e^{-A'} \quad (5)$$

의 분포가 된다.⁽⁹⁻¹⁰⁾ 식 (4), (5)에서 $A' = A_i / A_{avg}$, Γ 는 감마 함수이다.

본 연구에서는 식 (4)의 β 를 1.0으로 하면 식 (5)가 된다는 점에 착안, β 를 결정핵 형성 속도 인자(nucleation speed parameter)로 정의하고, 결정핵 형성 속도를 정하는 인자로 제안하고자 한다.

3.3 격자 모델 인자 추출

Fig. 3으로부터 주어진 그레인 개수를 생성하는 격자 모델 인자의 조합을 추출하고, 실제 그레인 크기 분포를 식 (4)를 이용 β 를 근사하면 주어진 현미경 사진의 미세구조를 생성시키는 격자 모델

인자를 추출할 수 있다. Fig. 4에 현미경 사진과 이미지 처리된 모델의 일례를 도시하고, Fig. 5에 실제 그래인 크기 분포와 추출된 격자 모델 인자를 이용한 미세구조 성장 모사 결과의 그래인 크기 분포를 비교하여, 본 방법의 타당성을 입증하였다.

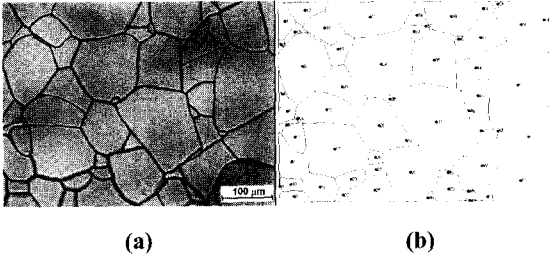


Fig. 4 The original (a) and the extracted (b) images of the poly- Al_2O_3 thin film⁽¹²⁾

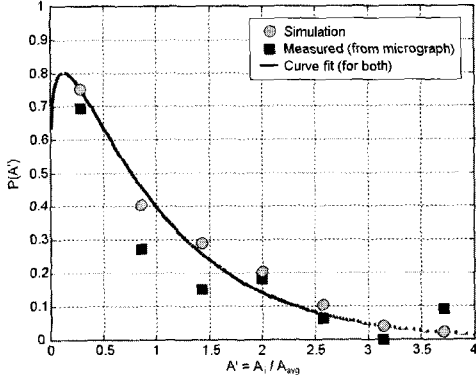


Fig. 5 Comparison of Grain Size Distribution of a given micrograph with simulation results

4. 유한 요소 분할 및 해석

이상의 과정으로 생성된 격자식 미세구조를 유한 요소로 분할하는 프로그램을 작성하여, 다결정 박막 소재의 기계적 특성 산출에 사용하였다. Fig. 4(a)의 미세구조를 유한 요소로 분할한 예를 Fig. 6에 도시한다.

3 절에 기술한 격자 모델 인자 역추출을 통해 추출된 격자 모델 인자를 적용하여, 미세구조 성장 모사를 실시하였다. 추출된 격자 모델 인자는 $f_p = 0.8829$, $p_N = 0.000086$ 이며, 생성된 미세구조와 유한 요소 모델의 일례를 Fig. 7 과 8에 각각 도시한다.

유한 요소 해석에는 ABAQUS를 사용하였으며, 해석 결과 Fig. 9와 같이 산포를 가지는 등가 탄성 계수가 산출되었다.

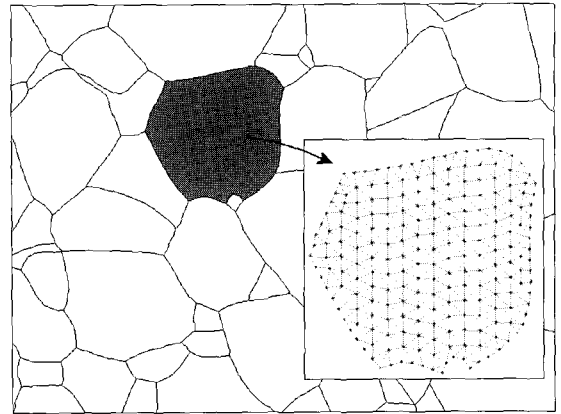


Fig. 6 Finite element mesh of a given microstructure

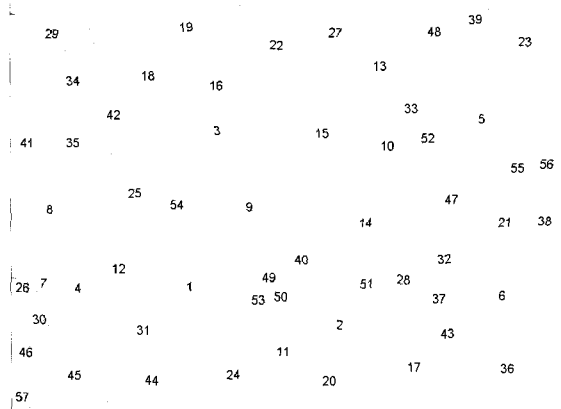


Fig. 7 Example of the constructed microstructure

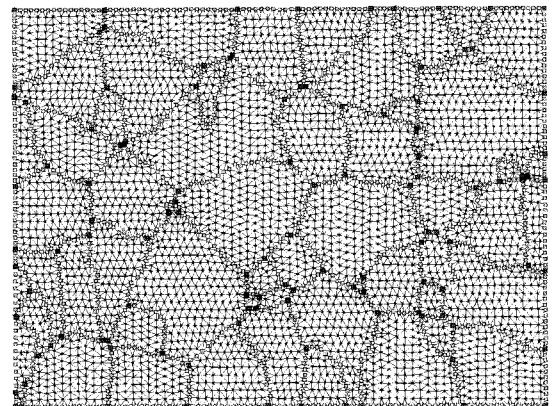


Fig. 8 Finite element mesh corresponding to the microstructure of Fig. 7

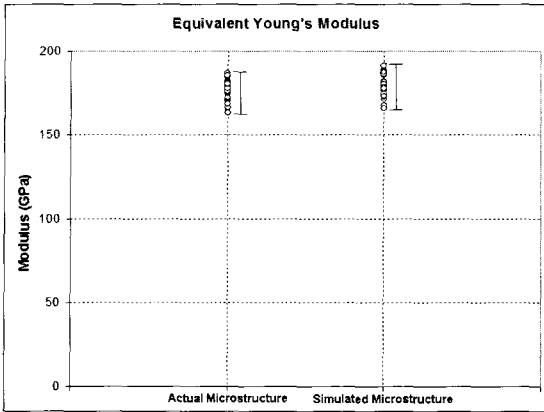


Fig. 9 Scattered equivalent Young's modulus of 546×410 μm specimen

5. 결론

본 연구를 통해 격자식 미세구조 성장 모사 프로그램을 개발하여, 다결정 박막 소재의 미세구조를 실제와 유사하게 모사할 수 있게 되었다. 또한 미세구조 성장 모사에 중요한 격자 모델 인자를 현미경 사진만으로 추출 가능하도록 하여, 미세구조 성장 모사의 효율성을 높였다.

그리고, 다결정 박막 소재의 미세구조를 고려한 유한 요소 해석이 가능하게 되어, 해당 소재의 마이크로 미터 길이 단위의 기계적 특성 산출이 가능하게 되었다.

후 기

본 연구는 산업자원부가 지원하고 있는 차세대 신기술 개발 사업 중 한국기계연구원이 주관하고 있는 고기능·초미세 광열유체 마이크로부품 기술 개발 사업의 세부과제로서 수행중입니다. 이에 관계자 여러분들께 감사 드립니다.

참 고 문 헌

(1) T. Yi and C. J. Kim, 1999, "Measurement of mechanical properties for MEMS materials," Meas. Sci. Technol., Vol. 10, pp. 706~716.
 (2) T. Tsuchiya, O. Tabata, J. Sakata and T. Yasunori, 19

98, "Specimen size effect on tensile strength of surface-micromachined polycrystalline silicon thin-films," J. MicroElectroMechanical Syst., Vol. 7, No. 1, pp. 106~113.
 (3) B. K. Gupta and B. Bhushan, 1995, "Micromechanical properties of amorphous carbon coatings deposited by different deposition techniques," Thin Solid Films, Vol. 270, pp. 391~398.
 (4) R. L. Mullen, R. Ballarini, Y. Yin and A. H. Heuer, 1998, "Monte Carlo simulation of effective elastic constants of polycrystalline thin films," Acta Materialia, Vol 45, No. 6, pp. 2247~2255.
 (5) R. E. Rudd, 2001, "The atomic limit of finite element modeling in MEMS: Coupling of length scales," Analog Integrated Circuits and Signal Processing, Vol. 39, pp. 17~26.
 (6) E. N. Gilbert, 1962, "Random subdivisions of space into crystals," The Annals of Mathematical Statistics, Vol. 33, pp. 958~972.
 (7) K. Zellama, P. Germain, S. Squelard and J. C. Bourgoin, 1979, "Crystallization in amorphous silicon," J. Appl. Phys., Vol. 50, No. 11, pp. 6995~7000.
 (8) M. Castro, A. Sanchez and F. Dominguez-Adame, 2000, "Lattice model for kinetics and grain-size distribution in crystallization," Physical Review B, Vol. 61, No. 10, pp. 6579~6586.
 (9) D. Weaire, J.P. Kermode and J. Wejchert, 1986, "On the distribution of cell areas in a Voronoi network," Philosophical Magazine B, Vol. 53, No. 5, pp. L101~L105.
 (10) P. Mulheran, 1994, "The scaling state in two-dimensional grain growth," Acta Metallurgica et Materialia, Vol. 42, No. 11, pp. 3589~3593.
 (11) A. Getis and B. Boots, 1978, "Models of Spatial Processes," Cambridge University Press.
 (12) J. M. den Toonder, J. A.W. van Dommelen and F.P.T. Baaijens, 1999, "The relation between single crystal elasticity and the effective elastic behavior of polycrystalline materials: theory, measurement and computation," Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 7, pp. 909~928.