

## 연구논문

## 펨토초 레이저 금속 가공시 발생하는 열충격 수치계산 프로그램 개발

## Development of numerical-computation program to predict thermal shock induced by fs laser processing of metals

오부국, 김동식

포항공과대학교 기계공학과

김재구, 이제훈

한국기계연구원 지능형 정밀센터

## ABSTRACT

It has been recognized that laser dicing of wafers results in low mechanical strength compared to the conventional sawing techniques. Thermal shock generated by rapid thermal loading is responsible for this problem. This work presents a two-dimensional ultra-short thermoelastic model for numerical simulation of femtosecond laser ablation of metals in the high-fluence regime where the phase explosion is dominant. Laser-induced thermoelastic stress is analyzed for Ni. The results show that the laser-induced thermal shock is large enough to induce mechanical damages.

**Key Word** : Thermal Shock, Thermoelastic Stress, Femtosecond Laser Processing, Metal

## 1. 서론

최근 반도체 공정의 선폭이 수십 나노미터까지 감소함에 따라 부품의 회로집적도가 지속적으로 높아지는 추세이다. 하지만 제작된 직접회로를 패키징 하는 공정에서 기존의 기계적인 절단에 의한 박막 웨이퍼의 절단이 불가능하거나 재료의 파괴가 발생하게 된다[1]. 따라서 웨이퍼 절단 분야에 레이저를 확대하기 위한 연구들이 진행되어 왔다[1-4]. 레이저를 이용한 웨이퍼 절단은 비접촉식이고 레이저 빔의 특성변화가 용이하다는 장점에 불구하고 가공면의 기계적 강도가 기계적 가공(sawing)에 의한 것보다 훨씬 떨어진다는 한계를 지닌다. 이러한 원인에 대한 다양한 실험적 연구가 진행되었으며 열탄성에 의한 기계적 파괴나 데브리(debris) 인한 기계적 강도 저하 등이 그 원인으로 추정되고 있다[2].

레이저 펄스의 조사로 인한 급격한 온도 구배는 강한 열응력을 표면에 집중시키면서 미세조직의 기계적 결함을 유발한다. 또한 어블레이션시 발생하는 데브리가 표면과의 반응을 통해서 응력 집중 또는 잔류응력을 유발하여 기계적 강도를 낮출 수 있다[2]. 레이저 절단에 의한 웨이퍼의 감소된 기계적 강도를 높이기 위해 화학적 에칭 공정[1], 액상공정[3] 등이 시도 되었다. 하지만 현재까지 근본적인 해결책을 제시하지는 못하였다. 재료의 미세 균열(crack)의 생성은 시편 내부에서 발생하는 현상이기 때문에 실시간 측정이 매우 어려우며 실험적으로 미세조직의 손상 기작을 밝히기도 매우 어렵다. 레이저 공정변수 중에서 미세조직의 변화에 영향을 미칠 수 있는 인자들로는 펄스폭, 에너지, 빔의 형상, 중첩률, 외부 환경 등이 있다. 따라서 수치해석 연구를 통해 다양한 레이저 공정변수 변화에 따른 재료 내부

의 기계적 거동을 살펴보고 미세 크랙의 생성 가능성을 예측하는 것은 의미가 있다.

피코초 또는 펨토초 레이저는 다이싱 또는 드릴링 공정의 차세대 광원으로서 잠재력을 지니고 있다. 특히 Kaspar는 피코초 펄스가 나노초 펄스에 비하여 훨씬 작은 열적 하중을 발생시킴을 측정하였다[4]. 따라서 본 연구에서는 향후 레이저 천공/절단 공정을 최적화 하기 위한 기초 연구로서 펨토초 펄스에 의한 금속 재료의 기계적 거동을 예측하기 위한 수치해석 프로그램을 개발/검증하고자 한다. 극초단 펄스에 의한 응력해석의 경우, Falkovsky는 전자와 격자온도의 비평형상태로 인한 추가응력항을 유도하여 열적 비평형 하에서 응력거동을 계산하였다[5]. Chen, Tzou는 이를 2차원 축대칭 문제에 까지 확장하였다[6,7]. 하지만 위의 연구는 모두 낮은 플루언스 영역에 국한되어 어블레이션이 일어나지 않는 상황으로 제한되었다. 따라서 본 연구에서는 높은 플루언스 (fluence; 단위면적당 에너지) 영역까지 확장하여 어블레이션을 고려한 계산을 수행하였다. 기초적인 계산결과를 바탕으로 극초단 레이저 펄스에 의한 재료의 열탄성 거동을 관찰하고 레이저 가공 시 기계적 손상의 가능성을 검토하였다.

## 2. 수치모델링

펨토초 펄스를 금속 시편에 조사하게 되면 전자와 격자간의 열적 비평형 상태가 발생하며 이를 이론적으로 표현하기 위해 식(1)과 같은 2온도 모델(Two-temperature model)이 주로 사용되고 있다[8,9]. 여기서 2개의 에너지 방정식이 도입되며 서로 에너지 결합상수( $G$ )에 의해 결합된다 [9]( $t$ : 시간,  $C_e, C_l$ : 전자/격자 열용량,  $T_e, T_l$ : 전자/격자 온도,  $H_l$ : 격자엔탈피,  $k_e, k_l$ : 전자열전도율,  $S$ : 에너지 생성항). 격자에너지 방정식의 경우, 상변화를 고려하기 위하여 엔탈피를 종속변수로 설정하였다. 계산영역은 2차원 실린더 좌표

계( $r, z, q$ )을 사용한 축대칭 영역으로 깊이( $L_z$ ) 1  $\mu$  m, 반경( $L_r$ ) 20  $\mu$  m 이다. 전자와 격자온도에 대한 초기조건과 경계조건은 식(2)에 주어진다. 레이저 에너지 흡수에 의한 열생성항은 식(3)으로 표현된다( $a$ : 광흡수계수,  $R$ : 반사율,  $E$ : 레이저 에너지,  $t_w$ : 펄스폭,  $r_w$ : 빔반경).

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k_e r \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - G(T_e - T_l) + S \quad (1a)$$

$$\frac{\partial H_l}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k_l r \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_l \frac{\partial T_l}{\partial z} \right) + G(T_e - T_l) \quad (1b)$$

$$T_e(r, z, 0) = T_l(r, z, 0) = T_0 \quad (2a)$$

$$\frac{\partial T_e}{\partial r} = \frac{\partial T_l}{\partial r} = 0 \text{ at } r = 0 \text{ or } r = L_r \quad (2b)$$

$$\frac{\partial T_e}{\partial z} = \frac{\partial T_l}{\partial z} = 0 \text{ at } z = 0 \text{ or } z = L_z \quad (2c)$$

$$S(r, z, t) = \frac{(1-R)\alpha E \sqrt{2.77}}{\pi^{1.5} \tau_w r_w^2} \times \exp \left[ -\alpha z - \left( \frac{r}{r_w} \right)^2 - 2.77 \left( \frac{t}{\tau_w} \right)^2 \right] \quad (3)$$

레이저 빔은 시공간적으로 가우시안 빔의 분포를 가진다( $t_w=220$  fs,  $r_w=5$  mm) [10]. Ni에 대한 물성치는 참고문헌 11, 12의 값들을 사용하였다. 극초단 펄스에 의한 재료의 열탄성 거동은 식(4)를 이용해 모델링 할 수 있다[6]. 식(4)로부터 변위( $u, w$ )가 구해지면 식(5)의 구성방정식을 이용하여 변형률( $e$ ) 및 응력( $s$ )으로 변환할 수 있다( $L$ : blast 계수[5],  $m$ : 전단계수,  $l$ : Lamé 1<sup>st</sup> 상수,  $d_{ij}$ : Kronecker delta,  $a_r$ : 열팽창계수,  $i, j=r$  또는  $z$  또는  $q$ ). 변위 및 응력에 대한 초기조건과 경계조건은 식(6)과 같다. 시편의 열적 증발 및 상폭발로 인한 플룸(plume)의 반발압력이 작용하는 시간은 대략 펄스 조사 후 수 ns 후에 발생하므로 본 계산에서는 고려하지 않는다[13].

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} + \Lambda \frac{\partial T_e^2}{\partial r} \quad (4a)$$

$$\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \frac{\sigma_{rz}}{r} + \Lambda \frac{\partial T_e^2}{\partial z} \quad (4b)$$

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} - (3\lambda + 2\mu) \alpha_T (T_i - T_0) \delta_{ij} \quad (5a)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u}{\partial r}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{u}{r}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (5b)$$

$$\varepsilon_{rz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \quad (5c)$$

$$\text{I.C. } u = w = \dot{u} = \dot{w} = \sigma_{ij} = 0 \text{ at } t = 0 \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} \text{B.C. } \sigma_{zz}(r, 0, t) &= \sigma_{zz}(r, L_z, t) = 0 \\ \sigma_{rz}(r, 0, t) &= \sigma_{rz}(r, L_z, t) = 0 \\ u(L_r, z, t) &= 0 \end{aligned} \quad (6b)$$

극초단 레이저 펄스를 조사하는 경우 재료의 열변형은 전자와 격자의 온도구배에 의해서 결정된다[5]. 식(4)의 마지막 항들은 전자의 온도구배로 인한 열변형을 고려하기 위해 추가된 항이다[14].

본 연구에서 어블레이션은 상폭발[15]과 파쇄[6]에 의해서만 일어나는 것으로 가정한다. 상폭발의 어블레이션 조건으로서 스피노달 한계 (spinodal limit;  $\partial p / \partial v|_T=0$ )를 사용한다. 상폭발 모델은 시편의 온도가 스피노달 한계에 도달하게 되면 순간적으로 기화한다고 가정한다. 따라서 상폭발과 파쇄에 의한 표면형상을  $r_{im}=f(T=T_{sp})$ 와 같이 표현 할 수 있다( $r_{im}$ : 계면좌표). 스피노달 한계는 일반적으로 임계온도의  $0.8 \sim 0.9T_{cr}$  ( $T_{cr}$ : 열역학적 임계온도)의 범위를 갖으며 본 연구에서는  $0.9T_{cr}$  를 어블레이션 조건으로 선택하였다[15]. 또한 다중 축하중 하에서 발생하는 재료의 파손은 VM(von-Mises) 응력으로 표현된다. 식(7)은 von-Mises 응력의 표현식이다[6].

$$\sigma_e = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{rr} - \sigma_{zz})^2 + 6\sigma_{rz}^2 \right]^{1/2} \quad (7)$$

본 연구에서는 다중펄스에 의한 가공형상을 계산할 때 단순히 단펄스에 의한 가공형상을 중복시켰다. 그러나 실제 표면 조건의 변화를 고려하기 위해 표면반사율을 맞춤변수로 설정하여 계산을 수행하였다. 이러한 다중펄스에 의해서 표면의 조도, 거칠기가 변화하게 되고 이로 인한흡수율의 증가는 일반적으로 잘 알려져 있으므로 반사율은 적절한 맞춤변수라 할 수 있다[16]. 용융면이 형성되면 온도의 함수로 표면장력이 주어지므로 마랑고니(Marangoni) 유동이 유발될 수 있다. 그러나 레이저 가열에 의한 마랑고니 유동의 대략적인 속도는 1 m/s 에 지나지 않는다[16]. 이 속도는 100 ps 동안 겨우 0.1 nm의 이동거리를 나타내므로 마랑고니 효과를 본 연구에서는 무시하였다.

수치계산은 식(1) ~ (6)의 지배방정식을 유한체적법을 사용하여 차분화 하였다. 차분화 방법은 양함수법과 중심차분법을 시간과 공간에 대하여 각각 사용하였다. 열탄성파의 전파는 온도구배가 큰 축에서 두드러지게 나타나므로 격자의 생성은 깊이(z) 방향으로는 최소간격 1 nm의 불균일 격자를 사용하여 표면근처의 정밀도를 높였고 반경(r) 방향으로는 균일 격자를 사용하였다. 격자 개수는 깊이, 반경 방향 모두 100 개로 나누었다. 총 계산수행시간은 75 ps 이며, 이 시간 이후에는 어블레이션이 발생하지 않는 충분한 시간이다.

### 3. 계산결과 및 해석

Figs. 1-2는 개발된 해석코드를 검증하기 위해 피코초, 펄토초 펄스에 의한 재료의 열탄성 거동을 기존의 연구결과와 비교 도시한 것이다. 초기에 열팽창에 의해서 압축응력이 표면근처에 생성

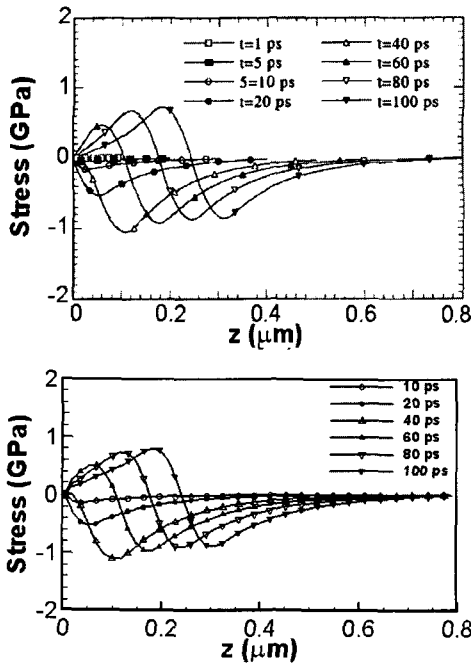


Fig. 1 Stress in gold illuminated by a picosecond laser (25 ps, 1.3 GW/cm<sup>2</sup>) is compared with previous work (top: X. Wang *et al.*[17], bottom: present work).

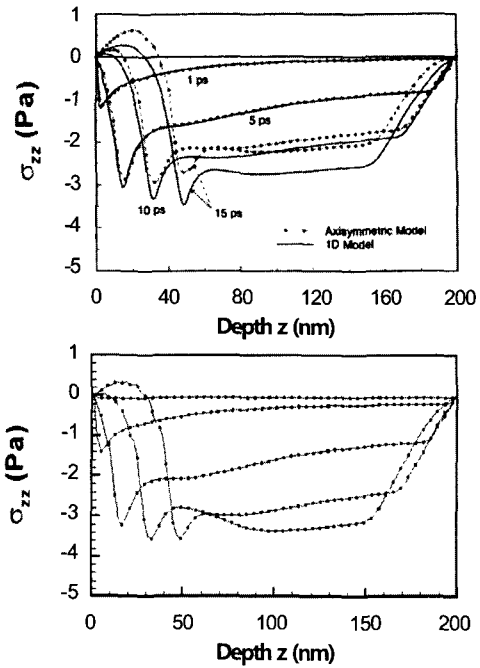


Fig. 2 Stress distribution along the z-axis in the cylindrical coordinate, generated in gold film by 100 fs (0.4 J/cm<sup>2</sup>) pulses, are compared with the previous work (top: J.K. Chen *et al.*[6], bottom: present work).

되고 시간이 지남에 따라 인장응력이 생성되는 과정이 두 경우 모두 관찰되고 기존의 결과와 잘 일치함을 볼 수 있다. 이를 통해 본 연구에서 개발된 극초단 펄스에 의한 2차원 열탄성 모델이 재료의 기계적 거동을 잘 묘사함을 알 수 있다.

Fig. 3은 니켈 시편에 펨토초 펄스를 조사하

였을 때 상폭발 조건을 적용하여 구한 재료의 제거율을 보여주고 있다[18]. Fig. 3에서 계산결과 ( $R=0.45$ )가 대기 중에서 수행된 실험결과와 비교적 잘 일치하고 있음을 알 수 있었다. Ni의 측정된 어블레이션 한계 플루언스는 약 200 mJ/cm<sup>2</sup> 정도로 나타났으며 근사적인 예측값(밀도×증발잠열×전자침투깊이/(1-R) ~ 250 mJ/cm<sup>2</sup>)과도 비교적 잘 일치한다[8].

원형 빔의 가장자리 영역에 조사되는 레이저는 플루언스는 중앙부에 비해 상대적으로 낮으므로 상폭발에 의한 어블레이션 가능성이 작다. 하지만 열충격으로 인한 기계적 손상에 의한 어블레이션의 가능성이 있을 수 있음이 기존의 연구를 통해서 제시되어 왔다[6]. 따라서 빔 가장자리 영역에서 재료의 응력 분포를 도시해 보면 Fig. 4와 같다. 단축 인장응력( $s_{rr}$ ,  $s_{zz}$ )은 중앙부에서는 충분히 크지만 빔의 가장자리 영역에서는 상대적으로 낮다. 일반적인 금속의 항복강도는 변형률의 함수이지만 최대값은 최대 수 ~ 수십 GPa

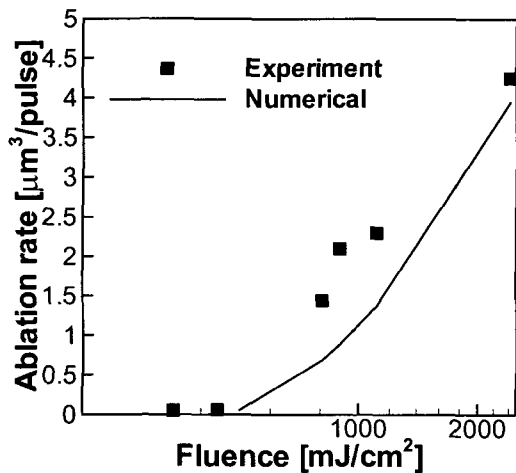


Fig. 3 Ablation rate of Ni (220 fs, 800 nm, 100 pulses) [18].

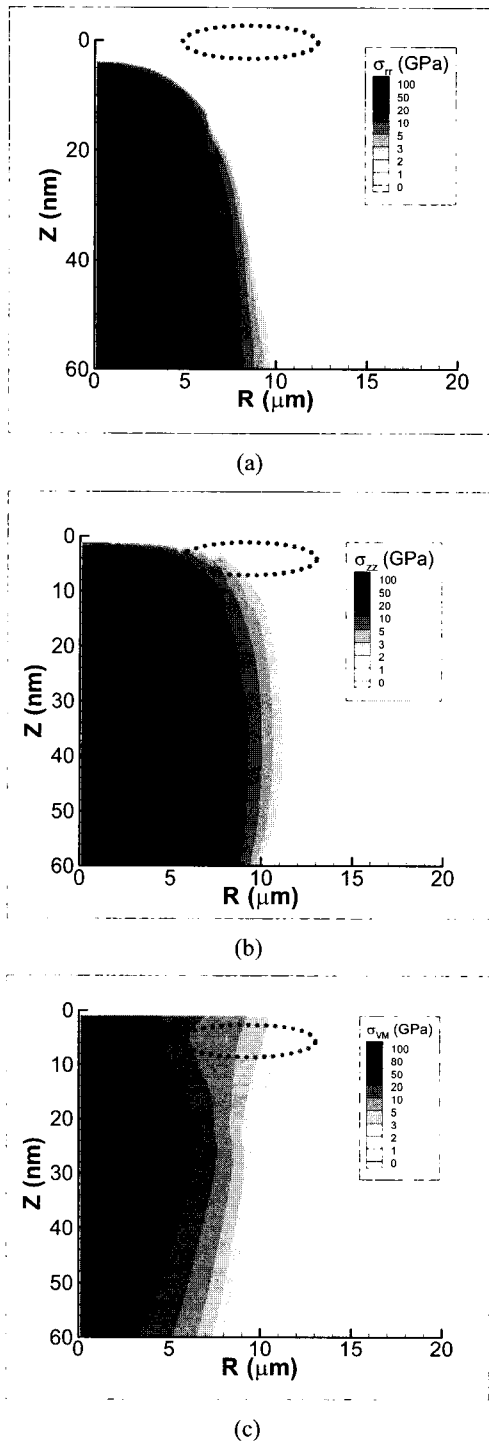


Fig. 4 (a) Radial, (b) z-directional, and (c) von-Mises stress distributions at 16ps, 11ps, and 4ps, respectively (fluence: 2420 mJ/cm<sup>2</sup>). The dashed ellipse represents the beam edge region.

정도의 값을 넘지 않는다[19]. Fig. 4(c)에서 빔의 가장자리 영역에서 VM 응력이 수 GPa 의 값을 나타내고 있다. 가장자리에서도 재료의 소성변형이

일어날 수 있음을 계산을 통해 알 수 있었다. 또한 빔의 중심부에서 최대 VM 응력을 구하면 레이저 플루언스에 따라 30 GPa(220 mJ/cm<sup>2</sup>), 160 GPa(810 mJ/cm<sup>2</sup>), 550 GPa(2420 mJ/cm<sup>2</sup>) 으로 나타났다. 빔의 가장자리 보다 VM 응력이 매우 크게 나타났다. 또한 최대응력 발생지점과 발생 시간은 큰 변화없이 약 100 nm와 약 20 ps 로 각각 나타났다. 상폭발이 발생하는 시간이 4 ps(2420 mJ/cm<sup>2</sup>), 9 ps(810 mJ/cm<sup>2</sup>) 인 것을 고려하면 빔의 중심부에서는 상폭발과 탄/소성 변형이 동시에 일어나는 복잡한 현상이 일어난다고 할 수 있다. 한편 빔의 가장자리에서의 VM 응력은 Fig. 4(c)처럼 약 4 ps 에서 최대이며 재료에 소성변형 및 기계적 결합을 유도하기에 충분히 큰 값이다. 4 ps 에서 가장자리 영역의 온도변화는 상폭발을 일으키지 못할 만큼 미미하다. 따라서 가장자리에서 재료의 거동은 열에 의한 상변화 보다는 기계적 소성변형이 주요함을 알 수 있다.

#### 4. 결론

본 연구를 통해 가공형상 예측을 위한 상폭발 모델과 펄초 레이저 펄스에 의한 재료의 응력 해석을 결합한 해석 코드를 개발 및 검증 하였다.

수치해석을 통해 펄초 레이저 가공시 von-Mises 응력이 빔 가장자리에서 소성변형을 일으킬 만큼 커 재료의 제거에 영향을 미치고 기계적 결합을 생성시킬 수 있음을 보았다. 특히 빔 가장 자리에서 재료의 어블레이션 예측을 위해서는 탄/소성거동을 반드시 함께 고려해야 함을 알 수 있다.

#### 후 기

본 연구는 산업자원부 첨단레이저-재료 반응 모사용 전산해석 기법 개발사업의 지원으로 수행되었다.

## 참고문헌

- 1) M. S. Amer, M. A. El-Ashry, L. R. Dosser, K. E. Hix, J. F. Maguire, and B. Irwin, Femtosecond versus nanosecond laser machining: comparison of induced stresses and structural changes in silicon wafers, *Appl. Surf. Sci.* 242, 162-167 (2005).
- 2) Y. Matsuoka, Laser-induced damage to semiconductors, *J. Phys D:Appl. Phys.* 9, 215-224 (1976).
- 3) K. L. Choo, Y. Ogawa, G. Kanbargi, V. Otra, L. M. Raff, and R. Komanduri, Micromachining of silicon by short-pulse laser ablation in air and under water, *Mater. sci. eng. A Struct. mater. : prop. microstruct. process.* 372, 145-162 (2004).
- 4) J. Kaspar, A. Luft, S. Nolte, M. Will, and E. Beyer, Laser helical drilling of silicon wafers with ns to femtosecond pulses : Scanning electron microscopy and transmission electron microscopy characterization of drilled through-holes, *J. Laser Appl.* 18, 85-92 (2006).
- 5) L. A. Falkovsky, and E. G. Mishchenko, Lattice deformation from interaction with electrons heated by an ultrashort laser pulse, *JETP Lett.* 66, 208-213 (1997).
- 6) J. K. Chen, J. E. Beraun, and C. L. Tham, Comparison of one-dimensional and two-dimensional axisymmetric approaches to the thermomechanical response caused by ultrashort laser heating, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 4, 650-661 (2002).
- 7) D. Y. Tzou, J. K. Chen, and J. E. Beraun, Recent development of ultrafast thermoelasticity, *J. Therm. Stress.* 28, 563-594 (2005).
- 8) S. Nolte, C. Momma, H. Jacobs, A. Tunnermann, B. Chichkov, B. Wellegehausen, and H. Welling, Ablation of metals by ultrashort laser pulses, *J. Opt. Soc. Am. B* 14, 2716-2722 (1997).
- 9) T. Q. Qiu, C. L. Tien, Heat transfer mechanisms during short-pulse laser heating of metals, *J. heat transfer* 115, 835-841 (1993).
- 10) A. N. Smith, J. L. Hostetler, and P. M. Norris, Nonequilibrium heating in metal films: an analytical and numerical analysis, *Numerical Heat Transfer: Part A* 35, 859-873 (1999).
- 11) J. Hohlfeld, S. S. Wellershoff, J. Gudde, U. Conrad, V. Jahnke, and E. Matthias, Electron and lattice dynamics following optical excitation of metals, *Chem. Phys.* 251, 237-258 (2000).
- 12) J. H. Weaver, and H. P. R. Frederikse, *Handbook of Chemistry and Physics* 81st Edt. by D. R. Lide, CRC press (2000-2001).
- 13) J. R. Ho, C. P. Grigoropoulos, and J. A. C. Humphrey, Computational study of heat transfer and gas dynamics in the pulsed laser evaporation of metals, *J. Appl. Phys.* 78, 4696-4709 (1995).
- 14) J. Chen, and J. Beraun, Modeling of ultrashort laser ablation of gold films in vacuum, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 5, 168-173 (2003).
- 15) R. Kelly, and A. Miotello, Comments on explosive mechanisms of laser sputtering, *Appl. Surf. Sci.* 96-98, 205-215 (1996).
- 16) M. V. Allmen, *Laser - beam interactions with materials*, Berlin, Springer (1987).
- 17) X. Wang, and X. Xu, Thermoelastic wave in metal induced by ultrashort pulses, *J. Therm. Stress.* 25, 457-473 (2002).
- 18) B. Oh, D. Kim, J. Kim, and J. H. Lee, Fs laser ablation of metals and crater formation by phase explosion in high-fluence regime, *8th Journal of physics: Conference Series* 59, 567-570 (2007).
- 19) D. E. Grady, The spall strength of condensed matter, *J. Mech. Phys. Solids* 36, 353-384 (1988).