

Thermal displacement minimization of an oxide target for bonding process by finite element analysis and optimal design

Hanyoung Cha and Chan-Yeup Chung[†]

Virtual Engineering Center, Korea Institute of Ceramic Engineering & Technology, Jinju 52851, Korea

(Received October 5, 2020)

(Revised October 13, 2020)

(Accepted October 14, 2020)

Abstract In this research, design optimization was investigated using the finite element analysis and the optimal design technique based on the PQRS algorithm to minimize the thermal deformation of IGZO oxide in a target module in which IGZO oxide and a copper backplate are bonded to each other. In order to apply the optimal design technique in conjunction with finite element analysis, the x -coordinate of lower supports and upper fixed boards used as design variables, and the optimal design was performed to minimize the thermal displacement of IGZO materials as the objective function. After the optimization process, the thermal displacement within IGZO oxide could be reduced to 42 % comparing with the initial model. The result is thought to be useful in the industry as it can reduce the thermal deformation of target oxides materials only by changing the position of the subsidiary materials during the bonding process.

Key words Thermal deformation, Oxide sputtering targets, Ceramic-metal bonding, Thermal displacement, Finite element analysis, Optimal design, PQRS

유한요소해석과 최적설계 기법을 활용한 증착용 산화물타겟 접합공정에서의 열 변형 최소화 연구

차한영, 정찬엽[†]

한국세라믹기술원 가상공학센터, 진주, 52851

(2020년 10월 5일 접수)

(2020년 10월 13일 심사완료)

(2020년 10월 14일 게재확정)

요약 본 연구에서는 유한요소 해석과 PQRS 알고리즘 기반의 최적설계 기법을 활용하여 IGZO 산화물 타겟과 구리 백플레이트가 서로 접합되어 있는 타겟 모듈에서 IGZO 산화물의 열변형을 최소화할 수 있는 방법에 대해 고찰했다. 3차원 유한요소 해석 결과 고온에서 IGZO와 구리 백플레이트의 접합 이후 냉각될 때 IGZO 산화물의 열변형은 최대 0.161 mm 로 예측되었다. 유한요소 해석을 연동한 최적설계기법을 적용하기 위해 타겟 모듈을 냉각할 때 사용하는 하부받침대와 상부고정대의 위치를 설계변수화하여 목적함수인 IGZO의 열변형이 최소화되도록 최적설계를 수행했고, 그 결과 IGZO 산화물의 열변형을 최대 42 % 감소시킬 수 있었다. 이는 타겟을 구성하는 주재료와 구조 변경 없이 공정 중에 사용되는 부재료의 위치 변경만으로도 산화물의 열변형을 감소시킬 수 있어 산업계에 유용할 것으로 사료된다.

1. 서론

모바일 기기, TV, 전장 등 다양한 분야로 디스플레이 채용이 확대되면서 디스플레이 소자를 제조하기 위한 다양한 소재에 대한 박막 증착 기술이 발전해왔다. 최근 AMOLED 기반의 유연디스플레이 소자의 수요가 늘고

소자의 응답 속도를 높이기 위한 기존 실리콘 기반에서 비정질 산화물 기반의 TFT 제작 기술이 발전하고 있으며[1,2] 터치 스크린 패널을 제조하기 위해 저항이 낮은 투명전극 증착에 대한 수요도 높아지고 있어 산업계에서는 다양한 산화물 박막 제작 기술에 대한 수요가 높아지고 있다. 이러한 디스플레이용 산화물 박막을 제작하기 위해서는 산화알루미늄, 산화이연, 산화인듐, 산화갈륨 등과 이들이 고용되어 있는 IGO, IGZO 등 다양한 조성의 산화물 박막 증착용 고순도 타겟이 필요하다[3]. 또

[†]Corresponding author
E-mail: chanyoup@kicet.re.kr

한 증착 장비에 따라 진공 챔버 내에서 증착되는 배치 타입, 유연 필름 상에 산화물 박막 증착을 위한 롤-투-롤(roll-to-roll) 타입[4] 등 다양한 증착 방식이 사용되고 있으며 어플리케이션에 따라 장비의 크기와 스펙이 다양하기 때문에 산화물 타겟의 크기와 구조도 다양하다. 일반적으로 증착용 타겟 모듈은 산화물 타겟을 금속 재질의 구조물인 백플레이트(backplate)에 접합한 형태로 증착 장비에 로딩되어 사용되며, 금속 백플레이트와 산화물 타겟 대비 녹는점이 낮은 금속 혹은 금속합금 등의 접착제를 사용하여 고온에서 접착제 금속을 용융시킨 다음 금속 백플레이트와 산화물 타겟을 접합하여 제작한다. 이후 대기 중에 노출되는 과정에서 고순도의 산화물 타겟과 금속 백플레이트 사이 열팽창계수의 차이로 인해 산화물 타겟 내부에 열응력에 의한 열변형이 발생하여 크랙 등 미세 결함이 발생하게 된다. 이러한 미세 결함이 내재된 타겟을 증착공정에 사용할 경우 산화물 박막의 품질 저하에 주된 원인이 되어 수율을 떨어뜨리고 심각한 품질 이슈를 야기시킨다.

본 연구에서는 이러한 미세결함 생성을 최소화하기 위해 자연냉각 과정에서 금속 백플레이트에 접합된 산화물 타겟의 열변형 정도를 정량적으로 평가하기 위해 유한요소해석 기반 시뮬레이션을 수행했고, 냉각 과정에서 타겟 모듈을 지지하고 휨방지를 위해 사용하는 하부받침대와 상부고정대의 위치를 최적설계 기법으로 최적화하여 산화물 타겟 내부에 발생하는 열변형을 최소화하는 방법을 고찰했다. 또한 최적설계 기법을 통해 최적화된 상부고정대와 하부받침대 위치에 대한 솔루션을 검증하기 위해

최적 설계된 산화물 타겟 모듈의 열변형 감소효과를 3차원 유한요소 시뮬레이션으로 확인했다. 산화물 타겟 모듈의 경우 장비와 대상 어플리케이션에 따라 크기와 스펙이 다양하기 때문에 일반적인 설계룰(design rule) 도출이 어렵다. 따라서 임의의 특정 모델을 예로 시뮬레이션 기반 최적설계를 수행했으며 타 모델에도 이러한 최적설계 방법이 쉽게 확대 적용 가능 할 것으로 판단된다.

2. 계산모델 정의

본 연구에 사용된 임의의 타겟 모듈은 Fig. 1과 같이 길이 3000 mm, 너비 230 mm 의 구리 백플레이트(노란색)에 1324.8 mm 길이의 IGZO 타겟 2개(회색)가 부착된 구조로 이루어져 있다. 구리 백플레이트와 IGZO 산화물 타겟을 접합하기 위해 수십~수백 마이크로미터 두께를 가지는 금속 접착제가 존재하지만 전체 모듈 구조에서 차지하는 부피가 매우 작아 유한요소 해석에서는 이 부분을 생략했다. 이 구리 백플레이트와 IGZO 타겟이 접합된 모듈을 고온에서 접합 후 자연냉각 시키는 과정에서 3개의 하부받침대 위에 거치하고 IGZO 타겟의 휨 방지 등을 목적으로 4개의 상부고정대(흰색 사각형)가 초기 타겟 표면 위치에 고정되어 있다. 초기 하부받침대는 노란색의 구리 백플레이트 아래 IGZO 타겟이 시작하는 지점, 끝나는 지점 그리고 두 IGZO 타겟의 중앙 지점에 위치하고 있으며 IGZO 타겟에 접촉하여 타겟을 눌러주는 역할을 하는 상부고정대의 경우 각

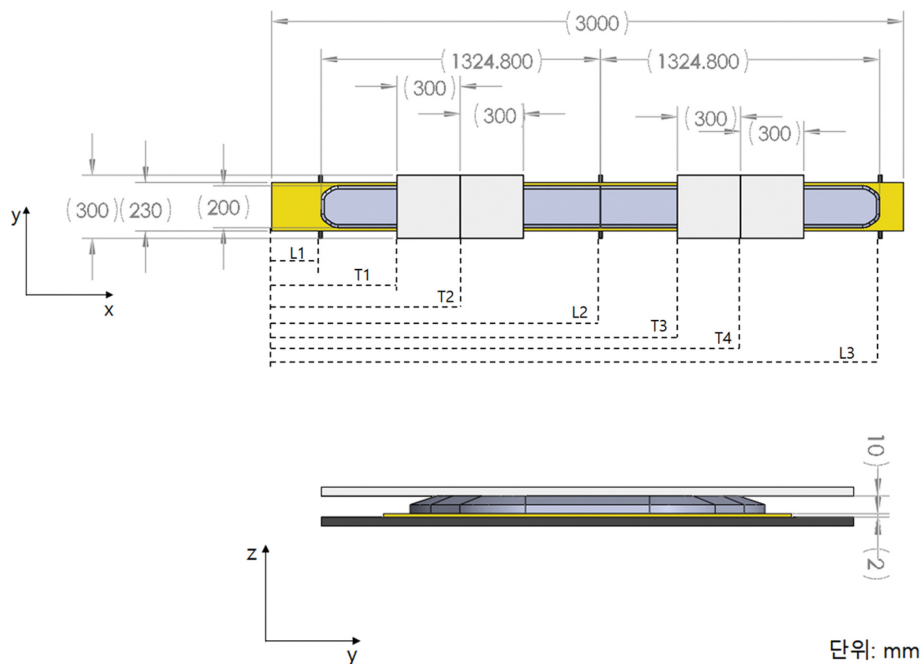


Fig. 1. Top view (top) and side view (bottom) of IGZO target module.

Table 1
Structural parameters and materials of the target module

	Target module Size [unit: mm]			Materials
	Width	Height	Thickness	
Metal backplate	3000	230	2	Cu
Oxide target	1324.8	200	10	IGZO
Support	17	250	3	SUS405
Fixed board	300	300	5	SUS405

IGZO 타겟의 중앙부에 2개씩 총 4개가 위치하고 있다. 구리 백플레이트는 2 mm 두께를 가지며 IGZO 타겟의 경우 10 mm 두께이다. 각 구조물에 대한 크기 및 물질에 대한 상세 정보는 Table 1에 나와 있다.

3. 계산 방법

우선, 초기 모델에서의 열변형을 예측하기 위해 3차원 구조물에서의 열전달 및 응력해석을 수행했다. 전체 타겟 모듈을 구성하고 있는 구성요소의 물성을 Table 2에 요약했다. 산화물 타겟의 경우 IGZO 물성값[5]을 사용했고, 금속 백플레이트의 경우 구리, 하부받침대와 상부고정대의 경우 SUS405의 물성값을 적용했다. 열전달과 열응력 해석은 정상상태(steady-state) 시뮬레이션 기반으로 진행되었다. 열전달 해석에서 전체 타겟 모듈의 초기온도는 156°C로 설정했고, 내부에서 단위시간당 발생하거나 감소하는 열량은 0으로 설정했다. 경계치 조건으로 모든 경계의 수직인 방향으로 외부 대기 온도 15°C로 자연대류에 의한 열전달 조건을 설정했다. 응력해석에서 경계치 조건으로 하부받침대와 상부고정대의 위치는 초기위치로 고정시켰다. 이러한 다중물리기반 유한요소 해석을 통해 156°C에서 15°C로 냉각될 때 IGZO 타겟 부위에 발생하는 열변형을 예측했다.

IGZO 산화물 타겟의 열변형을 최소화하기 위해 순차적 2차 반응표면법(PQRSM, Progressive Quadratic Response Surface Method) 기반의 최적설계 기법[6]을 적용했다. 유한요소 시뮬레이션 기반 최적설계를 위해서는 설계 변수들의 변화에 따라 유한요소 해석 모델을 변경하여 계산하는 과정을 반복하기 때문에 3차원 유한요소 해석은

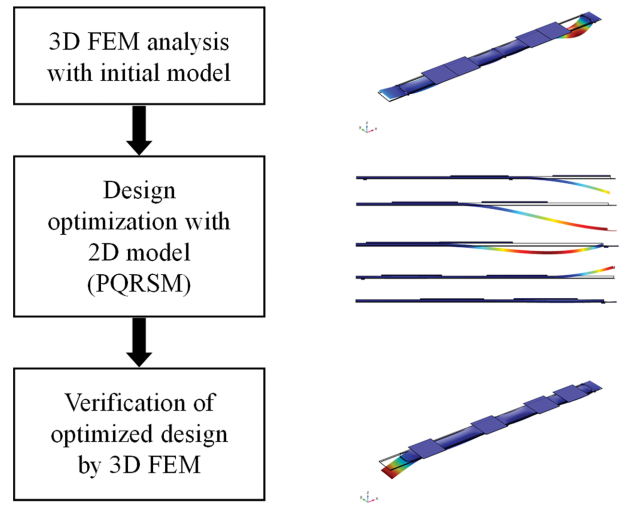


Fig. 2. Design optimization procedure with 2D & 3D finite element analysis.

장시간의 계산 시간을 요구한다. 따라서 본 연구에서는 초기 열변형 및 최적설계 과정 이후 최적설계 결과를 검증하는 단계에서만 3차원 모델을 활용했고, 최적설계 과정 중에는 Fig. 2와 같이 단면 2차원 모델기반의 정상상태(steady-state) 유한요소 해석을 연계하여 최적화를 수행했다.

설계변수는 하부받침대와 상부고정대의 x-축 방향으로의 좌표를 기반으로 $L_1, L_2, L_3, T_1, T_2, T_3, T_4$ 총 7개를 사용했고(Fig. 1), 목적함수는 IGZO 산화물 타겟의 수직 방향으로 가운데 지점을 좌우로 가로지르는 선상에 해당되는 각 지점에서의 열변형 값들 중 최대 열변형 값으로 설정했다. 하부받침대(L_n)의 경우 구리 백플레이트 길이 내에서 움직일 수 있고, 상부고정대는 IGZO 타겟 길이 범위 내에서 움직일 수 있기 때문에 다음과 같이 정의했다.

$$\begin{aligned}
 0 &\leq L_1 < 750 \\
 750 &< L_2 < 2250 \\
 2250 &< L_3 \leq 3000 \\
 235 &< T_1 < 597.4 \\
 597.4 &< T_2 < 1259.8 \\
 1560.2 &< T_3 < 2055 \\
 2055 &< T_4 < 2585 \text{ [단위: mm]}
 \end{aligned}$$

설계변수 변화에 따른 목적함수 값을 구하는 절차를 자

Table 2
Materials properties used in finite element analysis

	Young's modulus [GPa]	Poisson's ratio	Density [g/cm ³]	Thermal conductivity [W/(m·K)]	CTE [1/K]
Cu	120	0.34	8.96	401.0	16.5×10^{-6}
IGZO[5]	137	0.36	5.60	8.0	4.3×10^{-6}
SUS405	203	0.265	8.00	16.3	15.3×10^{-6}

동화하기 위해 각 설계변수들은 COMSOL multiphysics 코드[7]에서 모두 변수화하여 입력했고, 2차원 유한요소 해석이 완료된 다음 각각의 열변형 결과 데이터들을 수집했다. 이 자동화 과정은 설계최적화 코드인 PIANO[8]와 유한요소 해석 코드인 COMSOL multiphysics 을 연동하여 진행되었다.

4. 계산 결과 및 고찰

초기 모델에서의 열응력 및 열변형을 계산한 결과 Fig. 3과 같이 우측 IGZO 타겟 끝 부분에서 열변형이 크게 관찰되었는데 최대 0.161 mm의 열변형을 보였다. 이 열변형 값이 클수록 IGZO 타겟 내부에 크랙 등 결함이 발생할 가능성이 크다. 본 계산에 활용된 타겟 모듈 디자인의 경우 두 IGZO 타겟의 위치가 구리 백플레이트 정중앙이 아니고 오른쪽으로 치우쳐 있기 때문에 우측에 위치한 IGZO 타겟 끝부분에서 많은 열변형이 나타난 것으로 판단된다.

IGZO의 열변형을 최소화하기 위해 목적함수인 최대 열변형 값을 PQRSM 알고리즘 기반의 최적설계 기법으로 최적화 한 결과, Fig. 4와 같이 초기 위치 대비 하부 받침대 L^*_1 의 경우 239.84 mm, L^*_2 의 경우 19.39 mm, L^*_3 의 경우 -15.14 mm 이동하고 동시에 상부고정대 T^*_1 , T^*_2 , T^*_3 , T^*_4 의 경우 각각 -183.93 mm, 367.67 mm, 101.50 mm, 242.43 mm 이동할 경우 IGZO 산화물 타겟의 최대 열변형 값을 최소화할 수 있다는 결과를 얻었다. 모듈 구조에서 x-좌표를 설계변수화하여 사용했기 때문에 양(+)-수는 x-좌표의 양(+)-의 방향인 오른쪽 이동을 의미하고 음(-)-수는 x-좌표의 음(-)-의 방향인 왼쪽으로의 이동을 의미한다. 최적설계 이전 초기 모델에서 두 타겟 중 오른쪽에 위치한 IGZO 타겟의 오른쪽 끝 부분 주위에서 최대 열변형이 발생했기 때문에 이를 완화하기

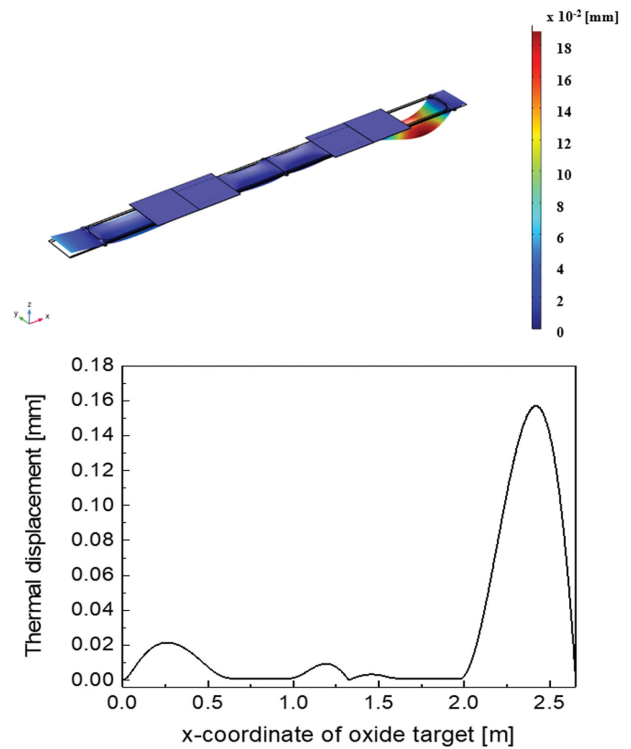


Fig. 3. 3D surface plot of thermal displacement (top) and calculated thermal displacement of IGZO targets from the initial model (bottom).

위해 하부받침대 L_1 를 상당부분 오른쪽으로 이동해야 하고 동시에 상부고정대의 경우 T_1 을 제외한 나머지 3개의 상부고정대는 모두 오른쪽으로 이동해야 오른쪽 타겟에 발생하는 열변형을 감소시킬 수 있는 것으로 판단된다.

유한요소 해석과 최적설계가 연계된 가상실험에서 도출된 최적설계안을 검증하기 위해 초기 모델과 같이 3차원 유한요소 모델을 활용하여 열변형을 확인한 결과, Fig. 5와 같이 열변형의 최대값이 0.079 mm로 줄어든

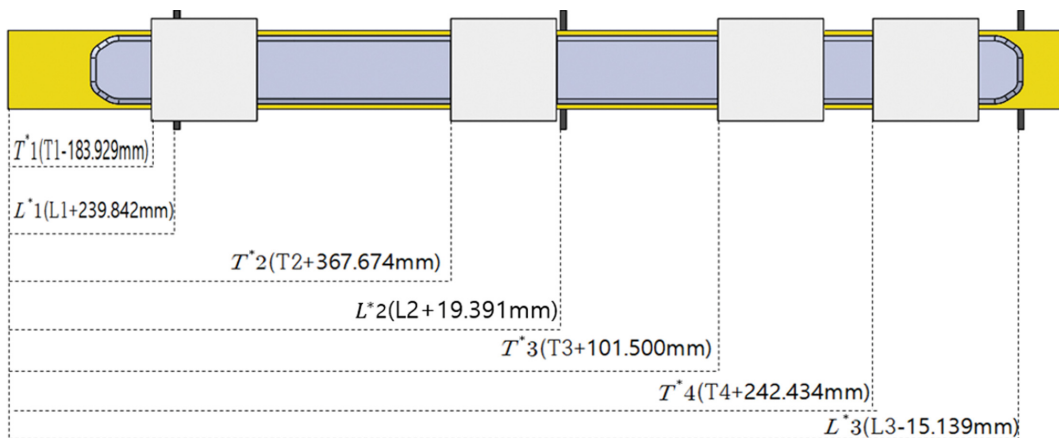


Fig. 4. Top view of the target module after design optimization process.

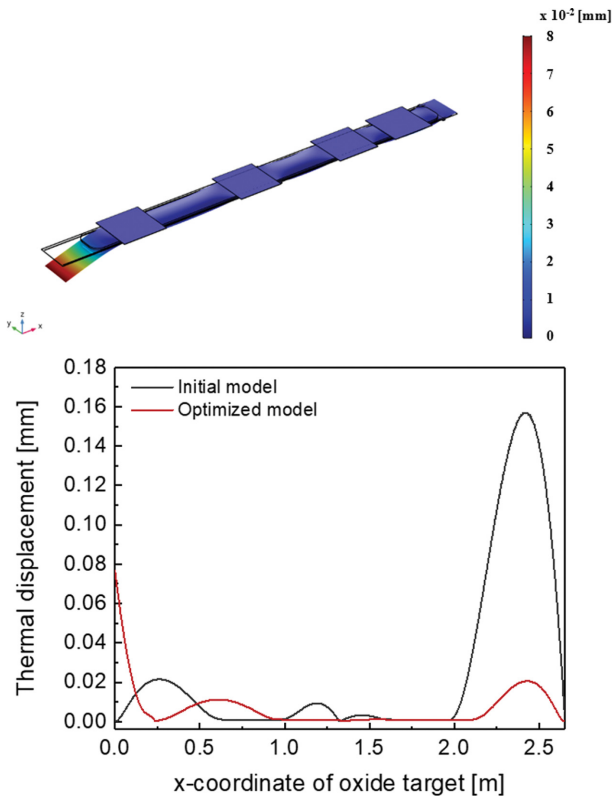


Fig. 5. 3D surface plot of thermal displacement (top) and comparison of calculated thermal displacement curves within IGZO targets after design optimization.

것으로 나타났다. 이는 최대 열변형 값이 초기 모델 대비 42% 감소한 값이다. 최적설계 솔루션이 적용된 결과의 경우 두 IGZO 타겟에서의 열변형이 동시에 감소했으며 두 타겟 간의 열변형의 차이도 현저히 줄어들었음을 알 수 있다. 다만 왼쪽에 위치한 타겟의 끝 부분에서 최대 열변형이 관찰되었는데 이는 초기모델에서 보여준 타겟 오른쪽 끝에서 보여준 최대 열변형 보다 42% 감소한 값이기 때문에 전체 IGZO 타겟에서 열변형이 감소했다고 결론 내릴 수 있다.

이처럼 세라믹과 금속이 접합된 구조를 가지는 타겟 모듈의 고온 접합 후 냉각하는 과정에서 열팽창계수 차이에 의한 변형은 제작과정에서 흔히 직면할 수 있는 문제다. 하지만 3개의 하부받침대와 4개의 상부고정대가 존재하는 비교적 단순한 모델의 경우에도 수치적인 최적설계 기법을 적용하지 않으면 최적해를 찾아내기는 매우 어렵다. 보통의 경우 현장 작업자의 경험에 의해 열변형이 가장 작아지는 위치를 찾아내거나 유한요소 기반의 열해석을 통해 열변형이 큰 지점을 찾아 그 위치에 고정대를 눌러 문제를 해결하려 하지만 이러한 문제해결은 타겟 다른 부분에서 열변형을 유발할 수 있고, 경험에 기초한 일회성의 실험들을 반복해서 최적설계를 수행할 경우 많은 변수들 중 어느 변수부터 통제하면서 최적해

를 구할 지 결정을 못 내릴 가능성이 크다. 그러나 유한요소 해석과 연계된 최적설계 기법을 활용한다면 7개나 되는 변수를 동시에 변경하면서 체계적으로 시뮬레이션 데이터를 수집하여 최적해를 찾아낼 수 있었다.

5. 결 론

산화물 타겟과 금속 백플레이트가 접합되어 있는 타겟 모듈의 경우 열팽창계수가 다른 이종 물질의 접합으로 고온에서 접합 후 냉각되는 과정에서 열변형이 발생한다. 두 개의 IGZO 타겟이 구리 백플레이트 상에 접합되어 있는 모듈의 경우 3차원 유한요소 해석 결과, IGZO 타겟 부위에 최대 0.161 mm의 열변형이 발생했다. 이러한 열변형은 고온도 산화물 타겟 내 크랙 등의 결함을 발생시켜 증착하는 박막의 품질에 영향을 주게 된다. 냉각 과정에서 타겟 모듈을 거치하는 하부받침대와 상부고정대의 위치를 설계변수화하여 목적함수인 열변형이 최소가 되는 지점을 찾기 위해 2차원 유한요소 해석과 PQSRM 알고리즘을 연계한 최적설계 기법을 적용했다. 최적설계 결과로 얻어진 하부받침대와 상부고정대의 위치를 적용한 타겟 모듈에 대한 3차원 유한요소 해석 결과 IGZO 타겟에 발생하는 최대 열변형이 초기 모델 대비 42% 감소했음을 확인했다. 산화물 타겟 모듈의 경우 장비와 증착하는 제품의 스펙에 따라 다양한 구조적 형상을 가지기 때문에 접합공정에 이러한 최적설계 기법을 확대 적용한다면 산화물 타겟 모듈 제작과정에서 열변형에 의한 불량률을 줄일 수 있을 것으로 예상된다.

감사의 글

본 연구는 한국세라믹기술원 정책연구사업(KPP-20007-1)의 연구비 지원으로 수행되었습니다.

References

- [1] T. Kamiya and H. Hosono, "Materials characteristics and applications of transparent amorphous oxide semiconductors", *NPG Asia Mater.* 2 (2010) 15.
- [2] X. Yu, L. Zeng, N. Zhou, P. Guo, F. Shi, D.B. Buchholz, Q. Ma, J. Yu, V.P. Dravid, R.P.H. Chang, M. Bedzyk, T. Marks and A. Facchetti, "Ultra-Flexible, "Invisible" thin-film transistors enabled by amorphous metal oxide/polymer channel layer blends", *Adv. Mater.* 27 (2015) 2390.
- [3] H.-K. Lee, J.-H. Yoon and K.-S. Cho, "Multicomponent IGZO ceramics for transparent electrode target fabricated from oxides and nitrates", *J. Korean Powder*

- Metall. 26 (2019) 375.
- [4] H.-K. Kim and J.-W. Lim, "Flexible IZO/Ag/IZO/Ag multilayer electrode grown on a polyethylene terephthalate substrate using roll-to-roll sputtering", *Nanoscale Research Letters* 7 (2012) 67.
- [5] H.-J. Kim and Y.-J. Kim, "Influence of external forces on the mechanical characteristics of the a-IGZO and graphene based flexible display", *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* 62 (2014) 012022.
- [6] K.J. Hong, M.S. Kim and D.H. Choi, "Efficient approximation method for constructing quadratic response surface model", *KSME Int. Journal* 15 (2001) 876.
- [7] COMSOL Multiphysics v.5.5, www.comsol.com, COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [8] PIA_nO (Process Integration, Automation and Optimization) User's Manual, Version 2020, PIDOTECH Inc., 2020.