

Irányfüggő poliszilícium anyagmodellek összehasonlítása MEMS strukturális elemek mechanikai modellezésénél

Comparison of direction-dependent material models for use in the simulation of MEMS structural elements

PLAVECZ Lambert^{1,2}, KARAP Attila², BEREZVAI Szabolcs¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Gépészmérnöki Kar, Műszaki Mechanikai Tanszék, H-1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.

²Robert Bosch Kft., H-1103 Budapest, Gyömrői út 104.

Abstract

Whether we speak about smartphones, wearables, hearables, drones, or cars, they all contain MEMS (micro-electro-mechanical system) sensors for the realization of different functions. The most common consumer applications are navigation, pressure and height measurement, voice detection, fitness and health functions. In the automotive industry, they are used for detecting crashes and monitoring the engine and the power train.

The main material of MEMS sensors is the polysilicon, consisting of single crystal silicon grains. These grains with their size of 1–2 μm are in general not negligible compared to the length scale of the MEMS structures (10 – 100 μm). Moreover, the grains acquire a columnar shape because of the deposition method, which lends a transversal elastic characteristic to the structures. The commonly applied isotropic assumption can lead to significant errors in this case.

In the present study, a comparison of a homogeneous isotropic, a transversal and an orthotropic (single-crystal) model is made in the cases of a tensile and a bending loading of a beam. The comparisons are based on simulations with random grain structures.

Keywords: MEMS, polysilicon, orthotropic material, transversal material, grain

Kivonat

Akár okostelefonról, fülhallgatóról, okosóráról, drónról vagy autóról beszélünk, mindegyikről elmondható, hogy MEMS (micro-electromechanical system, mikro-elektromechanikai rendszer) szenzorokat tartalmaz különböző funkciók megvalósításához. A leggyakoribb felhasználási területek a navigáció, a lépésszámlálás, a beszéd érzékelése, illetve az autók esetében az ütközés felismerése, valamint a motor és hajtáslánc megfigyelése.

A MEMS szenzorok fő anyaga a poliszilícium, amely egykristály szemcsékből áll. Ezek az 1 – 2 μm -es méretükkel a szenzorstruktúrák kis méretskálájából (10 – 100 μm) adódóan általánosságban nem elhanyagolhatóak. Továbbá a szemcsék a növesztés hatására oszlopszerűek lesznek, amely a struktúrának transzverzális tulajdonságot kölcsönöz. A gyakran alkalmazott izotróp feltételezéssel ebben az esetben jelentős hibát követhetünk el.

Jelen tanulmányban egy húzott és egy hajlított rúd példáján hasonlítjuk össze egy homogén izotróp, egy transzverzális és egy ortotróp (egykristály) szilícium anyagmodell viselkedését. Az összehasonlítás alapját mindkét esetben olyan szimulációk képezik, amelyek a szemcse-elrendezést is modellezzik.

Kulcsszavak: MEMS, poliszilícium, ortotróp anyagmodell, szemcse

1. BEVEZETŐ

A MEMS (micro-electromechanical system, mikro-elektromechanikai rendszer) szenzorok az ipar és a mindennapi élet számos területén megtalálhatóak: többek között okoseszközökben, autókban és drónokban is. Ezekben az alkalmazásokban a MEMS gyorsulásmérő szenzorok segítik a navigálást, érzékelik a rezgéseket. Továbbá az irányérzékelésre MEMS giroszkópokat, nyomás és magasság érzékelésre pedig MEMS nyomásszenzorokat alkalmazhatunk.

A MEMS szenzorstruktúrák, amelyek az érzékelést végzik, sok különböző irányítottságú egykristály szemcséből álló úgynevezett poliszilíciumból készülnek. A poliszilícium struktúrák egykristály alapra (wafer)

való felépítésének módjából adódóan a szemcsék oszlopszerűek lesznek [1]. A függőleges irányban így az eredeti egykristály <100> irányának megfelelő anyagtulajdonságok érvényesülnek, míg a vízszintes síkban a szemcsék véletlenszerű irányítottsággal rendelkeznek [2]. Ezt a fajta MEMS poliszilíciumot gyakran modellezzik transzverzális lineárisan rugalmas anyagmodellel, ahol a kitüntetett irány a függőleges, és a vízszintes síkban a szemcsék homogenizálására van szükség [2, 3]. A leggyakoribb homogenizálási módszer a végtelen sok kis, véletlenszerű irányítottságú szemcsé hatását összegezve ad meg alsó és felső határokat az anyagi viselkedésre. Ezeket Voigt és Reuss határoknak nevezi a szakirodalom. Kis méretű szemcsék esetén a valódi viselkedés ezen határok között mozog [4, 2]. Emellett az izotróp modellezés is gyakori [5, 1, 6].

A szemcsék azonban az 1–2 μm -es méreteikkel összemérhetőek a strukturális elemekkel, amelyek a 10–100 μm -es skálán mozognak. Ezért a szemcsék hatása gyakran nem elhanyagolható, a homogenizált anyagmodellek is pontatlan eredményre vezetnek. A szemcsék hatásának vizsgálatára egy néhány 10 μm -es méretskálájú véletlenszerűen szemcsés rúdgeometria húzásra és hajlításra mutatott viselkedését szimuláljuk. A szemcsés szerkezetet, a szemcsék geometriába való modellezése helyett, úgy állítjuk elő, hogy a már elkészített végelelemes háló egyes elemeihez a szemcsének megfelelő anyagmodellt rendeljük.

A húzó és hajlító szimulációkat vizsgáltuk egy izotróp, egy ortotróp egykristály, valamint három homogenizált transzverzális anyagmodellel is. Összehasonlítva a szemcsés szimulációk eredményeivel elmondható, hogy húzás esetén a transzverzális modellek jó közelítést jelentenek, ám a hajlítás esetén a szemcsék hatása nem elhanyagolható.

2. POLISZILÍCIUM ANYAGMODELLEK

2.1. Egyszerű modellek

A poliszilícium viselkedését izotróp lineárisan rugalmas anyagmodellel a legegyszerűbb modellezni. A szakirodalomban gyakran használt rugalmas paraméterek az $E = 161 \text{ GPa}$, $\nu = 0.23$ [5]. Ez azonban nem veszi figyelembe az oszlopszerű szemcsékből adódó transzverzális viselkedést, valamint a rugalmassági moduluszt valamelyest felülbecsüli.

A poliszilícium szemcséi egykristály szilíciumból állnak, amely lineárisan ortotróp tulajdonságokkal rendelkezik. Az egykristály szilícium esetében alkalmazott anyagparamétereket tartalmazza az 1. táblázat, ahol az y tengely jelöli a függőleges, az oszlopos szemcsékkel párhuzamos irányt. Ezentúl a szemcsék különböző orientációját elhanyagolva a többkristályos eset is modellezhető egykristályként, ám az ebből az elhanyagolásból adódó hiba jelentős, amint a 4. fejezetben olvasható.

Az egykristály szilícium ortotróp paraméterei [3].

1. táblázat

Rugalmassági modulusz	E GPa	E_x 169	E_y 130	E_z 169
Csúsztató modulusz	G GPa	G_{yz} 79.6	G_{zx} 50.9	G_{xy} 79.6
Poisson tényező	ν 1	ν_{yz} 0.28	ν_{zx} 0.064	ν_{xy} 0.36

2.2. Homogenizált modellek

A szemcsés poliszilícium anyagi viselkedése becsülhető homogenizált anyagmodellekkel. A valódi merevséget alulról becsüli a Voigt határ, valamint felülről a Reuss határ. Ezek a határok végtelen sok, különböző irányítottságú kis szemcsé együttes hatásaként értelmezhetőek. A Reuss határ matematikai kifejezése [4, 2] ezt jól mutatja:

$$\mathbf{K}_{\text{Reuss}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{T}^\top \mathbf{K} \mathbf{T} d\theta, \quad (1)$$

ahol $\mathbf{K}$ a két dimenziós egykristály szilícium merevségi mátrixa, $\mathbf{T}$ pedig a forgató mátrix, amelynek definíciója megtalálható az irodalomban [4, 2]. A kapott $\mathbf{K}_{\text{Reuss}}$ merevségi mátrixból pedig visszanyerhetőek a homogenizált lineárisan rugalmas anyagparaméterek (E, ν). A kifejezés az oszlopszerű szemcsékre merőleges síkban értelmezett, az oszlopírányban az egykristály szilícium paraméterei érvényesülnek. A Voigt határ az (1) egyenlethez hasonlóan számítható, mindössze a merevségi mátrix helyett annak inverzét, a rugóállandó-mátrixot kell behelyettesíteni. Az integrálás eredménye is a $\mathbf{C}_{\text{Voigt}}$ homogenizált rugóállandó-mátrix lesz, amiből a rugalmas paraméterek meghatározhatóak. Az így kapott Reuss és Voigt határoknak megfelelő oszlopszemcsés

Az alkalmazott transzverzális poliszilícium-modell paramétereit.

2. táblázat

Paraméter	Reuss határ			Voigt határ			Mértékegység
Rugalmassági modulusz	E_x	E_y	E_z	E_x	E_y	E_z	GPa
	158.7	130	158.7	147.1	130	147.1	
Csúsztató modulusz	G_{yz}	G_{zx}	G_{xy}	G_{yz}	G_{zx}	G_{xy}	GPa
	79.6	67.2458	79.6	79.6	60.2869	79.6	
Poisson tényező	ν_{yz}	ν_{zx}	ν_{xy}	ν_{yz}	ν_{zx}	ν_{xy}	1
	0.28	0.18	0.3418	0.28	0.22	0.3168	

poliszilícium modellek paramétereit tartalmazza a 2. táblázat. Amennyiben egy szerkezet szemcséi nem túl nagyok, akkor az anyagi viselkedés a Reuss és Voigt határok között mozog [4].

A két határ paramétereinek átlagolásával készíthetünk egy átlagos poliszilícium modellt [2], ennek a paramétereit a 3. táblázat tartalmazza. A két határ paramétereit közel vannak egymáshoz (kevesebb mint 10% eltérés), így az átlagolt modell sok esetben jó becslést ad.

A transzverzális poliszilícium anyagmodell a Reuss és Voigt határok átlagolásából.

3. táblázat

Rugalmassági modulusz	E	E_x	E_y	E_z
	GPa	152.9	130	152.9
Csúsztató modulusz	G	G_{yz}	G_{zx}	G_{xy}
	GPa	79.6	63.708	79.6
Poisson tényező	ν	ν_{yz}	ν_{zx}	ν_{xy}
	1	0.28	0.2	0.3293

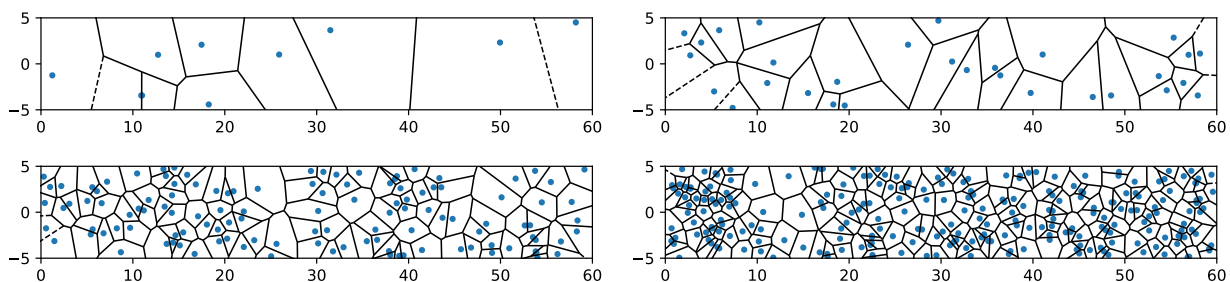
3. SZEMCSÉK MODELLEZÉSE

3.1. Szemcsegenerálás

Az alkalmazott szemcsegenerálási módszer lényege, hogy a már hálózott geometria egyes elemeit rendeljük a megfelelő szemcséhez ahelyett, hogy a szemcséket a geometriában modelleznénk. A generálás a következőképpen történhet. (1) Definiáljuk a kívánt szemcseszámot, majd a szemcsék gócpontjainak koordinátáit hozzuk létre véletlenszerűen. (2) Minden szemcséhez hozzárendelünk egy kristályirányt is véletlenszerűen, szögben kifejezve. (3) Ezután a már hálózott modell minden egyes eleméhez annak megfelelő kristályirányt rendelünk, amely szemcséhez tartozik. A szemcséhez tartozás kritériuma az, hogy melyik szemcséhez van az elem középpontja a legközelebb. Az így létrehozott különböző irányítottságú elemhalmazok finom hálófelbontás mellett jól közelítik az eredeti szemcsés szerkezetet.

A módszer előnye, hogy bármilyen bonyolult geometriába képes szemcséket létrehozni, valamint a szemcsék nem nehezítik a hálózást. A hátránya, hogy a szemcsék és a szemcsehatárok megfelelő felbontásához sűrű hálóra van szükség, azaz a szemcse- és az elemméret arányát magasan kell tartani.

3.2. Szemcsés poliszilícium rúd

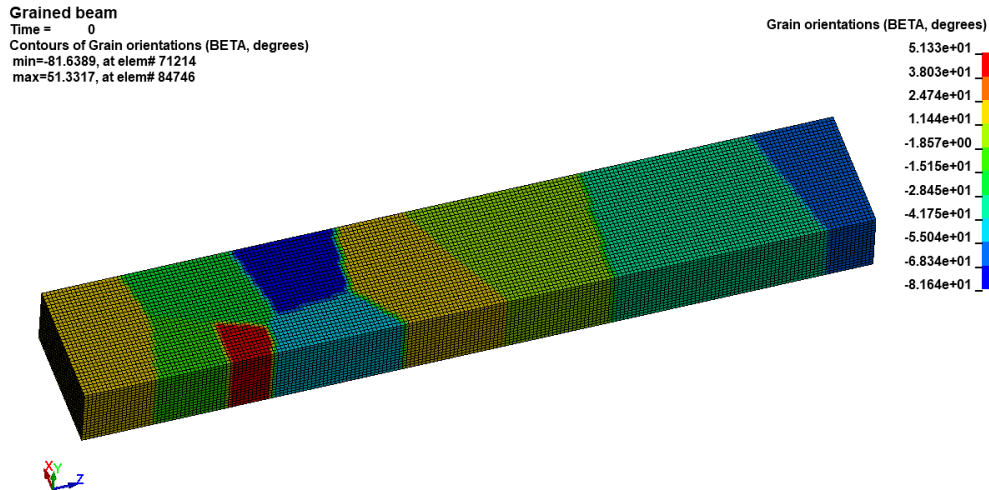


1. ábra. Véletlenszerűen generált szemcselosztás 10, 30, 120 és 240 szemcse esetén. A kék pontok a szemcsék gócpontjai. A méretek μm -ben értendők.

A vizsgált rúd méretei $60 \times 10 \times 5$ [μm]. A háló elemmérete $0.3 \mu\text{m}$, az elemek mind téglalapok. A szimulációk az Ansys LS-Dyna szoftverben [7] készültek 2-es elem keresztmetszettel (*element formulation 2*).

A szemcségócponatok koordinátái egyenletes eloszlásból lettek generálva a `numpy.random.uniform` függvény segítségével, ahol a „*random seed*” értéke 42. A szemcsék irányítottságát -90 és 90 közötti egyenletes eloszlásból vett szög (β) határozza meg. Az ezzel a módszerrel generált gócpontokat és a hozzájuk tartozó szemcséket mutatja az 1. ábra 10, 30, 120 és 240 szemcsé esetén. A 10 és 30 darab szemcsés felosztás jelentősen nagyobb szemcséket tartalmaz, mint ami poliszilícium esetén szokásos. Még a 120-as felosztás szemcséi is jellemzően nagyobbak. A 240 szemcsés eset áll közel a valósághoz, így ebből 4 különböző felosztás került tesztelésre, amelyek az 1, 42, 1729 és 4104 *random seed*-ekhez tartoznak.

A 2. ábra mutatja a 10 szemcsés esetben az oszlopszerű szemcséket tartalmazó végső modellt. A színezés a szemcsék irányítottságának szöge (β) alapján történt.

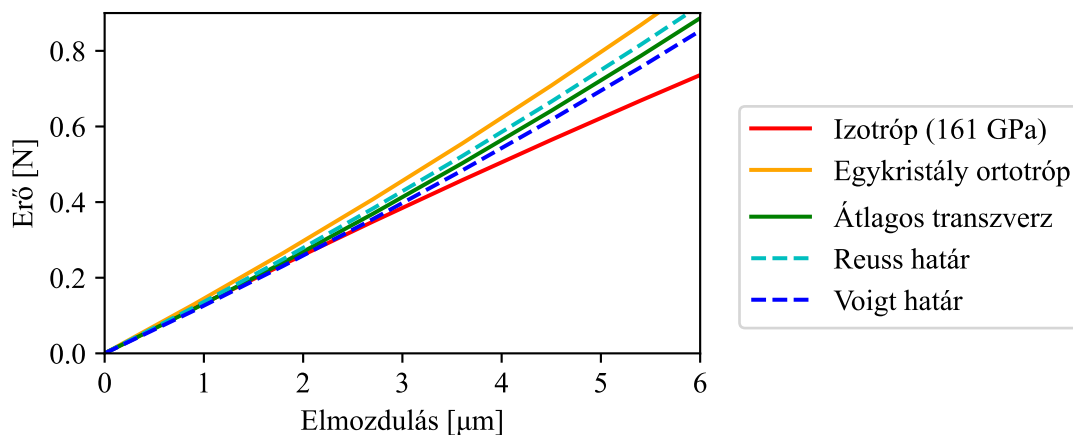


2. ábra. Az elemek szemcséhez rendelésével kapott 3D modell 10 szemcsé esetén.

4. RÚD SZIMULÁCIÓK

4.1. Húzott rúd

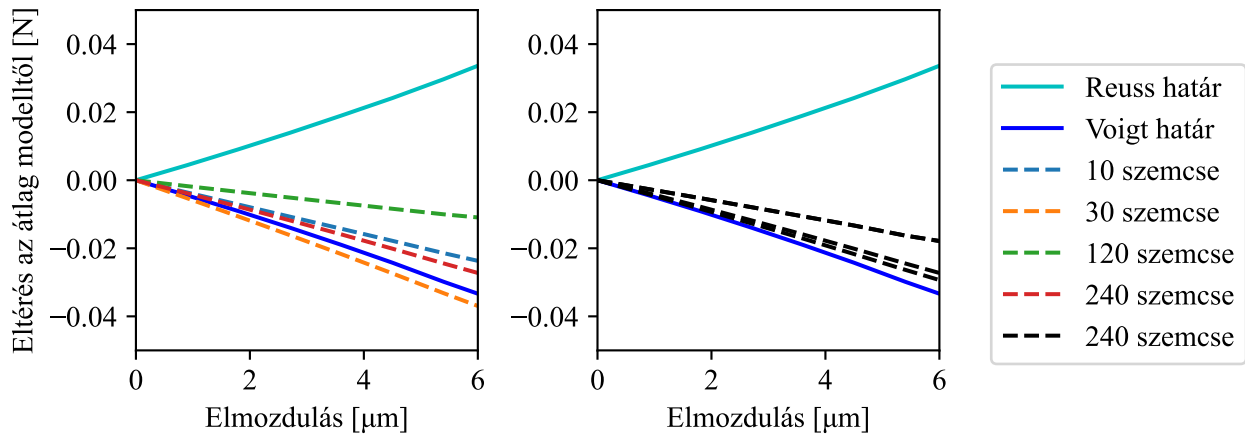
A húzott rúd szimulációjánál a rúd geometria egyik $10 \times 5 \mu\text{m}$ -es lapját megfogattuk a másik lapra pedig előírtuk az elmozdulást. Az adott elmozduláshoz szükséges erőt pedig a megfogás reakcióerejeként kiolvasható. A 3. ábrán látható a különböző anyagmodellek hatása a húzott rúd erő-elmozdulás görbéjére. A görbék egyenestől való eltérése a megfogás hatása. Látható, hogy körülbelül $2 \mu\text{m}$ elmozdulásig ($\epsilon \approx 0,3\%$) az izotróp modell is a Reuss–Voigt határokon belül van, ám afelett jelentős eltérést mutat. Az ortotróp egykristály-modell pedig végig a határokon kívül mozog.



3. ábra. Erő-elmozdulás görbék a különböző poliszilícium modellek esetében

Mivel a különböző modellekhez tartozó görbék egymáshoz közel haladnak, ezért érdemes az eltéréseiket ábrázolni. Az átlagos transzverzális modellt viszonyítási alapként használva, az eltéréseket a 4. ábra mutatja.

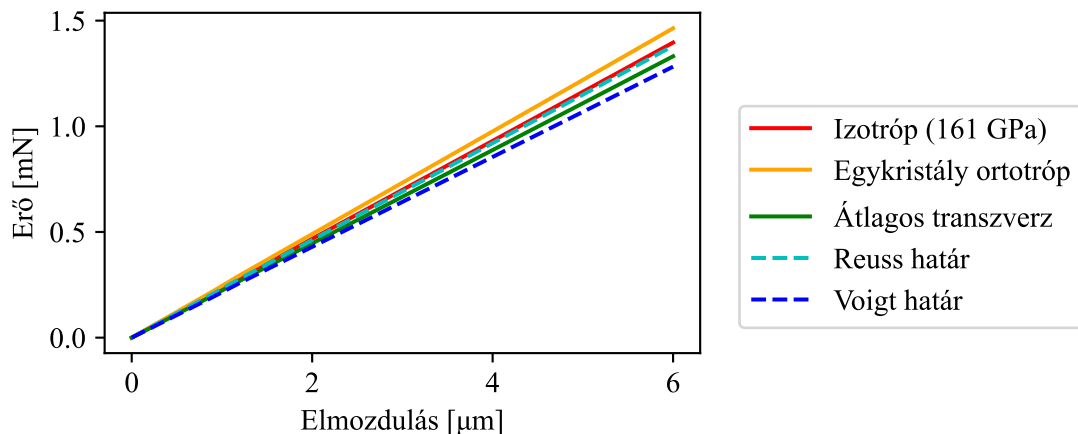
Egyedül a 30 szemcséhez tartozó görbe halad a Voigt–Reuss határokon kívül. Mivel a 240 szemcsés felosztásokból mindegyik a határok között marad, feltételezhető, hogy ekkor a szemcsék már kicsinek számítanak, és a transzverzális modell általánosan is jó közelítést jelent.



4. ábra. Erőgörbék átlagos modelltől való eltérése az elmozdulás függvényében különböző szemcselosztások esetén. Különböző szemcseszámok (bal) és 240 szemcse különböző elosztásban (jobb). A felső fekete görbe két nagyjából egybeeső görbéből áll.

4.2. Hajlított rúd

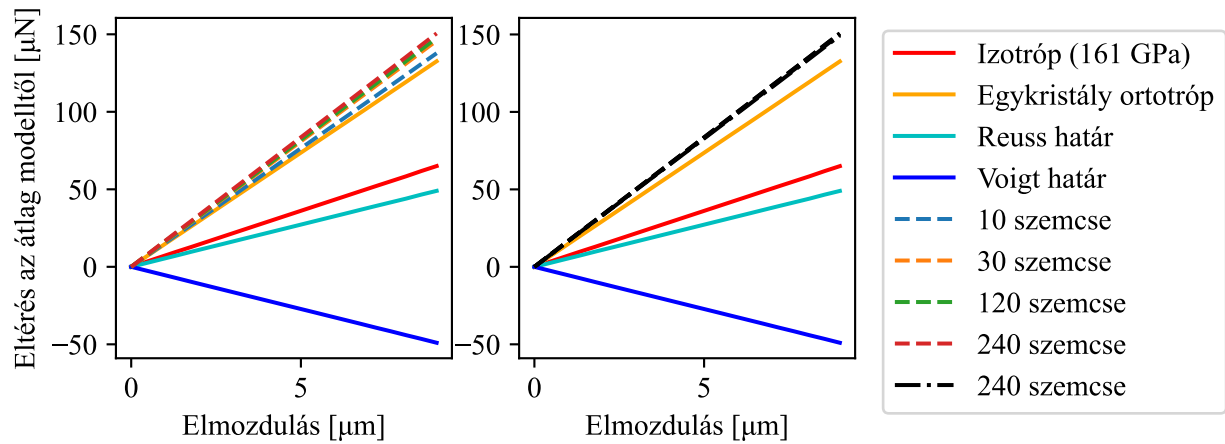
A hajlított rúd szimulációjánál az egyik $10 \times 5 \mu\text{m}$ -es lapját megfogattuk, és a másik lap felső élére írtuk elő az y -irányú elmozdulást. A szükséges erőt ismét a reakciókból kapjuk. Az előírt elmozdulásra merőleges irányokban a reakcióerő nagyságrendekkel kisebb, így elhanyagolható.



5. ábra. Erő-elmozdulás görbék rúd hajlítására különböző poliszilícium modellek esetében

A hajlítás eredményét a különböző anyagmodellek esetében az 5. ábra mutatja. Az összes modell nagyon hasonlóan viselkedik, az ortotróp esik egyértelműen a Reuss–Voigt határokon kívülre. Ebben az esetben az izotróp modell is a Reuss határon halad. Mivel az alkalmazott határok síkfeszültségi állapotra vonatkoznak, így nem feltétlenül fedik le ezt a terhelési esetet. Ez jól megfigyelhető a 6. ábrán, ahol a különböző szemcsés szimulációk nagy eltérést mutatnak a transzverzális modellektől és inkább az ortotróp modellhez állnak közel.

A homogenizált transzverzális modellek javíthatóak lehetnek a Reuss (1) és a Voigt módszerek síkfeszültségi állapot elhagyásával való kiterjesztésével. Ugyanakkor a különböző szemcseszerkezetek által mutatott mechanikai viselkedésbeli különbségek arra engednek következtetni, hogy a MEMS poliszilícium hajlításánál (nagy szemcséknél) figyelembe kell venni a szemcseszerkezetet a pontos szimulációhoz.



6. ábra. Az erőgörbéknek az átlagos modelltől való eltérése az elmozdulás függvényében hajlítás esetére. Különböző szemcseszámok (bal) és 240 szemcse különböző elosztásban (jobb). A 240 szemcsés változatok egymást fedő görbékét állítottak elő.

5. ÖSSZEGZÉS

A MEMS szenzorokban alkalmazott poliszilícium modellezésére húzó terhelés esetén homogén transzverzális modellek jó közelítést adnak. Hajlítás során azonban a MEMS esetében megszokott nagyobb szemcsék hatása jelentős, így a homogén modellek pontatlan eredményt adhatnak. A kutatás folytatását jelentheti nagy számú szemcsés szimuláció futtatása, amely alapján statisztikai megállapításokat vonhatunk le a poliszilícium viselkedéséről. Ezentúl fontos irány lehet a MEMS gyorsulásmérőkben előforduló csavarás esetének vizsgálata. Hosszabb távú cél pedig a szemcsés szerkezet dinamikus, ütközési szimulációkban mutatott viselkedésének feltárása.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A kutatás a Robert Bosch Kft. szakmai támogatásával készült. Plavec Lambert munkája a magyar Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával az EKÖP_KDP-24-1-BME-1 pályázati program finanszírozásában valósult meg (2024-2.1.2-EKÖP-KDP-2024-00005). Berezvai Szabolcsot a magyar Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap (NKFIH NKKP STARTING 149473) és a Magyar Tudományos Akadémia Bolyai János Kutatási Ösztöndíja támogatta.

IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Boroch R. E. *Mechanical Properties and Fatigue of Polycrystalline Silicon under Static and High Frequency Cyclic Loading*, 2007.
- [2] Mariani S., Ghisi A., Fachin F., Cacchione F., Corigliano A., Zerbini S. *A three-scale FE approach to reliability analysis of MEMS sensors subject to impacts*. *Meccanica*, 2008, 43, 469–483. doi: 10.1007/s11012-008-9111-0
- [3] Hopcroft M. A., Nix W. D., Kenny T. W. *What is the Young's Modulus of Silicon?* *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2010, 19, 229–238. doi: 10.1109/JMEMS.2009.2039697
- [4] Mullen R. *Monte Carlo simulation of effective elastic constants of polycrystalline thin films*. *Acta Materialia*, 1997, 45, 2247–2255. doi: 10.1016/S1359-6454(96)00366-7
- [5] Boroch R., Wiaranowski J., Mueller-Fiedler R., Ebert M., Bagdahn J. *Characterization of strength properties of thin polycrystalline silicon films for MEMS applications*. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2007, 30, 2–12. doi: 10.1111/j.1460-2695.2006.01055.x
- [6] Gad-el-Hak M. *The MEMS Handbook*, CRC Press, 2001.
- [7] Ansys Inc. *Ansys LS-Dyna, Ansys Enterprise Mechanical*. 2024 R2 verzió. 2024. <https://www.ansys.com/products/structures/ansys-ls-dyna>