

반도체 패키징용 고분자 소재의 물성 및 거동 예측

Prediction of Properties and Behaviors of Polymer Materials for the Semiconductor Packaging

정소담 | Sohdam Jeong

Department of Chemical Engineering, Dong-eui University,
176, Eomgwang-ro, Busanjin-gu, Busan 47340, Korea
E-mail: sohdam@deu.ac.kr

1. 서론

반도체 패키징은 생산 공정 중 마지막 단계로, 소자에 필요한 전력을 공급하여, 열을 방출시키고 열적, 물리 화학적 등 외부 충격으로부터 보호하는 역할 및 기술을 의미한다. 최근에는 반도체의 고성능화로 인해 단순한 보호 기능을 넘어, 냉각 효율, 데이터 전송 속도, 열전도성 등 다양한 특성을 갖는 고기능성 재료에 대한 요구가 높아지고 있다. 이에 따라 반도체 패키징 재료의 개발과 최적화는 필수적인 과제로 부각되고 있다. 일반적으로 반도체 제작은 매우 복잡하고 고비용 및 고도의 정밀도가 요구되기 때문에, 새로운 재료나 구조, 물성에 대한 연구 개발에 있어 필연적으로 컴퓨터 시뮬레이션의 역할이 중요해지고 있다. 따라서 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 재료의 분자적 특성과 거시적 물성을 예측/분석함으로써, 실험적 접근의 한계를 보완할 수 있을 것이다.

본 총설에서는 반도체 패키징에 주로 사용되는 에폭시나 이미드 계열 등의 소재를 대상으로, 분자동역학, 제일원리계산 등의 분자 수준에서의 전산모사를 통해 이들의 구조적, 열적, 기계적 물성과 모폴로지 등을 계산하는 다양한 연구 사례를 다룬다. 아울러 반도체 패키징용 고분자 소재의 미래 연구 방향과 전망에 대해 논의하고, 차세대 패키징용 고분자 소재 개발을 위해 어떤 방향으로 연구가 진행되어야 하는지에 대해 심도 있게 고민해보고자 한다.

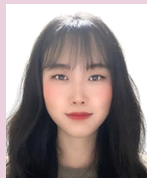
2. 본론

2.1 반도체 패키징

반도체 패키징은 전공정에서 제작된 소자를 포장하여 완성품으로 제작하는 과정을 의미하며, 최근 반도체 성능향상을 위한 후공정의 중요성이 높아지면서 고집적 및 다기능 구현을 위한 핵심 기술로서 주목받고 있다. 반도체 패키징은 소자에 필요한 전력을 공급하여 신호를 연결하고, 열을 방출시키며 자연적, 화학적, 열적 환경 등으로부터 보호하는 중요한 역할을 한다(그림 1).

따라서 내구성과 높은 신뢰성 및 효율적인 패키징 조립이 이루어져야 기계적 안전성, 전기적 특성 및 열 방출

Author



정소담

2010-2013 울산과학기술원 화학공학/신소재공학 (학사)
2013-2016 울산과학기술원 화학공학 (석사)
2016-2019 울산과학기술원 화학공학 (박사)
2019-2022 LG화학기술연구원 중앙연구소 책임연구원
2022-현재 동의대학교 화학공학과 조교수

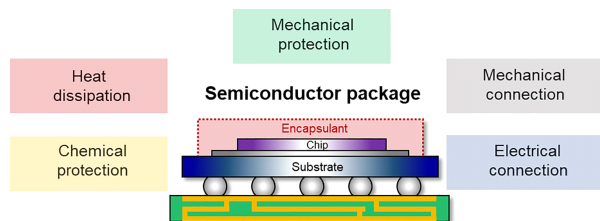


그림 1. 반도체 패키징 구조 및 역할.

능력, 신뢰성 등의 요구를 만족시킬 수 있기에 최근 접합 기술이나 패키징 재료를 개선하여 성능을 높이려는 연구 개발이 활발하다. 일반적으로 금속, 세라믹, 고분자 기반의 패키징으로 분류되며, 본 총설은 고분자 재료 기반 패키징에 관해 주로 이야기하고자 한다. 고분자 기반 패키징은 전기 전도성과 열전도성이 좋은 무기 필러의 장점과 가볍고 가공이 용이한 유기 고분자의 장점을 동시에 가질 수 있다. 대부분의 고분자 패키징 소재는 에폭시, 페놀릭, 폴리에스테르 및 실리콘과 같은 열경화성이며, 필러의 특성에 따라 비전도성 접착제, 전도성 접착제, 열전도성 접착제 등의 유형으로 나눌 수 있다. 세라믹 및 금속에 비해 고분자 기반 패키징은 일반적으로 전기 및 열전도성이 낮으므로, 전기적, 열적 성능을 향상시키기 위한 소재 및 기술 개발이 많은 관심을 끌고 있다. 예를 들어, 필러 최적화, 필러 크기 분포, 필러 방향, 수지 매트릭스 수정, 필러와 고분자 매트릭스 간 계면 특성 조정 등의 기술이나 소재의 다양화 및 새로운 합성법을 통해 고분자 기반 패키징의 특성을 향상시킬 수 있다고 알려져 있다.

2.2 반도체 패키징용 고분자 소재

반도체 패키징에 사용되는 소재는 에폭시(epoxy) 수지, 폴리이미드(polyimide), 실리콘(silicon), 폴리우레탄(polyurethane) 등이 있으며, 각각의 고유한 특성으로 인해 특정 응용 분야에서 사용된다(그림 2).

에폭시 수지는 산소 원자가 있는 고리형 ester를 갖는

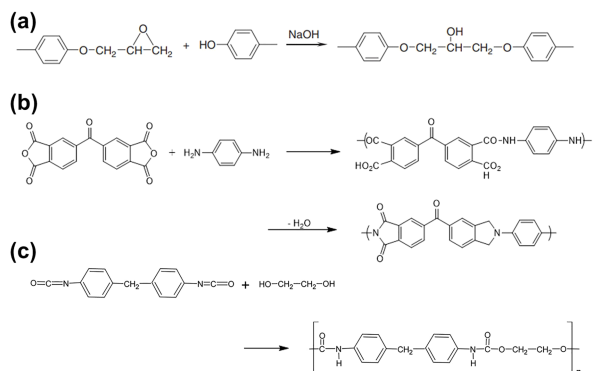


그림 2. 대표적인 반도체 패키징용 고분자 소재 구조: (a) 에폭시, (b) 폴리이미드, (c) 폴리우레탄 수지.

구조로 강한 반응성을 가진다. 일반적으로 열경화성 수지로 분류되며, 특히 bisphenol A와 bisphenol F구조가 많이 사용된다(그림 2a). 에폭시 구조는 backbone의 aromatic 구조로 인해, 일반적으로 우수한 기계적 물성과 우수한 접착력 및 낮은 수축률을 가진다고 알려져 있다. 특히, 열적 안정성 및 전기 절연성이 뛰어나기 때문에 반도체 패키징에 널리 사용되고 있다. 에폭시 수지는 상온에서 주로 유리 상태에 있는 경우가 많으며, 에폭시 화합물과 개시제 또는 경화제의 화학 반응을 통해 얻을 수 있다. 따라서 다양한 유형의 경화제 및 에폭시 종류에 따른 가교반응 및 형성되는 네트워크와 물리적 상태 변화 및 그에 따른 물성 이해를 위한 많은 연구가 선행되어 왔다. 특히 반도체 패키징에 주로 사용되는 EMC(epoxy molding compound)는 고성능 열경화성 플라스틱의 일종으로, 수지에 필러와 경화제, 난연제 등이 섞인 복합재료이다. 분말 상태의 에폭시를 젤 상태로 녹여, 온도를 낮추면 주변의 리드프레임, 와이어, 웨이퍼 등과 강한 결합력을 나타내며 매우 높은 경도로 변하게 된다. 경화된 후의 EMC는 반도체 동작 시 온도 변화에 따라 칩과 유사하게 팽창/수축을 유지하도록 조절할 수 있어야 하며, 열을 빼내는 것이 중요하므로 혼합재의 특성이 EMC의 신뢰성을 결정한다. 그러나 에폭시 수지는 상대적으로 취성이 있어 충격에 약하고, 경화 후 가공이 어렵기 때문에, 새로운 에폭시 수지 개발을 통해 EMC의 성능을 향상시키는 것이 중요하다. 폴리이미드는(그림 2b) 반복단위 내에 이미드 고리를 함유하고 있는 고분자로 우수한 열적 안정성과 전기적 특성으로 인해 고온 환경에서도 성능을 유지하며, 절연특성 및 내화학성으로 인해 고기능성 고분자 재료로 각광받고 있다. 반도체 및 디스플레이 산업 등에 활용되고 있으며, 폴리이미드 내 단량체 조합, 가교 구조, 공정 변수 조절 등으로 다양한 특성 발현이 가능하다는 장점이 있다. 그러나 폴리이미드는 상대적으로 고가의 소재이며 가공이 어려우므로, 생산 공정을 개선하여 비용을 절감하고 가공이 용이한 폴리이미드 소재의 구조 탐색이 필요하다. 폴리우레탄은(그림 2c) 주로 폴리올(R-OH)과 이소시아네이트(isocyanate, R'-N=C=O)로 구성된 3차원 구조를 가진 플라스틱 소재이며 우수한 내마모성과 유연성, 화학적 저항성을 가진다. 기본 구성인 폴리올을 신규 구조로 디자인하거나, 무기물 등의 조합을 통해 하이브리드 폴리우레탄 개발로 폭넓은 상용화의 가능성이 기대되는 소재이다. 특히 반도체용 패키징 소재에 있어 칩과 기판의 공간을 메우거나, 칩을 보호하기 위해 사용되는 몰딩 컴파운드, 코팅 및 접착제 등으로 사용되고 있다. 그러나 폴리우레탄은 상대적으로 열적 안정성이 낮고, 경화 과정에서 유해 가스가 발생할 수 있는 단점이 있으며 내습성의 개선이 필요하다고 알려져 있다.

따라서 반도체 패키징에 사용되는 고분자 소재는 각각의 강점과 취약점이 있으므로, 각 소재의 물성을 개선하기 위한

지속적인 연구가 필요하다. 이러한 연구는 반도체 패키징의 성능을 최적화하고 신뢰성을 높이며, 다양한 응용 분야에서의 활용성을 증대시킬 수 있을 것이다.

2.3 제일원리계산과 분자동역학

최근 컴퓨팅 기술의 비약적인 발전과 다양한 알고리즘 및 인공지능 기술의 진보로 인해 전산모사를 활용한 연구가 다양한 분야에서 활발히 진행되고 있다. 일반적으로 시간과 길이 규모에 따라 전산모사 방법론은 여러 영역으로 나뉘지만, 본 총설에서는 양자영역과 원자단위 및 미시영역 단위의 방법론을 주로 다루도록 하겠다. 제일원리계산(first principle calculation)은 ‘from the beginning’ 뜻의 라틴어인 abi-initio에서 유래된 것으로, 전자와 원자핵의 에너지를 Hamiltonian 연산자로 표현하여 슈뢰딩거 방정식의 해를 구하는 방법론을 의미한다. 플랑크 상수 등과 같은 기본 상수를 바탕으로 분자 구조와 반응 속도 상수와 같은 물질의 특성을 계산한다. 가장 널리 쓰이는 모델은 Hartree-Fock(HF) 모델, Hartree-Fock 이후의 방법(post HF), 그리고 밀도범함수이론(density functional theory, DFT) 등이 있다. HF는 원자의 움직임 및 전자와의 상호작용을 무시하고 mean-field를 통해 근사를 하는 방식이다. 따라서 HF에서 필연적으로 발생하는 오차의 한계점을 극복하기 위해 post HF 방법론이 도입되었으며, HF보다는 정확하나 그렇지 않은 경우도 있다. 가장 널리 쓰이는 방법인 DFT의 경우 파동함수의 해를 도출하는 것이 아닌 밀도함수로 대체하여 쉽게 계산하는 방법이다. 각 전자의 potential을 주변 전자들의

밀도함수 기반의 mean-field로 정의하므로, 빠르고 효율적인 계산을 가능하게 하나 금속산화물 등의 전하 이동이나 self-interaction, 분산력에 의한 weak interaction 등에 의한 에러를 주의해야 한다.

원자 단위의 미시적 현상을 다루는 분자동역학(molecular dynamics)은 뉴턴 역학을 바탕으로 고분자를 포함한 나노 물질의 구조적 및 동역학적 정보를 계산한다. 뉴턴의 운동 방정식을 적분하기 위해서는 각 원자에 작용하는 potential을 계산하여야 하며, 이 함수의 형태 및 파라미터들을 force field라고 한다. 현재는 다양한 소재들에 대해 각 물리화학적 특성에 맞는 force field 및 파라미터들이 개발되어 있다. 본 방법론은 양자역학 기반보다 비교적 큰 계에 대해서도 모사가 가능하나, 화학 반응이나 전자의 이동을 제대로 기술하기 어렵다. 따라서 양자역학적인 방법과 고전역학적인 방법을 함께 사용하는 abi-initio molecular dynamics(AIMD) 방법론을 통해 복잡하고 다양한 분자나 재료 등의 거동을 보다 효과적으로 설명하는 연구들이 활발히 진행되고 있다.

고분자는 내부구조를 갖는 단량체가 종합적으로 연결된 거대분자로, 미시적 수준에서는 고분자의 단량체 간 상호작용과 운동을 이해해야 하며, 거시적 수준에서는 고분자의 전체적인 형태와 물성을 평가해야 한다. 따라서 계층적인 시공간 규모에서의 정적/동역학적 해석이 필요하기 때문에 다양한 시간/길이 단위에서의 해석이 필요하다. 특히 반도체 패키징 용으로 사용되는 고분자 소재는 분자량, 온도 특성 등에 따른 안정성, 기계적, 열적, 전자 특성 등이 중요하므로 구조-물성

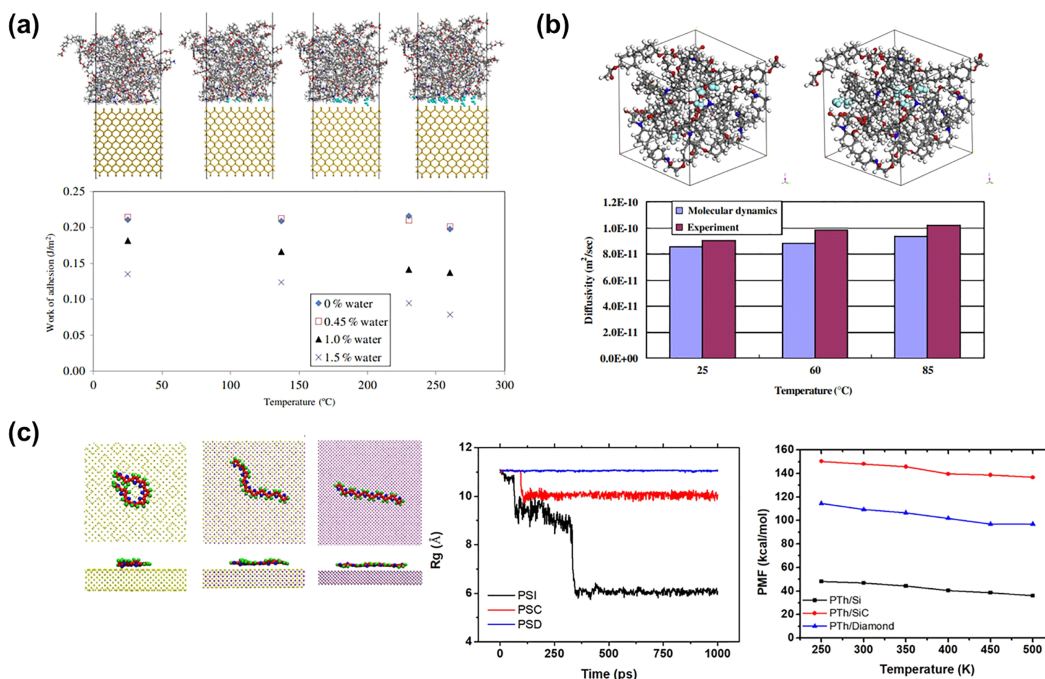


그림 3. 반도체 패키징용 고분자 소재의 계면 거동 및 흡습 인자 영향 해석: (a) 수분함량에 따른 에폭시의 계면 강도, (b) 에폭시 재료의 팽창성, (c) 폴리이미드의 계면 강도.¹⁻³

간의 상관관계 확보와 많은 데이터 수집을 전산모사가 가능하게 할 수 있을 것이다. 따라서 아래에서는 전산모사 기술을 활용하여 반도체 패키징용으로 사용되는 고분자 소재의 구조와 물성 예측 사례를 살펴보겠다.

2.4 전산모사를 활용한 반도체 패키징용 고분자 소재 연구

일반적으로 고분자 재료는 습기를 흡수하면 기계적 거동이 크게 영향을 받게 되어 전자 패키징에 있어 파손 메커니즘을 발생하게 할 수 있다. 특히 흡습 팽창(hygroscopic swelling) 현상이 발생하고 이는 접착력을 낮추고 계면 박리(delamination) 및 균열을 일으켜 패키지에 치명적인 물성 저하를 일으킬 수 있다. 그러므로 패키징의 내습성은 반도체 신뢰성에 있어 중요한 요소이며, 이를 개선하고 흡습 및 계면 관련인자 및 메커니즘을 밝히려는 다양한 연구가 시도되어 왔다. Kim *et al.*¹은 반도체 패키지의 수분에 의한 계면 박리 등의 현상을 계산/실험적으로 설명하고자 하였다. 그들은 Si/에폭시 접착제 계면에서 계면 접착 에너지 및 강도에 대한 수분 및 온도의 영향을 분자동역학을 통해 해석하고, 계면 박리 현상에 대한 임계 수분량 및 계면 강도 등을 예측하였다(그림 3a). 또한 Chang *et al.*²은 분자동역학 시뮬레이션을 통해 온도 및 수분 농도에 따른 에폭시 재료의 확산성 및 팽창 변형 등의 특성을 규명하고 실험과 효과적으로 비교하였다(그림 3b). 그들은 에폭시 소재 내 수분의 확산도 및 팽창 계수를 계산하여, 에폭시의 흡습 특성이 분자 레벨의 시뮬레이션으로 꽤 정확도 있는 모사가 가능하다는 것을 보였다. 또한 Qian *et al.*³에 의하면³ 우수한 전도성 접착제 중 하나인 폴리티오펜(polythiophene)과 Si, C와의 계면 강도를 전산적으로 해석하였다(그림 3c). 특히 고분자 사슬의 엔트로피와 반데르발스 및 정전기적 상호작용 등의 상관관계 도출을 통해 폴리티오펜 접착력의 주요 인자를 밝히고, 반도체 패키징의 접착제 선택 최적화가 가능함을 보여주었다. 이외에도 다양한 고분자 소재의 흡습 팽창 성질 및 물성을 이해하려는 연구는 많이 보고되어 있다.⁴⁻⁶ 그러나 신뢰성 문제를 예측하고 방지하기 위해서는 좀 더 면밀한 연구가 필요하다.

반도체는 고온 환경에 대응할 수 있는 방열과 내열성이 중요하다. 즉, 발생한 열을 효과적으로 빼내고, 고온에서도 신뢰성을 잃지 않는 패키지 재료를 개발하는 것이 반도체 성능과 직결된다고 할 수 있다. 따라서 고분자 소재들의 열전도율과 열 메커니즘을 분자 구조와 연관지어 규명하는 것은 매우 중요하다. K. Tanaka *et al.*⁷은 분자 시뮬레이션을 이용하여, 필러-고분자-필러 시스템 내 열전도율의 특성 및 메커니즘을 규명하였다(그림 4a).

표면 결합제의 효과에 따른 계면 온도 및 열전도도를 예측하였으며, 그것이 비평형 분자동역학 시뮬레이션의 결과

중 하나인 투과계수와 밀접한 관련이 있다는 것을 밝혀냈다. 또한 J. Lu *et al.*⁸ 따르면, 일반적인 고분자/반도체 계면을 모델링하여 분자동역학 시뮬레이션으로 열전도를 조사하여 자가조립 단분자막이 계면의 열 조절에 높은 잠재력을 가지고 있음을 입증하였다. 특히 알킬 사슬 길이에 따른 조립 구조의 변화와 그에 따른 열 저항 변화 및 열전도 효율을 보이고, 실험과도 일치하는 것을 확인하였다(그림 4b). 따라서 이론적 계산과 실험 모두에서 열 물성 조절을 위한 분자 수준의 설계 가능성을 보여주는 사례라 볼 수 있겠다. 한 연구에서는⁹ 열전도성이 우수한 충전재 역할을 할 수 있는 탄소나노튜브(CNT)가 고분자의 열전도 특성을 개선하는 것을 CNT와 폴리우레탄 간의 열전도도 및 계면 메커니즘을 분자동역학으로 규명하여 입증하였다. 이 연구에 따르면 열전도도는 CNT의 길이 및 폴리우레탄의 사슬 수와 관련이 있으며, 폴리우레탄 내 특정 원자가 계면 열전도에 유리한 특성을 나타내게 한다는 결과가 보고되었다. 이와 같이 반도체 소자 및 패키지에

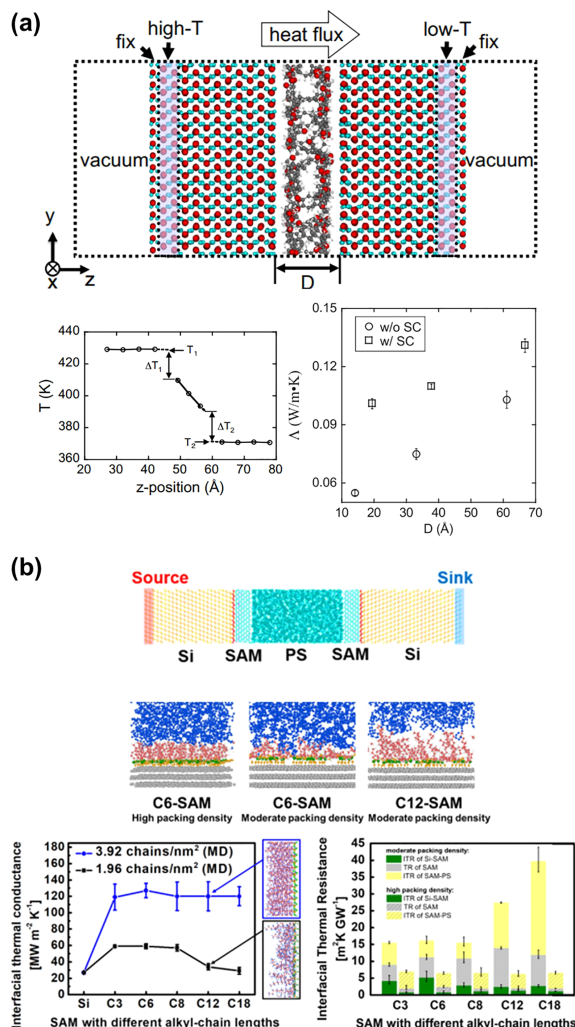


그림 4. (a) 필러-고분자 시스템의 열전도율 특성과 (b) 고분자/반도체 계면의 열전도 해석.⁸

적용되는 소재는 열팽창계수와 열전도도 특성의 고려가 필요하며, 소개된 사례 이외에도 에폭시 등의 고분자 소재의 열전도도를 향상시키기 위한 다양한 노력이 지속되고 있다.¹⁰⁻¹²

외부 환경으로부터 반도체를 보호할 수 있는 기계적 안정성은 반도체 패키지 신뢰성을 결정하는 중요한 요소 중 하나이다. 특히 열응력이나 열피로에 의해 층 분리, 박리 및 균열이 발생할 수 있기 때문에 효과적인 열 발산 방법과 함께 균열을 방지할 수 있는 높은 기계적 안정성을 갖는 소재의 연구가 활발히 진행되고 있다. 예를 들면, K. Min *et al.*은¹³ 분자동역학을 이용하여 당김과 박리를 가해 실리카 표면에서 방향족 및 지방족의 폴리이미드의 다양한 접착 특성을 계산하였다. 각 사슬의 형태변화와 강성에 따른 상세한 분석을 진행하여, 사슬 간의 강한 전하 이동이 접착에 더 큰 힘을 요구하고, 분리되는 거리가 짧음을 증명하였다. 이는 복합 소재의 다양한 계면 접착력과 분자 구조 간의 상관관계를 면밀히 본 연구로, 다양한 복합 소재의 구조 및 기계적 특성 간의 이해에도 도움이 될 수 있을 것이다. 또한 X. Wan *et al.*은¹⁰ 분자동역학 시뮬레이션을 사용하여 bisphenol F와 diethyl toluene diamine이 가교된 에폭시 수지의 가교 정도에 따른 열전도성과 기계적 물성 간의 상관관계를 규명하였다 (그림 5). 그들에 따르면, 가교도가 높을수록 수지의 탄성 계수와 열전도성이 증가하였고, 특히 열전도성은 bonded interaction이 중요한 역할을 하는 경향을 보였다. 이외에도 M. Grujicic *et al.*은¹⁴ 기능화된 탄소나노튜브가 비닐 에스테르 에폭시 고분자의 기계적 물성에 끼치는 영향을 분자단위 시뮬레이션에서 규명하였고, Y. Shudo *et al.*은¹⁵ 원자 수준의 관점에서 구조-기계적 특성간의 관계를 페놀과 가교제가 사용된 페놀 수지에 대해 원자레벨의 분자동역학 시뮬레이션을 통해 계산하고, 변형 방향에 대한 bonded interaction이 인장계수에 큰 영향을 미친다는 것을 보였다.

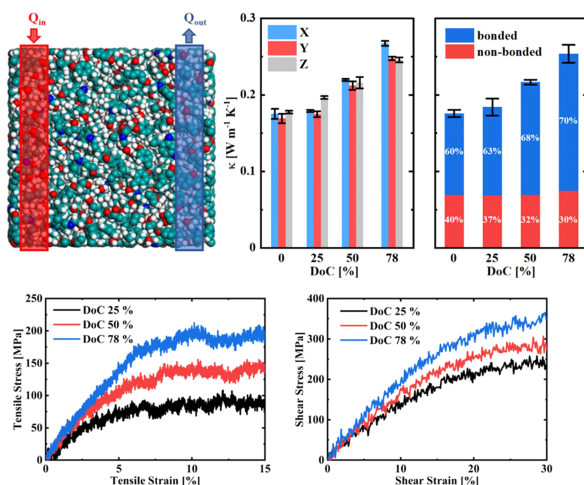


그림 5. 에폭시 수지 가교에 의한 열전도성과 기계적 물성 변화.¹⁰

3. 결론

전자 장치의 급격한 통합, 기능화 및 소형화로 인해 효율적인 열관리와 동시에 기계적 안정성 및 전기적 특성까지 갖는 재료의 요구가 높아지고 있다. 따라서 혁신적인 방열 솔루션과 반도체의 파손의 원인이 되는 접합부 온도 발열량, 패키지 내부의 온도 분포, 외부로 방출되는 열경로 이해 및 이에 따른 구조적 열응력 등에 대한 평가 기술 및 소재를 확보하는 것이 중요하다. 반도체 소자는 다양한 복합적 재료가 활용되는데다 특정 소자나 재료의 개발에 필요한 비용/시간적인 문제는 무시하기 어렵기 때문에, 새로운 재료나 구조에 대한 연구 시 재료 자체의 물성을 정확히 분석하고 이를 제어하는데 필연적으로 시행착오 의존적 과정을 통해 연구가 진행될 수밖에 없다. 그렇기에 전산모사를 활용하여, 소재의 구조 및 기계적, 열적, 전기적 특성 및 메커니즘의 이해와 정확한 평가가 선행되어야 차세대 반도체 패키징용 소재 및 기술 개발이 혁신적으로 이루어질 수 있을 것이다.

참고문헌

1. H. S. Kim, J. Huh, and J. Ryu, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**, 034007 (2011).
2. S. H. Chang and H. S. Kim, *Polymer*, **52**, 3437 (2011).
3. Y. Qian, M. Guo, C. Li, K. Bi, and Y. Chen, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 30470 (2019).
4. H. Ardebili, E. H. Wong, and M. Pecht, *IEEE Trans. Compon. Packag. Tech.*, **26**, 1 (2003).
5. B. Han and D. S. Kim, *J. Electron. Packag.*, **139**, 010802 (2017).
6. L. Tam, D. Lau, and C. Wu, *Mol. Simul.*, **45**, 120 (2019).
7. K. Tanaka, S. Ogata, R. Kobayashi, T. Tamura, and T. 5. Kouno, *Int. J. Heat Mass Trans.*, **89**, 714 (2015).
8. J. Lu, K. Yuan, F. Sun, K. Zheng, Z. Zhang, J. Zhu, X. Wang, X. Zhang, Y. Zhuang, Y. Ma, X. Cao, J. Zhang, and D. Tang, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 42708 (2019).
9. L. Qiu, N. Zhu, Y. Feng, X. Zhang, and X. Wang, *Int. J. Heat Mass Trans.*, **152**, 119565 (2020).
10. X. Wan, B. Demir, M. Anc, T. R. Walsh, and N. Yang, *Int. J. Heat Mass Trans.*, **180**, 12181 (2021).
11. O. Hölk, E. Dermizaki, B. Wunderle, J. Bauer, and B. Michel, *Microelectron. Reliab.*, **51**, 1027 (2011).
12. Z. Liu, J. Li, C. Zhou, and W. Zhu, *Int. J. Heat Mass Trans.*, **126**, 353 (2018).
13. K. Min, A. R. Rammohan, H. S. Lee, J. Shin, S. H. Lee, S. Goyal, H. Park, J. C. Mauro, R. Stewart, V. Botu, H. Kim, and E. Cho, *Sci. Rep.*, **7**, 10475 (2017).
14. M. Grujicic, Y. -P. Sun, and K. L. Koudela, *App. Surf. Sci.*, **253**, 3009 (2007).
15. Y. Shudo, A. Izumi, K. Hagita, T. Nakao, and M. Shibayama, *Polymer*, **116**, 506 (2017).