FEM 기반 결함 분석을 이용한 나노임프린트 공정 연구
Prediction of Defects in Nanoimprint Lithography Using FEM Simulation

*송남호 [1], 손지원 [1], 임성한 [2], #오수익 [1]
*N. H. Song[1], J. W. Son[1], S. H. Rhim[2], #S. I. Oh(sioh@snu.ac.kr)[3]
[1] 서울대학교 기계항공공학부, [2] 한국기술교육대학교 기계정보공학부

Key words : Nanoimprint lithography, Polymer flow, Strain Concentration, Fracture defect

1. 서론

나노임프린트 리소그라피는 집적화된 나노시스템의 생산 방법으로서 폴리머 레진을 경화시키는 방법에 따라 열경화 나노임프린트 리소그라피와 UV 경화 나노임프린트 리소그라피로 나누어 진다. 나노임프린트 리소그라피는 가압(molding), 유지(holding), 분리(demolding)의 세 단계의 간단한 공정 방법으로 나노 스케일의 패턴을 우수하게 전사 할 수 있어서 짧은 기간 동안 비약적인 발전을 해왔다. 그러나 나노임프린트 공정 시 나타나는 여러 가지 결함은 아직도 큰 관심사로 남아있으며, 실제 나노 스케일 생산 공정인 나노임프린트 공정의 가장 큰 장애물로 남아있다. 미충전, 패턴 파손, 패턴 변형, 버블, 오염 등의 결함들이 나타나며, 공정조건, 몰드 형상 및 폴리머의 물성에 따라 공정 중에 복합적으로 나타난다. 이런 결함 중에 패턴 파손은 큰 비중을 차지하는데, 대부분의 연구에서 분리 공정 시 몰드와 폴리머 패턴 사이의 접착 및 응력집중에 의해 패턴이 파손 되는 것으로 알려져 왔다. 하지만 본 연구에서는 분리 공정 시 발생되는 패턴 파손에 대한 근본적인 원인을 찾기 위해 FEM 시뮬레이션을 이용하여 폴리머 유동에 대해 연구하였다.

2. 파손 결함 및 폴리머 유동

Fig. 1 은 파손 결함의 개략적인 그림이다. 분리 공정 시 몰드를 제거하는 과정에서 폴리머와 몰드 사이의 접착력이 폴리머 패턴을 잡아 늘이게 되며, 패턴의 밑부분에서 파손이 이루어진다. 하지만 분리 공정 시 작용되는 접착보다 먼저 근본적인 원인으로 폴리머의 유동에 의한 영향을 고려해야 한다.

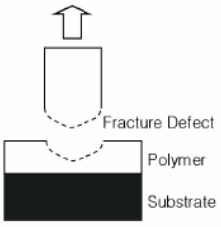


Fig. 1 fracture defect

Fig. 2 처럼 몰드로 가압하면 돌출부(protrusion) 밑의 폴리머는 변형하며 이동하여 공동(cavity)를 채우게 된다. 몰드의 균일한 패턴에 의해 폴리머는 균일한 유동을 하게 된다. 이런 균일한 유동의 경우 파손 결함의 다른 이유로 패턴의 밑부분 모서리에 응력집중이 발생하여 발생하는 것으로 알려져 있다. 하지만 패턴과 패턴 사이에 큰 폭을 갖는 돌출부가 있거나, 공동 및 돌출부의 폭이 일정하지 않은 경우에는 폴리머의 불균일 유동을 야기하게 된다. Fig. 3 처럼 왼쪽 측면의 돌출부가 크다면, 주된 폴리머 유동은 왼쪽에서 오른쪽으로 이동하게 된다. 그러면 몰드 공동의 왼쪽편이 안쪽보다 일찍 채워진다. 모든 공동이 채워질 때까지 왼쪽 공동은 계속적으로 압력을 받게 되며, 유동은 계속적으로 이루어진다. 측면 폴리머 유동과 압축력이 변형률 불일치를 야기하고, 패턴의 코너에서 공동을 야기하는 것이 발견된다. (Fig. 3 A 영역) 또한, 측면 폴리머 유동이 패턴의 코너에서 급격한 변형률을 야기하는 것이 발견된다. (Fig. 3 B 영역) 이와 같이 코너 A 에서 공동이 발생 되고, 코너 B 에서 급격한 측면 변형률의 발생이 폴리머의 불균일 유동에 의한 파손 결함의 근본적인 원인으로 분석할 수 있다.

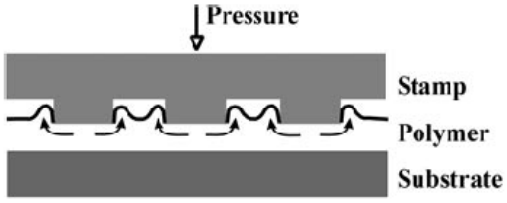


Fig. 2 Schematic depicting polymer uniform flow

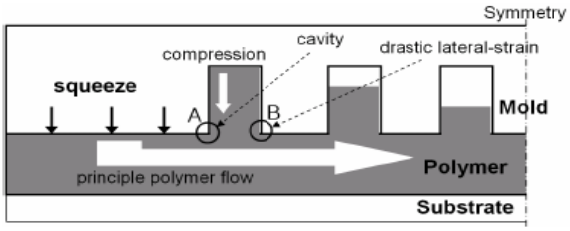
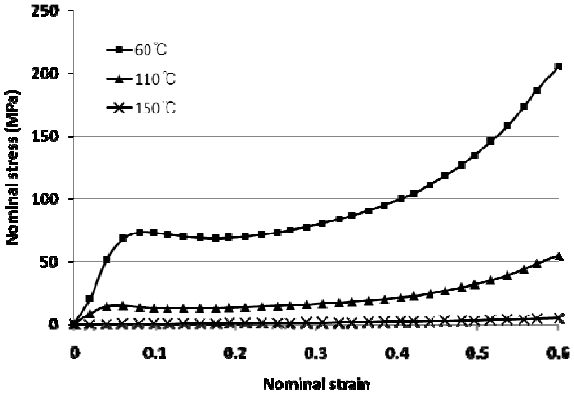


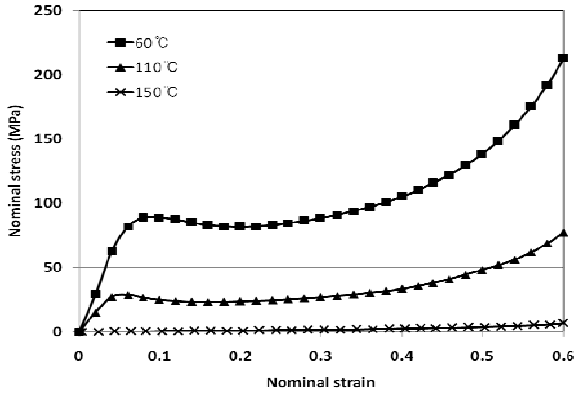
Fig. 3 Schematic depicting polymer non-uniform flow

3. 시뮬레이션

NIL 공정의 유동 형상을 시뮬레이션을 수행하기 위해 유한요소해석은 라그랑지안 공식을 기본으로 한 DEFORM-2D 를 사용하였고, 평면변형으로 가정하였다. 이 연구에서 FEM 해석은 실험 데이터를 적용하여 점소성 모델을 가지고 수행하였다. 다양한 온도와 변형률속도에서 단순압축실험을 수행하였다. Fig. 4 (a)와 (b)는 PMMA 의 응력-변형률 관계를 보여준다. Fig. 5 는 해석을 수행 할 FEM 모델이다. 경계 조건은 주기적인 경계 조건을 주어 해석을 수행하였다. 접촉표면에서 메쉬 침투를 피하기 위해 몰드의 코너에 라운드를 주었다. 몰드와 폴리머 사이의 상호간의 마찰계수는 0.5 로 가정하였고, 5138 개의 엘리먼트를 사용하였다. 폴리머의 초기 두께 h_t, 몰드의 공동(cavity) 폭 w_m, 몰드의 공동 깊이 h_m, 그리고 몰드의 돌출부(protrusion) 너비 p_m 의 다양한 조건에서 FEM 해석을 수행하였다.



(a)



(b)

Fig. 4 Material characteristics of a PMMA (a) stress-strain relationship at $\dot{\varepsilon}$=0.002 (b) stress-strain relationship at $\dot{\varepsilon}$=0.02

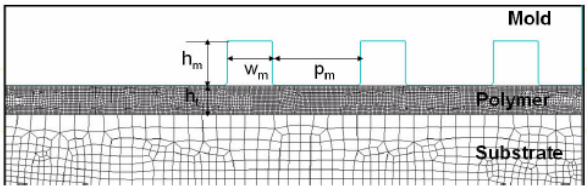


Fig. 5 simulation model

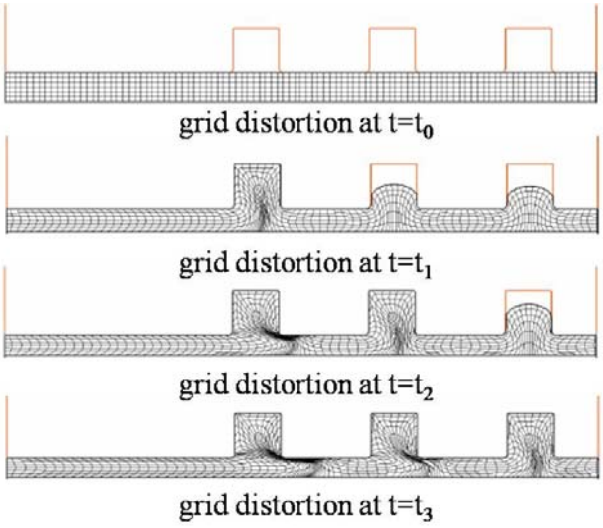


Fig. 6 polymer flow patterns using FLOWNET (h_m=500nm, h_t=400nm, w_m=500nm, p_m=1000nm)

Fig. 7 strain distribution

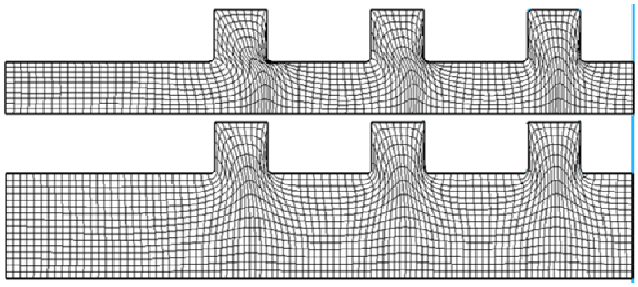


Fig. 8 polymer flow patterns (top: h_t=600nm, bottom: h_t=1200nm)

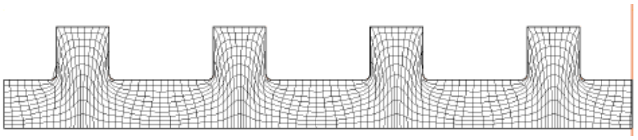


Fig. 9 polymer flow pattern (h_m=500nm, h_t=600nm, w_m=500nm, p_m=1000nm with uniform protrusion width)

Fig. 6 은 시간에 따른 폴리머의 불균일 유동 패턴을 나타낸다. 폴리머의 유동을 보여주기 위해 DEFORM 의 포스트 프로세스 도구인 FLOW NET 을 사용하였다. FLOW NET 은 변형되는 동안 유동을 추적하기 위한 도구이다. 몰드의 불균일 패턴 디자인에 의해 폴리머의 불균일 유동이 일어나게 되어 전체적인 유동이 왼쪽에서 오른쪽으로 이루어진다. 왼쪽의 공동이 먼저 채워지게 되고 계속적인 압력에 의해 안쪽의 공동이 채워지게 된다. 그 결과 Fig. 7 에서 보여지는 것처럼 과도한 스트레인이 채널의 밑부분에 발생됨을 보여주며, 몰드 표면에서의 전단 변형과 패턴의 코너에서 신장변형을 야기한다. 이런 현상은 Fig. 8 처럼 폴리머의 초기 두께가 감소할수록 쉽게 발생된다. 폴리머의 초기 두께가 두꺼울수록 공동을 채우는 폴리머가 밑에서 위로 이동하는 유동을 보이기 때문이다. 시뮬레이션 결과는 패턴의 코너에서 스트레인 집중이 일어나고 그것이 몰드를 제거하는 과정에서 결정적인 결함의 원인이 될 수 있음을 보여준다. 그러나 Fig. 9 에서 보여지는 것처럼 균일한 충전 경우에 과도한 스트레인 집중은 일어나지 않았다. 그러므로 패턴의 근본적인 파손의 원인이 폴리머의 불균일 유동에 있음을 보여준다.

4. 결론

나노임프린트 리소그라피에서 폴리머의 파손 결함에 대해 해석적으로 연구를 하였다. 이 연구에서 나노임프린트 공정 동안의 폴리머 변형과 충전 모드를 시뮬레이션을 통해 보여주었다. 불균일 충전이 공동과 급격한 측면 스트레인을 야기하고, 이것이 몰드를 제거하는 공정에서 파손 결함을 야기하는 것으로 나타났다. 레진의 초기 두께가 작을수록 이런 결함이 증가하는 것으로 나타났다. 결함을 줄이고 제거하기 위해 불균일 유동이 없는 몰드 디자인을 하는 것이 중요하다.

후기

본 연구는 과학기술부 21 세기프론티어연구개발사업의 나노메카트로닉스기술개발에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사 드립니다.

참고문헌

1. S. Y. Chou, P. R. Krauss, and P. J. Renstrom, "Imprint of sub-25 nm vias and trenches in polymers," Appl. Phys. Lett. **67**, 3114 , 1995.
2. Y. Hirai, S. Yoshida and N. Takagi , " Defect analysis in thermal nanoimprint lithography," Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, **21**, 2765-2770, 2003.
3. Y. Hirai, S. Harada, H. Kikuta, Y. Tanaka, M. Okano, S. Isaka, and M. Kobayasi, "Imprint lithography for curved cross-sectional structure using replicated Ni mold," J. Vac. Sci. Technol. B, **20**, 2867, 2003.
4. L. J. Heyderman, H. Schift, C. David, J. Gobrecht, and T. Schweizer, "Flow behaviour of thin polymer films used for hot embossing lithography," Microelectronic Engineering, **54**, 229–245, 2000
5. DEFORM2D Version8.0 User's Manual p.152