

# 유한요소 해석을 이용한 나노임프린트 가압 공정에서 발생하는 결함 원인에 대한 연구

송남호<sup>1</sup>, 손지원<sup>1</sup>, 김동연<sup>1</sup>, 오수익<sup>#</sup>

## A Study on Cause of Defects in NIL Molding Process using FEM

N. H. Song, J. W. Son, D. E. Kim, S. I. Oh

### Abstract

In nano-imprint lithography (NIL) process, which has shown to be a good method to fabricate polymeric patterns, several kinds of pattern defects due to thermal effects during polymer flow and mold release operation have been reported. A typical defect in NIL process with high aspect ratio and low resist thickness pattern is a resist fracture during the mold release operation. It seems due to interfacial adhesion between polymer and mold. However, in the present investigation, FEM simulation of NIL molding process was carried out to predict the defects of the polymer pattern and to optimize the process by FEA. The embossing operation in NIL process was investigated in detail by FEM. From the analytical results, it was found that the lateral flow of polymer resin and the applied pressure in the embossing operation induce the weld line and the drastic lateral strain at the edge of pattern. It was also shown that the low polymer-thickness result in the delamination of polymer from the substrate. It seems that the above phenomena cause the defects of the final polymer pattern. To reduce the defect, it is important to check the initial resin thickness.

**Key Words** : Nanoimprint lithography, defect, molding process, non-uniform filling, lateral flow, weld line, piping defect, initial resin thickness

### 1. 서론

나노임프린트 리소그래피는 집적화된 나노시스템의 생산 방법으로서 폴리머 레진(resin)을 경화시키는 방법에 따라 열경화 나노임프린트 리소그래피와 UV경화 나노임프린트 리소그래피로 나누어진다. 나노임프린트 리소그래피는 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[1]. 그러나 나노임프린트 공정 시 나타나는 여러 가지 결함은 아직도 큰 관심사로 남아있으며, 실제 나노 스케일 생산 공정인 나노임

프린트 공정의 가장 큰 장애물로 남아있다. 미충전, 패턴 파손, 패턴 변형, 버블, 오염 등의 결함들이 나타나며, 공정조건, 몰드 형상 및 폴리머 레진의 물성에 따라 공정 중에 복합적으로 나타난다. 이런 결함들 중에 패턴 파손은 큰 비중을 차지하는데, 대부분의 연구에서 분리 공정 시 몰드와 폴리머 패턴 사이의 접촉 및 마찰에 의해 패턴이 파손 되는 것으로 알려져 왔다. 하지만 본 연구에서는 분리 공정 시 발생하는 패턴 파손의 근본적인 원인을 가압 공정에서 찾았다. 가압 공정 시 몰드의 형상에 따라 레진의 과도한 유동이 발생하여 패턴 파손에 영향을 미치게 된다. 이를 FEM 시뮬레이션을 이용하여 연구하였다.

1. 서울대학교 기계항공공학부

# 교신저자: 서울대학교 기계항공공학부, sioh@snu.ac.kr

## 2. 해석

### 2.1 해석 조건

NIL 공정의 유동 형상을 시뮬레이션을 수행하기 위해 유한요소해석은 라그랑지안 공식을 기본으로 한 DEFORM-2D를 사용하였고, 평면변형으로 가정하였다. 이 연구에서 FEM 해석은 실험 데이터를 적용하여 점소성 모델을 가지고 수행하였다 [2]. 경계 조건은 주기적인 경계 조건을 주어 해석을 수행하였다. 접촉표면에서 메쉬 침투를 피하기 위해 몰드의 코너에 라운드를 주었다. 몰드와 폴리머 사이의 상호간의 마찰계수는 0.5로 가정하였다.

### 2.2 해석 모델

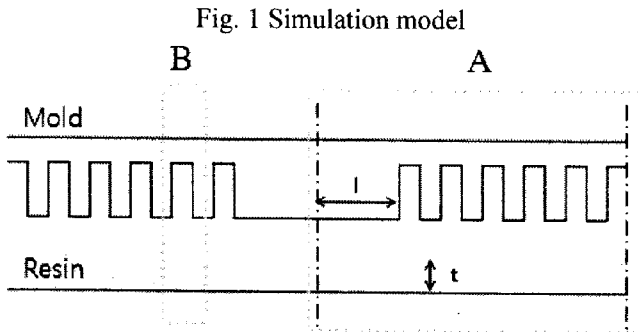


Fig. 1과 같이 2가지에 대한 해석모델을 정하여 해석을 수행하였다. 단일 채널에 대한 해석인 B 영역과 다중 채널에 대한 해석인 A 영역에 대해 해석을 수행하였다. 몰드 채널의 높이(height)는 200nm, 폭(width)은 50nm이며, 돌출부(protrusion)의 너비는 50nm이다. 채널의 폭과 채널 사이의 간격을 1:1 비율로 유지하였다. A 영역의 해석에서 몰드의 채널 형상은 일정하게 유지하고, 폴리머 레진의 두께(t)와 채널이 없는 빈 공간(l) 즉, 채널군과 채널군 사이의 간격을 변화시키면서 다양한 조건에서 해석을 수행하였다. 또한 B 영역에서는 폴리머 레진의 두께(t)와 돌출부의 너비(w)를 변화시키면서 폴리머 레진의 유동에 대한 FEM 해석을 수행하였다. 폴리머의 유동을 보여주기 위해 DEFORM-2D의 포스트 프로세스 도구인 FLOWNET을 사용하였다. FLOWNET은 변형되는 동안 유동을 추적하기 위한 도구이다.

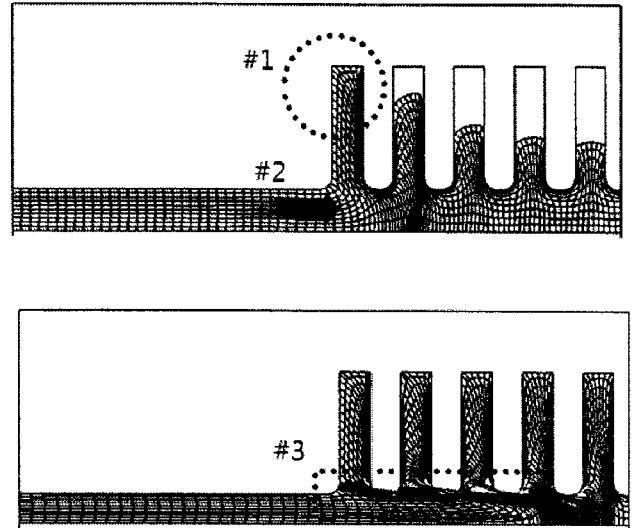


Fig. 2 Flow of resin (FLOWNET)  
(a) Non-uniform filling (b) Lateral flow

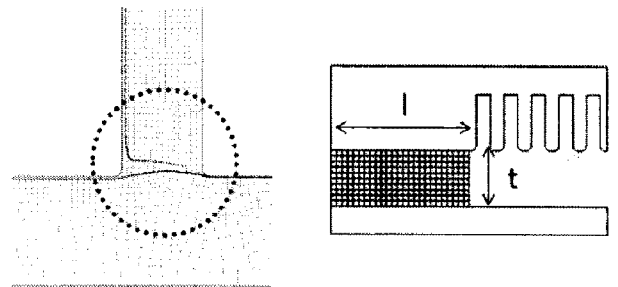


Fig. 3 (a) Weld line (b) Simulation model

## 3. 폴리머 레진의 유동

### 3.1 불균일 유동에 의한 weld line

Fig. 2 처럼 왼쪽의 돌출부(빈 공간)가 크게 설계된 몰드로 나노임프린트 공정을 수행하게 되면, 가압 공정 시 레진은 왼쪽에서 오른쪽으로 이동하는 측면 유동을 하게 된다. 그러면 몰드의 왼쪽 채널이 안쪽 채널보다 먼저 채워지게 되는 불균일 유동을 보인다.(#1) 모든 채널이 채워질 때까지 먼저 채워진 왼쪽 채널(#1)은 계속적으로 압력을 받게 되며, 나머지 빈 채널을 채우기 위해 측면 유동은 계속적으로 이루어진다.(#2) 레진의 측면 유동과 계속적인 압축력이 변형을 불일치를 야기하고, 패턴의 밑부분에 큰 측면 스트레인을 발생시킨다.(#3) 큰 측면 유동으로 Fig. 3 (a)처럼 패턴의 밑부분 코너에서 weld line 을 발생시키는 것이

발견되었다. 이와 같이 몰드의 채널 밀도 차이에 의한 불균일 유동은 큰 측면 유동을 야기하여 패턴의 밑부분에 weld line 을 생성하여 분리 공정 시 파손 결함의 근본적인 원인으로 분석할 수 있다.

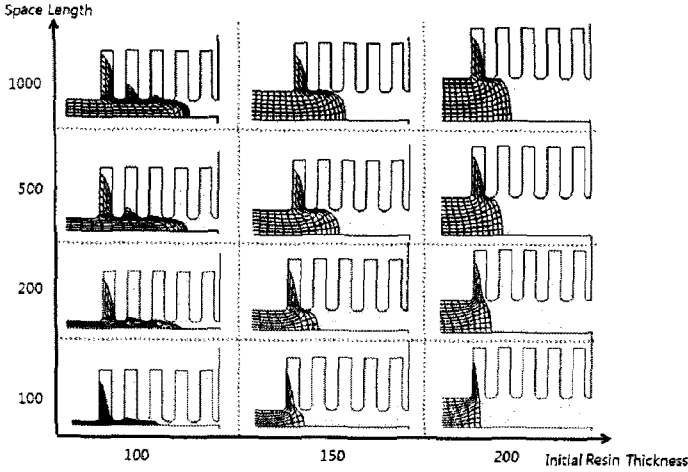


Fig. 4 Parametric study

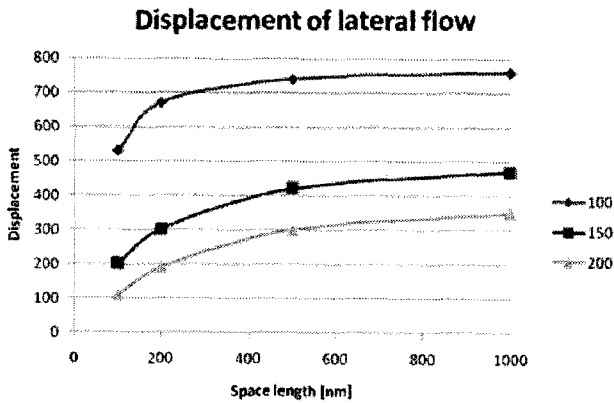


Fig. 5 Displacement of lateral flow

### 3.1.1 Parametric study

Fig. 3(b)에서와 같이 몰드의 채널 형상은 일정하게 유지하고 폴리머 레진의 두께(t)와 채널이 없는 빈 공간(l) 즉, 채널군과 채널군 사이의 간격을 변화시키면서 해석을 수행하였다. 레진의 측면 유동을 시각적으로 보이기 위해 빈 공간 밑의 레진에만 FLOWNET 그리드를 입혔다. 폴리머 레진 두께 및 빈 공간 크기에 따른 해석 결과를 Fig. 4에 정리 하였다. 가로축을 기준으로 빈 공간이 100, 200, 500, 1000nm로 일정한 길이에 따라 초기 레진 두께가 감소할수록 측면 유동이 커짐을 알

수 있다. 또한 초기 레진 두께가 100, 150, 200nm로 일정할 때 빈 공간의 길이가 클수록 측면 유동이 커져 패턴 파손의 가능성이 커지게 된다.

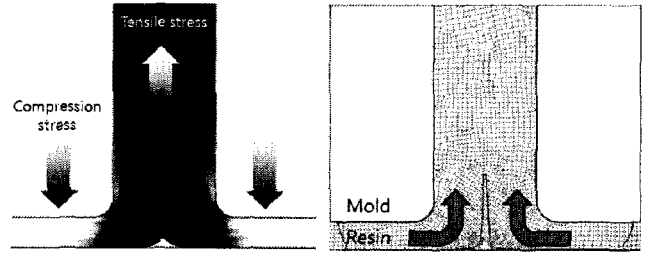


Fig. 6 Resin flow of single channel

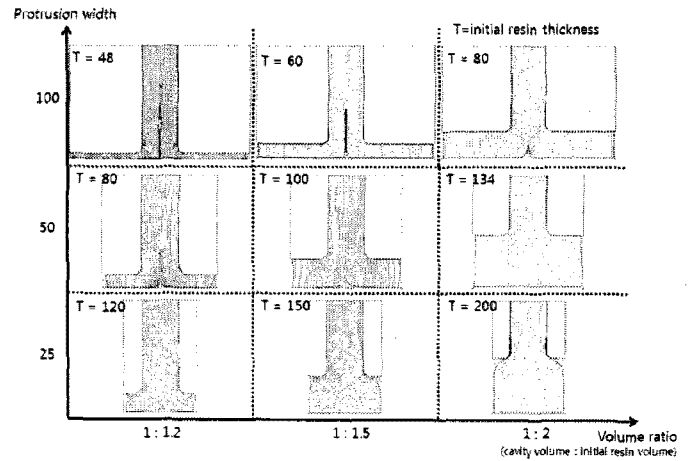


Fig. 7 Parametric study

Fig. 5 는 FLOWNET 격자의 측면 이동을 거리로 나타내었다. 빈 공간의 크기가 클수록 측면 이동이 커지지만 레진의 초기 두께가 얇을수록 더욱 큰 측면 유동을 나타남을 보여준다. 이 처럼 레진의 초기 두께가 감소할수록 쉽게 발생된다. 이것은 레진의 초기 두께가 두꺼울수록 채널을 채우는 레진이 밑에서 위로 이동하는 유동을 보이기 때문이지만, 초기 두께가 얇으면 레진의 측면 유동이 커지기 때문이다.

### 3.2 균일 유동에 의한 piping defect

단일 채널에 대한 해석 영역인 B 영역에 대한 해석을 수행하였다. 채널의 높이는 200nm, 폭은 50nm이며, 돌출부의 너비는 50nm이다. 단일 채널의 가압 공정 시 레진의 응력 분포가 Fig. 6 (a)처

럼 나타났다. 응력 분포의 차이에 의해 레진의 유동은 Fig. 6 (b)의 화살표와 같이 나타나는데 그로 인해 패턴의 중앙 밑부분에 박리 결함이 나타났다가 지속적인 압력에 의해 레진이 접합하게 하게 되는 weld line이 생긴다. 이를 파이핑 결함(piping defect)이라고 한다.

### 3.2.1 Parametric study

레진의 초기 두께와 돌출부(protrusion) 너비에 따라 파이핑 결함의 경향을 분석하기 위해 해석을 수행하였다. 해석 결과를 Fig. 7에 표로 정리하였다. 가로축을 기준으로 돌출부 너비가 25, 50, 100nm로 일정한 길이에 따라 채널 부피와 초기 레진의 부피와의 관계가 적을수록 파이핑 결함이 발생하였다. 부피비가 일정할 때 돌출부의 크기가 클수록 파이핑 결함 발생은 현저히 증가하였다. 즉, 파이핑 결함의 경우 초기 레진 두께가 작고, 돌출부의 크기가 클수록 크게 발생됨을 보였다. 이것 또한 채널을 채우기 위한 레진의 유동이 밑에서 위로의 이동보다 측면 유동이 크기 때문이다.

## 4. 결론

나노임프린트 리소그래피에서 폴리머의 파손 결함의 원인에 대해 해석적으로 연구를 하였다. 대다수의 연구에서 NIL 공정의 결함의 원인을 분리(demolding) 공정에서 발생하는 접착과 마찰이 주요 원인으로 지적되었다. 하지만 본 연구에서 나노임프린트 리소그래피의 가압 공정 동안의 레진의 유동과 충전 모드가 패턴 파손의 중요한 원인을 시뮬레이션을 통해 보여주었다. 측면 유동에 의한 불균일 충전이 weld line 과 급격한 측면 스트레인을 야기하고, 이것이 몰드를 제거하는 공정에서 파손 결함을 야기하는 것으로 나타났다. 레진의 초기 두께가 작을수록, 채널이 없는 빈 공간이 클수록 이런 결함이 증가하는 것으로 나타났다. 결함을 줄이고 제거하기 위해 불균일 유동

이 없는 몰드 디자인을 하는 것이 중요하다. 또한 균일 충전 시에도 응력분포에 의한 레진의 유동에 의해 파이핑 결함(piping defect) 및 레진의 박리 결함이 나타났다. 역시 레진의 초기 두께가 작을수록 결함이 증가하였다.

몰드의 설계가 정해졌을 때 나노임프린트 리소그래피 공정 시 레진의 초기 두께를 결정하는 것이 매우 중요함을 보였다. 나노임프린트 리소그래피에서 레진의 잔류 두께를 줄이기 위해 초기 두께를 줄이는 경향이 있는데, 본 연구에서 레진의 초기 두께를 줄일수록 결함의 원인이 증가함을 보였다. 공정 시 패턴의 파손을 줄이기 위해 적절한 레진의 초기 두께를 결정하는 것은 매우 중요하다.

## 후 기

본 연구는 과학기술부 21 세기 프론티어 연구개발사업의 나노메카트로닉스 기술개발에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사 드립니다.

## 참 고 문 헌

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