

# 연속체 가정을 통한 NIL 공정의 전산모사

김승모<sup>†</sup> · 이우일<sup>\*</sup>

## Numerical Simulation of NIL Process Based on Continuum Hypothesis

Seung Mo Kim, Woo Il Lee

**Key Words :** Surface tension(표면장력), Wall adhesion(벽면흡착), Polymer(고분자), Fixed grid(고정 격자계), Lithography(식판술)

### Abstract

Nano imprint lithography(NIL) is a cost-efficient, high-throughput processing technique to transfer nano-scale patterns onto thin polymer films. Polymers used as the resist include UV cured resins as well as thermoplastics such as polymethyl-methacrylate(PMMA). In this study, an analytic investigation was performed for the NIL process of transferring nano scale patterns onto polymeric films. Process optimization calls for a thorough understanding of resist flow during the process. We carried out 2D and 3D numerical analyses of resist flow during NIL process. The simulation incorporated continuum-hypothesis and the effects of surface tension were taken into account. For a more effective prediction of free surface, fixed grid scheme with the volume of fluid (VOF) method were used. The simulation results were verified with experimental results qualitatively. And the parametric study was performed for various process conditions.

### 기호설명

$t$  : 시간  
 $u_i$  :  $x_i$ 의 속도성분  
 $\rho$  : 밀도  
 $\mu$  : 점도  
 $f_i$  :  $x_i$  방향의 체적힘  
 $\sigma_{ij}$  : total stress tensor  
 $d_{ij}$  : strain rate tensor  
 $\sigma$  : 표면장력 계수  
 $\kappa$  : 곡률  
 $T$  : 온도

### 1. 서론

정밀하고 복잡한 나노 구조물을 만들기 위해 여러 가지 패터닝 방법을 이용하고 있다. 대표적으로 optical lithography는 현재 반도체 산업에 많이 사용하는 범용적인 방법이지만 빛의 회절현상으로 인해 나노 스케일의 공정에서는 어려움이 있으며, 그 회절현상의 어려움을 극복하기 위한 X-ray lithography와 같은 방법은 많은 설비 투자가 필요하다는 단점이 있다. 이를 보완할 수 있는 다른 패터닝 방법으로 e-beam lithography, scanning probe microscope lithography (SPM) 등이 있지만 생산 효율성에 있어서 범용적으로 사용하기에 어려움이 있다. 여러 방법 중에서, 차세대에 널리 쓰일 수는 있는 패터닝 방법으로 nano imprinting lithography(NIL)가 있다. NIL은 최소 10nm의 작은 나노 구조물을 제작하는데 있어 효율적인 차세대 패터닝 기법 (NGL : Next Generation Lithography)으로 기대를 모으고 있다. [1]

---

<sup>†</sup> 회원, 서울대학교 기계항공공학부 대학원  
E-mail : memories@snu.ac.kr  
TEL : (02)880-1657 FAX : (02)880-0631

<sup>\*</sup> 서울대학교 기계항공공학부 대학원

---

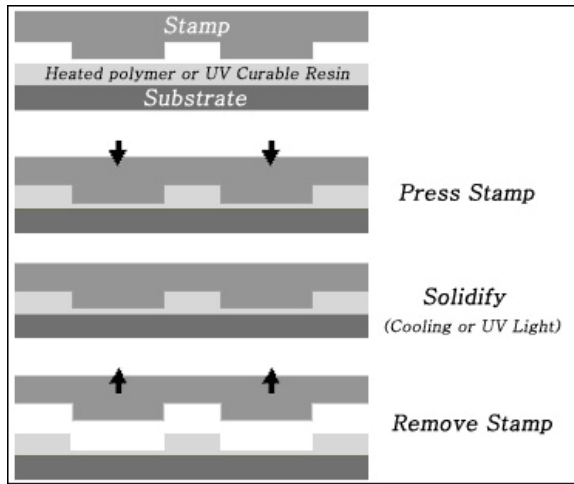


Fig. 1 Schematic of NIL process

NIL 공정은 사용하는 resist 의 solidification 의 방식에 따라 Thermal NIL 과 UV NIL 로 크게 나누어진다. Filling 공정에서 나타나는 유동을 관찰하는데 있어서 두 방식의 가장 큰 차이는 점도이다. Thermal NIL 의 경우는 일반적으로 점도가 높은 resist 가 쓰이며 UV NIL 의 경우는 상대적으로 낮은 점도의 resin 이 사용된다. 이러한 두 종류의 NIL 공정은 공통적으로 spin coating or dispensing, embossing, solidification, de-molding 의 네 가지 공정(Fig. 1)으로 이루어진다.

구조물이 작아질수록 그리고 복잡해질수록, 제품의 결함을 줄이고 공정을 최적화하기 위해 공정에서 나타나는 현상을 이해하는 것이 필요하다. 여기서는 stamp 로 resist 를 누르는 embossing 공정에서 나타나는 여러 결함들, incomplete filling 이나 air bubble 생성 현상을 파악하기 위해 수치해석을 수행하였다. 구조물의 크기로 인해, 실험적인 관찰이 매우 어렵기 때문에 이러한 수치해석을 통해 공정을 디자인하고 공정 변수를 최적화하는 것이 필요하다. [2]

나노 스케일의 유동을 해석함에 있어서, 크게 Top-down 방식과 Bottom-up 방식을 들 수 있다. Top-down 방식에서는 resist 의 유동을 연속체로 가정하여 해석하며, Bottom-up 방식의 경우 분자동역학에 기반을 둔 Molecular Dynamics 해석을 통해 현상을 파악하게 된다. 원칙적으로 Bottom-up 방식으로 해석을 수행하는 것이 나노 스케일의 거동을 가장 정확하게 모사할 수 있으나, 여러 가지 수치적인 제약(계산시간, 계산용량)으로 인해 전체적인 거동을 관찰하기 위해서는 어려움이 많다.

따라서 실용적인 관점에서, 연속체로 가정할 있는 스케일에서는 Top-down 방식의 해석이 가능

하기 때문에, 이 연구에서는 Top-down 방법을 이용한 해석이 수행되었다. 복잡한 유동선단을 효율적으로 찾기 위해 2D fixed grid 를 이용하였다. Fixed grid system(Eulerian system)의 경우는 moving grid system(Lagrangian system)의 경우보다 3 차원 확장이 용이하며, 복잡한 유동 형상의 경우도 보다 쉽게 해석이 가능하다는 장점이 있다. 나노 스케일에서 일어나는 현상이므로 정확한 해석을 위해 표면장력효과를 고려하였다.[2]

## 2. 계산방법

### 2.1 Governing Equation

수치해석에서는 unsteady 비압축 유동과 시스템의 isothermal condition 을 가정하였으며 FEM 을 기반으로 연속방정식과 N-S 운동량 방정식을 Penalty method 로 formulation 하여 계산하였다. [3,4]

연속방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

Navier-Stokes 운동량 방정식

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ji}(u) + \rho f_i$$

구성방정식

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu d_{ij}, \quad d_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

Penalty method

$$P = -\gamma_e \nabla \cdot u \quad (\gamma_e : \text{Penalty parameter})$$

### 2.2 Volume of Fluid method

Volume of Fluid(VOF) 방법은 fixed grid system 에서 자유표면을 추적하는 방법 중 대표적인 방법으로 부분 체적을 요소의 변수로 정의하며, 부분 체적은 전체 도메인을 유체와 기체 부분으로 나누기 위해서 사용된다. 유체로 완전히 채워진 cell 과 부분적으로 채워진 cell 그리고 유체가 비어있는 cell 에서의 부분체적의 값은 각각 1, 0~1, 0 로 주어진다. 분수 체적은 다음의 transport equation 을 이용하여 각각 시간스텝에서 계산된다.[5]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0, \quad f : \text{분수체적}$$

자유 표면을 추적하는 순서는 다음의 세 단계로 이루어진다. 우선 해당 시간 스텝의 유동장의 해를 얻고, 특정 요소에서 이웃하는 요소로의 유체의 부피 플럭스를 계산하며[14], 마지막으로 각각의 최종 부분체적을 업데이트하게 된다. 이 과정을 반복하여 유동 선단을 전진시키는 방법으로 해석을 수행하였으며, 유체의 부피 플럭스를 정확히 계산하는 방법으로는 Babycell 방법[6]을 이용하였다.[6]

### 2.3 표면장력 모델링

표면장력 효과는 일반적인 마크로 스케일의 유동에서는 무시할 수 있는 물리적 현상이지만, 나노 스케일의 경우 표면 대 부피비가 상대적으로 매우 커지기 때문에 반드시 고려되어야 하는 현상이다. Fixed grid system 에서 표면장력 효과를 고려하기 위해, 아래와 같이 surface force 를 body force 로 바꿔주는 Brakbill [7]의 Continuum Surface Force (CSF) 모델을 이용하였다.

$$F = \frac{\sigma}{[f]} \kappa \nabla f, \quad \kappa = -(\nabla \cdot n), \quad n = \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$$

벽면에서의 wall adhesion 효과를 구현하기 위해서 contact angle 을 이용한 wall adhesion 경계조건을 적용하였다. 아래와 같이 벽면과 자유표면 사이 접촉점에 contact angle 에 해당하는 normal 벡터를 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\vec{n}_s = \vec{n}_w \cos \theta + \vec{t}_w \sin \theta$$

위의 식에서,  $\theta$  는 유체와 벽면 사이의 contact angle,  $\vec{n}_w$  는 벽면방향의 단위 벽면 법선벡터,  $\vec{t}_w$  는 유체 방향의 단위 벽면 tangential 벡터를 나타낸다.

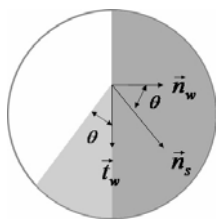


Fig. 2 Illustration of Wall adhesion

### 3. 검증 (Thermal NIL)

UV-cured NIL 의 경우 공정이 매우 순식간에 일어나기 때문에 실험을 통한 해석의 검증이 용이하지 않다. 따라서 해석 결과의 검증을 위해 thermal NIL 의 경우를 고려하였다. 2D thermal NIL 의 계산도메인은 Fig. 3 과 같이 고려하였다. Resist 의 양끝은 mass 의 이동이 자유로운 경계조건으로 가정하였으며 그 외 접촉면은 slip 경계조건을 가정하였다.

Thermal NIL 의 resist 로 PMMA 와 같은 높은 점도의 열가소성 수지를 고려하였다. PMMA melt 의 밀도는  $1.06 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ , 표면장력의 계수는  $29.7 \text{ mN/m}$  으로 해석을 수행하였다. PMMA 의 shear thinning effect 와 같은 유변학적 거동을 고려하기 위해서 점도는 shear rate 와 온도의 함수로 Cross-WLF 모델[8]을 이용하였다. 공정 조건으로 온도는  $170^\circ\text{C}$ , 접촉각은  $70^\circ$ , 스탬프의 속도는  $10 \text{ nm/s}$  로 해석을 수행하였다.

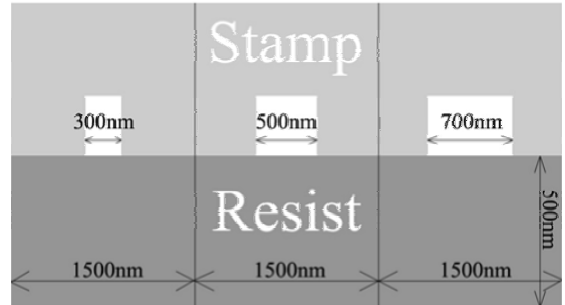


Fig. 3 Geometry of 2Dcomputational domain

Filling 공정에서의 유동 형태의 검증을 위해 해석과 비슷한 조건에서 thermal NIL 의 'short shot' 실험을 수행하였다. Fig. 4 에서 볼 수 있듯이, 해석과 실험 결과 모두 filling 되는 유동의 선단 모습이 보다 넓은 cavity 방향으로 치우쳐서 filling 되는 모습을 볼 수 있다. 이를 통해서, 해석 결과는 실험결과와 정성적으로 잘 일치하고 있음을 알 수 있었다.

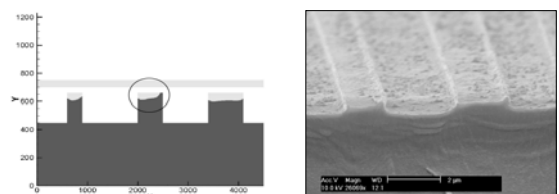


Fig. 4 Verification of simulation module

## 4. UV-cured NIL

### 4.1 Parametric Study

스탬프 속도, 진공도, 몰드 내 패턴의 영향에 따른 UV-cured NIL의 parametric study를 수행하였다. 3D 계산 도메인은 Fig. 5에 나타내었다.

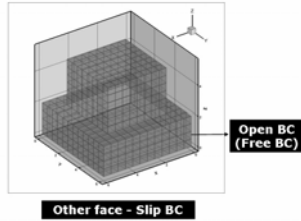


Fig. 5 Geometry of 3D computational domain

스탬프의 속도 또는 압력은 filling 공정의 시간과 최소로 요구되는 resist의 두께를 결정하는 기본적인 변수 중 하나이다. (너무 큰 스탬프의 속도/압력은 filling 시간을 짧게 하고 filling하는 mass flux에도 영향을 주기 때문에 최소로 요구되는 resist의 두께와 관련이 있다.) 접촉각은  $20^\circ$ , 표면장력 계수는  $22.9\text{mN/m}$ 로 가정하였으며 3D 해석 결과를 쉽게 비교하기 위해 slice한 유동선단과 속도 contour를 Fig. 6과 Fig. 7과 같이 나타내었다. Fig. 7에서 같이, cavity의 filling 시간은 스탬프의 속도/압력과 관련이 있기 때문에 cavity를 완전히 채우기 위해서는 상대적으로 작은 스탬프 속도가 요구되는 것을 관찰할 수 있다.

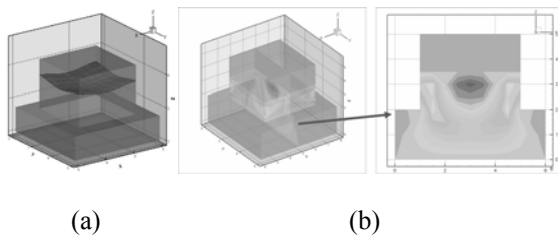


Fig. 6 3D UV-cured NIL simulation results  
(a) 3D flow front in filling  
(b) Sliced velocity 2D contour

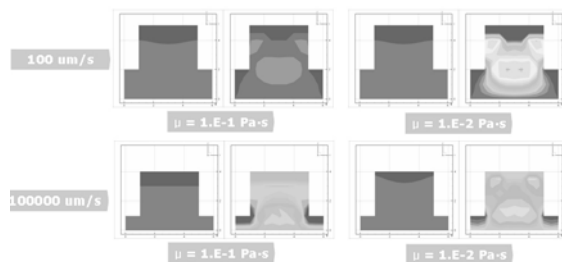


Fig. 7 Slice result in 3D simulation

점도의 영향 또한 Fig. 7에서 관찰할 수 있다. 점도가 낮을수록 resist의 유동성이 증가하며 그로 인해 resist에서 cavity내로 유입되는 mass flux는 증가하여 filling되는 시간은 감소하게 된다.

다음으로 진공도에 대한 해석을  $O$  ( $\sim 1$  torr)에서  $O$  ( $\sim 100$  torr)까지  $1 \times 10^{-1} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 의 점도에서 수행하였다. 접촉각이 작고 점도 또한 낮은 경우이므로 capillary flow가 지배적으로 나타나며, 따라서 stamp의 속도를  $0 \mu\text{m/s}$ 로 가정하여 관찰하였다. Fig. 8의 결과는 유동이 평형상태에 도달했을 때의 모습을 보여주고 있다. (a)의 경우에는 거의 완전한 filling이 일어났음을 관찰할 수 있었으나 (b)와 (c)의 경우에는 bubble를 관찰할 수 있었다. 이러한 결과를 토대로, air bubble의 생성과 위치를 찾을 수 있으며, 현재와 같은 NIL 공정은  $O$  ( $\sim 10$  torr) 아래에서 수행하는 것이 유리할 것임을 알 수 있었다.

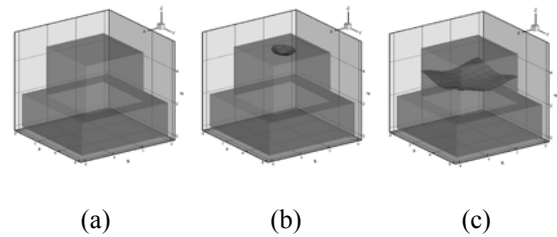


Fig. 8 Vacuum Effect - UV cured NIL  
(a)  $O$  ( $\sim 1$  torr)  
(b)  $O$  ( $\sim 10$  torr)  
(c)  $O$  ( $\sim 100$  torr)

마지막으로, 주변 패턴에 따른 영향을 살펴보았다. 실제 공정은 매우 다양한 패턴을 가지는 공정이기 때문에, 앞선 결과와 같이 한 개의 cavity만을 고려했을 경우와 같이 대칭적인 유동선단이 아닌 다양한 유동 형태를 관찰할 수 있다. 이러한 주변 패턴의 영향을 보다 간단히 관찰하기 위해 3D 형상의 2개의 cavity를 계산 도메인으로 고려하였으며 해석결과를 보다 쉽게 비교하기 위해 2D slice 결과를 Fig. 9와 같이 나타내었다.

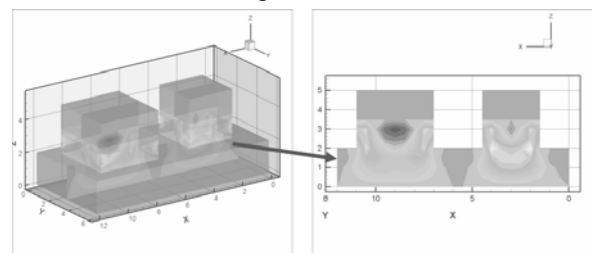


Fig. 9 3D computational domain & 2D slice results

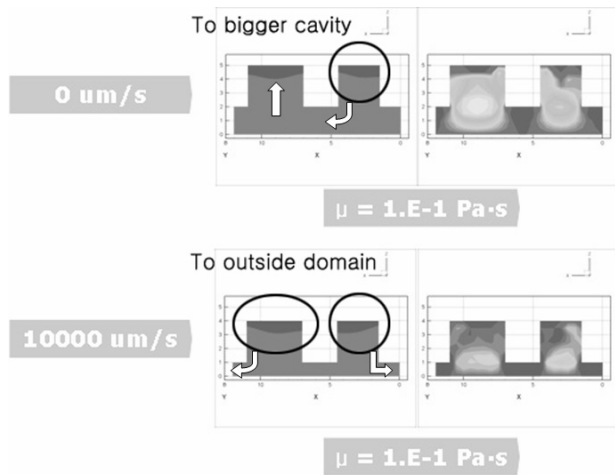


Fig. 10 Slope toward the global flow

스탬프의 속도에 따른 해석 결과를 Fig. 10 에서 나타내었다. 해석 결과에서 나타나는 유동 모습은 thermal NIL 의 검증 결과와 비슷하게 일정방향으로 치우치는 모습을 관찰할 수 있었다. 다만 그 방향은 thermal NIL 과 다르게 공정조건의 영향에 따라 크게 달라지는 것을 알 수 있다. 오직 capillary flow 로 인해 cavity 가 filling 되는 경우는 thermal NIL 의 경우와 마찬가지로 보다 넓은 cavity 방향으로 전체적인 유동이 형성되는 것을 볼 수 있었지만, 스탬프의 속도가 큰 경우에는 전체적인 유동은 cavity 바깥으로 나가는 방향으로 치우치게 되는 것을 알 수 있었다. 이러한 유동 선단의 다양한 모습을 통해서 수직으로 내리는 공정 방식뿐만 아니라 롤러와 같은 공정 방식에서도 해석 결과에 따른 유동 형태를 관찰함으로써 incomplete filling 이나 air bubble 의 위치를 추정할 수 있을 것이다.

#### 4.2 Flow Mechanism & Process Optimization

여러 가지 parameter 들에 따른 UV-cured NIL 에서 나타나는 유동 mechanism 에 대해 살펴보았다. Thermal NIL 과 다르게 점도가 낮은 UV-cured NIL 의 경우, 매우 다양한 filling 거동을 보인다. 이러한 다양한 파라미터는 크게 3 가지로 분류할 수 있는데, 우선 Resist 의 물성치(점도, 표면장력계수, 접촉각), NIL 공정변수(스탬프 속도/압력, 진공도, resist 의 두께) 그리고 패턴의 형태와 위치에 따른 영향을 들 수 있다. 이러한 파라미터에 대한 flow mechanism 을 해석을 통해 관찰할 수 있었다. 각각의 파라미터가 모두 filling 거동에 적지 않은 영향을 주기 때문에 NIL 공정을 최적화하기 위해서 이러한 flow mechanism 을 기본으로 위의 여러

파라미터의 최적화된 값을 찾는 것이 중요하다.

## 5. 결론

연속체 가정을 기반으로 한 해석 모듈을 이용하여 NIL 공정에서 나타나는 유동의 거동을 해석하였다. 자유표면을 적절히 고려하기 위해 VOF 방법을 이용하였으며, 나노 스케일과 같이 작은 스케일의 경우를 고려하기 위해 표면장력 효과를 구현한 해석 모듈을 이용하였다. 스탬프 속도, 점도, 진공도, 주변 패턴의 영향과 같은 parameteric study 를 수행하여 flow mechanism 을 관찰하였다. 이러한 flow mechanism 을 통해 NIL 공정에서 필요한 다양한 parameter 들의 최적값을 찾을 수 있었다.

## 후 기

본 연구는 과학기술부가 주관하는 21 세기 프론티어 연구개발사업의 일환인 나노메카트로닉스 기술개발사업단의 연구비지원(06K1401-01020)과 한양대학교의 나노 스코피아 센터를 통한 연구비지원에 의해 수행되었습니다.

## 참고문헌

- [1] S. Chou et al., 1996, "Imprint lithography with 25 nanometer resolution", *Science*, Vol. 272, pp.85-87.
- [2] L.J. Heyderman et al., 2000, "Flow behaviour of thin polymer films used for hot embossing lithography", *Micro electronic Engineering*, Vol. 54, pp.229-245.
- [3] L. D. Landau and E.M. Lifshitz, 1959, *Fluid Mechanics*, Pergamon, New York.
- [4] J.N. Reddy and D.K. Gartling, 1994, "The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics", CRC Press.
- [5] Hirt C W and Nichols B D, 1981, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries", *Journal of computational Physics*, Vol. 39, pp. 201-225.
- [6] Park J S, Kim S M, Kim M S and Lee W I, 2005, "Finite element analysis of flow and heat transfer with moving free surface using fixed grid system", *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol. 19, pp. 263-276
- [7] J. U. Brackbill et al., 1992, "A continuum method for modeling surface tension", *Journal of Computational Physics*, Vol. 100, pp.334-354.

[8] Ferry J.D., 1989, Viscoelastic Properties of Polymers, John Wiley& Sons