

FEM 을 이용한 나노임프린트 공정의 디몰딩 결함 연구 Prediction of Demolding-defects in Nanoimprint Lithography Using FEM Simulation

*#손지원¹, 송남호¹, 오수익¹

**J. W. Son(jwson@plab2.snu.ac.kr)¹, N. H. Song¹, S. I. Oh¹

¹ 서울대학교 기계항공공학부

Key words : Nanoimprint Lithography, Demolding Process, Interface Friction, Fracture Defect

1. 서론

나노임프린트 리소그래피는 폴리머 레진(resin)을 원하는 패턴 형상으로 경화시키는 고집적 나노시스템의 생산방법이다. 폴리머 레진을 경화시키는 방법에 따라 열경화 나노임프린트 리소그래피와 UV 경화 나노임프린트 리소그래피로 분류된다. 특히 열경화 나노임프린트 리소그래피는 가열 및 가압(heating and molding), 냉각(cooling), 분리(demolding)의 세 단계의 공정방법으로 나노 스케일의 패턴을 우수하게 전사할 수 있다. 그러나 나노 임프린트 공정 시 나타나는 여러 가지 결함은 실제 나노 스케일 생산 공정의 가장 큰 장애물로 남아있다. 불완전 충전, 패턴 파손, 패턴 변형 등의 기계적 결함 뿐 만 아니라 공정 조건 및 폴리머의 물성에 따라 여러 가지의 복합적인 결함이 보고되어 있다. 이런 결함 중 패턴 파손 결함은 몰드의 분리 공정에서 발생하는 것으로 결함 중에서도 매우 큰 비중을 차지하고 있으며, 이는 대부분 분리 공정 시 몰드와 폴리머 패턴 사이의 접착(adhesion) 현상에 의해 발생하는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 패턴 파손 결함의 발생원인에 대하여 구체적으로 고찰해보고 특히 분리 공정에서 파손 결함 발생을 증가시킬 수 있는 인자에 대해 연구하였다.

2. 파손 결함 (Fracture Defect) 및 발생 요인

Fig. 1은 분리 공정 시 발생하는 파손 결함의 개략적인 그림이다. 분리 공정 시 몰드를 제거하는 과정에서 폴리머와 몰드 사이의 접착력(adhesion force)이 폴리머 패턴을 잡아 늘리게 되며, 실험 결과의 대부분은 패턴의 밑부분과 몰드와의 접촉부에서 파손이 먼저 이루어지는 경향을 보이고 있다. 이러한 파손 결함은 특히 높은 가로세로비(aspect ratio)를 가지는 패턴에서 더욱 크게 발생한다. 패턴의 밑부분에서 파손 결함이 발생하는 이유는 첫째, 가압 공정 시 폴리머 유동에 의해 불균일한 패턴 충전(filling)이 발생하고 이러한 유동이 폴리머 패턴의 밑부분에서 급격한 수평 변형량(lateral strain)을 발생시키는 현상, 둘째, 냉각 공정 시 몰드와 폴리머의 열수축량의 차이로 인한 수평 변형량의 발생, 셋째, 분리 공정에서 몰드와 폴리머의 접촉 부위의 마찰력에 의해 상기 부분에 응력 집중이 발생함을 고려할 수 있다. 특히, 분리 공정 시 몰드가 폴리머 패턴에 비해 경사지게 움직일 경우 이러한 응력집중현상은 더욱 심하게 나타난다.

첫째, 가압 공정 시 불균일한 패턴 충전에 대해서는 기존의 논문에서 자세하게 설명한 바 있다.¹⁾ Fig. 2 처럼 폴리머 패턴의 밑부분에서 급격한 수평 변형량이 발생함을 확인할 수 있으며, 이는 분리 공정 시 파손 결함을 발생시킬 수 있는 잠재적인 요인이 될 수 있다.

둘째, 나노임프린트 리소그래피에서 일반적으로 사용되는 PMMA의 열수축 계수는 Tg 이하에서 $85 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$,

Tg 이상에서 $133 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 이고, 몰드로 사용될 수 있는 Ni의 열수축 계수는 $13.1 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 이다. 만일 열수축의 기준점을 정중앙 위치로 잡는 경우, 정중앙에서 4 inch 거리의 점에서는 단순 계산상으로 보아도 $50 \mu\text{m}$ 이상의 차이가 발생하게 된다. 즉, 냉각 공정 이후 몰드와 폴리머간의 열수축계수의 차이로 인해 상대적인 위치 변동이 발생하고, 이것이 폴리머에 수평 변형량(lateral strain)을 발생시킨다. 이러한 수평 변형량은 폴리머의 밑부분에 변형량 집중 및 응력집중을 발생시키게 된다. 이는 Hirai²⁾에 의해 해석된 바 있고, Fig. 2에서 보이는 것처럼 본 연구에서도 재차 확인하였다. 이 역시 냉각 공정 시에 직접적인 파손 결함을 야기시키지는 않으나, 분리 공정 시 파손 결함을 발생시킬 수 있는 잠재적인 요인이 될 수 있다.

본 연구에서는 분리 공정 시 상기 가압 및 냉각 공정에서 잠재되어 있던 파손 결함 발생 인자가 발현될 수 있음을 DEFORM2D를 이용하여 유한 요소 해석을 수행하였고, 특히 분리 공정 시 몰드의 경사도에 의하여 상기 발현 가능성이 증가할 수 있는 위치에 대해 정성적인 분석을 수행하였다. 유한 요소 해석을 수행하기 위한 기본적인 폴리머의 물성 데이터는 Hirai²⁾를 참조하였다.

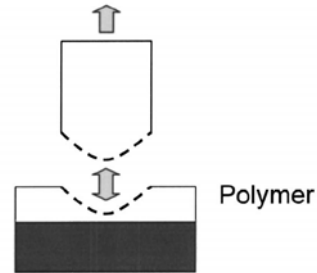


Fig. 1 Fracture defect

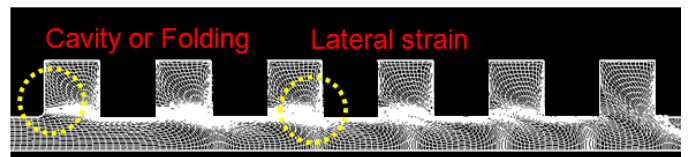


Fig. 2 Polymer flow during filling process

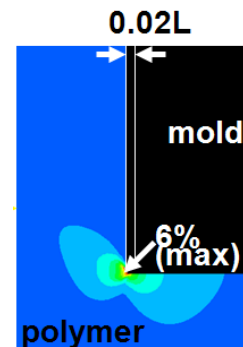


Fig. 3 Strain distribution due to thermal shrinkage

3. 분리 공정의 시뮬레이션

3.1 몰드와 폴리머 경계의 마찰력

분리 공정 시 몰드와 폴리머의 경계면에서는 표면 접착 (surface adhesion)에 의한 마찰력이 작용하게 된다. 이러한 접착 마찰 이론은 Pollock³⁾에 의해 제시된 바 있다. 마이크로 및 나노 스케일에서 표면 접착력은 두 물질의 경계면에서 주요한 인자이다. 두 경계면에 서로 미끌어질 때의 마찰력은 다음과 같이 표시된다.

$$F = \mu S \tag{1}$$

여기에서 F 는 마찰력, μ 는 마찰계수, 그리고 S 는 경계 접착력이며 다음과 같이 계산될 수 있다.³⁾

$$S = \left(\frac{3}{2} \pi \omega K a^3 \right)^{1/2} \tag{2}$$

ω 는 Dupre 방정식에서 정의되는 접착일(adhesion work)로서 다음의 관계식을 가진다.

$$\omega = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 \tag{3}$$

K 는 경계를 이루는 두 물질의 Young의 계수 E 와 Poisson 비와의 관계식으로 정의된다.

$$\frac{1}{K} = 0.75 \left[\frac{(1-\nu_1^2)}{E_1} + \frac{(1-\nu_2^2)}{E_2} \right] \tag{4}$$

식 (2)에서 a 는 접촉원(contact circle)로서 0.1 내지 0.01 μm 사이로 가정할 때, 접촉 응력(contact stress) σ 는 110 Mpa, 전단 응력은 49.5 Mpa로 되며, 마찰계수는 0.45가 된다.³⁾

경계 접착력 s 와 접촉 응력 σ 는 아래와 같은 관계를 만족하며, 이로써 두 경계면에서의 마찰력을 구할 수 있다.

$$\sigma = \frac{S}{\pi a^2} \tag{5}$$

3.2 해석 결과 및 고찰

분리 공정 시 몰드를 폴리머 패턴에 대하여 정확하게 수직으로 분리하지 못하는 경우에는 몰드의 경사도가 폴리머에게 비틀림 힘을 작용하게 된다. 이러한 현상은 몰드가 가요성(flexible)의 경우라면 감소할 수 있으나, 강성(rigid)의 경우라면 그 문제는 심각해질 수 있다. Fig. 4는 이러한 문제의 도식도를 나타낸다.

Fig. 5는 복수의 폴리머 패턴에서, 몰드의 경사도가 0°인 경우(a)와 1°인 경우(b)에 대한 해석 결과이다. 먼저, 0°인 경우에 폴리머 패턴의 밑부분에서 응력집중이 발생하는 사실을 확인할 수 있다. 특히 최소 응력에 비해서 최대 7배의 유효응력이 집중됨을 확인하였다. 가압 공정 및 냉각 공정 시 상기 폴리머 패턴의 밑부분에 발생한 수형 변형량에 의해 상기 부분에 파손 결함이 발생할 가능성이 잠재해 있는 상태에서, 분리 공정 시 응력집중이 가해지게 되면 파손 결함이 발생할 확률은 증가하게 된다. 이런 메커니즘으로 파손 결함의 발생원인에 대하여 설명할 수 있다. 몰드의 경사도가 1°인 경우에는 회전 중심부에서 거리가 증가하는 방향(왼쪽)으로 응력집중 현상이 심해지는 것을 확인할 수 있다. 이는 비틀림 각도가 0°인 경우에 비해서 최대 2배 가량 증가하였다. 또한, 회전 중심부에서 거리가 증가할수록 이러한 경향성은 증가하였다. 이는 파손 결함이 분리 공정 시 몰드의 경사도 및 중심부로부터의 거리에 의하여 증가할 수 있다는 사실을 보여준다. Fig. 6은 각 패턴의 위치에 대하여 집중된 응력의 크기를 보여준다. 5번 패턴은 Fig. 5의 오른쪽으로서 회전중심부이고, 1번 패턴은 가장 왼쪽의 위치이다.

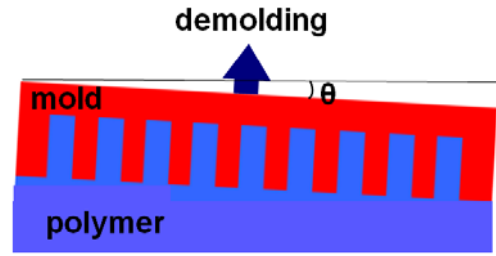


Fig. 4 Schematic diagram of inclined mold in demolding process

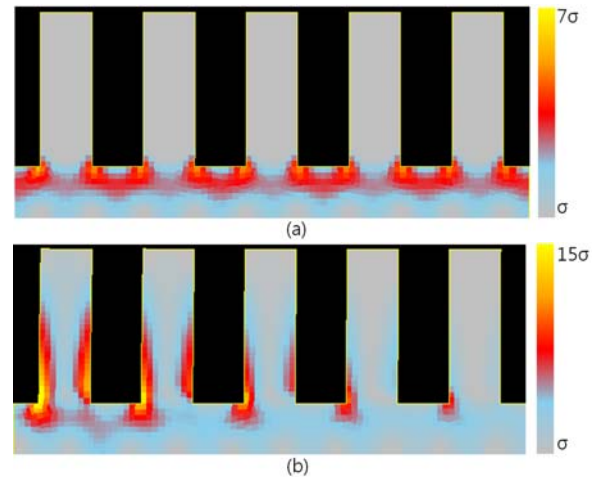


Fig. 5 effective stress distribution in multiple polymer pattern with demolding angle (a) 0° and (b) 1°

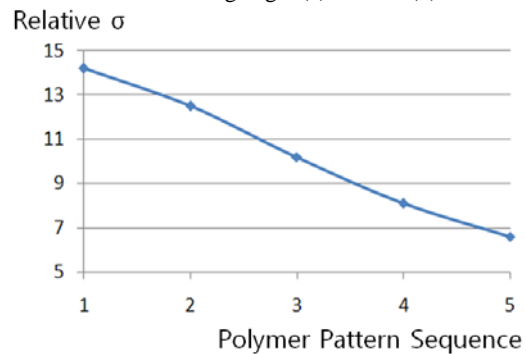


Fig. 6 effective stress in accordance with polymer pattern sequence

4. 결론

나노임프린트 리소그래피에서 폴리머 패턴의 파손 결함에 대해 해석적으로 연구를 하였다. 이 연구에서 나노임프린트 공정 동안의 가압 및 냉각 공정 시 잠재적 파손 결함 인자와 분리 공정 시 파손 결함이 발생하는 원인 및 위치에 대하여 고찰하였다. 파손 결함이 발생할 수 있는 가능성을 감소시키기 위하여는 강성(rigid) 몰드를 사용하는 경우라면 분리 공정에서 수직 위치를 제어하는 것이 중요하다.

참고문헌

1. 송남호, 손지원, 임성한, 오수익, "FEM 기반 결함 분석을 이용한 나노임프린트 공정 연구", 한국정밀공학회 2007년 춘계 학술대회 논문집
2. Y. Hirai, S. Yoshida, and N. Takagi, "Defect analysis in thermal nanoimprint lithography," J. Vac. Sci. Technol. B 21(6), 2765-2770, 2003
3. Y. Guo, G. Liu, X. Zhu, and Y. Tian, "Analysis of the demolding forces during hot embossing," Microsyst Technol 13, 411-415, 2007