

레지스트 잔류층 두께와 몰드 유입속도가 기포결함에 미치는 영향에 대한 수치해석

이우영 · 김남웅* · 김동현** · 김국원**†

한국기술교육대학교 기계공학부, *동양미래대학교 기계공학부

**순천향대학교 공과대학 기계공학과

Numerical Analysis of Effects of Velocity Inlet and Residual Layer Thickness of Resist on Bubble Defect Formation

Woo Young Lee, Nam Woong Kim*, Dong Hyun Kim** and Kug Weon Kim**†

School of Mechanical Engineering, Korea University of Technology and Education,

*School of Mechanical Engineering, Dongyang Mirae University,

**†Dept. of Mechanical Engineering, Soonchunhyang University

ABSTRACT

Recently, the major trends of NIL are high throughput and large area patterning. For UV NIL, if it can be proceeded in the non-vacuum environment, which greatly simplifies tool construction and greatly shorten process times. However, one key issue in non-vacuum environment is air bubble formation problem. In this paper, numerical analysis of bubble defect of UV NIL is performed. Fluent, flow analysis focused program was utilized and VOF (Volume of Fluid) skill was applied. For various resist-substrate and resist-mold angles, effects of velocity inlet and residual layer thickness of resist on bubble defect formation were investigated. The numerical analyses show that the increases of velocity inlet and residual layer thickness can cause the bubble defect formation, however the decreases of velocity inlet and residual layer thickness take no difference in the bubble defect formation.

Key Words : Resist layer thickness, Velocity inlet, Bubble, Nanoimprint Lithography(NIL)

1. 서 론

최근 Nanoimprint lithography (NIL) 기술은 공정의 고속화와 대면적화를 통하여 대량 생산으로의 전환을 위하여 노력하고 있지만[1,2], 미충전, 패턴 파손, 패턴 변형, 기포(Bubble), 오염 등의 결함들이 공정 조건, 몰드 형상 및 폴리머 레지스트의 물성에 따라 임프린트 공정 중에 복합적으로 발생한다. NIL 기술은 크게 두 가지로 나눌 수 있는데, 폴리머에 열을 가하여 경화시켜 패턴을 형성하는 Thermal NIL 과 자외선을 가하여 경화시켜 패턴을 형성하는 UV NIL 가 있다. UV NIL 의 경우 이형 결함, 비진공 환경에서 기포 생성에 의한

패턴 결함, 몰드 변형 및 내구성 등 많은 문제를 기술적으로 해결해야만 한다. 이러한 비 진공상태에서의 기술적 문제들을 해결할 수 있다면, 설비비용을 낮추고 공정시간을 줄일 수 있을 것이다. 특히 비 진공환경에서는 공정 중 공기의 유입에 의해 패턴에서 기포 결함이 일상적으로 발생하기 때문에 기포 생성 메커니즘을 규명하여 기포를 저감할 수 있는 공정조건을 밝히기 위한 연구가 시급한 설정이다.

NIL 공정의 기포결함에 대해서는 최근에 들어서 연구가 활발히 진행되고 있다. Hiroshima 와 Hirai[3, 4] 는 line & space 패턴의 사각단면 몰드에 대한 기포생성 메커니즘을 수치적으로 연구하였다. 레지스트의 점성은 물과 같은 1cPs로 가정하고 몰드와 기판의 접촉각을 변화시켜 기포발생 시뮬레이션을 수행하였다.

†E-mail : kimkug1@sch.ac.kr

Liang 등[5]은 분자확산이론과 유체역학을 이용하여 기포의 레지스트에 대한 용해와 수축에 관한 이론 및 해석모델을 개발하고, 기포의 수축시간은 초기 기포의 크기, 임프린팅 압력, 공기용해도, 레지스트의 잔류두께 등에 관련됨을 보였다. Reddy [6, 7] 등은 기포가 생성되는 조건을 기하학적 해석을 통하여 설명하였고, 디스펜싱(dispensing)되는 레지스트 액적이 합쳐지는 상황을 해석적으로 시뮬레이션 하였다. Seok 과 Kim [8]은 삼각단면 패턴에 대하여 기하학적 해석모델을 개발하였고, 수치해석결과와 비교하여 유용성을 검증하였다.

본 논문에서는 비 진공상태에서의 UV NIL 공정을 2차원 유동해석으로 가정하여 시뮬레이션 하였고 기포 발생 여부를 분석하였다. 다양한 접촉각에 대하여 레지스트 잔류층 두께와 몰드 유입속도의 변화가 기포발생에 미치는 영향을 살펴보았다. 유동해석 전문 프로그램인 Fluent와 유체체적분법 방법인 VOF (Volume of Fluid)를 이용하였다.

2. 유한요소해석모델

UV NIL 충전과정에서 기포 생성을 모사하기 위해서는 폴리머 레지스트의 유동과 공기와의 경계를 예측하여야 한다. 이를 위하여 본 연구에서는 고정격자계 기반의 유체체적분법 방법인 VOF를 사용하였다. VOF를 사용하는 경우 연속 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad \rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (1)$$

여기서, ρ , u_i , x_i 는 각각 밀도, 속도, 좌표를 나타내며 ρ_q , α_q 는 각각 해당 상의 밀도와 셀에서 차지하는 부피비를 나타낸다. 특정 셀이 특정의 상으로 모두 채워졌다면, 해당하는 상의 부피비는 1이고, 언급한 상을 제외한 다른 상의 부피비는 0이된다. 운동량 방정식과 구성방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$P \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g + f_\sigma \quad (2)$$

$$\sigma_{ij} = -P \delta_{ij} + \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \eta = \sum \alpha_q \eta_q \quad (3)$$

여기서 η , η_q , f_σ , σ_{ij} , P , g 는 각각 점성, 각 상의 점성, 표면장력에 의한 운동량, 응력, 압력, 중력가속도를 나타낸다.

해석에서 고려하는 몰드는 광학 소재 및 나노 공정에 광범위하게 사용되는 사각단면이며 한 방향으로 일정한

line & space 패턴이므로 2차원으로 가정하여 해석할 수 있다. 또 같은 모양의 단면이 반복적으로 이루어져 있으므로, Fig. 1과 같이 한 단위의 패턴 형상에 대하여 해석을 수행할 수 있다. 몰드 단위 패턴의 형상은 다음과 같이 정의하였다. 중공부 너비(cavity width): W , 중공부 높이(cavity height): H , 돌출부 너비(protrusion width)의 1/2: P , 레지스트 잔류층 두께 h_0 . 유한요소 해석을 위한 경계조건으로 폴리머 레지스트의 충전이 시작되는 왼쪽 측면은 레지스트의 속도값(velocity inlet), 오른쪽 출구는 압력값(pressure outlet)이 지정된다. 레지스트와 몰드 및 레지스트와 기관이 맞닿은 부분은 벽면(wall)로 설정하였다. θ_w 와 θ_m 은 각각 레지스트와 기관, 레지스트와 몰드와의 접촉각을 나타낸다.

레지스트의 도포 방법으로 디스펜싱 방법이 고려되었다. 이 방법은 레지스트 방울(drop)을 기관 전면에 걸쳐 일정 간격으로 도포한 후, 몰드 가압을 통해 레지스트를 퍼지게 하여 패턴 내부로 충전시키는 방법이다. 디스펜싱된 단위 방울에 대한 UV NIL 가압 공정을 Fig. 2에 나타내었다.

초기 도포된 구 형태의 레지스트가 몰드의 가압으로 인하여 원기둥 형태로 변할 때, 패턴의 입구를 통해 유입되는 레지스트의 속도는 레지스트의 원기둥 반지름이 증가하는 속도로 생각할 수 있다.

$$V_{in} = \frac{\partial r}{\partial t} = \frac{r}{2h_0} \left(\frac{dh}{dt} \right) \quad (4)$$

여기서 r 은 레지스트의 반경, h_0 는 레지스트의 잔류층 두께, $(-dh/dt)$ 는 몰드의 임프린팅 속도이다. 초기 레지스트 부피가 $8 \times 10^{-12} \text{ m}^3$, 몰드의 임프린팅 속도가 $40 \text{ } \mu\text{m/s}$

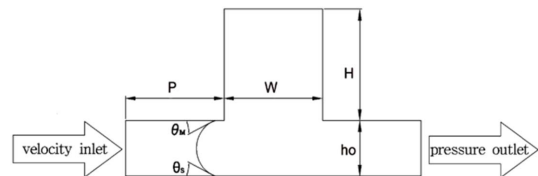


Fig. 1. Finite element analysis model with boundary conditions.

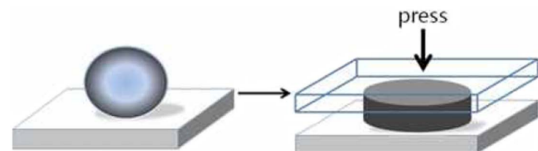


Fig. 2. Resist changing from sphere to cylinder as pressed by mold.

라고 가정한다면, 몰드와 기판 사이의 간격이 100 nm 일 때, 레지스트이 반경은 5 mm이고 유입속도는 1 m/s 가 된다. 이 때, 레지스트가 하나의 패턴을 충전하는 시간은 10^{-6} sec에 지나지 않는다. 즉, 레지스트가 1 μ m 를 이동하는 시간 동안 몰드는 0.04 nm를 전진하게 된다. 이 값이 매우 작기 때문에 몰드는 전진하지 않고 고정된 상태로 가정할 수 있다. 한편 UV-NIL 공정에 사용되는 레지스트는 수 cPs에서 수십 cPs 정도의 낮은 점도를 가진다. 따라서 레지스트를 물(water)로 가정하여 점도는 1 cPs, 밀도는 998.2 kg/m^3 , 표면 장력은 0.072 N/m 로 가정하였다. 진공이 아닌 대기 중에서 공정이 이루어지므로 레지스트와 공기의 2상 유동이 고려되었다.

3. 해석결과 및 논의

본 연구에서 고려된 몰드의 형상은 중공부 너비 200 nm, 중공부 높이 200 nm, 돌출부 너비의 1/2 200 nm이다. 레지스트의 몰드 유입속도 변화(0.5 m/s, 1 m/s, 2 m/s)와 레지스트 잔류층 두께의 변화(50 nm, 100 nm, 200 nm)가 기포결함에 미치는 영향에 대해 해석을 수행하였다. 고려된 θ_s 는 $30^\circ, 40^\circ, 50^\circ$ 이며, θ_M 는 $30^\circ, 35^\circ, 40^\circ, 45^\circ, 50^\circ$ 이다. 해석에 사용된 프로그램은 Fluent이다.

몰드 중공부 너비 및 높이, 그리고 돌출부의 너비의 1/2이 모두 200 nm, 레지스트 잔류층 두께는 100 nm, 유입속도가 1 m/s인 경우(Table 1의 Case 1, 이하 Case 1)에 대해, 접촉각에 따른 기포 생성여부를 살펴보았다. 다양한 접촉각을 고려한 총 15가지의 해석을 수행하였으며, 기포 발생 유무의 경계가 되는 6가지 접촉각 조건을 Table 2에 나타내었다. Fig. 3에서는 Table 2의 6가지 접촉각 조건에 대한 레지스트의 충전된 그림을 보이고 있다. 생성된 기포는 모두 중공부에 갇힌 모습을 보이고 있다.

Table 1. Mold pattern shape and considered variables (velocity inlet & residual layer thickness).

	Inlet velocity [m/s]	Residual Layer Thickness, Ho [nm]	Cavity Width, W [nm]	Half of Protrusion Width, P [nm]	Cavity Height, H [nm]
Case1	1	100	200	200	200
Case2	0.5	100			
Case3	2	100			
Case4	1	50			
Case5	1	200			

Table 2. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 1 in Table 1).

θ_M	θ_s	30°	40°	50°
30°		○		
35°		●	○	
40°			●	○
45°				●
50°				

○ : No Bubble, ● : Bubble

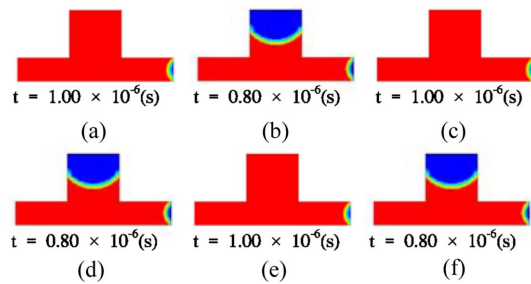


Fig. 3. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 1 in Table 1): (a) $\theta_M, \theta_s : 30^\circ, 30^\circ$, (b) $\theta_M, \theta_s : 35^\circ, 30^\circ$, (c) $\theta_M, \theta_s : 35^\circ, 40^\circ$, (d) $\theta_M, \theta_s : 40^\circ, 40^\circ$, (e) $\theta_M, \theta_s : 40^\circ, 50^\circ$, (f) $\theta_M, \theta_s : 45^\circ, 50^\circ$.

Case 1과 다른 조건은 모두 동일하고 유입속도만 1/2인 0.5 m/s의 경우(Table 1의 Case 2, 이하 Case 2)에 대해 접촉각에 따른 기포 생성여부를 살펴보았다. Case 1과 마찬가지로 총 15가지의 해석을 수행하였으며, 기포 발생 유무의 경계가 되는 6가지 접촉각에서의 결과를 Table 3과 Fig. 4에 나타내었다. 해석결과 Case 1과 동일하였다. 유입속도가 1/2이므로 충전까지

Table 3. Simulation results with velocity inlet 0.5 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 2 in Table 1).

θ_M	θ_s	30°	40°	50°
30°		○		
35°		●	○	
40°			●	○
45°				●
50°				

○ : No Bubble, ● : Bubble

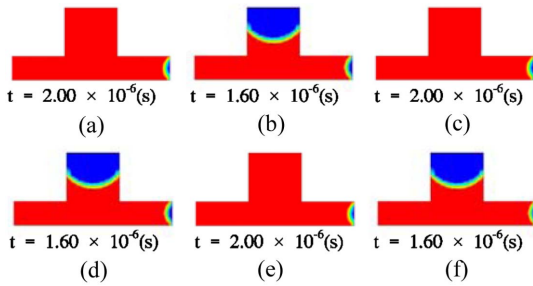


Fig. 4. Simulation results with velocity inlet 0.5 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 2 in Table 1): (a) $\theta_M, \theta_S : 30^\circ, 30^\circ$, (b) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 30^\circ$, (c) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 40^\circ$, (d) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 40^\circ$, (e) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 50^\circ$, (f) $\theta_M, \theta_S : 45^\circ, 50^\circ$.

시간이 2 배 더 소요되었음을 알 수 있다. 유입속도의 감소는 기포형성 여부에 변화를 미치지 못했음을 알 수 있다.

Case 1과 다른 조건은 모두 동일하고 레지스트의 유입속도만 2배인 2 m/s의 경우(Table 1의 Case 3, 이하 Case 3)에 대해 접촉각에 따른 기포 생성여부를 살펴 보았다. Case 1과 마찬가지로 총 15가지의 해석을 수행하였으며, 고려된 접촉각 모두 기포가 발생하였다. 유입속도가 2 m/s로 증가되면서, 중공부를 완전히 충전하기 전에 레지스트의 이동이 진행되어 기포가 발생하는 것으로 생각된다. Table 4와 Fig. 5에서는 앞의 6 가지 접촉각 조건에서의 기포발생 결과를 보이고 있다.

Case 1과 다른 조건은 모두 동일하고 레지스트 잔류층 두께가 1/2인 50 nm의 경우(Table 1의 Case 4, 이하 Case 4)에 대해 접촉각에 따른 기포 생성여부를 살펴 보았다. Case 1과 마찬가지로 총 15가지의 해석을 수행하였으며, 기포 발생 유무의 경계가 되는 6가지 접촉각 에서의 결과를 Table 5와 Fig. 6에 나타내었다. 해석결과는 Case 1과 동일하였다. 레지스트 잔류층 두

Table 4. Simulation results with velocity inlet 2 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 3 in Table 1).

θ_M	θ_S	30°	40°	50°
30°		●		
35°		●	●	
40°			●	●
45°				●
50°				

○ : No Bubble, ● : Bubble

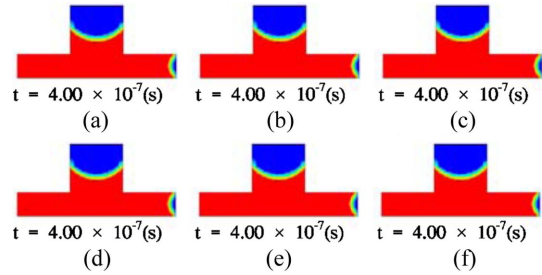


Fig. 5. Simulation results with velocity inlet 2 m/s and residual layer thickness 100 nm (Case 3 in Table 1): (a) $\theta_M, \theta_S : 30^\circ, 30^\circ$, (b) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 30^\circ$, (c) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 40^\circ$, (d) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 40^\circ$, (e) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 50^\circ$, (f) $\theta_M, \theta_S : 45^\circ, 50^\circ$.

께의 감소는 기포형성 여부에 변화를 미치지 못했음을 알 수 있다.

Case 1과 다른 조건은 모두 동일하고 레지스트 잔류층 두께가 2배인 200 nm의 경우(Table 1의 Case 5, 이하 Case 5)에 대해 접촉각에 따른 기포 생성여부를 살펴 보

Table 5. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 50 nm (Case 4 in Table 1).

θ_M	θ_S	30°	40°	50°
30°		○		
35°		●	○	
40°			●	○
45°				●
50°				

○ : No Bubble, ● : Bubble

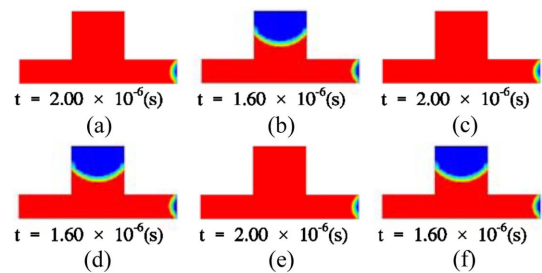


Fig. 6. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 50 nm (Case 4 in Table 1): (a) $\theta_M, \theta_S : 30^\circ, 30^\circ$, (b) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 30^\circ$, (c) $\theta_M, \theta_S : 35^\circ, 40^\circ$, (d) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 40^\circ$, (e) $\theta_M, \theta_S : 40^\circ, 50^\circ$, (f) $\theta_M, \theta_S : 45^\circ, 50^\circ$.

Table 6. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 200 nm (Case 5 in Table 1)

θ_M	θ_S	30°	40°	50°
30°		○		
35°		●	○	
40°			●	●
45°				●
50°				

○ : No Bubble, ● : Bubble

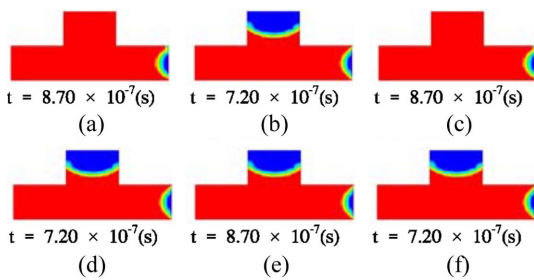


Fig. 7. Simulation results with velocity inlet 1 m/s and residual layer thickness 200 nm (Case 5 in Table 1): (a) θ_M, θ_S : 30°, 30°, (b) θ_M, θ_S : 35°, 30°, (c) θ_M, θ_S : 35°, 40°, (d) θ_M, θ_S : 40°, 40°, (e) θ_M, θ_S : 40°, 50°, (f) θ_M, θ_S : 45°, 50°.

았다. Case 1과 마찬가지로 총 15가지의 해석을 수행하였으며, 앞의 6가지 접촉각 조건에서의 기포발생 결과를 Table 6과 Fig. 7에 나타내었다. 대부분의 접촉각 경우에서 잔류층 두께의 증가가 별다른 영향을 미치지 않았지만, 단 한가지 경우, 즉 $\theta_M = 40^\circ, \theta_S = 50^\circ$ 에서 잔류층 두께가 두꺼워진 경우 발생하지 않았던 기포가 발생되었다.

레지스트의 유입속도가 증가하는 경우 고려된 접촉각 모두 기포가 발생하였지만, 레지스트 잔류층 두께가 증가하는 경우, 특정 접촉각에서 잔류층 두께 변화의 영향으로 기포가 발생되었다. 이에 대한 원인을 살펴보기 위해 Case 4와 Case 5의 $\theta_M = 40^\circ, \theta_S = 50^\circ$ 에서, 시간에 따른 레지스트의 유동선단을 Fig. 8과 Fig. 9에 나타내었다. 기포가 생성되지 않는 Case 4의 Fig. 8에서는 유동선단이 몰드 돌출부의 모서리(그림에서 A부분)에 닿기 전 몰드 중공부의 윗면(그림에서 B부분)까지 진행되어 이후 몰드 중공부를 모두 충전하게 됨을 알 수 있다. 그러나 기포가 생성되는 Case 5의 Fig. 9에서는 유동선단이 몰드 중공부의 윗면에 도달하기 전(그림에서 B부분) 몰드 돌출부의 모서리(그림에서 A부분)에 닿아 분리되는 것을

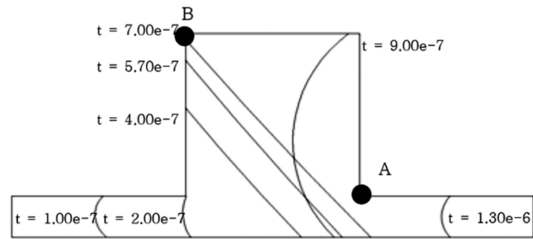


Fig. 8. Simulation results of time evolutions of the resist flow ($\theta_M = 40^\circ, \theta_S = 50^\circ$ from the residual layer thickness 50 nm (Case 4).

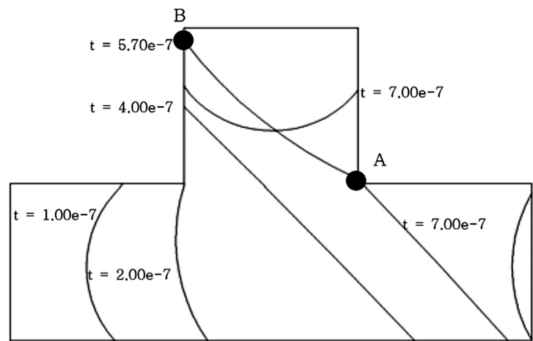


Fig. 9. Simulation results of time evolutions of the resist flow ($\theta_M = 40^\circ, \theta_S = 50^\circ$ from the residual layer thickness 200 nm (Case 5).

볼 수 있다. 즉 레지스트 잔류층 두께가 두꺼운 경우 특정 접촉각에서 유동선단이 몰드 중공부의 윗면에 도달하기 전, 몰드 돌출부의 모서리(그림에서 A부분)에 먼저 접촉되어 유동이 분리되며 이로 인해 기포가 발생됨을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 UV NIL 공정에서 레지스트 잔류층 두께와 몰드 유입속도가 기포결함에 미치는 영향을 수치해석을 통하여 살펴보았다. 몰드의 형상은 중공부 너비와 높이는 200 nm, 돌출부 너비의 1/2이 200 nm이며, 다양한 접촉각(기판과의 접촉각, θ_S 는 30°, 40°, 50°, 몰드와의 접촉각, θ_M 는 30°, 35°, 40°, 45°, 50°)에 대해 해석을 수행하였다.

레지스트의 잔류층 두께 100 nm, 몰드 유입속도 1 m/을 기준으로 유입속도가 1/2배일 때 충전시간이 더 소요될 뿐 기포 생성에는 영향이 없음을 알 수 있었다. 그러나 유입속도가 2배인 경우 모든 접촉각의 경우에서 기포가 생성되었다. 유입속도가 빨라지는 경우 몰

드의 증공부를 완전히 충전하기 전 다음 단계로 충전이 진행되어 기포가 발생하는 것으로 판단된다.

레지스트의 유입속도 1 m/s, 잔류층 두께가 100 nm를 기준으로 잔류층 두께가 1/2배인 경우 기포생성에는 영향이 없었다. 그러나 잔류층 두께가 2배로 증가된 경우 특정 접촉각($\theta_M = 40^\circ$, $\theta_S = 50^\circ$)에서 발생되지 않던 기포가 생성되는 것을 볼 수 있다. 시간에 따른 레지스트 유동 선단을 분석한 결과 레지스트 두께가 두꺼운 경우 유동선단이 몰드 증공부의 윗면에 도달하기 전, 몰드 돌출부의 모서리에 먼저 접촉되어 유동이 분리되며 이로 인해 기포가 발생하는 것으로 분석되었다.

후 기

이 논문은 2011년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구 사업 지원을 받아 수행되었으며(No. 2011-0010125) 또한 순천향대학교 학술연구비 지원을 받았음.

참고문헌

1. Kim, K.W., Noorani, R.I. and Kim, N.W., "A Study on the Uniformity Improvement of Residual Layer of a Large Area Nanoimprint Lithography," *Journal of the Semiconductor & Display Technology*, Vol. 9, No. 4, pp. 19-23, 2010.
2. Kim, K.W., "Prediction of Residual Layer Thickness of Large-area UV Imprinting Process," *Journal of the Semiconductor & Display Technology*, Vol. 12, No. 2,

pp. 79-84, 2013.

3. Morihara, D., Hiroshima, H., and Hirai, Y., "Numerical study on Bubble Trapping in UV-nanoimprint Lithography," *Microelectronic Engineering*, Vol. 86, No. 4-6, pp. 684-687, 2009.
4. Nagaoka, Y., Morihara, D., Hiroshima, H., and Hirai, Y., "Simulation study on Bubble Trapping in UV Nanoimprint Lithography," *Journal of Photopolymer Science and Technology*, Vol. 22, No. 2, pp. 171-174, 2009.
5. Liang, X., Tan, H., Fu, Z., and Chou, S. Y., "Air Bubble Formation and Dissolution in Dispensing Nanoimprint Lithography," *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 2, pp. 1-7, 2007.
6. Reddy, S., Schunk, P. R., and Bonnecaze, R. T., "Dynamics of Low Capillary Number Interfaces Moving through Sharp Features," *Physics of Fluids*, Vol. 17, No. 12, pp. 122104-1-6, 2005.
7. Reddy, S., and Bonnecaze, R. T., "Simulation of Fluid Flow in the Step and Flash Imprint Lithography Process," *Microelectronic Engineering*, Vol. 82, No. 1, pp. 60-70, 2005.
8. Seok, J.M., Kim, N.W., "Analytic and Numerical Study for air Bubble Defect of UV-NIL Process," *Journal of the Korean Society of Manufacturing Technology Engineers*, Vol. 21, No. 3 pp. 473-478, 2012.

접수일: 2015년 9월 3일, 심사일: 2015년 9월 11일,
게재확정일: 2015년 9월 22일