

# 常温纳米压印软模具变形机理研究

兰红波<sup>①②\*</sup>, 丁玉成<sup>①</sup>, 刘红忠<sup>①</sup>, 阙艳荣<sup>①</sup>, 陶巍巍<sup>①</sup>, 李寒松<sup>①</sup>, 卢秉恒<sup>①</sup>

① 西安交通大学机械制造系统工程国家重点实验室, 西安 710049;

② 山东大学机械工程学院, 济南 250061

\* E-mail: [hblan@sdu.edu.cn](mailto:hblan@sdu.edu.cn)

收稿日期: 2007-09-26; 接受日期: 2008-01-16

国家重点基础研究发展计划(“973 计划”)(批准号: 2003CB716203)、国家自然科学基金(批准号: 50775176)和山东省自然科学基金(批准号: Y2007F49)资助项目

**摘要** 通过对软模具变形的理论分析、数值模拟和实验验证的系统研究, 以期揭示模具变形的机理、规律和关键影响因素, 为探索减小模具变形策略和方法, 提高纳米压印复型精度奠定理论基础, 以实现高保真度纳米或亚纳米图型的转移.

**关键词**

纳米压印  
软模具  
变形  
抗蚀剂减薄  
复型精度  
数值模拟

纳米压印光刻(nanoimprint lithography, NIL)是一种全新的纳米图形复制方法<sup>[1]</sup>, 它采用传统的模具微复型方法来代替包含光学、化学及光化学反应机理的传统复杂光学光刻, 避免了对特殊曝光光源、高精度聚集系统、极短波长透镜系统以及抗蚀剂分辨率受光半波长效应的限制和要求, 目前压印的最小特征尺寸可以达到 5 nm<sup>[2]</sup>. 现有的主流纳米压印光刻技术主要以普林斯顿大学的热压印(HE-IL)<sup>[3]</sup>、德州大学的紫外压印(UV-NIL)<sup>[4]</sup>和哈佛大学微接触印刷( $\mu$ CP)为代表<sup>[5]</sup>, 其中 UV-NIL 被认为是目前最具有应用前景的一种工艺<sup>[6]</sup>. NIL 用的模具按照材料硬度可分为硬模具和软模具. 硬模具已经被广泛应用于热压印和紫外压印. 在压印过程中变形量小, 使用寿命较长. 但是硬模具材料的表面能高, 与固化后的抗蚀剂表面能相近, 容易发生粘连, 不易脱模. 严重影响压印图型的质量, 并对模具造成一定的破坏. 另外, 由于硅片表面和硬模具表面之间存在的平行度误差和平度公差问题, 导致硬模具与硅片表面之间的接触效

果较差, 限制了图型转换的有效面积. 尽管在实际使用硬模具进行压印图型时, 可以采用多层抗蚀剂技术消除硅片表面平面度公差问题, 但是平行度误差和硬模具表面的平面度公差问题却难以解决. 软模具与硬模具相比, 其最大优势在于模具材料具有一定的弹性, 模具的弹性可以很好适应基板的姿态, 增大压印区域面积, 具有在整个硅片上实现压印的能力, 提高压印效率, 满足大面积纳米压印工艺的要求. 其次, 压印压力小, 表面能低易于脱模, 不易与抗蚀剂粘连, 并可克服抗蚀剂颗粒缺陷, 减少了特征图型的缺陷率, 这是硬模具无法比拟的优点. 但是软模具的弹性也导致了压印过程中的模具易于变形的问題, 此变形一方面可能导致图型转移的失败; 另一方面, 它是制约纳米压印复型精度提高的关键要素. 本文通过对软模具变形的理论分析、数值模拟和实验验证的系统研究, 以期揭示模具变形的机理、规律和关键影响因素, 为探索减小软模具变形策略和方法, 提高纳米压印复型精度奠定理论基础, 以期实现高保真

度纳米或亚纳米特征图型的转移。

## 1 理论分析

对于常温纳米压印工艺, 模具图型转移是通过模具下压导致抗蚀剂流动并填充到模具表面特征图型中; 随后增大模具下压载荷致使抗蚀剂减薄, 在抗蚀剂减薄过程中下压载荷恒定; 当抗蚀剂减薄到后续工艺允许范围内(设定的留膜厚度)停止模具下压并固化抗蚀剂。在加载过程中由于存在外力作用将导致模具产生变形, 进而影响复型质量和精度。模具变形主要受加载载荷和抗蚀剂流动的双重影响。NIL 工艺过程通常被划分为: 模具与抗蚀剂的接触、抗蚀剂向模具沟槽内部填充和抗蚀剂减薄三个阶段。模具与抗蚀剂的接触和抗蚀剂填充阶段模具的变形较小, 模具的变形主要发生在抗蚀剂减薄阶段。抗蚀剂的流动填充过程就是模具特征的转移过程, 抗蚀剂填充模具的好坏关系着最后的压印结果并且对压印工艺生产能力起决定性作用。不完全的填充对最终压印结果很不利, 一旦填充的不完全度超过一定的界限, 就会导致最后的压印图型不合格, 影响产品质量。填充工艺的优化就是为了获得最大的抗蚀剂填充高度和最小的留膜厚度, 但一般两者很难同时满足。抗蚀剂减薄过程中的流动形态直接影响模具的下压速度和加载载荷的大小(抗蚀剂减薄过程需要的压印载荷最大), 以及模具变形量的大小。本节将从理论上分析压印加载过程中加载载荷、抗蚀剂流动速度、模具下压速度及下压时间等参数之间的数学关系, 确定抗蚀剂流动对模具表面的影响, 并对抗蚀剂减薄过程中模具受到的摩擦力进行分析。

在模具下压过程中, 抗蚀剂流动分两个过程: 抗蚀剂向模具沟槽内部填充过程和抗蚀剂减薄过程。在这两个过程中抗蚀剂的流动形态, 特别是抗蚀剂减薄过程中的流动形态直接影响模具的下压速度和加载载荷的大小, 以及模具变形量的大小。必须准确的描述抗蚀剂在加载载荷下的流动方式。根据模具表面特征图型的形态和占空比, 抗蚀剂向模具表面特征图型内部的填充过程, 可分为几种不同的状态: 单个图型极小占空比、多个图型极小占空比、多个图型小占空比、多个图型大占空比、平面模具(100%占空比)<sup>[7]</sup>。当模具下压并开始接触抗蚀剂时, 抗蚀剂受

压流动, 模具表面图型占空比越小, 模具所受的阻力就越小。当抗蚀剂完成对模具表面特征图型的填充过程, 并开始抗蚀剂减薄过程时, 可将所有模具图型情况都假定为平面模具状态。因此, 在压印图型转移过程中, 抗蚀剂填充压印模具表面特征图型, 此过程属于固体侵入液体; 抗蚀剂减薄, 此过程属于抗蚀剂在两平行板之间挤压流动过程。

模具的变形主要发生在抗蚀剂减薄阶段, 本节重点针对抗蚀剂减薄过程进行具体的分析, 假定为平面模具状态。在进行分析之前, 首先对系统作如下假设:

1) 模具相对于硅片是垂直运动, 即模具和硅片表面之间没有相对滑动;

2) 模具表面平行于硅片表面。

并对抗蚀剂作以下假设:

1) 抗蚀剂为牛顿流体, 即剪应力正比于剪应变;

2) 抗蚀剂是不可压缩的;

3) 抗蚀剂的体积力(如重力和引力)与粘性力相比, 可忽略不计, 即抗蚀剂不受附加力场的作用;

4) 抗蚀剂流动时的惯性力与粘性力相比, 可忽略不计;

5) 抗蚀剂表面张力和毛细引力忽略不计;

6) 抗蚀剂在界面上无滑动, 即抗蚀剂与模具和硅片的接触面上没有相对运动;

7) 抗蚀剂的粘度和密度保持不变, 即不计温度和压力对粘度和密度的影响。

压印图型转移前后对比图如图 1 所示。为了研究方便, 假设压印模具表面特征图型均为矩形立方体, 所有非矩形立方体, 均通过图型分解变为矩形立方体。在压印过程开始前, 压印模具, 抗蚀剂和硅片的状态如图 1(a)所示。图中  $h_0$  为抗蚀剂薄膜初始厚度,  $h_i$  为压印模具表面特征图型深度,  $S_i$  为第  $i$  个特征图型的宽度,  $W_i$  为第  $i$  个沟槽的宽度,  $S$  为压印模具横向宽度,  $L$  为压印模具纵向深度。图 1(b)为抗蚀剂固化脱模后状态。

图 2 所示为抗蚀剂填充模具表面特征图形时的受力分析图。图 2 中  $p$  为模具所受均布载荷,  $h(t)$  为此抗蚀剂剩余薄膜厚度,  $u(z)$  为抗蚀剂在  $x$  方向上的速度分量, 抗蚀剂在  $y$  和  $z$  方向上的速度分量为  $v(z)$  和  $w(z)$ , 将它们分别简写为  $u$ ,  $v$  和  $w$ 。  $\delta_x$  和  $\delta_z$  分别代表

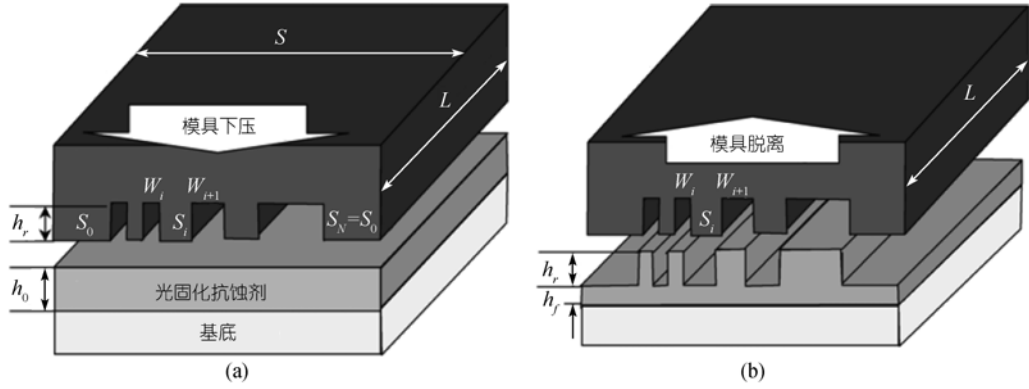


图 1 压印图型转移前后对比图

(a) 模具下压前; (b) 固化脱模后

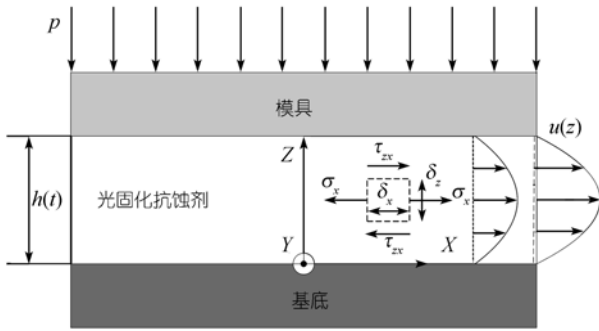


图 2 抗蚀剂减薄阶段受力分析图

单元体在  $x$  和  $z$  方向的形状畸变;  $\tau_{ij}(i, j=x, y, z)$  是剪应力,  $\sigma_i(i=x, y, z)$  是正应力在  $x, y$  和  $z$  方向上的分量。

在模具下方任一侧, 取一个抗蚀剂单元体进行受力分析。坐标原点取在硅片上, 位于模具中心正下方, 如图 2 所示。由流体力学 Navier-Stokes 公式可推导出载荷  $F$  与模具下压速度的关系(具体推导请参见文献[8~10]), 此时将抗蚀剂流动简化为两平行板间压力流动, 其所需压印载荷为

$$F = \frac{3k\eta LS^3}{4(h(t))^3} \frac{dh(t)}{dt}, \quad (1)$$

式中  $F$  为所需载荷,  $k$  为模具表面系数, 由实验结果推算得到。

抗蚀剂流动对模具表面产生的总摩擦力为

$$\begin{cases} F_x = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} \tau_{zx} \Big|_{z=h(t)} dx dy = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} -\frac{6\eta x}{h(t)^2} \frac{dh(t)}{dt} dx dy, \\ F_y = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} \tau_{zy} \Big|_{z=h(t)} dx dy = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} -\frac{6\eta y}{h(t)^2} \frac{dh(t)}{dt} dx dy. \end{cases} \quad (2)$$

式中  $F_x$  和  $F_y$  分别为  $x$  方向和  $y$  方向的摩擦力总和, 可以看出, 对于中心对称图形, 其摩擦力总和为 0。

抗蚀剂薄膜厚度由初始值减薄到  $h(t)$  所需时间为 [11]

$$t \approx \frac{\eta S^2}{2P_{eff}} \left( \frac{1}{h^2(t)} - \frac{1}{h_0^2} \right), \quad (3)$$

式中  $P_{eff}$  为有效压强, 其表达式为

$$P_{eff} = \frac{F}{kSL}, \quad (4)$$

通过压印实验确定模具表面系数  $k=0.79$ 。

在确定了  $k$  值后, 就确定了加载载荷和模具下压速度之间的关系, 同时也确定了抗蚀剂流动对模具表面的影响, 以及模具加载所需时间, 即

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{4(h(t))^3 F}{3 \times 0.79 \times \eta L^4}, \quad (5)$$

$$\begin{cases} F_x = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} \tau_{zx} \Big|_{z=h(t)} dx dy = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} -\frac{8x h(t) F}{0.79 L^4} dx dy, \\ F_y = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} \tau_{zy} \Big|_{z=h(t)} dx dy = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{S}{2}}^{\frac{S}{2}} -\frac{8y h(t) F}{0.79 L^4} dx dy, \end{cases} \quad (6)$$

$$t \approx \frac{0.79 \eta L^4}{2F} \left( \frac{1}{h^2(t)} - \frac{1}{h_0^2} \right). \quad (7)$$

基于以上抗蚀剂减薄阶段受力分析, 得到以下结论。

1) 压印加载载荷  $F$  与抗蚀剂作用在模具表面上的摩擦力成一阶线性正比例关系, 即压印加载载荷  $F$

增大直接导致抗蚀剂对模具表面的摩擦力增大。

- 2) 抗蚀剂对模具表面产生的摩擦力在模具图形中心为 0, 并向四周二阶增大。
- 3) 抗蚀剂流动速度在模具图形中心为 0, 并向四周等比例一阶线性增大, 在任意(x, y)位置处, 流动速度沿抗蚀剂薄膜厚度方向按二次曲线分布。
- 4) 抗蚀剂所受压力在模具图形中心达到最大, 并向四周按抛物线规律减小, 在模具边缘减小到 0。
- 5) 抗蚀剂对中心对称图形产生的摩擦力不会造成模具在下压过程中产生整体平移, 即模具不会与硅片发生相对滑动。

2 数值模拟

2.1 PDMS 软模具的建模

PDMS 软模具的材料是硅橡胶, 它是橡胶的一种。描述橡胶弹性变形的基本理论主要有两类: 一类是分子统计方法的高斯链网络交联橡胶的弹性理论, 适用于材料小变形的情况; 另一类是基于唯象理论的宏观弹性理论, 适用于材料大变形的情况。由于在压印过程中, 软模具在压印力的作用下将发生大变形, 因此, 软模具压印受力分析采用宏观弹性理论。

宏观弹性理论基于唯象理论, 它有以下假设:

- (i) 弹性体的形变是均匀纯变形, 是各向同性的;
- (ii) 橡胶是不可压缩的, 形变时体积不变。

硅橡胶软模具满足此假设要求, 基于宏观弹性理论橡胶的 Mooney-Rivlin 模型, 可以推得

$$\frac{\sigma}{2(\lambda - \lambda^{-2})} = C_1 + C_2\lambda^{-1}. \tag{8}$$

公式(8)就是常用的两参数橡胶 Mooney-Rivlin 模型公式, 它常用来模拟橡胶的力学性能, 本文采用该模型进行软模具的受力分析。(8)式中,  $C_1$  和  $C_2$  是材料常数。

通常 Mooney-Rivlin 常数在一般的文献中查不到, 原因在于对于不同的材料, 其值都不尽相同, 确定它的办法一般有两种: 1) 利用橡胶材料的经验公式; 2)

通过工程实验数据计算得到。第一种方法属于经验公式, 准确性很难保证, 而第二种方法材料常数的确定的依据是实际的工程实验数据, 因此由该方法得到的数据较好的反映了硅橡胶材料的属性, 在分析中我们采用第二种方法确定软模具材料常数。通过压缩实验得到  $C_1=0.62748$  MP 和  $C_2=0.1056$  MP<sup>[8]</sup>。

2.2 PDMS 软模具变形仿真分析

2.2.1 仿真建模

1) 创建几何模型与定义材料参数

软模具的尺寸 20 mm×20 mm×2 mm, 它与厚度为 5 mm 的石英背衬粘接在一起, 压印时压印力主要作用于石英背衬上。硅片尺寸为半径 50 mm, 厚度 0.5 mm。几何模型包括石英、软模具和硅片。为了研究的方便, 几何模型做了如下简化: 1) 由于特征尺寸相对于软模具整体尺寸很小, 它对软模具的宏观弹性变形影响很小, 将其忽略; 2) 硅片材料的弹性模量和泊松比分别为  $1.5\times10^5$  MPa 和 0.28, 石英材料具体参数如表 1 所示设置。

2) 单元选择与网格划分

软模具属于超弹性材料, 且严格对称, 采用 HYPER58, 以四方体进行网格划分; 石英和硅片采用 SOLIDE 四方体进行单元划分, 下部为软模具, 其网格较密, 如图 3(a)所示。

3) 施加载荷与约束

图 4 是理想条件下软模具的受力图。由于将抗蚀剂隔离进行分析, 但抗蚀剂作用在模具上的剪切作用不能忽视。前面已经推导过作用在模具与抗蚀剂接触面上的摩擦力的具体数值计算公式, 在有限元分析中, 我们将摩擦力加载在模具接触面上的网格节点上。在具体计算时, 运用前面推导的公式(6), 将每个网格作为一个积分的区间, 分别计算作用在节点上的沿 x 方向和 y 方向的摩擦力。也就是说将作用在每个网格平面上的力加载在网格的节点上。如

表 1 石英材料参数

| 密度/g·cm <sup>-3</sup> | 弹性模量/MPa            | 抗压强度/MPa            | 泊松比  | 抗拉强度/MPa | 抗剪强度/MPa |
|-----------------------|---------------------|---------------------|------|----------|----------|
| 2.1                   | 7.0×10 <sup>4</sup> | 1.8×10 <sup>4</sup> | 0.15 | 70       | 70       |

注: 摘自中国建材院玻璃科学与特种玻璃纤维研究所材料参数表

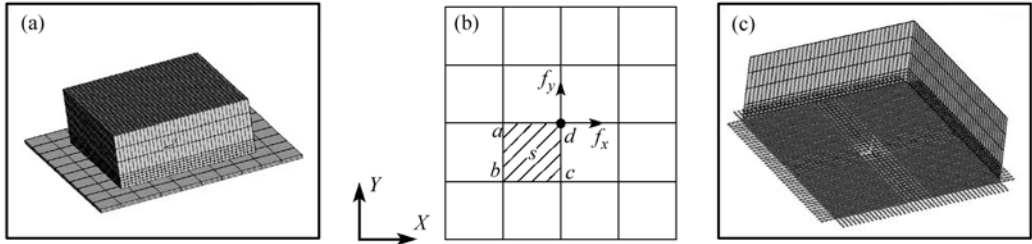


图3 接触面上摩擦力的加载

(a) 有限元网格模型; (b) 在节点上加载摩擦力; (c) 接触面加载后的示意图

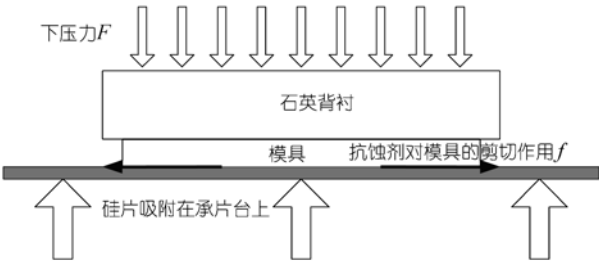


图4 理想下压条件下模具受力简图

图3(b)所示, 作用在网格平面 $abcd$ 上的摩擦力加载在节点 $d$ 上. 这样, 作用在整个接触面上的力就被分散在面上的各个节点上. 接触面上摩擦力的加载如图3(c)所示.

**2.2.2 模具宏观变形模拟.** 压印过程模具的宏观变形数值模拟是对模具的整体受力与变形进行研究(压印过程中模具下压面微特征变形的集聚表现为其整体变形), 影响模具宏观变形的关键因素主要包括: 压印力、摩擦系数、模具材料厚度和不平度. 本节主要开展这些因素对模具变形产生的影响进行分析.

(I) 压印力对模具变形的影响

在压印力分别为 5, 10, 25 和 50 N 条件下对模具宏观弹性变形进行分析, 其变形与应力分析如图显示在以上4个压印力条件下模具与石英背衬的变形与应力呈现特定的规律性, 模具变形及其上节点的应力值分布规律在一定范围内与压印力无关, 但节点变形值与应力值存在显著的正比关系. 图5给出了压印力与模具节点最大变形率关系曲线, 图6是不同压印力条件下的模具下压面中线节点综合变形曲线.

通过不同压印力对软模具变形有限元受力分析, 得出以下结论.

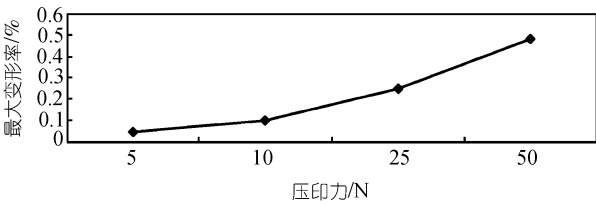


图5 压印力与模具节点最大变形率关系曲线

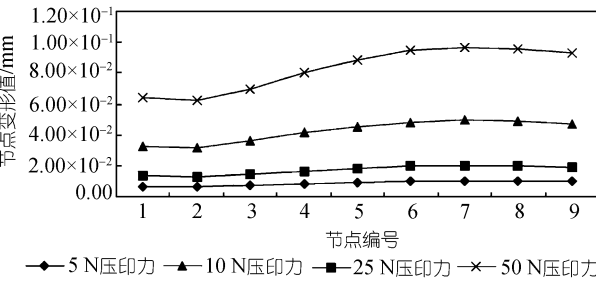


图6 不同压印力条件下的模具下压面中线节点综合变形曲线

1) 压印力的增加将直接导致模具各节点综合变形值的增大与最大变形率的增加; 压印过程中变形最小的区域位于模具的中心位置, 沿中心方向向外节点变形值逐渐增加. 因此, 为使压印过程处于控制之中我们需要适当安排模具下压面的微特征图案排列, 以达到最高的压印复型效率, 即如果在一个 PDMS 模具上要放置不同 CD 的图型, 最好将 CD 越小的图型放置在越靠近模具中心的位置.

2) 压印过程中的最大应力发生在石英背衬与模具粘结面的四个直角处. 由于边界效应等因素的原因, PDMS 模具在靠近模具边缘区域的变形量急剧增大, 不符合整体变形规律, 致使模具上这部分区域有可能无法参与图型转移.

3) 模具上相同位置在不同压印载荷作用下的变

形变化趋势是相同的。

4) 模具下压面与接触面之间的摩擦力是压印过程中影响模具变形的重要因素, 接触面的摩擦力直接对压印过程中的模具特征变形和受力产生作用。

(II) 压印面摩擦力(系数)对模具变形的影响

实际压印过程中接触面摩擦力的产生主要来源于: 阻蚀胶为粘弹性材料; 模具下压面微特征阻蚀胶填充变形的相互作用; 模具压印整体变形。

通过建立 8 个不同磨擦系数的接触分析模型对压印过程中摩擦系数与模具变形关系进行研究, 压印力取 10 N, 磨擦系数序列如表 2 所示。

表 2 有限元分析摩擦系数列表

| 序列   | 1 | 2    | 3   | 4   | 5   | 6   | 7   | 8   |
|------|---|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 摩擦系数 | 0 | 0.05 | 0.1 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.5 | 0.6 |

图 7 和图 8 分别展示了最大变形率与摩擦系数关系曲线图和下压面关键节点变形与摩擦系数关系曲线图。

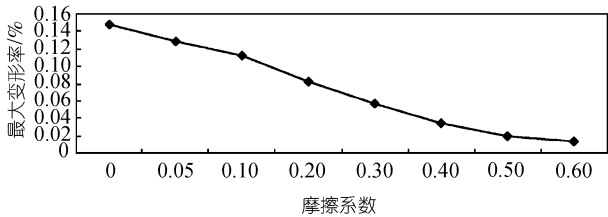


图 7 最大变形率与摩擦系数关系曲线图

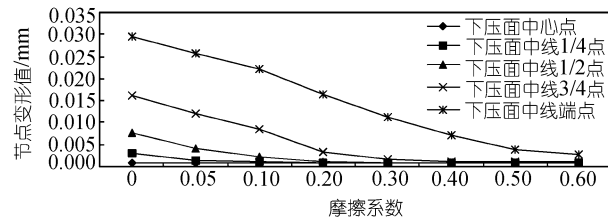


图 8 下压面关键节点变形与摩擦系数关系曲线图

通过摩擦系数与模具变形关系的研究, 得到以下结论。

1) 在模具压印变形分析中, 摩擦系数是一个关键因素, 它的有无与具体数值的大小对模具变形将产生至关重要的影响; 摩擦系数的增大直接导致同一压印力与相关参数条件下模具变形值与最大变形率的减小。

2) 摩擦系数与模具关键节点的压印变形规律并无显著影响, 最大变形值与最小变形值以及其它关键节点的变形基本规律并未因磨擦系数变化而发生转移。

(III) PDMS 模具材料厚度对模具变形的影响

模具与石英背衬粘结后进行压印, 压印过程中软模具材料厚度不同会引起不同的变形量, 从而导致压印复型效果的差异。本节对模具厚度为 2, 1 和 0.5 mm 条件下的模具最大变形值和变形规律进行分析。从有限元分析结果中导出节点综合变形值, 发现在压印力均为 10 N 的情况下, 模具厚度  $h$  越大, 模具上对应同一节点的变形量也越大。当软模具厚度为 2 mm 时, 模具的轴向变形最大压缩量为 15  $\mu\text{m}$ , 径向变形最大为 28  $\mu\text{m}$ ; 当软模具厚度为 1 mm 时, 模具的轴向变形最大压缩量为 7  $\mu\text{m}$ , 径向变形最大为 12  $\mu\text{m}$ ; 而当软模具厚度为 0.5 mm 时, 模具的轴向变形最大压缩量为 3  $\mu\text{m}$ , 径向变形最大为 5  $\mu\text{m}$ 。有限元分析结果显示, 在压印力及其它相关参数固定条件下, 模具的变形值随着模具厚度的增加而增加。当模具厚度大于 2 mm 时模具在压印过程中的变形过大, 故模具厚度的取值不宜大于此值; 当模具厚度小于 0.5 mm 时, 模具上节点的变形值并无进一步减小的趋势, 而厚度的进一步减小给模具制作与粘结等工艺带来诸多挑战。综合考虑, 在压印过程中模具的厚度应根据压印图案特征的要求在 0.5~1 mm 之间选择。

(IV) 模具平行度误差对其变形的影响

普通硅片在 20 mm×20 mm 的范围内表面不平度误差最大值为 210 nm 左右; PDMS 模具表面平面度误差为 200 nm 左右; 模具与硅片之间的平行度误差最佳状态可以调整到不大于 1  $\mu\text{m}$ 。实际中模具与硅片不平行时的不平度有时 would 达到 10  $\mu\text{m}$  左右。分别建立 1 和 10  $\mu\text{m}$  的模型, 分析相同的压印力下, 平行度误差对模具变形的影响。在 40 N 的压印力下, 模具接触面采集的各个节点的位移如图 9 所示。当平行度误差分别为 1 与 10  $\mu\text{m}$  时, 模具上同一水平线上的各点都呈现了比较明显的漂移。但从数据中发现对变形起决定作用的还是压印力, 不同平行度情况下模具的变形并没有太大的差别。在保证图型复型完整性的前提下不同平行度误差对压印的影响决定于需要施加的最小压印力的值。

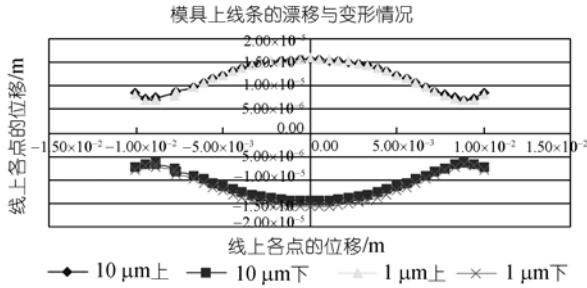


图9 不同平行度误差情况下软模具宏观变形

为了保证复型的完整, 需要知道在存在平行度误差的情况下, 至少需要多大的压印力, 才能使模具与抗蚀剂完全接触. 由于实际中模具与硅片不平行的不平度有时达到  $10\ \mu\text{m}$  左右, 而实际中平行度误差的准确数值很难检测到, 所以通过有限元仿真的办法, 建立不平度为  $10\ \mu\text{m}$  的模型, 分别施加 5, 10, 15 N 的压印力, 察看模具与抗蚀剂的接触情况. 根据仿真的结果, 5 N 的压印力下, 模具与硅片之间的间隙比较明显; 压印力增大到 10 N 时, 间隙明显减小, 但并没有完全接触上, 而且此时, 不平度对变形也产生了一定的影响; 压印力继续增大, 当增大到 15 N 时, 模具与硅片已经完全接触上, 间隙消失. 所以对于实际情况中  $10\ \mu\text{m}$  左右的平行度误差, 在保压固化阶段, 我们至少需要 15~20 N 的压印力来保证图型转移的完整性.

**2.2.3 模具微观变形模拟.** 在压印实验中发现, 随着压印力的增大, 微特征的变形越来越明显, 而压印模具在下压过程中其微特征的变形会直接影响复型图案质量. 本节将研究不同压印深度和压印力对模具微特征的影响.

#### (I) 压印力对模具微特征变形的影响

对特征微观变形情况, 采用子模型的有限元分析方法. 子模型方法又称为切割边界位移法或特定边界位移法. 它是一种得到模型部分区域中更加精确解的有限单元技术. 切割边界就是子模型从整个较粗糙的模型分割开的边界. 整体模型切割边界的计算位移值即为子模型的边界条件. 子模型基于圣维南原理, 即如果实际分布载荷被等效载荷代替以后, 应力和应变只在载荷施加的位置附近有改变. 这说明只有在载荷集中位置处才有应力集中效应, 如果子模型的位置远离应力集中位置, 则子模型内就

可以得到较精确的结果. 除了能求得模型某部分的精确解以外, 子模型方法还有以下优点: ① 它减少甚至取消了有限元实体模型中所需的复杂的传递区域; ② 它使得用户可以在感兴趣的区域就不同的设计(如不同的圆角半径)进行分析; ③ 它帮助用户证明网格划分是否足够细. 但子模型方法也存在一些限制: ① 只对体单元和壳单元有效; ② 子模型的原理要求切割边界应远离应力集中区域, 用户必须验证是否满足这个要求. 软模具上微特征的位置既不在应力集中的位置, 而且模型选择的单元类型也属于超弹性体单元, 因此选择子模型的方法是可行的. 既能够得到微观特征的变形情况, 又不必对整个模型划分那么细的网格, 大大的节省了计算的时间. 子模型分析过程包括以下步骤: (1) 生成并分析较粗糙的模型; (2) 生成子模型; (3) 提供切割边界插值; (4) 分析子模型; (5) 验证切割边界和应力集中区域的距离应足够远. 其中比较关键是第二步与第三步.

因为软模具上靠近边缘的图形变形最明显, 所以在建立粗糙模型时, 微观的特征选择在靠近边缘  $0.5\ \text{mm}$  处. 微特征的结构尺寸为  $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ , 建立 4 个微特征的微观模型. 具体如图 10 所示. 在微观模型切割边界的节点后, 读入宏观模型的分析结果, 进行切割边界差值计算, 将结果作为微观模型的边界约束条件, 再施加其他的载荷和边界条件, 指定载荷步选项, 并对子模型求解, 结果如图 11(a) 所示. 从图 11 中可以发现, 微观特征的横向结构并没有太大的变化, 只是随着压印力的增加, 会纵向弯曲变形. 进一步开展了压印实验, 实验中分别取压印载荷值为 3, 25, 50, 100, 200 N, 施加 3 和 200 N 的压印载荷, 抗蚀剂固化后用原子力显微镜扫描的结果如图 11(b) 和 (c) 所示. 实验结果显示: 随着压印载荷的提高, 抗蚀剂填充高度在逐渐降低, 同时特征图型出现明显的失真(图 11(c) 中抗蚀剂表面特征图型沟槽明显变宽, 分析原因是由于 PDMS 模具承受压印载荷后变形导致), 这表明压印力的增大会对软模具的宏观变形带来越来越明显的影响, 进而影响到微观特征在纵向上的变形. 另外压印力对模具表面特征图型的填充高度和留膜厚度也会产生比较明显的影响, 200 与 3 N 的特征高度上相差  $120\ \text{nm}$  左右.

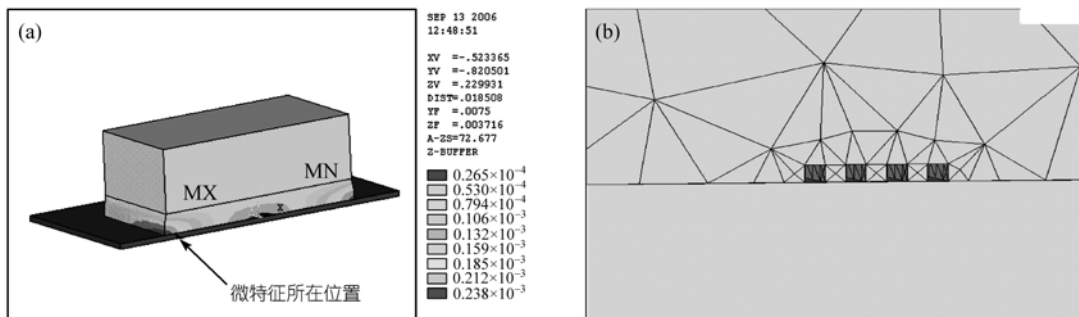


图 10 宏观模型与微观模型

(a) 宏观模型的分析结果; (b) 微观模型

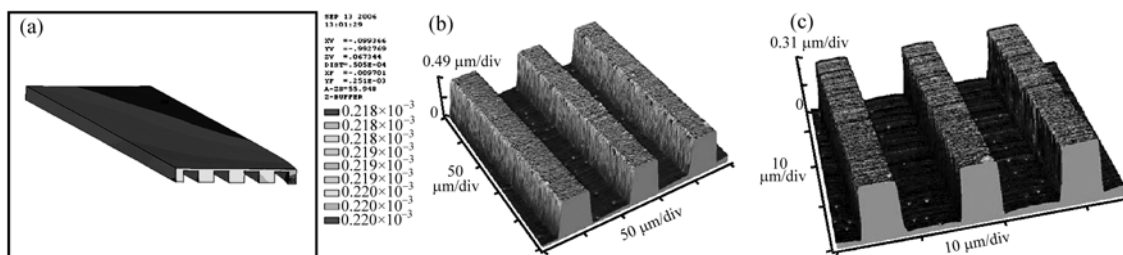


图 11 微观特征的变形情况与不同压印力下的特征图案

(a) 微观特征的变形情况; (b) 3 N 时的阻蚀胶表面形貌; (c) 200 N 时的阻蚀胶表面形貌

## (II) 压印深度对模具微特征变形的影响

由于模具实际厚度在 0.5~2 mm 间, 而模具表面微特征尺寸介于 100 nm~1  $\mu\text{m}$ , 给实际建模带来困难, 故只取微特征及其上 1  $\mu\text{m}$  模具材料建模进行分析; 同时由于分析中我们最关心微特征及其上小范围内的变形, 因此对模型加以简化, 忽略下压分析中微特征之上 1  $\mu\text{m}$  模具材料顶端的变形。

取压印复型中较为常见的 1  $\mu\text{m}$  条状微特征, 深宽比为 1. 分析中发现, 当给定模具下压位移大于 550 nm 之后分析结果便不收敛, 因此只对下压深度为 50, 100, 200, 300, 400, 500 和 550 nm 时模具与抗蚀剂层的接触下压过程进行模拟分析. 由于压印光刻实际过程受到多种因素影响, 因此在分析中作以下假设:

- 1) 下压过程处于理想可控状态, 即压印深度可以根据我们的分析需要进行纳米数量级的调整;
- 2) 忽略 20 mm 厚度的模具之上不同位置处的微特征尺寸受力及约束差异, 假定所有微特征均处于无限大平板之上;
- 3) 对模具取 50% 占空比的一个完整特征及其上

1  $\mu\text{m}$  模具材料进行分析;

4) 接触分析中由于光刻胶经过甩胶厚度约为 1  $\mu\text{m}$ , 在分析中将其视作超弹性材料依据橡胶材料相关参数进行设置。

利用有限元分析软件 ANSYS 建立 1  $\mu\text{m}$  模具微特征和与微特征下表面接触的 1  $\mu\text{m}$  胶层, 均选择超弹性材料中的 hyper56 单元. 硅橡胶模具材料特征: 磨擦系数为 0.35, 弹性模量取  $8.2 \times 10^6$  Pa, 泊松比取 0.45. 胶层材料弹性模量取  $4.0 \times 10^5$  Pa. 材料常数  $C_1$  和  $C_2$  如 3.1 节, 泊松比取 0.45, 接触面摩擦系数设置为 0.15. 建模与参数设置后进行网格划分, 并对模具特征和胶层设置接触对; 在分割后的模具特征和胶层边线施加对称约束, 对胶层下表面施加完全约束将其固定; 接触分析属于典型的非线性分析, 分析类型设置为大应变, 载荷加载时间为 4 s, 时间子步为 0.005 s, 打开 Newton-Raphson 选项和自动步长调节选项, 有限元按照修正的 Newton 迭代法进行迭代运算. 对模具微特征上表面施加 Y 方向负位移后进行分析求解. 图 12 和图 13 分别展示了模具凸出特征侧边不同压印深度时的节点变形曲线和对应不同压印深

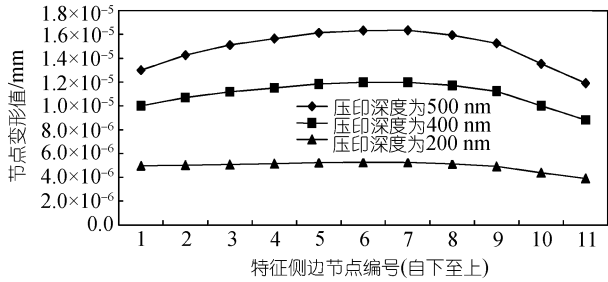


图 12 模具凸出特征侧边不同压印深度时的节点变形曲线图

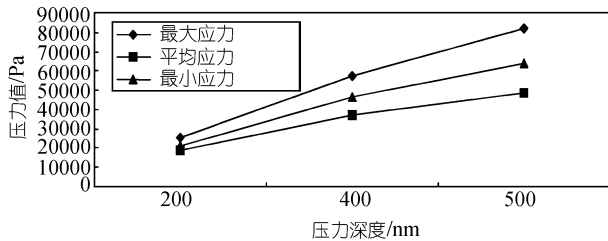


图 13 对应不同压印深度的微特征底面应力关系曲线

度的微特征底面应力关系曲线。

通过对软模具微特征在不同压印深度的接触模拟分析, 得出以下结论。

1) 压印过程中伴随着压印深度的增加, 所需压印力也将显著增加, 这对实际压印过程的实时控制具有积极意义。

2) 压印过程中软模具微特征变形量随着压印深度的增加而增大, 模具特征的侧边呈现鼓型凸出变形, 底边的两个角点呈现明显畸变; 同时抗蚀剂层的凹进并不完全与模具特征完全吻合, 而呈现出梯形式上宽下窄的渐变特征, 这与实验拍摄的压印微特征照片特点一致。

3) 压印过程中的最大应力始终出现在模具特征的底边角点与侧边拐角处, 应力集中效应可能会成为软模具多次重复压印微特征发生破损的主要原因之一。

### 3 实验验证

选择用于对准的光栅作为实验的对象, 第一是由于在光栅模具母板上分布着 3×3 共 9 个图案, 如图 14(a) 和 (b) 所示, 便于考察翻模后软模具在压印力的作用下各个区域的变形情况; 第二是因为在每一个光栅图案的四分之一区域中, 存在 30 条栅格, 如图 14(c) 所示, 而每个栅格的宽度为 5 μm, 这样一个图案的尺寸就达到 700 μm 左右, 便于变形的测量。

实验中, 分别用 20, 40, 80, 160, 200, 225 N 的压印力对模具的变形进行考察。2 区域特征图案的变形虽不及与 3 区域图案的变形, 但 2 区域随模具宏观变形而产生的特征漂移却是最大的。从各区域压印结果也发现, 只有模具中心区域的特征图案随着压印力的增大既不随模具的宏观变形产生漂移, 也不发生特征的扭曲变形。通过对中心图案特征随压印力伸长结果与有限元仿真结果比较, 考察仿真结果的可靠性。仿真计算的结果与实验结果的比较如图 15 所示。40 N 时的试验伸长量为 12.24 μm, 仿真的结果伸长量为 10.08 μm; 200 N 时的试验伸长量为 45.37 μm, 仿真的结果伸长量为 48.60 μm。考虑测量上的误差与压印过程中其他因素对变形的影响, 如工作台结构的变形等等, 仿真的结果与实验结果还是比较吻合的, 仿真的可靠性得到了很好的证明。

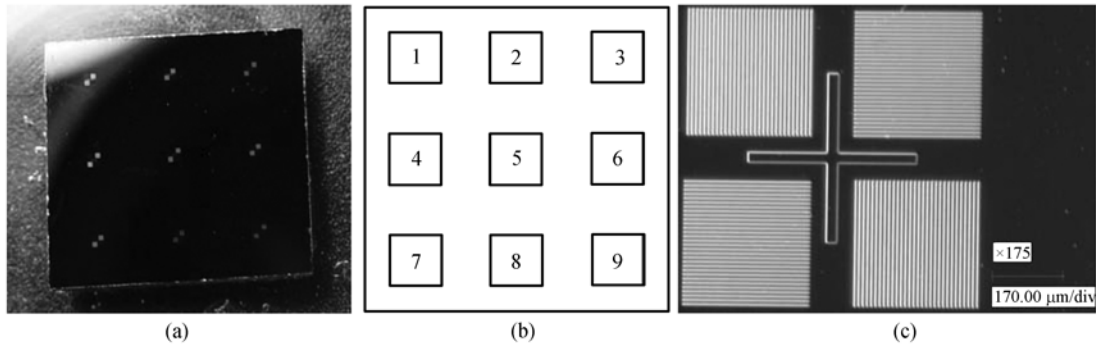


图 14 实验用的母版

(a) 光栅母板; (b) 光栅母板图型编号; (c) 母版上一个光栅的图案

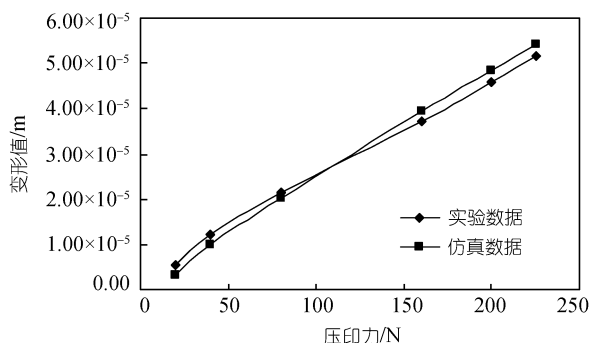


图 15 复型图案实测数据与有限元仿真结果的比较

## 4 结论

常温纳米压印软模具的变形一方面可能导致图形转移的失败; 另一方面, 它是制约纳米压印复型精度提高的关键要素. 本文通过对软模具变形的理论分析、数值模拟和实验验证的系统研究, 得到以下主要结论.

1) 压印加载载荷  $F$  与抗蚀剂作用在模具表面上的摩擦力成一阶线性正比例关系, 即压印加载载荷  $F$  增大直接导致抗蚀剂对模具表面的摩擦力增大.

2) 抗蚀剂对模具表面产生的摩擦力在模具图形中心为 0, 并向四周二阶增大. 抗蚀剂对中心对称图

形产生的摩擦力不会造成模具在下压过程中产生整体平移, 即模具不会与硅片发生相对滑动.

3) 压印力的增加将直接导致模具各节点综合变形值的增大与最大变形率的增加; 压印过程中变形最小的区域位于模具的中心位置, 沿中心方向向外节点变形值逐渐增加. 因此, 需要适当安排模具下压面的特征排列, 以期获得最高的压印复型质量.

4) 压印过程中的最大应力发生在石英背衬与模具粘结面的四个直角处. 在使用 PDMS 模具进行小 CD 图型压印转移时, PDMS 模具的边缘区域是不可使用的.

5) 摩擦系数对模具变形有着极为重要的影响; 摩擦系数的增大直接导致同一压印力与相关参数条件下模具变形值与最大变形率的减小.

6) 在压印过程中模具的厚度应根据压印图案特征的要求在 0.5~1 mm 之间选择.

7) 软模具的尺寸增大一倍, 在相同的压印力下相同尺寸的图案变形相差了近一个数量级. 对于相同的图案, 模具越大, 压印力对模具宏观变形的影响越小.

8) 本文采用有限元数值模拟的方法研究软模具变形主要是在微尺度领域, 更深入研究纳尺度软模具变形数值模拟应采用分子动力学模拟的方法.

## 参考文献

- 1 Chou S Y, Krauss P R, Renstrom P J. Imprint lithography with 25-nanometer resolution. *Science*, 1996, 272 (5258): 85—87 [DOI]
- 2 Austin M D, Ge H X, Wu W, et al. Fabrication of 5 nm linewidth and 14 nm pitch features by nanoimprint lithography. *Appl Phys Lett*, 2004, 84 (26): 5299—5031 [DOI]
- 3 Chou S Y, Krauss P R, Renstrom P J. Nanoimprint lithography. *J Vac Sci Technol B*, 1996, 14(6): 4129 [DOI]
- 4 Schmid G M, Thompson E, Stacey N, et al. Toward 22 nm for unit process process development using step and flash imprint lithography. *SPIE*, 2007, 6517: 651717 [DOI]
- 5 Xia Y, Whitesides G M. Soft Lithography. *Annu Rev Mater Sci*, 1998, 28: 153—184 [DOI]
- 6 Bender M, Fuchs A, Plachetka U, et al. Status and prospects of UV-Nanoimprint technology. *Microelectron Eng*, 2006, 83(4-9): 827—830 [DOI]
- 7 Sotomayor A. *Alternative Lithography*. Holland: Kluwer Academic Publishers, 2003, 1—19
- 8 陶巍巍. 常温软压印光刻中模具变形与复型质量研究. 硕士学位论文. 西安: 西安交通大学, 2007
- 9 李寒松. 微压印中抗蚀剂、模具及图型转移工艺研究. 博士学位论文. 西安: 西安交通大学, 2006
- 10 Otto M, Bender M, Hadam M, et al. Characterization and application of a UV-based imprint technique. *Microelectron Eng*, 2001, 57-58(9): 361—366
- 11 Heyderman L J, Schiff H, David C, et al. Flow behaviour of thin polymer films used for hot embossing lithography. *Microelectron Eng*, 2000, 54(3-4): 229—245 [DOI]