

热压印脱模工艺中摩擦系数影响的研究

张睿, 王清, 郑旭, 张金涛, 马立俊, 张艳菊, 张星远, 刘华伟

(山东科技大学 土木工程与建筑学院, 山东 青岛 266590)

摘要: 压印胶层纳米结构在热压印脱模工艺中的变形关系到纳米器件质量的高低。为了提高纳米器件的质量, 研究脱模过程中模板和压印胶之间的接触特性至关重要。采用模型优化、数值模拟和理论分析相结合的方法研究摩擦系数对胶层纳米结构受力和变形的影响, 得到摩擦系数增大时 von-Mises 应力云图和胶层纳米结构顶端变形曲线。分析应力云图可得胶层纳米结构的最大应力和变形在脱模初期随摩擦系数增大而增大, 在脱模后期随摩擦系数增大而减小, 并从压印胶受力角度对胶层纳米结构顶端变形进行解释。对比顶端变形曲线可得 Ni-PTFE 模板最佳摩擦系数为 0.20, Ni-PTFE 模板最优化 PTFE 含量为 15 g/L。通过最佳接触特性对模板进行优化可以减少胶层纳米结构变形, 提高纳米器件质量。

关键词: 热压印; 脱模; 摩擦系数; 纳米结构; 变形; 数值模拟

中图分类号: TN405

文献标志码: A

文章编号: 1672-3767(2016)03-0073-05

Effects of Friction Coefficients during Demolding in Hot Embossing

ZHANG Rui, WANG Qing, ZHENG Xu, ZHANG Jintao,
MA Lijun, ZHANG Yanju, ZHANG Xingyuan, LIU Huawei
(College of Civil Engineering and Architecture, Shandong University of
Science and Technology, Qingdao, Shandong 266590, China)

Abstract: The quality of nanoscale devices depends strongly on the deformation of nanostructures at resists layer during demolding in hot embossing. In order to improve the quality of nanoscale devices, it is crucial to study the contact behavior between the template and the resists in the demolding process. Model optimization, numerical simulation and theoretical analysis were combined to investigate the effects of friction coefficients on the stress and deformation of nanostructures at resists layer. The von Mises stress nephograms and deformation curves of the nanostructure top with the increase of friction coefficients was obtained. According to the stress nephograms, when the friction coefficient increases, the maximum stress and the deformation of nanostructure increase at the initial stage of demolding and decrease at the late stage of demolding. Then the deformation in the nanostructure top was explained in terms of the forces on resist. By comparing the deformation curves of the nanostructure top, the best friction coefficient (0.20) of Ni-PTFE template and the optimal PTFE content (15 g/L) were obtained. Optimizing the template by adjusting the contact behavior can reduce the deformation of nanostructures and improve the quality of nanoscale devices.

Key words: hot embossing; demolding; friction coefficient; nanostructure; deformation; numerical simulation

收稿日期: 2015-11-23

基金项目: 山东省“泰山学者”建设工程专项资金项目(TSHW20130956)

作者简介: 张睿(1990—), 女, 山东泰安人, 博士研究生, 主要从事功能材料与智能结构、微纳米成型与表面功能化研究。

王清(1966—), 男, 河北石家庄人, 教授, 博士生导师, 主要从事功能材料与智能结构、微纳米成型与表面功能化研究, 本文通信作者。E-mail: profqwang@163.com

纳米压印技术作为新一代主流光刻技术,以其高精度、高分辨率、低成本等优势在光学、电子学、生物学和微型机电系统(micro-electro-mechanical system, MEMS)等领域得到广泛应用^[1]。麻省理工大学的一篇评论称之为“可能改变世界的十大技术之一”^[2]。目前,应用最广泛的热压印是纳米压印的一项主流技术^[3]。与其他压印技术相比,采用热压印工艺制备纳米器件具有成本低、效率高、可并行操作等显著优点^[4]。在热压印的脱模过程中,模板和压印胶之间的相互作用会导致胶体发生粘连变形甚至破损,破坏胶层结构和模具结构。因此,亟需对热压印脱模的影响因素进行研究,提高纳米器件质量,延长模具寿命^[5]。

国内外已有研究者通过数值模拟的方法对脱模过程进行研究,Song 等^[1]通过数值模拟对脱模速率和脱模角度等参数进行优化;Reedy 等^[6]模拟了模板和压印胶之间的界面剪应力对脱模的影响;Chan-Park 等^[7-8]发现在模板上旋涂脱模剂可以减小界面剪应力,减少胶层纳米结构的缺陷;Guo 等^[9]在镍(Ni)模板表面旋涂聚四氟乙烯(polytetrafluoroethylene, PTFE)层,通过减小摩擦系数使压印胶中应力集中区域缩小;Tian 等^[10]发现 Ni-PTFE 复合材料模板的摩擦系数比旋涂 PTFE 层的 Ni 模板的摩擦系数更小;Zhang 等^[11]通过电铸技术制备 Ni-PTFE 复合材料模板并将其应用于实际脱模工艺中,得到了高质量的纳米器件。

现有研究成果表明,通过改善模板和压印胶之间的接触特性可以减少脱模造成的纳米结构缺陷,但是对接触面摩擦系数与胶层纳米结构变形之间的关系研究不够完善。本研究通过建立有限元模型对热压印脱模过程中模板和压印胶的接触面上摩擦系数影响进行研究。分析胶层纳米结构在不同摩擦系数作用下的受力和变形特征,从界面摩擦力的角度对胶层纳米结构的顶端变形做出解释。通过对比不同摩擦系数作用时胶层纳米结构的顶端变形曲线,得到 Ni-PTFE 复合材料模板的最优摩擦系数和最优 PTFE 含量,为优化模板材料提供重要参考和理论依据。

1 热压印脱模工艺的有限元模拟

1.1 二维几何模型及边界条件

为了研究脱模过程中胶层纳米结构的应力变化和变形状态,借助 ANSYS 15.0 模拟热压印的脱模过程。选用 Ni 作为模板材料,聚甲基丙烯酸甲酯(polymethyl methacrylate, PMMA)作为压印胶层材料,建立二维有限元模型。模型几何尺寸和边界条件如图 1 所示,胶层纳米结构的高度 $H = 100 \text{ nm}$,宽度 $W = 100 \text{ nm}$ 。模型底边采用固定约束,两侧边沿高度方向可以移动,但沿水平方向不能移动。为了模拟模板与压印胶的分离过程,定义二者的接触边界为可滑动面,并在模板上表面施加 100 nm 的脱模位移,位移方向垂直于模板向上。

1.2 模板和压印胶的材料属性

压印胶层材料(PMMA)的弹性模量远小于模板材料(Ni)的弹性模量,压印胶层更容易发生变形,影响压印图案的质量,因此压印胶层材料对于脱模模拟至关重要。在已有的脱模有限元仿真分析中,对 PMMA 属性的定义仅有密度、弹性模量和泊松比。为了使模拟材料更接近真实材料,假设 PMMA 为不可压缩的各向同性材料,采用 Mooney-Rivlin 模型描述其力学性能^[12]。通过 Mooney-Rivlin 模型常数 C_{10} 和 C_{01} 定义 PMMA 的材料属性, C_{10} 和 C_{01} 与 PMMA 的弹性模量 E 的关系^[13]:

$$6(C_{01} + C_{10}) \approx E, C_{01} = 0.25C_{10}; \quad (1)$$

$$C_{10} = \frac{4}{30}E, C_{01} = \frac{1}{30}E. \quad (2)$$

模板和压印胶的材料参数如表 1 所示。

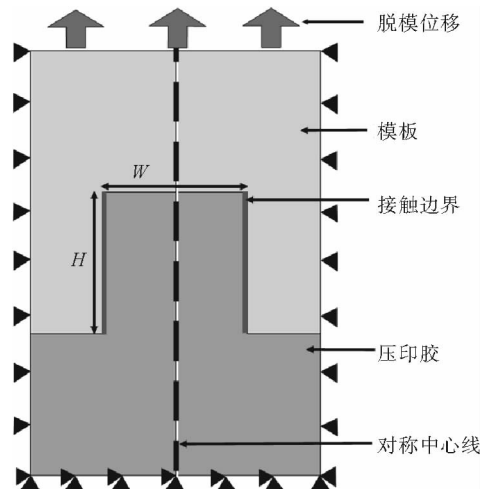


图 1 二维几何模型和模拟边界条件

Fig. 1 Two-dimensional geometry model and boundary conditions adopted for simulation

表 1 模板和压印胶的材料参数

Tab. 1 Material properties of the template and the resists

结构	密度/(kg/m ³)	弹性模量/MPa	泊松比	Mooney-Rivlin 常数/MPa
模板	8 880	207 000	0.31	—
压印胶	1 190	3 300	0.15	C ₁₀ = 440/C ₀₁ = 110

1.3 二维有限元模型

在建立的有限元模型中,模板采用 PLANE42 单元,压印胶采用 PLANE182 单元,模板与压印胶之间的接触关系用接触单元 CONTA172 定义。不考虑沿模板和压印胶厚度方向的应力变化,该模型可简化为平面应力问题^[1]。为使模拟结果更为准确,在划分网格时对有限元模型的单元数量进行加密处理。建模完成后有限元模型共有 2 726 个单元和 2 848 个节点。

2 摩擦系数对胶层纳米结构的影响

2.1 胶层纳米结构的应力变化和变形状态

已有研究证明两种材料混合后摩擦性能会发生改变^[14],例如,Ni-PTFE 复合材料模板的平均摩擦系数比 Ni 模板的摩擦系数小^[9]。不同 PTFE 含量的 Ni-PTFE 复合材料的摩擦系数如表 2 所示^[11]。由表 2 可知,PTFE 在 Ni-PTFE 中所占比例越小,Ni-PTFE 复合材料的摩擦系数越大。通过改变有限元模型中接触单元的接触特性 Friction Coefficient,模拟热压印脱模工艺中摩擦系数增大对胶层纳米结构的应力和变形的影响,得到摩擦系数(μ)分别为 0.18、0.20、0.26、0.33 和 0.40 时不同脱模时刻的纳米结构 von-Mises 应力云图,如图 2 所示。研究图 2 可知,当脱模距离为 25 nm 时,随着摩擦系数的增大,最大应力值逐渐增大, $\mu = 0.40$ 时的最大应力值约是 $\mu = 0.18$ 时的最大应力值的 2 倍,与此同时,胶层纳米结构的顶端出现凹陷变形,并且变形随着摩擦系数的增大而增大;当脱模距离为 65 nm 时,随着摩擦系数的增大,最大应力值逐渐减小,与此同时,胶层纳米结构的顶端出现凸起变形,并且变形随着摩擦系数的增大而减小。

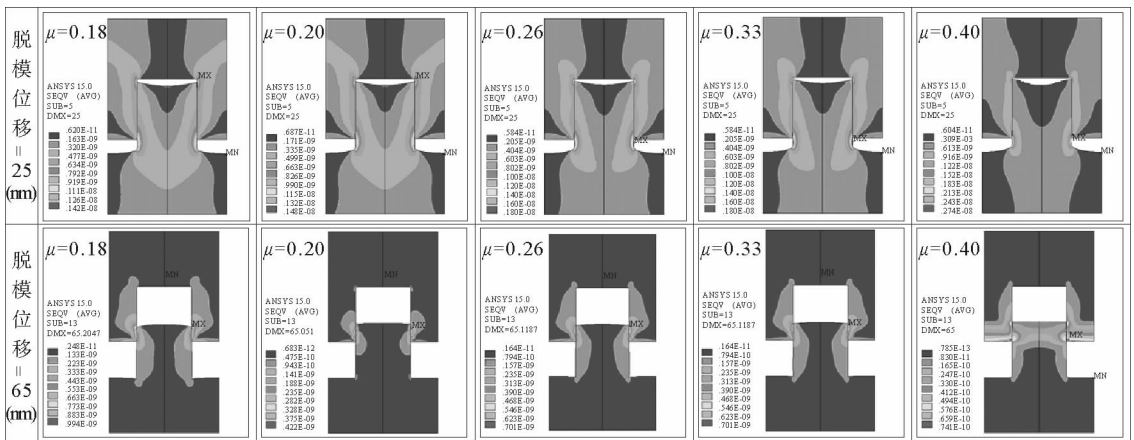


图 2 摩擦系数(μ)为 0.18、0.20、0.26、0.33、0.40 时,纳米结构在脱模至 25 nm 和 65 nm 处的 von-Mises 应力云图

Fig. 2 Distribution of von Mises stress in nanostructure at the releasing displacement of 25 nm and 65 nm, when friction coefficients (μ) are 0.18, 0.20, 0.26, 0.33 and 0.40, respectively

2.2 胶层纳米结构顶端变形的原因分析

在热压印的脱模过程中,模板在外力作用下从压印胶层中向上升起,模板在与胶层纳

表 2 不同 PTFE 含量的 Ni-PTFE 复合材料的摩擦系数

Tab. 2 Friction coefficients (μ) of Ni-PTFE with different content of PTFE

参数	1	2	3	4	5
PTFE 含量(g/L)	30	15	10	5	0
摩擦系数	0.18	0.20	0.26	0.33	0.40

米结构的接触面处受到方向向下的界面摩擦力作用,根据牛顿第三定律,胶层纳米结构在接触面处同时受到方向向上的界面摩擦力作用。脱模初期,由于界面摩擦力的作用,胶层纳米结构的顶端边缘出现向上的弹性形变(如图 2 中脱模位移为 25 nm),而且摩擦系数越大,界面摩擦力越大,顶端形成的凹陷变形越大;脱模继续进行,当已经发生变形的压印胶自重与界面摩擦力相当时,胶层纳米结构的顶端凹陷变形达到最大;脱模后期,已变形的压印胶在自重作用下逐渐回落(如图 2 中脱模位移为 65 nm),此时作用在压印胶上的界面摩擦力成为阻碍其回落变形的阻力。摩擦系数越大,界面摩擦力越大,胶层纳米结构的顶端回落变形的阻力越大,顶端形成的凸起变形越小。

3 Ni-PTFE 复合材料模板中最佳 PTFE 含量的选定

为确定 Ni-PTFE 复合材料模板中最佳 PTFE 的含量,本节将对脱模过程中胶层纳米结构的顶端变形进行定量研究。选取胶层纳米结构的顶端中间节点(点 A)为研究对象,绘制脱模过程中摩擦系数增大时点 A 的竖向变形曲线,如图 3 所示。

观察图 3 中 $\mu_5=0.40$ 时的曲线可知,随着脱模的进行,节点 A 向上移动,脱模到 40 nm 时,节点 A 向上的变形达到最大值,记为 $D_{\max 5}$,此后节点 A 向下回落,脱模到 70 nm 时,节点 A 的变形达到最小值,记为 $D_{\min 5}$ 。对比图 3 曲线可得, $D_{\max 5} > D_{\max 4} > D_{\max 3} > D_{\max 2} > D_{\max 1}$, $|D_{\min 1}| > |D_{\min 4}| > |D_{\min 3}| > |D_{\min 5}| > |D_{\min 2}|$; $\mu_1=0.18$ 时,节点 A 向上变形的最大值 $D_{\max 1}$ 虽然是 $D_{\max 5}$ 、 $D_{\max 4}$ 、 $D_{\max 3}$ 、 $D_{\max 2}$ 、 $D_{\max 1}$ 中的最小值,但是向下变形的最大值 $|D_{\min 1}|$ 是 $|D_{\min 1}|$ 、 $|D_{\min 4}|$ 、 $|D_{\min 3}|$ 、 $|D_{\min 5}|$ 、 $|D_{\min 2}|$ 中的最大值;而 $\mu_2=0.20$ 时,曲线变化平缓, $D_{\max 2}$ 和 $|D_{\min 2}|$ 相对较小,节点 A 在整个脱模过程中的变形较小。由表 2 可知, Ni-PTFE 复合材料模板的摩擦系数为 0.20 时, Ni-PTFE 复合材料模板中 PTFE 含量为 15 g/L,此值即为 Ni-PTFE 复合材料模板的最佳 PTFE 含量。

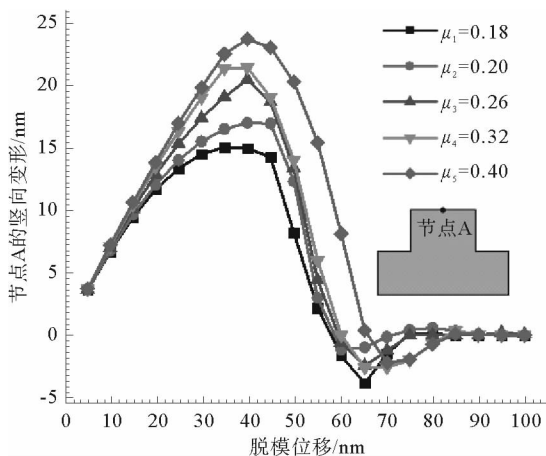


图 3 脱模过程中摩擦系数增大时节点 A 的竖向变形曲线
Fig. 3 The influence of increasing the friction coefficient on the deformation at the node A during the whole demolding process

4 结论

采用模型优化、有限元数值模拟和理论分析相结合的方法对摩擦系数与胶层纳米结构受力、变形之间的关系进行了研究。

1) 利用 Mooney-Rivlin 模型常数定义了压印胶的材料属性,对模拟实验中有限元模型进行网格加密优化。借助 ANSYS 软件对热压印的脱模过程进行了模拟,得到摩擦系数增大时纳米结构的 von-Mises 应力云图和胶层纳米结构的顶端变形曲线图。

2) 通过分析纳米结构的 von-Mises 应力云图得到摩擦系数增大时胶层纳米结构的最大应力及变形的变化规律:最大应力及变形在脱模初期随摩擦系数的增大而增大,在脱模后期随摩擦系数的增大而减小;从压印胶层受界面摩擦力的角度解释了胶层纳米结构的顶端变形现象,得出了胶层纳米结构的顶端变形规律。

3) 通过对比分析不同摩擦系数作用时胶层纳米结构的顶端变形曲线,得到 Ni-PTFE 复合材料模板的最优摩擦系数为 0.20,以及最佳 PTFE 含量为 15 g/L。通过优化 Ni-PTFE 复合材料模板的配合比使胶层纳米结构在热压印脱模工艺中的变形最小,可减少因热压印脱模造成的图形缺陷,提高纳米器件的产品质量。

参考文献:

[1] SONG Z C, CHOI J, YOU B H, et al. Simulation study on stress and deformation of polymeric patterns during the demolding

- process in thermal imprint lithography[J]. *Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 2008, 26(2): 598-605.
- [2]王金合,费立诚,宋志堂,等. 纳米压印技术的最新进展[J]. *微纳电子技术*, 2010, 47(12): 722-730.
WANG Jinhe, FEI Licheng, SONG Zhitang, et al. Latest progress in nano-imprinting technology[J]. *Micronanoelectronic Technology*, 2010, 47(12): 722-730.
- [3]陈芳,高宏军,刘忠范. 热压印刻蚀技术[J]. *微纳电子技术*, 2004(10): 1-9.
CHEN Fang, GAO Hongjun, LIU Zhongfan. Hot embossing lithography[J]. *Micronanoelectronic Technology*, 2004(10): 1-9.
- [4]BECKER H, HEIM U. Hot embossing as a method for the fabrication of polymer high aspect ratio structures[J]. *Sensors and Actuators*, 2000, 83(1): 130-135.
- [5]郭育华,刘刚,朱学林,等. 热模压成形技术中的脱模研究[J]. *中国机械工程*, 2005, 16(增 1): 432-434.
GUO Yuhua, LIU Gang, ZHU Xuelin, et al. Study on demolding process during hot embossing[J]. *China Mechanical Engineering*, 2005, 16(S1): 432-434.
- [6]REEDY E D, COX J V. Hierarchical analysis of the release step in a nanofabrication process using an adhesion/atomistic friction surface interaction model[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2013, 135(1): 279-284.
- [7]CHAN-PARK M B, LAM Y C, LAULIA P, et al. Simulation and investigation of factors affecting high aspect ratio UV embossing[J]. *Langmuir*, 2005, 21(5): 2000-2007.
- [8]CHAN-PARK M B, YAN Y H, NEO W K, et al. Fabrication of high aspect ratio poly(ethylene glycol)-containing microstructures by UV embossing[J]. *Langmuir*, 2003, 19(10): 4371-4380.
- [9]GUO Y H, LIU G, XIONG Y, et al. Study of the demolding process—Implications for thermal stress, adhesion and friction control[J]. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2007, 17(1): 9-19.
- [10]TIAN Y C, ZHANG P, LIU G, et al. The lifetime comparison of Ni and Ni-PTFE moulding inserts with high aspect-ratio structure[J]. *Microsystem Technologies*, 2005, 11(4/5): 261-264.
- [11]ZHANG P, LIU G, TIAN Y C, et al. The properties of demoulding of Ni and Ni-PTFE moulding inserts[J]. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2005, 118(2): 338-341.
- [12]LAN H B, DING Y C, LIU H Z, et al. Mold deformation in soft UV-nanoimprint lithography[J]. *Science in China Series E: Technological Sciences*, 2009, 52(2): 294-302.
- [13]孙国良,王海容,高鲜妮,等. TiN 模板热压印中的若干关键影响因素仿真分析[J]. *机械强度*, 2011, 33(2): 285-289.
SUN Guoliang, WANG Hairong, GAO Xianni, et al. Investigation on several crucial factors influencing the hot-embossing lithography with TiN mold[J]. *Journal of Mechanical Strength*, 2011, 33(2): 285-289.
- [14]YASUHIKO T, MASASHI H, TAKAYUKI I, et al. Nanotribology of polymer blends[J]. *Journal of Applied Physics*, 2000, 87(6): 2803-2807.

(责任编辑:李 磊)