

# NIL 공정에서 폴리머 온도가 성형 및 이형에 미치는 영향에 대한 분자동역학적 연구

## Molecular Dynamics Study on Effects of Deformation

### Temperature of Polymer on NIL process

\*김석범<sup>1</sup>, 문성남<sup>2</sup>, 이종인<sup>1</sup>, #이우일<sup>1,2</sup>, #조경지<sup>2</sup>

\*S. P. KIM<sup>1</sup>, S. N. Moon<sup>2</sup>, D. E. Lee<sup>1</sup>,

#W. I. Lee(wilee@snu.ac.kr)<sup>1,2</sup>, #K. J. Cho(kjkjcho@snu.ac.kr)<sup>2</sup>

<sup>1</sup>서울대학교 기계항공공학부 <sup>2</sup>서울대학교 WCU 멀티스케일 기계설계 전공

Key words : Nano Imprint Lithography(NIL), Molecular Dynamics(MD) Simulation, Adhesion force, Temperature

### 1. 서론

나노 임프린트 리소그래피(NIL) 방법은 몰드를 반복적으로 사용 할 수 있고, 대면적 성형이 가능하다는 측면에서 다른 미세 성형 방식에 비해 효율적이고 경제적이다. 하지만 몰드와 폴리머 사이에 물리적인 접촉으로 인한 힘이 발생하고, 그 힘에 의하여 패턴과 몰드에 변형에 의한 손상 문제를 야기시킨다. [1]

본 연구에서는 NIL 공정 중 폴리머 온도가 스탬핑 (stamping) 단계와 이형 (demolding) 단계에 미치는 영향에 대해 알아보았다. 특히 유리 전이 온도(Tg) 이하의 낮은 온도에서는 성형이 잘 일어나지 않는 반면 높은 온도에서는 성형이 잘 일어나는 것을 확인하고, 이러한 현상이 이형과정 중에서 몰드에 가해지는 이형력에 미치는 영향에 대해서 실험치를 구하고 이를 분자동역학적 방법으로 분석해 보았다.

### 2. 해석방법

#### 2.1 실험방법

몰드를 웨이퍼에 스핀코팅된 PMMA 에 공정 온도를 달리하며 약 30bar 정도의 압력으로 임프린팅 후 상온으로 냉각하여 이형력을 측정하였다.

#### 2.2 분자동역학적 모사

첫번째 몰드(mold)로는 내부에 가로 5nm, 깊이 2nm 크기의 cavity 를 가진  $\Pi$  모양의 스탬프를 표현하였고, 두번째 몰드로서 roughness 효과를 주기 위해 1nm 혹은 그보다

약간 작은 깊이의 톱니모양의 구멍들을 랜덤하게 분포시킨 몰드를 Fig.1 과 같이 모델링하였다. 폴리머의 경우  $\text{CH}_2$  를 기본단위로 하는 united atom 모델을 이용하였고, 100 개, 200 개, 300 개의 united atom 이 각각 하나의 체인으로 이루어진 세 종류의 폴리머로 구성하였으며 각각 150, 75, 50 개 체인을 가진 레지스트(resist)로 모델링하였다.

Polyethylene 의 각 chain 내의 운동은 bonding, bending, torsion, LJ(Lennard Jones) 12-6 potential 을 사용하여 계산하였고, 폴리머 resist 와 몰드 간의 interaction 및 폴리머 chain 간의 interaction 은 LJ 12-6 potential 을 사용하였다[2] 이때 parameter 수치는 [Moore et al.(2000)] 의 값[2]을 사용하였다.

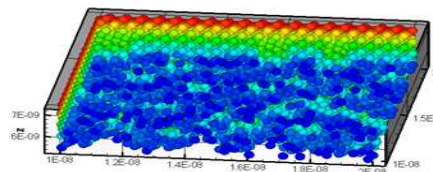


Fig 1 Mold with roughness

#### 2.3 모사 과정

Tg 인 약 230K[3]보다 높은 510K 에서 성형하는 경우에는 스탬핑 과정 후 150K 까지 내린 다음 이형 과정을 시행하였고, Tg 보다 낮은 150K 에서는 온도변화 없이 시행하였다. 스탬핑 과정에서는 압력이 50MPa 이 될때까지 몰드를 약 5m/s 의 속도로 내렸다가 멈추고

이형과정을 시행하였다.

### 3. 결과 및 고찰

실험에서는 T<sub>g</sub> 이하의 온도에서의 이형력과 T<sub>g</sub> 이상의 온도에서 임프린팅 후 T<sub>g</sub> 이하로 식힌 폴리머의 이형력이 약 6 배가량 차이 나는 것을 확인할 수 있었다.

T [°C]	80	130	180
Load[N]	3.454	13.52	20.875

Table 1 온도에 따른 이형력(실험치)

첫번째 몰드인 Π 모양의 스탬프로 150K 온도로 성형한 경우 성형이 잘 이루어지지 않았다. 이때의 이형력은 Fig.2 와 같이 분자량에 따라 약간의 변화가 있지만 50~65Mpa 의 수치를 보였다.

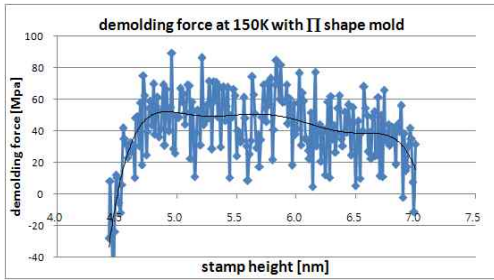


Fig 2 demolding force at 150K with Π shape mold

510K 온도에서 성형한 경우 분자량에 관계없이 비슷한 높이에서 성형이 완전히 이루어졌다. 또한 이것을 150K 까지 온도를 낮춘 후 이형을 할 때 130Mpa~160Mpa 정도의 이형력을 보여, 150K 에서 성형할 때 보다 약 2 배~3 배가량 큰 수치를 볼 수 있었다.

두번째 몰드인 Roughness 효과를 준 몰드의 경우 150K 에서 성형 후 이형할 때의 이형력이 약 130Mpa 정도로 510K 에서 성형 후 150K 로 낮추어서 이형할 때의 이형력과 서로 거의 유사한 크기 및 형태를 보였다. (Fig.3 참조)

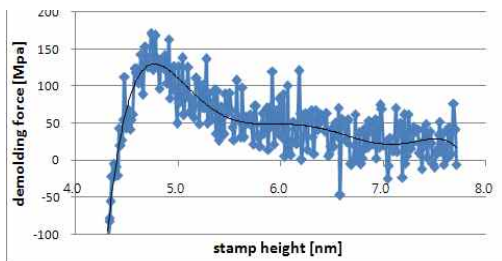


Fig 3 demolding force at 150K from 510K with roughness

첫번째 몰드인 Π 모양의 스탬프의 경우 150K 에서 폴리머 변형이 적어서 cavity 내부에 폴리머가 완전히 채워지지 않아서 이형력이 적게 나온 반면에 roughness 효과가 들어간 몰드의 경우 150K 의 낮은 온도에서도 sub-nano 스케일의 틈새로 폴리머가 채워져 들어가는 모습을 보였고 이런 현상으로 인해 이때 이형력이 510K 에서 성형후 150K 로 낮춰서 이형력을 비교해 보았을 때와 비슷한 수치의 결과로 표현되는 것을 알 수 있었다.

### 4. 결론 및 향후 계획

이형력을 이루는 힘은 폴리머가 몰드 면에 수직방향으로 움직일 때 작용하는 힘과 면에 수평으로 움직일 때 작용하는 힘(특히 요철이 있는 cavity 벽면에서 미끄러질 때 나타나는 힘)으로 나누어 생각해 볼 수 있는데, 그 중 면에 수직인 방향의 힘에 대해 알아보았다. 본 연구조건과 같은 경우 Sub-nano 스케일의 작은 요철에 대해서는 폴리머가 요철 내부에 채워지는 현상으로 인해 온도에 따른 차이를 볼 수 없지만 요철의 크기가 그보다 더 큰 스케일에서는 온도에 따라 약 2 배~3 배 가량 차이를 나타내었다. 이는 실험에서 구한 차이보다 작은 수치로, 앞으로 요철이 있는 cavity 내부 벽면에서의 미끄러짐에 의해 발생하는 힘에 관련한 추가 시뮬레이션으로 보정이 필요하다.

### 후기

본 연구는 교육과학기술부의 세계 수준의 연구중심대학 육성사업(WCU)(R31-2008-000-10083-0)과 2 단계 두뇌한국 21 사업에 의해 지원되었고, 한국연구재단 기초연구사업의 지원을 받아 수행되었습니다. (2010-0024947)

### 참조문헌

1. 우영석,이우일, “분자동역학기법을 이용한 나노 임프린트 리소그래피 공정에서의 고분자 변형모사” 대한기계학회 pp89-94, 2007
2. J.D. Moore, et al., “A molecular dynamics study of a short-chain polyethylene melt” J. Non-Newtonian Fluid Mech, 93,pp 83-99, 2000
3. G.T.Davis, et al., “ Glass transition of polyethylene” J. Appl. Phys. 44, pp4274 (1973)