

Nano Cavity 유동의 분자동역학 해석을 통한 폴리머 Melting point 예측

Prediction of Polymer Melting Point in Nano Cavity by Molecular Dynamics Simulation

*김석범¹, #이우일^{1,2}, 정재민¹, 이동연¹, 문성남²

*S. P. Kim¹, #W. I. Lee(wilee@snu.ac.kr)^{1,2}, J. M. Jung¹, D. E. Lee¹, S. N. Moon²

¹서울대학교 기계항공공학부, ²서울대학교 WCU 멀티스케일 기계설계 전공

Key words : Nano Imprint Lithography(NIL), Molecular Dynamics(MD), Melting Point, Temperature

1. 서론

나노 임프린트 리소그래피(NIL) 방법은 몰드를 반복적으로 사용할 수 있고, 대면적 성형이 가능하다는 측면에서 다른 미세 성형 방식에 비해 효율적이고 경제적이다.[1] Thermal-NIL 의 경우 레지스트로 사용되는 폴리머는 점도가 높아 상온에서 imprinting 시에 강한 힘이 필요하게 되고 이 힘에 의해 몰드에 영향을 미쳐 몰드의 재사용에 문제를 야기할 수 있다. 따라서 몰드의 힘을 줄이면서 폴리머 패터닝을 원활하게 하기 위해 레지스트를 높은 온도로 가열하여 폴리머의 유동성을 높이는 방법을 사용한다.

본 연구에서는 분자동역학을 이용하여 NIL 공정을 모사하였다. 특히 imprinting 시 몰드 cavity 내부로 폴리머가 차 들어가는 정도와 몰드가 받는 힘이 폴리머 온도에 따라 달라지는 정도에 대하여 연구하였고, 원활한 유동이 발생하기 시작하는 온도를 폴리머 특성인 melting point 와 연관지어 보았다.

2. 해석방법

2.1 분자동역학적 모델링

몰드는 diamond cubic 구조를 가지는 실리콘(Si)으로 모델링 하였다. 전체 크기는 가로 세로 높이가 10 x 10 x 3 nm 이고, 내부 cavity 는 5 x 10 x 2nm 크기로 구성하였다.

레지스트로는 polyethylene 을 모델링하여 수행하였는데, 단위 monomer 인 CH₂ 입자를 하나의 united atom 으로 가정하여 총 200 개의 monomer 가 하나의 단일 체인을 이루도록

만들고, 전체 레지스트는 75 개의 체인으로 구성하였다.

각 체인 내에서 폴리머 입자들의 운동은 bonding, bending, torsion, LJ(Lennard Jones) 12-6 potential 을 사용하여 계산하였고, 체인간 폴리머 입자들의 운동과 폴리머와 몰드간 interaction 은 LJ 12-6 potential 을 사용하였다.[2] 각 운동방정식의 상수값은 [Moore et al.(2000)] 의 값[2]을 사용하였다.

2.2 모사과정

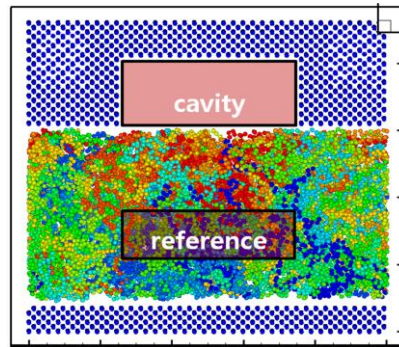


Fig.1 Simulation scheme

총 6 가지 다른 온도(150K, 200K, 260K, 330K, 410K, 510K) 에서 안정화시킨 폴리에틸렌 레지스트 위에 몰드를 5m/s 의 속도로 하강하여 NIL 공정을 모사하였다. 이때, 온도에 따라 cavity 내에 차 들어가는 폴리머 양을 환산하는 방법으로써 다음의 방법을 이용하였다.

$$\text{Filling ratio} = N_{\text{cav}} / N_{\text{ref}} \quad (1)$$

여기서 N_{ref} 은 레지스트 내부의 일정 공간 내에 존재하는 입자 개수이고, N_{cav} 는 동일한 밀도로 가정했을 때 cavity 내에 있는 폴리머 입자 갯수이다. 이 filling ratio 가 몰드가 누르는 힘의 크기가 증가함에 따라 달라지는 정도를 계산하였다.

3. 결과 및 고찰

온도 변화에 따른 NIL 모사 결과를 Fig.2 에 나타내었다. 가장 오른쪽의 완만한 그래프는

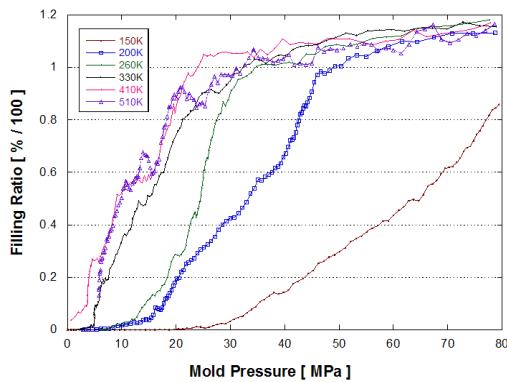


Fig.2 Filling ratio with various temperature PE

150K 일때의 폴리머 filling ratio 를 나타내며, 150K 에서 410K 사이에서는 동일한 몰드 압력에 대하여 온도가 높은 폴리머일수록 filling ratio 가 증가한다. 이것은 온도가 높을수록 cavity 내로 폴리머가 원활하게 이동하여 나노 패턴을 만드는 데 적은 힘이 필요하다는 것을 보여준다. 하지만 410K 에서는 510K 으로 온도가 높아져도 패턴을 만드는 데 필요한 힘의 감소효과가 나타나지 않는다. 이것을 통하여 330K 에서 410K 으로 온도가 증가할 때 410K 부근에서 물질의 상태가 변화 하였음을 추측할 수 있다. 이때, 510K 그래프가 위아래로 진동하는 것은 온도 증가에 따라 폴리머의 유동성이 급격하게 활발해지기 때문이다.

4. 결 론

분자동역학을 이용하여 레지스트 온도에 따른 NIL 모사를 수행하였고, 이를 통해 410K 이하 부근에서 polyethylene 의 상태 변화가

있음을 알 수 있다. 실험에 의한 HDPE 의 melting point 는 약 400K ~ 410K 정도로 알려져 있다.[3] 따라서 분자동역학적 모사를 이용한 melting point 예측이 실제 실험 결과와 유사함을 확인하였고, 이를 통해 melting point 를 예측하는 새로운 방법으로서, 온도에 따라 Nano Cavity 내부로 들어가는 폴리머 유동 차이를 분자동역학을 이용하여 해석하는 방법을 제시하였다.

추가적으로 330K~510K 사이에 온도구간을 더 많이 나누어 시뮬레이션을 하면 melting point 예측 범위를 좁힐 수 있을 것이라 생각한다.

Acknowledgement

본 연구는 교육 과학 기술부의 세계 수준의 연구중심대학 육성사업(WCU) (R31-2008-000-10083-0)과 2 단계 두뇌한국 21 사업에 의해 지원되었고, 2010 년도 교육과학기술부의 재원으로 한국 연구재단의 기초 연구사업 지원을 받아 수행되었습니다.(2010-0024947)

참고문헌

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. J. N. Hay, et al., "The effect of mixing on the properties of polyethylene blends", Polymer, 1993, Vol 34, No 11