

분자 동역학을 이용한 나노임프린트 리소그래피에서의 패턴 전사에 관한 연구

강지훈* · 김광섭 · 김경웅†

한국과학기술원 기계공학과

Molecular Dynamics Study on the Pattern Transfer in Nanoimprint Lithography

Ji-Hoon Kang^{*}, Kwang-Seop Kim and Kyung-Woong Kim[†]

Dept. of Mechanical Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)

Abstract – The molecular dynamics simulation of nanoimprint lithography (NIL) using SiO₂ stamp and amorphous poly-(methylmethacrylate) (PMMA) film is performed to study pattern transfer in NIL. Force fields including bond, angle, torsion, van der Waals and electrostatic potential are used to describe the intermolecular and intramolecular force of PMMA molecules and SiO₂ stamp. Nosé-Hoover thermostat is used to control the system temperature and cell multipole method is adopted to treat long range interactions. The deformation of PMMA film is observed during pattern transfer in the NIL process. For the detail analysis of deformation characteristics, the distributions of density and stress in PMMA film are calculated. The adhesion and friction forces are obtained by dividing the PMMA film into subregions and calculating the interacting force between subregion and stamp. Their effects on the pattern transfer are also discussed as varying the indentation depth and speed.

Key words – nanoimprint lithography, pattern transfer, molecular dynamics simulation.

1. 서 론

최근 나노기술(nanotechnology)의 발달로 수십~수백 nm의 크기를 갖는 나노구조물이나 나노패턴을 대량으로 제조할 수 있는 기술이 요구되고 있다. 이러한 기술 중 최근 주목 받는 기술로서 나노임프린트 리소그래피를 들 수 있다. 나노임프린트 리소그래피는 Chou[1] 등이 최초로 제안한 기술로서, 수십~수백 nm 크기의 패턴이 각인된 스탬프를 폴리머 등의 비교적 변형이 쉬운 재료의 박막 표면에 눌러 박막을 소성 변형시킴으로써 패턴을 전사하는 방법이다. 이 방법은 현재의 광리소그래피로는 달성이 어려운 100 nm 이하의 패턴 전사가 가능하며, 공정이 단순하기 때문에 값싸고 빠르게 패턴 제조가 가능하여 대량 생산에 적합하다. 따라서

기존의 광리소그래피나 입자리소그래피 등을 대신할 기술로 기대되고 있다.

나노임프린트 리소그래피는 Chou[1,2] 등이 최초로 직경이 25 nm 크기의 점패턴들과 폭이 70 nm인 선패턴들을 제조한 이후 여러 연구자들에 의해 활발히 연구되고 있다. 현재까지 나노임프린트 리소그래피로 제작된 패턴의 크기는 10 nm 이하에 이르고 있으며[3,4] 세장비(aspect ratio)가 10 이상인 구조물을 만들려는 연구도 활발히 진행 중이다[5]. 또한 레이저를 이용하여 레지스트(resist) 표면을 순간적으로 녹임으로써 낮은 압력으로 10 nm 크기의 패턴을 제작한 결과도 보고되었다[6].

나노임프린트 리소그래피에서 패턴 전사의 성패는 스탬프를 누르는 동안 폴리머 박막이 스탬프 형상에 따라 제대로 변형하는지의 여부와 스탬프를 분리하는 동안 전사된 패턴이 파괴되지 않는지의 여부에 달려있다. 현재까지 폴리머의 유동성 부족에 의해 소성 변형이 불

*주저자 : deli@kaist.ac.kr

†책임저자 : taeho@kaist.ac.kr

충분하게 일어나거나[7], 응력 집중 및 변형을 증가에 의해 잔류층 두께가 제한되거나[8], 폴리머 박막의 탄성 회복에 의해 전사된 패턴이 일그러지는 현상들이 실험적으로 관찰되었고[9], 이들은 정확한 패턴 전사를 방해하는 걸림돌로 작용한다고 논의되었다. 또한 스탬프와 박막의 직접적인 접촉에 기인한 점착 및 마찰은 스탬프 분리시 전사된 패턴의 일그러짐과 파괴의 원인이 된다[10]. 이러한 문제점들을 해결하기 위해서는 패턴 전사 중에 일어나는 폴리머 분자들의 이동이나 변형 양상, 박막 내부의 응력 분포나 밀도 분포 등을 통해 박막의 변형 특성을 규명하는 일이 필요할 것이다. 또한 스탬프와 박막 사이의 점착 및 마찰의 영향을 규명하고 그 크기를 예측하는 일은 스탬프의 분리 과정 동안 패턴의 변형이나 파괴를 줄이고 스탬프의 내구성을 향상시키는 공정 설계에 큰 도움이 될 것이다.

이를 위해 본 연구에서는 나노임프린트 리소그래피 공정에 대해 분자동역학 해석을 수행하였다. 현재 나노임프린트 리소그래피 공정을 해석하기 위해 유한요소해석 방법이 이용되고 있다[11]. 그러나 나노임프린트 리소그래피 공정으로 만들어지는 패턴 크기는 100 nm 이하로 매우 작기 때문에 연속체 역학을 적용하기가 곤란하며 나노스케일의 점착력과 마찰력은 원자간력이나 분자간력에 의해 결정되기 때문에, 나노임프린트 리소그래피 공정을 해석하기 위해서는 연속체 역학 보다는 시스템을 N개의 입자로 이루어졌다고 보고 해석하는 분자 동역학 해석이 바람직하다[12-14].

본 연구에서 수행된 나노임프린트 리소그래피 공정에 대한 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 공정 중에 일어나는 폴리머 박막의 변형 양상을 관찰하였고 박막 내부의 응력 분포 및 밀도 분포를 계산하였다. 또한 스탬프와 폴리머 재료 사이에서 발생하는 점착력과 마찰력을 계산하고 이들의 영향 및 특성에 관해 살펴보았다.

2. 해석 방법

2-1. 해석 모델

Fig. 1은 나노임프린트 리소그래피 공정의 해석 모델을 나타낸다. 이 모델은 Fig. 1(a)와 같이 주기적인 선형 패턴을 전사하는 실제의 나노임프린트 리소그래피 공정의 일부분을 나타낸 것으로서, 이 해석 모델이 실제 공정을 적절하게 묘사할 수 있도록 x, y 방향으로 주기 경계 조건을 부여하였다. 해석 모델은 Fig. 1

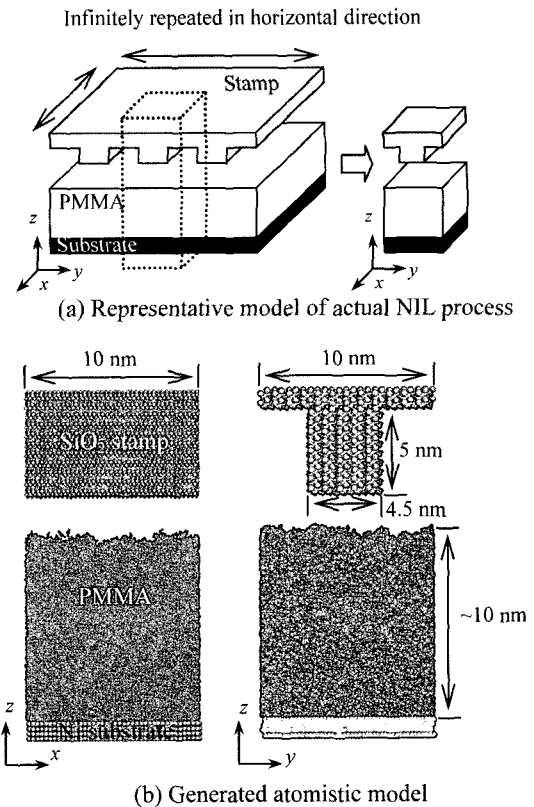


Fig. 1. Schematics of simulation model.

(b)에 나타난 것처럼 선형 패턴을 가지고 있는 SiO₂ 스탬프, PMMA 박막, 그리고 PMMA 박막을 받치고 있는 니켈 기판(substrate)으로 이루어져 있다.

PMMA 박막은 단위체(monomer) 100개가 중합된 분자량 10,016인 syndiotactic PMMA 분자로 이루어져 있으며 비정질(amorphous) 상태이다. SiO₂(a-quartz) 스탬프는 패턴 선폭이 약 4.5 nm이며 패턴 높이는 5 nm와 15 nm로 달리하였다. 스탬프 표면의 산소 원자들은 수소 원자를 결합시켜 dangling bond를 제거하고 H-terminated 표면을 구성하였다. PMMA 박막이 올려져 있는 기판은 면심입방구조를 가지는 니켈 원자 네 개의 층으로 이루어져 있으며 수직방향으로 (111)면을 가진다. SiO₂와 니켈의 Young's modulus는 각각 70 GPa와 210 GPa로서 PMMA의 3 GPa에 비해 매우 크기 때문에 본 연구에서는 SiO₂ 스탬프와 니켈 기판은 변형이 없다고 가정하였다.

2-2. 포스 필드(Force Field)

본 연구에서는 PMMA 입자 사이의 상호작용력을

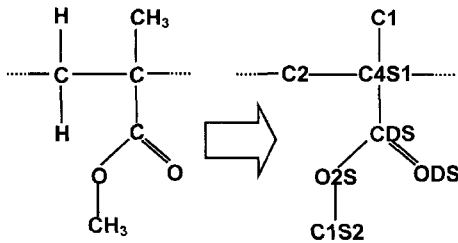


Fig. 2. PMMA molecule and its UA model.

나타내기 위해 Okada 등[15]이 제시한 포스 필드를 이용하였다. 이 포스 필드는 Fig. 2에 나타난 것처럼 PMMA 분자의 CH₃와 CH₂를 하나의 입자로 간주하는 United atom(UA) 방법을 이용하며 포텐셜 에너지는 식 (1)과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned}
 U = & \sum_{\text{bonds}} k_r(r-r_0)^2 + \sum_{\text{angles}} k_\theta(\theta-\theta_0)^2 + \sum_{\text{torsions}} \sum_{i=1}^N (V_n \cos n\phi) \\
 & + \sum_{\text{improper torsions}} (K_1(\Theta-\Theta_0) + K_2(\Theta-\Theta_0)^2) + \sum_{1,5\text{nonbonds}} \left(\frac{A}{r^{12}} - \frac{C}{r^6} \right) \\
 & + \sum_{i < j} \sum \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{C_0 q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} \right) \quad (1)
 \end{aligned}$$

첫 번째 항은 결합 길이, 두 번째 항은 결합각, 세 번째 항은 세 개의 결합이 이루는 비틀림각, 네 번째 항은 improper torsion에 해당하는 out-of-plane각에 대한 포텐셜 에너지이다. 다섯 번째 항은 결합 거리가 4인 두 입자 사이의 상호작용을 묘사하기 위한 레너드-존스(Lennard-Jones) 포텐셜이며 여섯 번째 항은 비결합 상호작용으로서 반데르발스힘을 나타내는 레너드-존스 포텐셜과 정전기력을 나타내는 정전기 포텐셜로 이루어져 있다. 결합 길이, 결합각, 뒤틀림각, out-of-plane각에 대한 설명은 Fig. 3에 나타나 있으며 아래첨

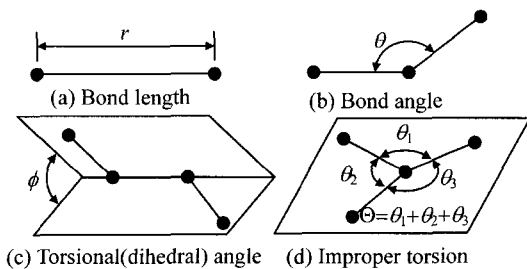


Fig. 3. Definition of bond length, bond angle, torsional angle and out-of-plane angle.

자 0는 평형 상태의 값을 의미한다.

PMMA와 SiO₂스탬프 사이의 상호작용을 나타내기 위해 레너드-존스 포텐셜과 정전기 포텐셜을 이용하였으며 상수는 Sides[16] 등의 결과를 이용하였다. 또한 PMMA와 니켈 기관 사이의 상호작용을 나타내기 위해 레너드-존스 포텐셜을 이용하였으며 상수는 니켈의 결합에너지와 격자상수로부터 유도한 값을 이용하였다 [17]. SiO₂스탬프와 니켈 기관이 변형하지 않는다고 가정했기 때문에 스탬프 원자끼리의 상호작용이나 니켈 원자들끼리의 상호작용은 고려하지 않았다.

2-3. 해석 절차

본 시뮬레이션에 앞서 PMMA 분자들은 포텐셜 에너지가 낮은 상태로 잘 완화(well-relaxed)된 비정질의 박막 형태로 되어 있어야 한다. 이를 위해 원하는 PMMA 박막의 두께만큼 떨어진 니켈 기관 사이에 PMMA 분자들을 채워 넣는다. 이 때 PMMA 분자들의 모든 결합 길이와 결합각을 평형 상태의 값으로 고정시키고 모든 비틀림각이 임의의 값을 갖게 한다. 이렇게 얻어진 PMMA 박막은 원자 중심이 겹치는 원자들이 매우 많아 구조가 불안정하기 때문에 분자 동역학 완화 과정을 수행하여 이를 해결하였다. 완화 과정 동안 원자들이 받는 힘의 크기는 적절한 값 이하로 제한되어 원자들의 궤적이 발산하는 것(blow-up)을 막는다. 또한 Nosé-Hoover 서모스탯을 이용하여 온도를 일정하게 유지시킴으로써 포텐셜 에너지가 효율적으로 낮아지게 한다. 포텐셜 에너지가 충분히 낮아진 후 위쪽의 니켈 기관을 제거하고 추가적인 완화 과정을 통해 PMMA 박막을 얻을 수 있다. 이렇게 얻어진 PMMA 박막의 밀도는 약 1.06 g/cm³으로 벌크 상태의 밀도인 1.19 g/cm³와 비슷하였다.

시뮬레이션은 다음과 같은 단계를 거쳐 이루어진다. 첫 번째로 스탬프는 일정한 속도로 PMMA 박막을 압입하게 된다. 이 때 PMMA 박막의 온도는 유리전이 온도(glass transition temperature) 이상인 125°C로 유지되며 압입 깊이는 패턴 높이가 5 nm인 스탬프의 경우 3 nm로, 15 nm인 스탬프의 경우 8 nm로 하였다. 압입이 끝나고 난 후, 150,000시간 스태프 동안 스태프를 머무르게 한다. 이 때 처음 50,000시간 스태프 동안은 온도를 125°C로 유지하고 그 다음의 50,000시간 스태프 동안은 시간 경과에 비례하도록 온도를 낮추어 상온에 해당하는 25°C가 되도록 한다. 다음의 50,000시간 스태프 동안은 PMMA 박막의 온도를 25°C로 유

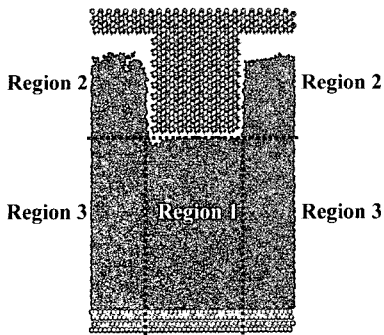


Fig. 4. Divided regions for detail analysis of force.

지한다. 이 후, 일정한 속도로 스탬프를 들어올려 스탬프가 PMMA 박막으로부터 완전히 분리되도록 한다. 압입 및 분리 속도는 10 m/s와 50 m/s로 달리하였다.

PMMA 박막의 온도를 조절하기 위해 Nosé-Hoover 서모스탯을 이용하였으며, 계산 시간을 줄이고 정확도를 높이기 위해 Cell multipole 방법을 이용하여 원거리 포텐셜인 정전기 포텐셜과 반데르발스 포텐셜에 의한 상호작용을 계산하였다. 운동 방정식을 수치 적분하기 위해 velocity Verlet 알고리즘을 이용하였으며 시간 간격은 5fs로 하였다. 응력 분포를 계산하기 위해 식 (2)를 이용하였으며 이 때 해석 영역을 적당한 크기의 미소체적으로 나누어서 응력 분포를 계산하였다.

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{V} \sum_i \left(\sum_{k, k \neq i} F_{ik}^{\alpha} r_{ik}^{\beta} + m_i v_i^{\alpha} v_i^{\beta} \right) \quad (2)$$

또한 SiO₂스탬프와 PMMA 사이에 작용하는 점착력과 마찰력의 크기를 계산하기 위해 Fig. 4와 같이 PMMA 박막을 스탬프의 형상에 따라 세 부분으로 나누어 식 (3)과 같이 각각의 영역에 포함된 입자들이 스탬프에 작용하는 힘을 계산하였다. 이때 F_{z2}는 마찰력에 해당하며 스탬프 분리 중의 F_{z1}은 점착력에 해당한다.

$$F_{zi} = \sum_{j \in \text{stamp}} \sum_{k \in \text{region } i} (F_{jk})_z \quad (3)$$

$$F_z = F_{z1} + F_{z2} + F_{z3} \quad (4)$$

F_z는 세 영역에서 작용하는 힘의 합으로서 스탬프에 작용하는 z방향 힘을 의미한다.

3. 결과 및 고찰

3-1. 패턴 전사 양상

Fig. 5는 시뮬레이션 과정의 각 단계를 x 방향에서 본 모습을 나타낸다. 패턴 높이는 15 nm, 압입 깊이는 8 nm이며 압입 및 분리 속도는 10 m/s이다. 압입이 진

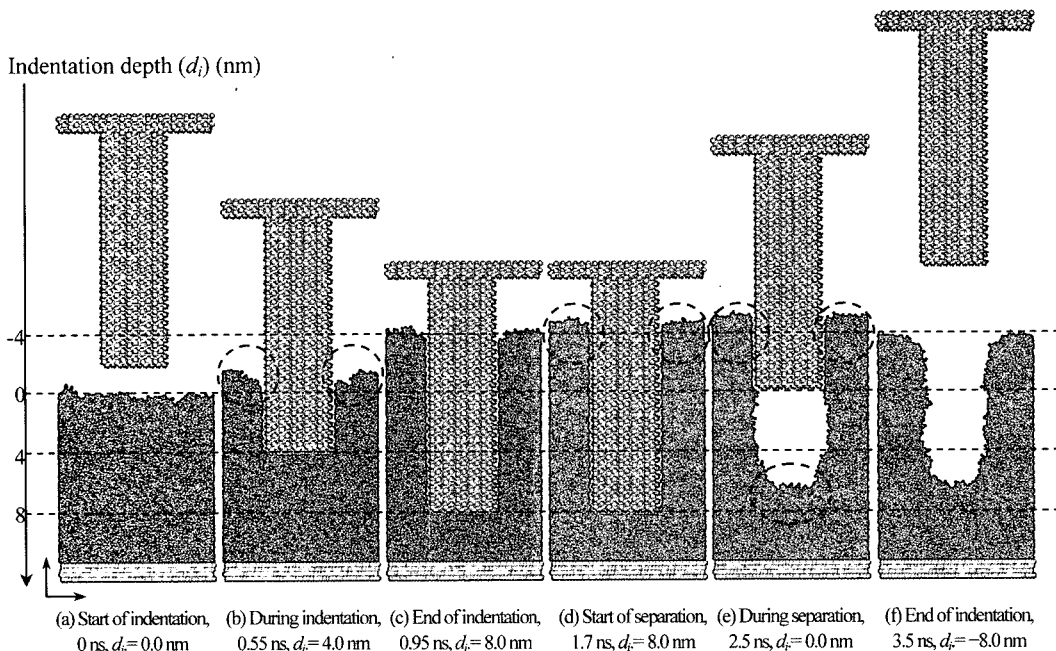


Fig. 5. Snapshots of MD simulation of NIL (aspect ratio of pattern=2.5, indentation and separation speed=10 m/s).

행됨에 따라 PMMA 박막은 스탬프의 형상에 따라 변형되거나 스탬프의 바로 양 옆면에서는 스탬프와 PMMA 박막 사이의 마찰 때문에 PMMA 입자들이 스탬프를 따라 아래로 끌려들어가며 이로 인해 파일업(pile-up) 현상이 스탬프의 양 옆면에서 약간 떨어진 곳에서 생기게 된다(Fig. 5(b)). 압입 후 스탬프가 머무르는 동안 PMMA 분자들이 이동하여 전사된 패턴이 수직 방향으로 약간 늘어나게 된다(Fig. 5(d)). 스탬프의 분리가 진행됨에 따라 스탬프의 아랫면에서는 많은 PMMA 입자들이 끌려 올라간다(Fig. 5(e)의 아래쪽 원 안). 이는 스탬프와 PMMA 박막 사이의 점착에 의한 현상과 압축되어 있던 PMMA 박막이 탄성 회복하며 늘어나는 스프링 백(spring-back) 현상이 일어나기 때문이다. 스탬프가 머무르는 동안 PMMA 박막이 충분히 소성 변형하지 못하여 상당한 크기의 압축 응력이 남아 있으며 이 때문에 스탬프가 분리되는 동안 PMMA 박막의 탄성 회복이 일어나게 된다. PMMA 박막 내부의 응력 분포는 다음절에서 다룰 것이다. 또한 Fig. 5(e)를 보면(위쪽 원 안) 스탬프가 분리됨에 따라 스탬프의 옆면에 있는 PMMA 박막의 돌출 부분이 끌려 올라감을 알 수 있는데 이는 스탬프와 PMMA 박막 사이의 마찰에 의한 것이라 생각된다. 이렇게 끌려 올라간 입자들은 스탬프가 박막에서 분리되면 곧바로 다른 PMMA 입자들과의 인력에 의해 끌려 올라가기 전과 비슷한 위치로 돌아가게 되며 스탬프가 완전히 분리된 후에는 스탬프가 압입되었던 자리에 스탬프의 패턴이 전사된 것을 관찰할 수 있다(Fig. 5(f)).

3.2. PMMA 박막의 밀도 및 응력 분포

PMMA 박막의 변형 특성을 보다 상세하게 알기 위해 세장비 2.5인 스탬프로 8 nm를 압입하는 경우 박막 내부의 밀도 분포와 응력 분포를 Fig. 6에 나타내었다. 압입 및 분리 속도는 10 m/s이다. Fig. 6(a)는 압입이 시작되기 전의 밀도 분포를 나타낸다. 니켈 원자들과의 상호작용력이 강하기 때문에 니켈 기관 근처의 밀도가 약간 높으며 표면 근처에서는 밀도가 약간 낮지만 전체적으로는 입자들의 분포가 거의 균일하다. 또한 Fig. 6(e), 6(i), 6(m)이 나타내는 수직응력(normal stress) σ_{yy} , σ_{zz} 및 전단응력(shear stress) τ_{xy} 역시 전체적으로 거의 균일한 분포를 나타낸다. 응력이 강하게 나타나는 부분들이 몇 군데에 산재하는데 이는 입자들의 운동에 의해 발생하는 국부적인 압축이나 인장에 의해 생기는 것이다. 수직응력의 경우 양의

값이 압축응력, 음의 값이 인장 응력을 나타내며, 전단 응력의 경우 양의 값이 시계 방향, 음의 값이 반시계 방향을 나타낸다.

Fig. 6(b)는 압입이 끝난 순간의 밀도 분포를 나타낸다. 스탬프 패턴 바로 아래의 입자들의 밀도가 매우 높아진 것을 알 수 있다. 또한 스탬프의 빈 공간을 채우게 되는 PMMA 박막의 돌출부는 상대적으로 밀도가 낮는데 이는 PMMA 입자들이 스탬프의 빈 공간을 채울 정도로 충분히 이동하지 못했기 때문이다. Fig. 6(f)와 6(j)에 나타난 응력 σ_{yy} 와 σ_{zz} 의 분포를 보면 스탬프 바로 아래에서 높은 압축 응력이 발생하는 것을 알 수 있다. 이는 스탬프가 압입됨에 따라 패턴 아래의 PMMA 박막이 압축되기 때문에 발생하는 것이며 PMMA 입자들이 움직여 스탬프의 빈 공간을 채울 수 있게 하는 원인으로 작용할 것이다. 특히 σ_{yy} 는 패턴 바로 아래보다는 그 양 옆 부분(Fig. 6(j)의 원 안)에서 크기가 더욱 큰데 이는 스탬프가 압입됨에 따라 패턴 바로 아래 부분에 있던 입자들이 양 옆으로 밀려나 이 부근에서 압축되기 때문이라 생각된다. 이렇게 입자들이 빠져나가는 출구 부분에 형성된 높은 응력 때문에 입자들의 시출이 방해되며 이는 잔류층의 두께를 얇게 하는데 걸림돌이 될 것이다[8]. Fig. 6(n)에 나타난 전단응력 τ_{xy} 의 분포를 보면 절대값의 크기가 비슷하며 방향이 반대인 전단응력이 스탬프 패턴 양 모서리 부분에서 발생하는 것을 알 수 있다.

Fig. 6(c)는 압입이 끝난 후 150,000시간 스탬프 후의 밀도분포를 나타낸다. 압입 직후에 비해 패턴 바로 아래의 입자 밀도가 많이 낮아졌으며 PMMA 박막 돌출부 높이가 더 높아졌다. 이는 밀도 차이와 압력 차이에 의해 PMMA 입자들이 움직였기 때문이다. 이 때문에 전단응력분포나 수직응력분포의 크기도 압입 직후에 비해 낮아져 있다(Fig. 6(g), 6(k), 6(o)). 그러나 패턴 바로 아래 부분의 밀도 및 응력 값은 다른 부분에 비해 높으며 이 때문에 스탬프가 분리되는 동안 박막에 탄성 회복이 일어나게 되는 것이다. Fig. 6(d)는 스탬프가 분리되기 시작한 후 55,000시간 스탬프가 경과하여 최대 압입 지점으로부터 1.75 nm 정도 분리됐을 때를 나타낸다. 입자의 밀도 분포는 압입 전처럼 거의 균일하며 패턴 바로 아래 부분에서는 PMMA 박막이 올라온 것을 관찰할 수 있다. 이는 Fig. 6(g), 6(k)에서 나타난 패턴 아래 부분의 응력 집중이 Fig. 6(h), 6(l)에서는 없어진 것으로 미루어 볼 때, 스탬프와 PMMA 사이의 점착력에 의한 것보다는 압축되어 있

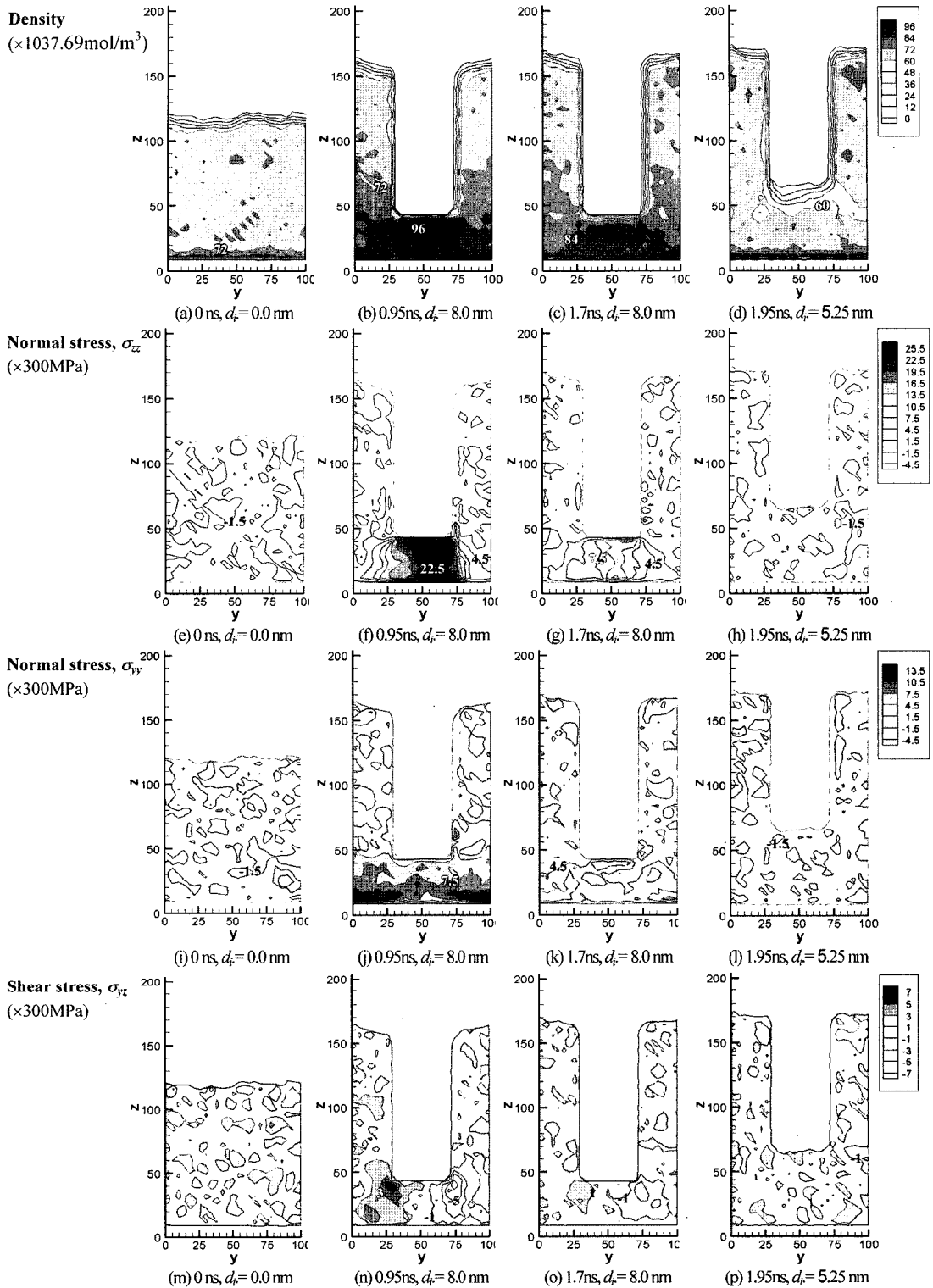


Fig. 6. Density and stress distribution (aspect ratio of pattern=2.5, indentation and separation speed=10 m/s).

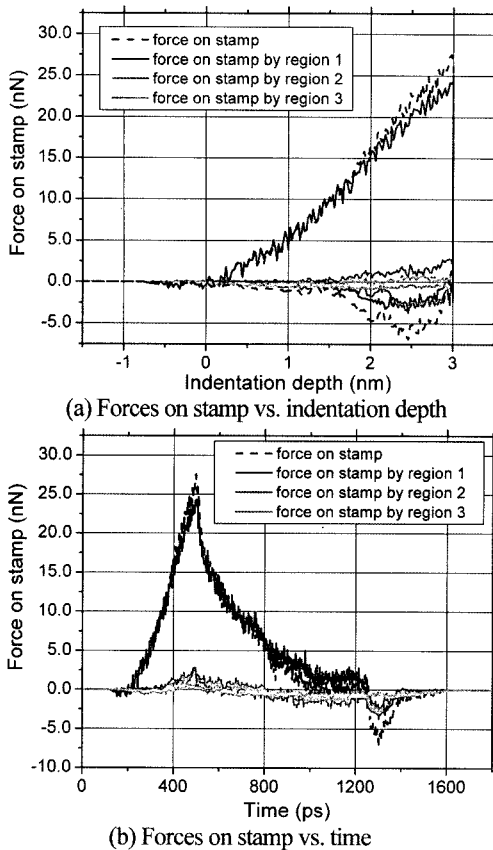


Fig. 7. Forces on stamp by each region.

던 박막이 외력이 없어짐에 따라 탄성 회복되어 변형한 것 때문이라 생각된다.

3-3. 점착력 및 마찰력 계산

Fig. 7은 패턴 높이가 5nm, 압입 및 분리 속도가 10 m/s인 경우에 대해 각각의 영역에 의해 스탬프에 작용하는 힘을 시간 및 변위에 대해 나타낸 것이다. Fig. 7(a)처럼 압입이 진행됨에 따라 압입력은 변위에 대해 거의 선형적으로 증가한다. PMMA 박막은 비정질이기 때문에 금속과 같은 결정 재료에서 나타나는 힘떨어짐(force-drop) 현상은 나타나지 않았다. 또한 압입력은 대부분 영역 1에 있는 입자들에 의해 작용한다. 이는 스탬프 패턴 바로 아래 부분에서 입자 밀도 및 응력 집중이 일어나는 현상과 연관되어 있다. 스탬프가 분리되는 동안에는 스탬프의 이동 방향과 반대 방향으로 힘이 작용하는 것을 알 수 있다. 영역 1에 있는 입자들에 의한 점착력은 스탬프가 분리됨에 따라 증가하다가 스탬프와 PMMA 박막이 분리되는 시점에

서 최대 값을 가지게 되며 그 후로는 다시 줄어들게 된다. 영역 2에 있는 입자들에 의한 마찰력의 크기는 압입이 진행됨에 따라 증가하다가 스탬프가 분리되기 시작하면서 힘의 방향이 바뀌어 다시 줄어드는 것으로 볼 때, 마찰력의 크기는 접촉면적과 비례함을 알 수 있다. 영역 3의 입자들에 의해 작용하는 힘은 그 크기가 상대적으로 작았으나 마찰력과 비슷한 경향을 나타내었다.

Fig. 7(b)처럼 압입이 진행됨에 따라 압입력은 시간에 대해 선형적으로 증가한다. 압입 직후 압입력은 매우 빠른 속도로 줄어들어 약 100,000시간스텝(500 ps) 후에는 거의 일정한 값으로 수렴한다. 이는 앞서 설명하였듯이 PMMA 박막 내부에 유동이 발생하여 소성 변형이 일어났기 때문이다. 스탬프가 분리되는 동안 발생하는 점착력과 마찰력은 스탬프가 PMMA 박막으로부터 떨어지는 순간인 260,000번째 시간 스텝(1.3 ns) 근방에서 최대가 되며 점착력과 마찰력의 크기가 거의 비슷함을 알 수 있다.

각각의 경우에 대해 스탬프의 분리 과정 동안 발생하는 최대 점착력 및 마찰력의 크기를 Fig. 8에 나타내었다. 점착력의 크기는 스탬프 패턴의 세장비와 상관없이 일정하였으며 분리 속도가 10 m/s에서 50 m/s로 증가하였을 때 약 10~15%정도 증가하였다. 반면 마찰력의 크기는 세장비가 2.5인 경우, 세장비가 1인 경우에 비해 약 50%의 증가하였으며 분리 속도가 10 m/s에서 50 m/s로 증가하였을 때 약 40~50%정도 증가하였다. 따라서 스탬프의 세장비나 분리속도는 점착력 보다는 마찰력에 큰 영향을 주게 되며 이 때문에 세장비와 분리속도가 증가할수록 스탬프를 분리하는데 필요한 힘도 증가한다.

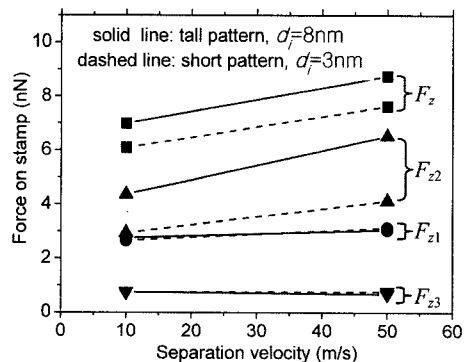


Fig. 8. Force on stamp during separation for different aspect ratio and separation velocity.

4. 결 론

본 연구에서는 분자 동역학을 이용하여 나노임프린트 리소그래피 공정을 모델링하고 패턴 전사 과정을 관찰하였다. 압입 과정 동안 스탬프 패턴의 바로 아래에서 밀도 및 응력값은 증가하며 이러한 밀도 및 응력 집중 현상은 스탬프가 머무르는 동안 PMMA 박막의 유동을 일으키게 되어 시간이 경과한 후에는 집중 현상이 어느 정도 줄어들게 된다. 또한 밀도 및 응력 집중 현상은 스탬프 분리시 박막의 탄성 회복(스프링 백)을 일으키고 패턴 아래에서 입자들의 사출을 방해하여 패턴 전사의 품질을 떨어뜨리는 원인이 된다. 또한 분리 과정 동안 스탬프에는 점착력과 마찰력이 작용하게 된다. 마찰력은 패턴의 세장비가 커질수록 증가하나 점착력은 거의 일정하다. 따라서 세장비가 큰 패턴을 전사할 때는 마찰의 영향이 더욱 커질 것으로 생각된다.

후 기

본 연구는 Brain Korea 21, 21세기 프론티어연구개발사업 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원(05K1401-00911) 및 한국과학기술정보연구원의 'Grand Challenge' 지원 프로그램을 통해 수행되었습니다.

참고 문헌

1. Chou, S. Y., Krauss, P. R. and Renstrom, P. J., "Imprint of sub-25 nm vias and trenches in polymers," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 67, No. 20, pp. 3114-3116, 1995.
2. Chou, S. Y., Krauss, P. R. and Renstrom, P. J., "Nanoimprint lithography," *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 14, No. 6, pp. 4129-4133, 1996.
3. Chou, S. Y., Krauss, P. R., Zhang, W., Guo, L. J. and Zhuang, L., "Sub-10 nm imprint lithography and applications," *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 15, pp. 2897-2904, 1997.
4. Austin, M. D., Ge, H., Wu, W., Li, M., Yu, Z., Wasserman, D., Lyon, S. A. and Chou, S. Y., "Fabrication of 5nm linewidth and 14 nm pitch features by nanoimprint lithography," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 84, No. 26, pp. 5299-5301, 2004.
5. Hirai, Y., Yoshida, S., Takagi, N., Tanaka, Y., Yabe, H., Sasaki, K., Sumitani, H. and Yamamoto, K., "High aspect pattern fabrication by nanoimprint lithography using fine diamond mold," *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 42, pp. 3863-3866, 2003.
6. Chou, S. Y., Kelmel, C. and Gu, J., 2002, "Ultrafast and Direct Imprint of Nanostructures in Silicon," *Nature*, Vol. 417, No. 20, pp. 835-837, 2002.
7. Heyderman, L. J., Schiff, H., David, C., Gobrecht, J. and T. Schweizer, "Flow behaviour of thin polymer films used for hot embossing lithography," *Microelectronic Eng.*, Vol. 54, pp. 229-245, 2000.
8. Cross, G. L. W., O'Connell, B. S. and Pethica, J. B., "Influence of elastic strains on the mask ratio in glassy polymer nanoimprint," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 86, 081902, 2004.
9. Martin, C., Ressler, L. and Peyrade, J. P., "Study of PMMA recoveries on micrometric patterns replicated by nano-imprint lithography," *Physica E*, Vol. 17, pp. 523-525, 2003.
10. Hirai, Y., Yoshida, S. and Takagi, N., "Defect analysis in thermal nanoimprint lithography," *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 20, No. 6, pp. 2765-2770, 2003.
11. Young, W. B., "Analysis of the nanoimprint lithography with a viscous model," *Microelectronic Eng.*, Vol. 77, pp. 405-411, 2005.
12. Hsu, Q. C., Wu, C. D. and Fang, T. H., "Deformation mechanism and Punch taper effects on nanoimprint process by molecular dynamics," *Jpn. J. of Appl. Phys.*, Vol. 43, No. 11A, pp. 7665-7669, 2004.
13. 강지훈, 김광섭, 김경웅, "나노임프린트 리소그래피에서의 폴리머 레지스트의 변형에 관한 분자 동역학 시뮬레이션," *대한기계학회 논문집 A권*, 제 29권 6호, pp. 852-859, 2005.
14. Kang, J. H., Kim, K. S. and Kim, K. W., "Molecular dynamics study of pattern transfer in nanoimprint lithography," *The International Tribology Conference, Book of Synopses*, pp. 355, 2005.
15. Okada, O., Oka, K., Kuwajima, S., Toyoda, S. and Tanabe, K., "Molecular simulation of an amorphous poly(methylmethacrylate)-poly(tetrafluoroethylene) interface," *Comput. Theo. Polymer Sci.*, Vol. 10, pp. 371-381, 2000.
16. Sides, S. W., Curro, J., Grest, G. S., Stevens, M. J., Soddemann, T., Habenschuss, A. and Londono, J. D., "Structure of poly(dimethylsiloxane) melts: Theory, simulation, and experiment," *Macromolecules*, Vol. 35, pp. 6455-6465, 2002.
17. Kittel, H., "Introduction to solid state physics," 6th ed., Wiley, New York, 1986.