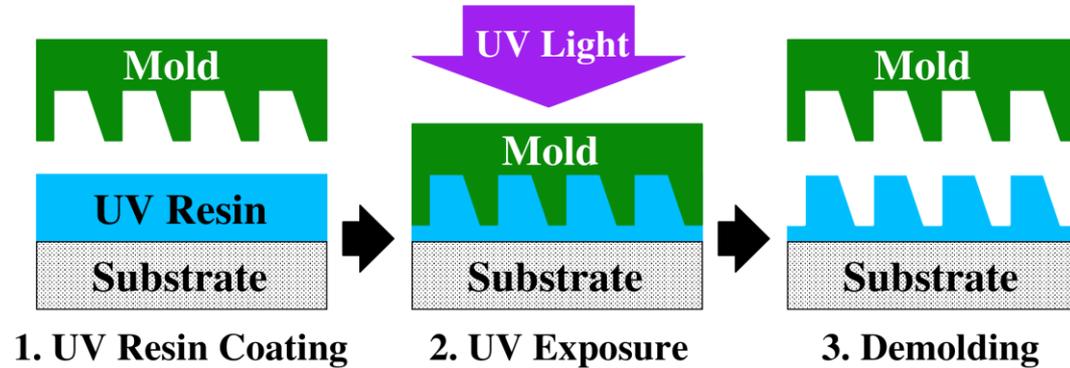


# 反応速度論に基づく UV硬化収縮と熱変形を考慮した UVインプリントの形状変形解析

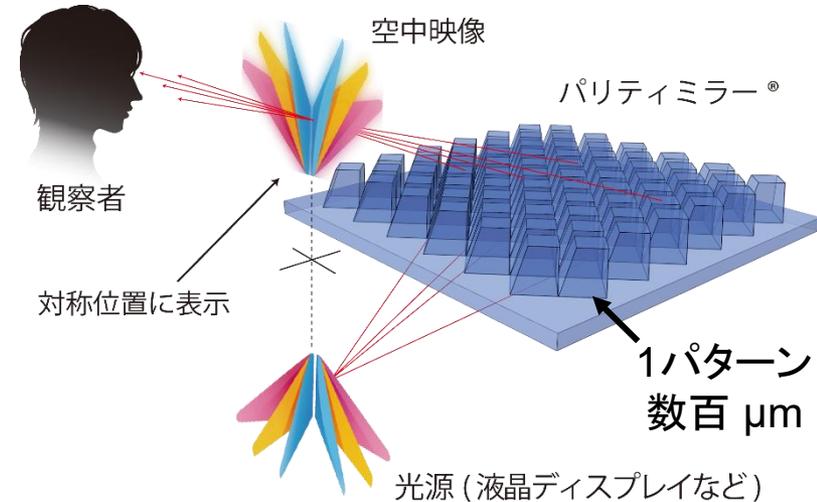
大西 有希, 山下 龍之介, 天谷 賢治 (東京工業大学)  
平井 義彦 (大阪府立大学)

# 研究背景

- **UVインプリント**は低コストかつ高スループットな微細構造物の製造方法として知られている。
- 近年，マイクロミラーアレイといった**高精度な表面形状**が要求される微細光学デバイスの製造方法として採用が進んでいる。



## UVインプリントの基本的なステップ

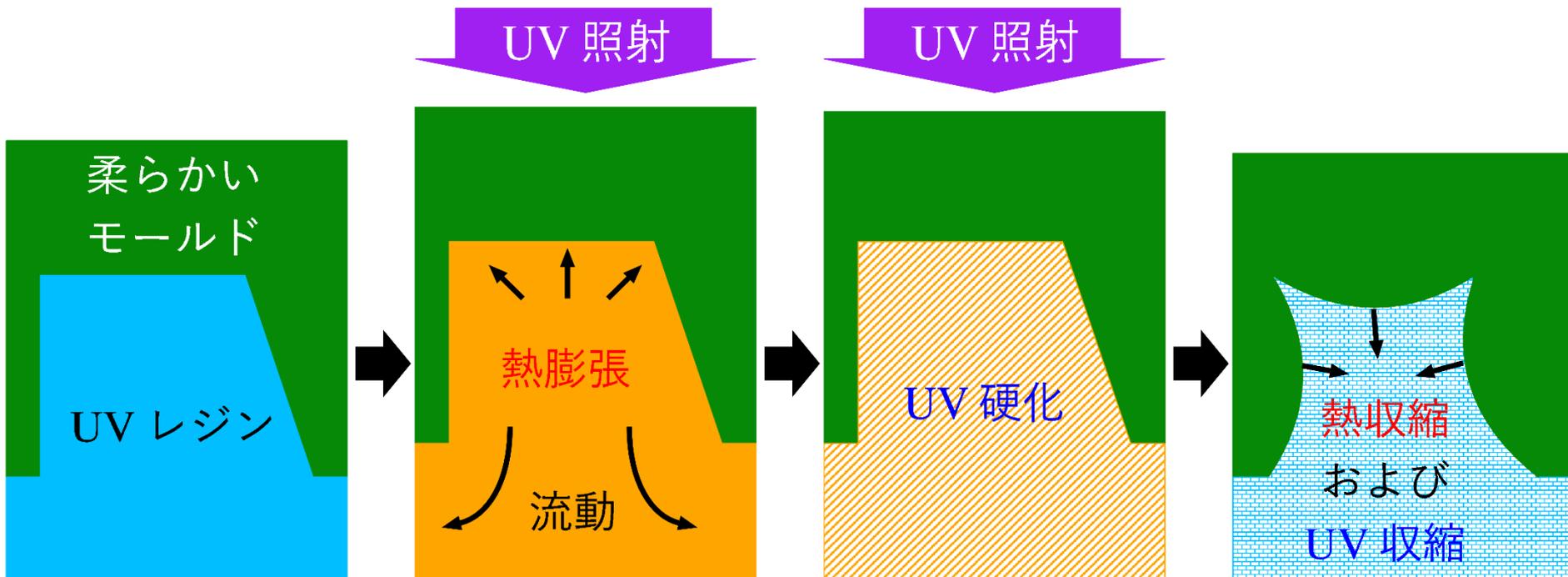


## マイクロミラーアレイの動作原理

<https://shinkachi-portal.smrj.go.jp/en/webmagazine/qriii/>

# 問題点

- インプリント中にUVレジンが**数%の熱変形**および**数% UV収縮**が発生するため、柔らかいモールドを使用すると予期せぬ**表面湾曲**が発生してしまう。



## 表面湾曲の発生メカニズム

- これを数値解析で予測したいが、UVインプリントプロセスを再現する数値モデリング手法が提案されていない。

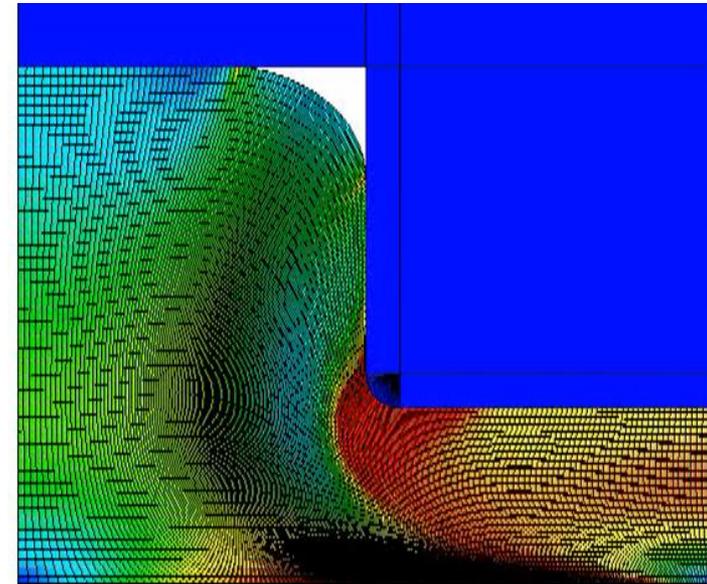
# 熱インプリントの数値モデリング手法 (参考)

UVインプリントと似たプロセス「**熱インプリント**」の数値モデリング手法は既に提案されている。

## ■ 樹脂は**熱粘弾性構成モデル**

- 熱変形: 熱膨張係数
- せん断挙動: 粘弾性体  
(一般化Maxwellモデル)
- 温度依存性: 時間-温度換算則  
(WLF則)

## ■ 大変形FEM解析.



熱インプリント解析例

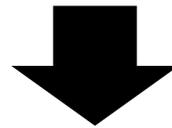
### 本研究の着想

同様のアプローチで**UVインプリント**解析も  
実現できるのではないか？

# 提案手法のアプローチ

- 熱インプリントの熱可塑性樹脂とのアナロジーに着目:
  - UV反応進行 ⇒ 温度低下
  - UV硬化 ⇒ 冷却固化
  - UV収縮 ⇒ 冷却収縮
- 仮想的に冷やすため、「**仮想温度**」の概念を導入する.

← UVレジンを  
仮想的に冷やす  
と考える.

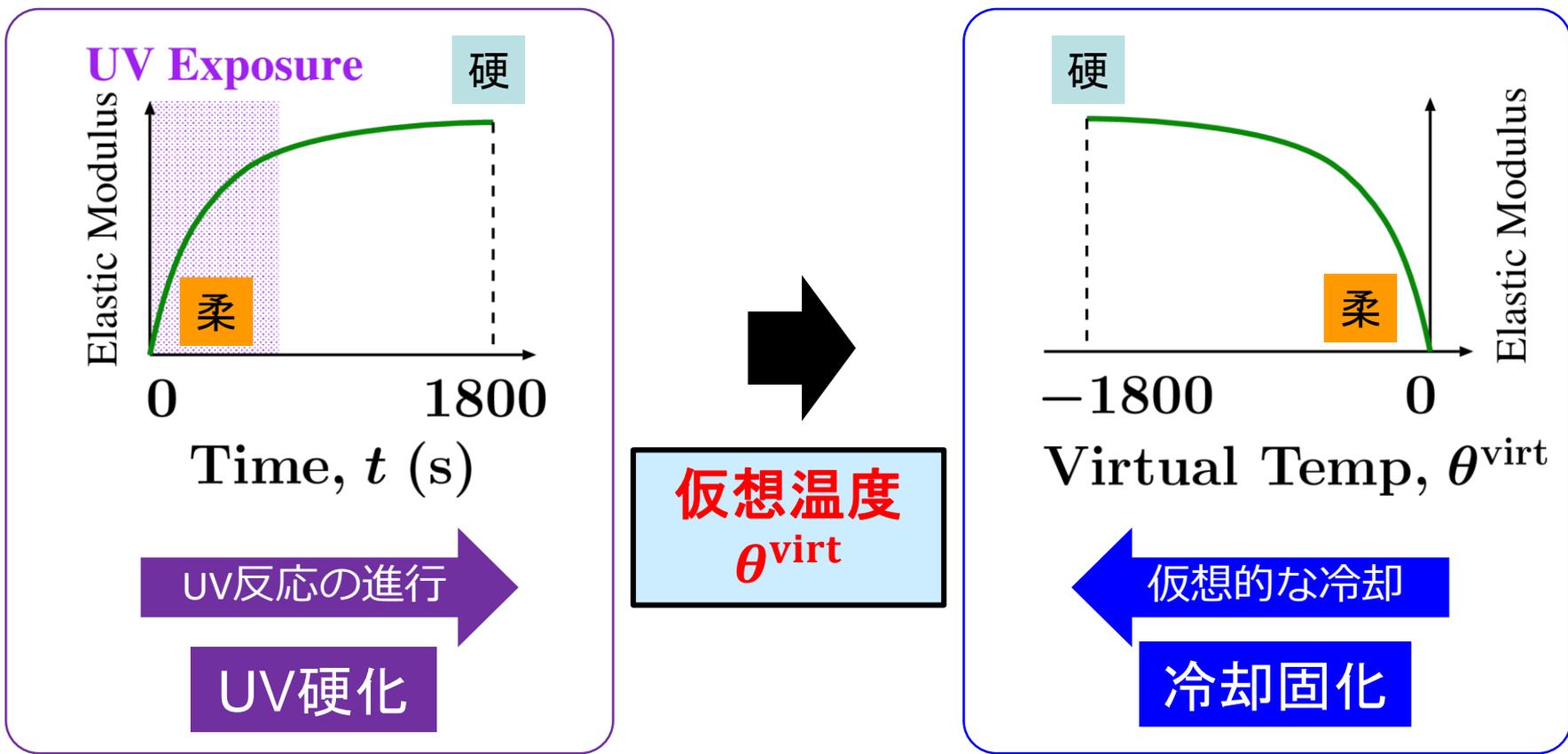


熱インプリントの数値モデリング手法に帰着.

# 仮想温度の概念

UVレジンを**仮想的に冷やす**ため、硬化進行の尺度として**仮想温度 $\theta^{virt}$** というパラメータを導入。

## 例: 「UV硬化 $\Rightarrow$ 冷却固化」の置き換え



- UV硬化・UV収縮・熱変形・温度依存反応速度の全てを考慮したUVインプリントの形状変形解析手法の確立
- 空中ディスプレイ用マイクロミラーアレイを例とした解析精度の確認

## 発表目次:

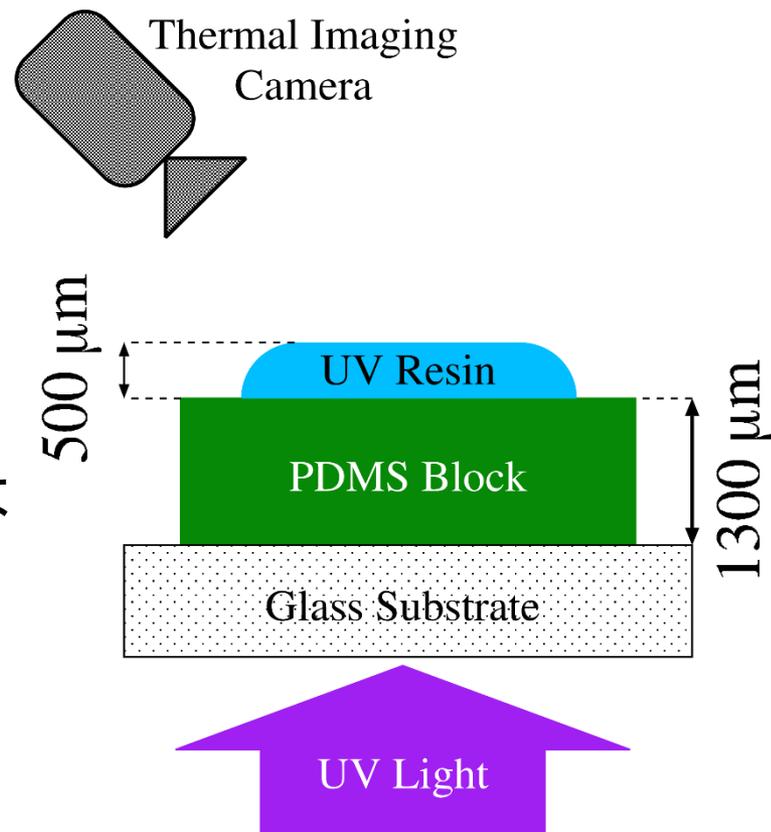
- 実験
- 手法
- 結果と考察
- まとめ

# 実験

# レジン温度測定実験

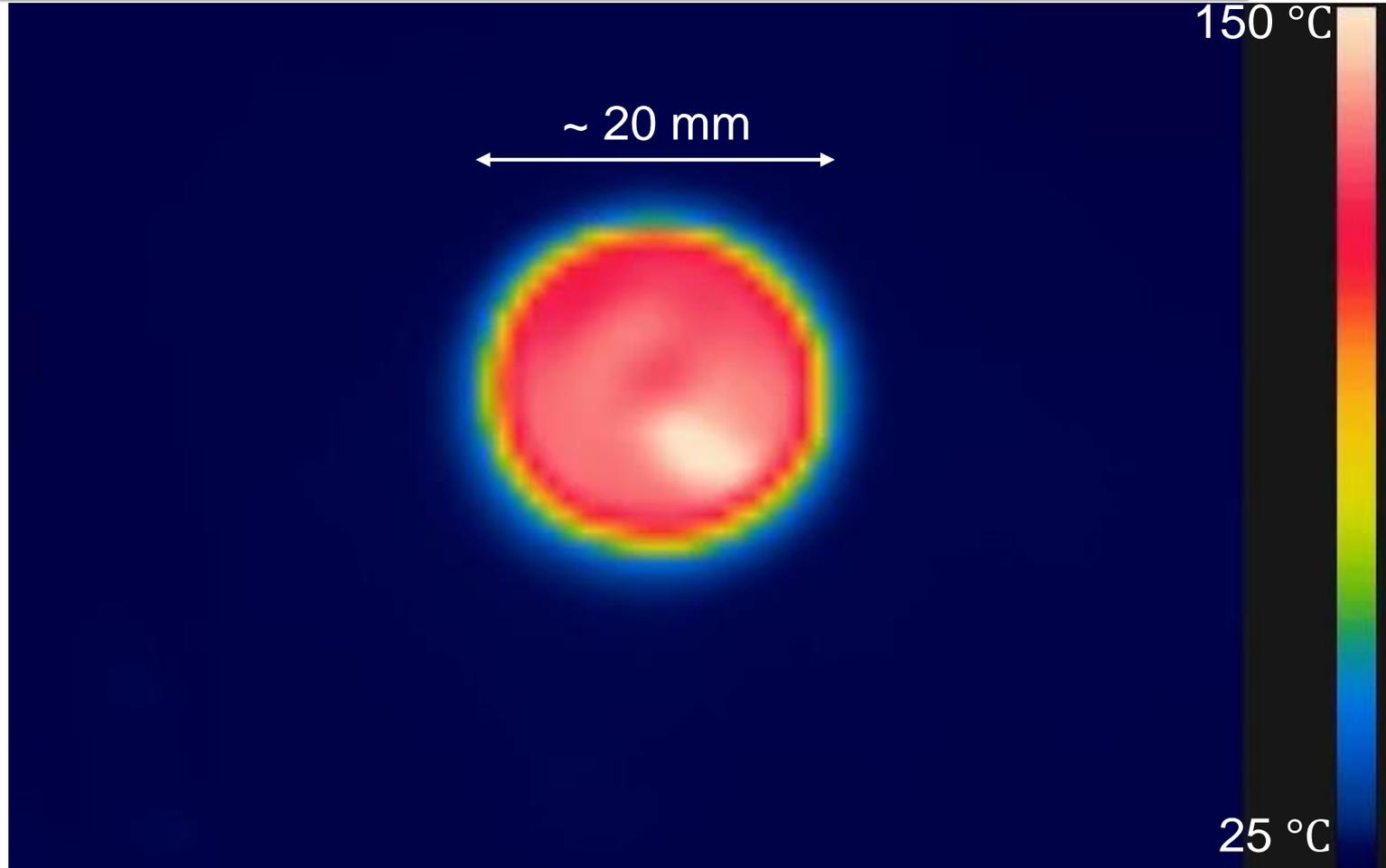
## 概要

- ガラス基板の上にPDMSブロックを載せ、その上にUVレジンを滴下.
- 下面側からUV光を照射.
- 上面側からサーモグラフィーで撮影し、温度を測定.
- UVレジンやブロックの材質と厚さ、UV光源の波長・強度・照射時間等は検証用ミラーアレイの実成形と同一.
  - カチオン重合系UVレジン
  - ヤング率 5 MPaの硬質PDMS
  - 365 nmの単色UV-LED面光源
  - $50 \text{ mW/cm}^2$ で30秒照射.



# レジン温度測定実験

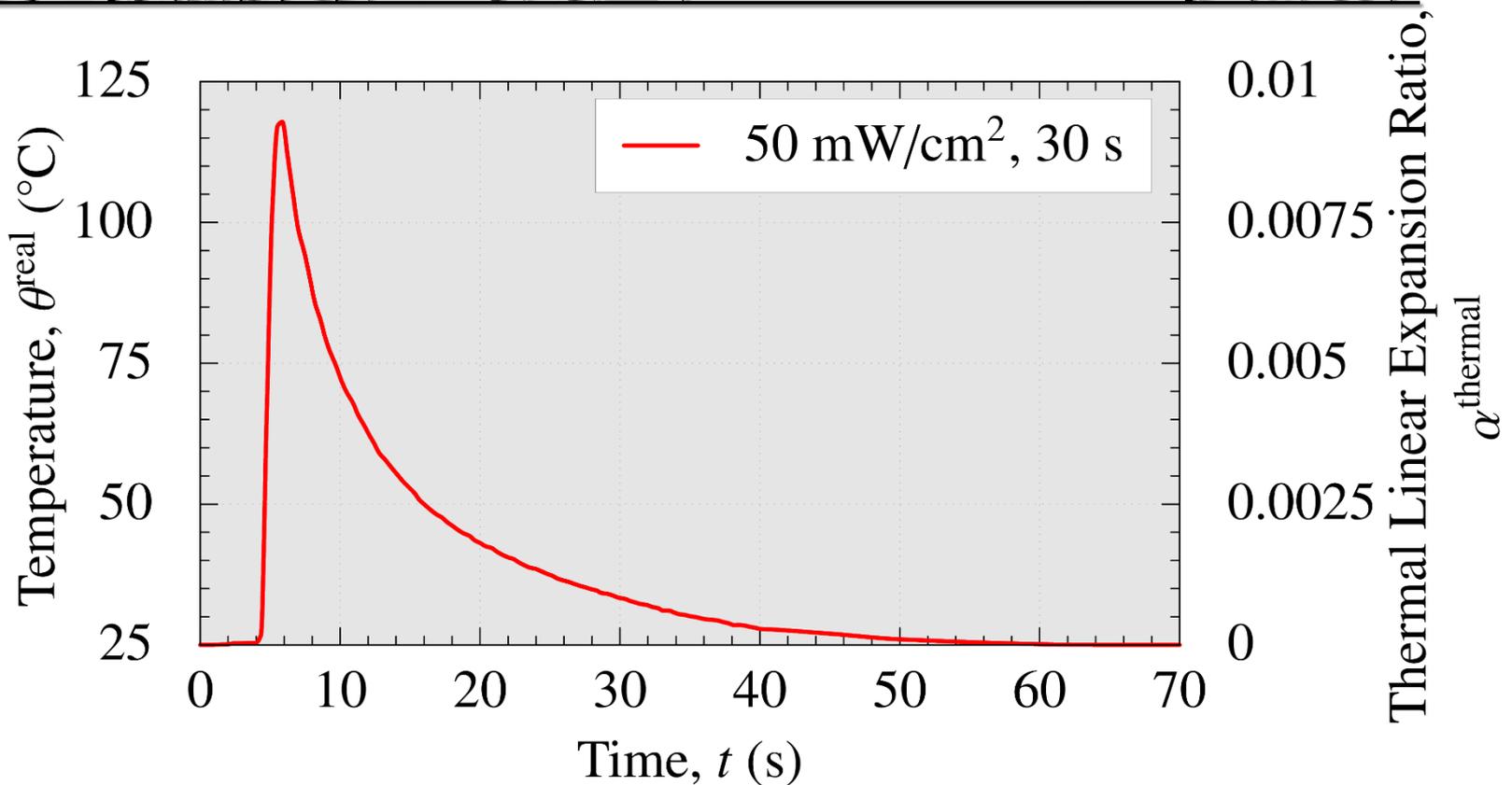
## 温度撮影結果の一例 ( $300 \text{ mW/cm}^2$ で30秒照射)



照射開始から6秒後に最高温度( $100^\circ\text{C}$ 超)に達し、  
徐々に室温に戻ってゆく様子が見て取れる。

# レジジン温度測定実験

## 温度と線熱膨張の時刻歴 (50 mW/cm<sup>2</sup> で30秒照射)



※別実験より、線熱膨張係数が $1.0 \times 10^{-4}$  [1/K]であることを利用.

100K弱の温度上昇により、照射から6秒後に1%弱の線熱膨張(体積膨張で3%弱)を起こしている.

# UV収縮/複素せん断弾性率測定実験

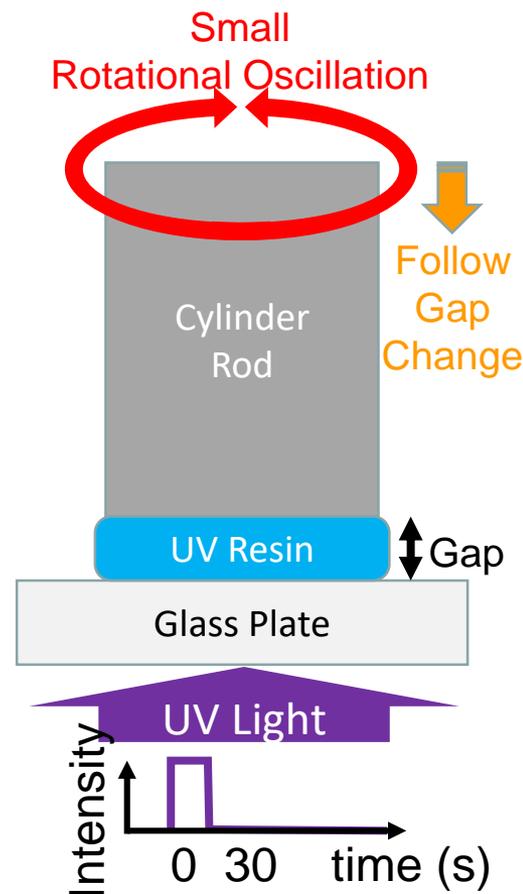
## 概要

- 回転型動的粘弾性試験
- UVレジンにUV光を照射しながら**微小回転振動**を与える。
- ギャップ長さの変化から、**UV収縮**の時間変化も測定。
- 温度と回転振動数を様々に変化させて**複素せん断弾性率**の時間変化を測定。
- UV照射が終わっても「暗硬化」により硬化および収縮が継続する点に注意。
- UV照射条件は実成形と同一。
- レジン温度は温調とアルミロッドにより一定に保たれる。



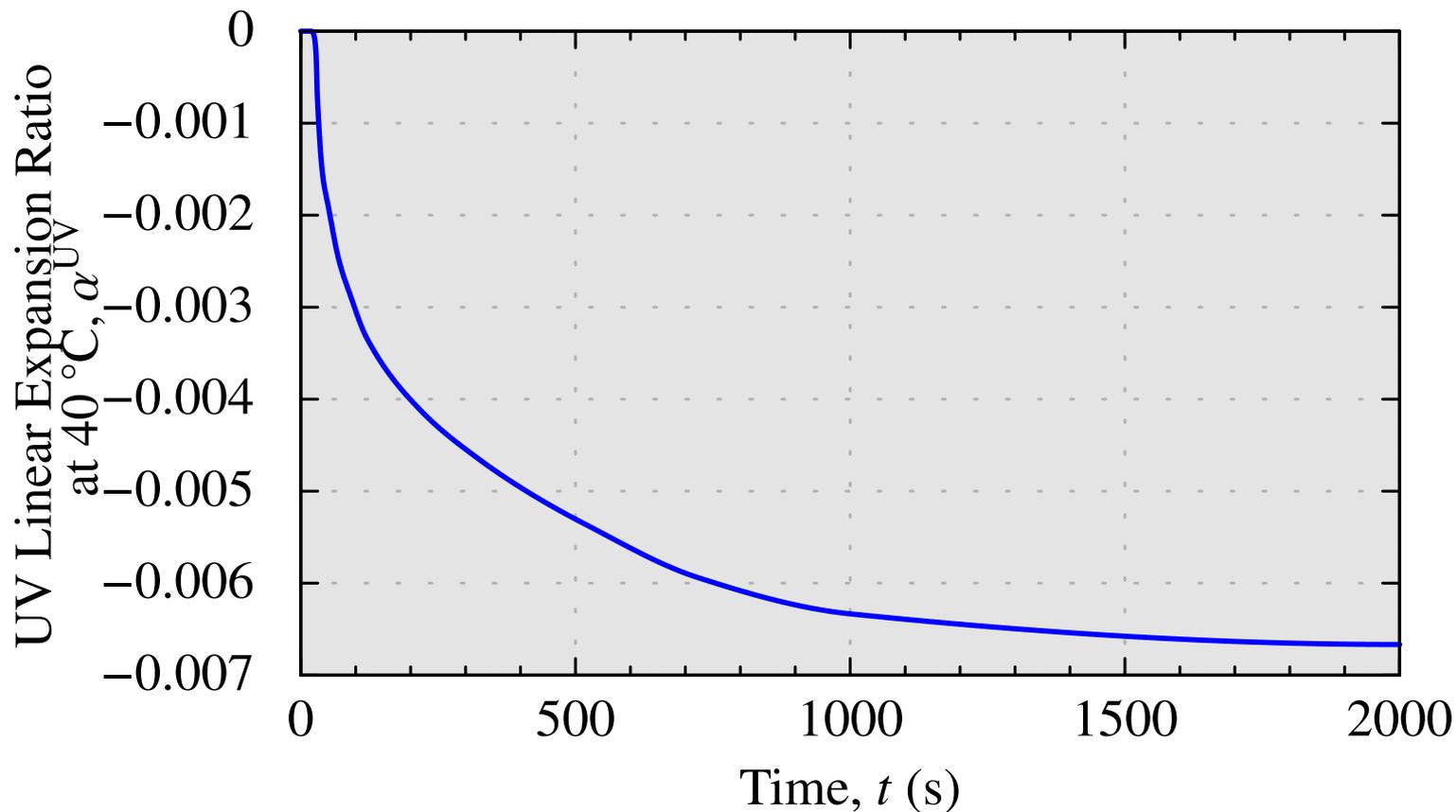
***Anton Paar MCR series***

<https://www.anton-paar.com/corp-en/products/details/rheometer-mcr-102-302-502/>



# UV収縮 / 複素せん断弾性率測定実験

## UV収縮の測定結果 (温度は40°C固定, 振動数非依存)

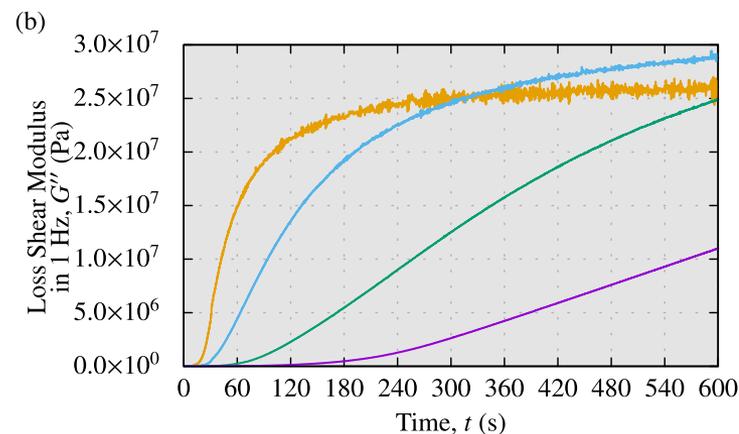
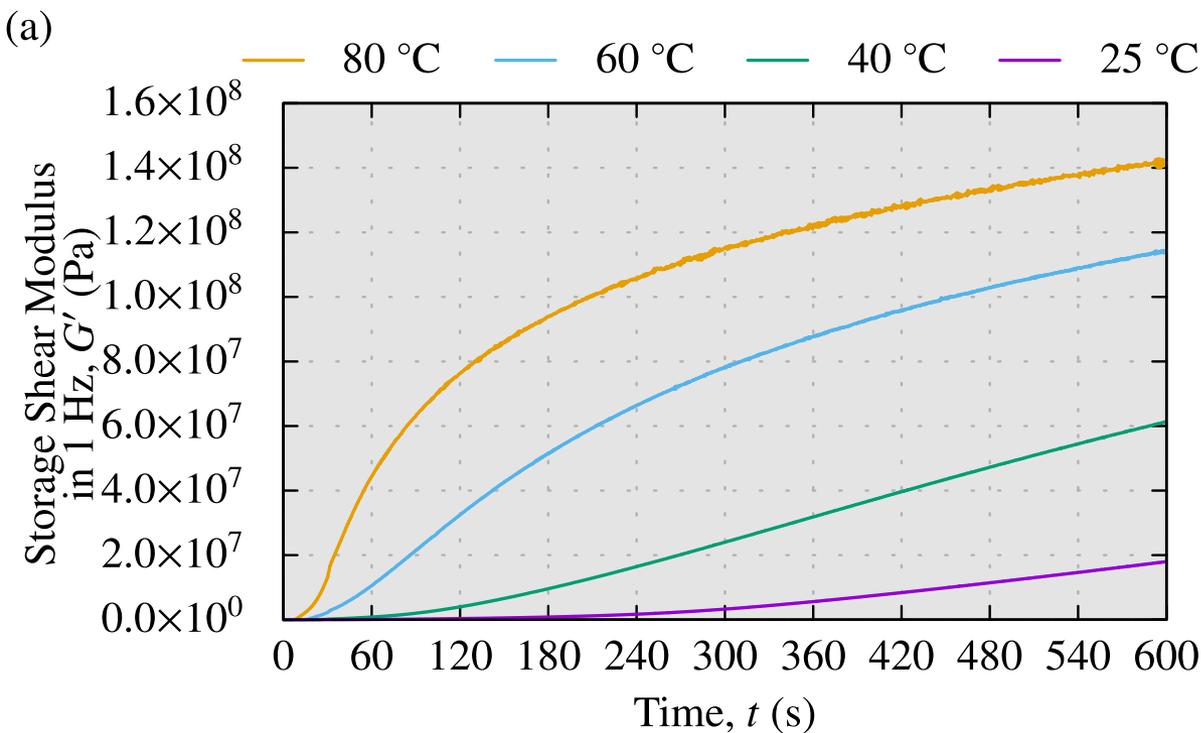


最終的に約0.7%のUV線収縮(体積収縮で約2%)を起こしている。  
⇒ 前述の熱変形と合算して「熱」膨張として扱えそう。

# UV収縮 / 複素せん断弾性率測定実験

## 様々な温度での弾性率測定結果(振動数は1 Hz固定)

左図: 貯蔵弾性率 $G'$ , 右図: 損失弾性率 $G''$



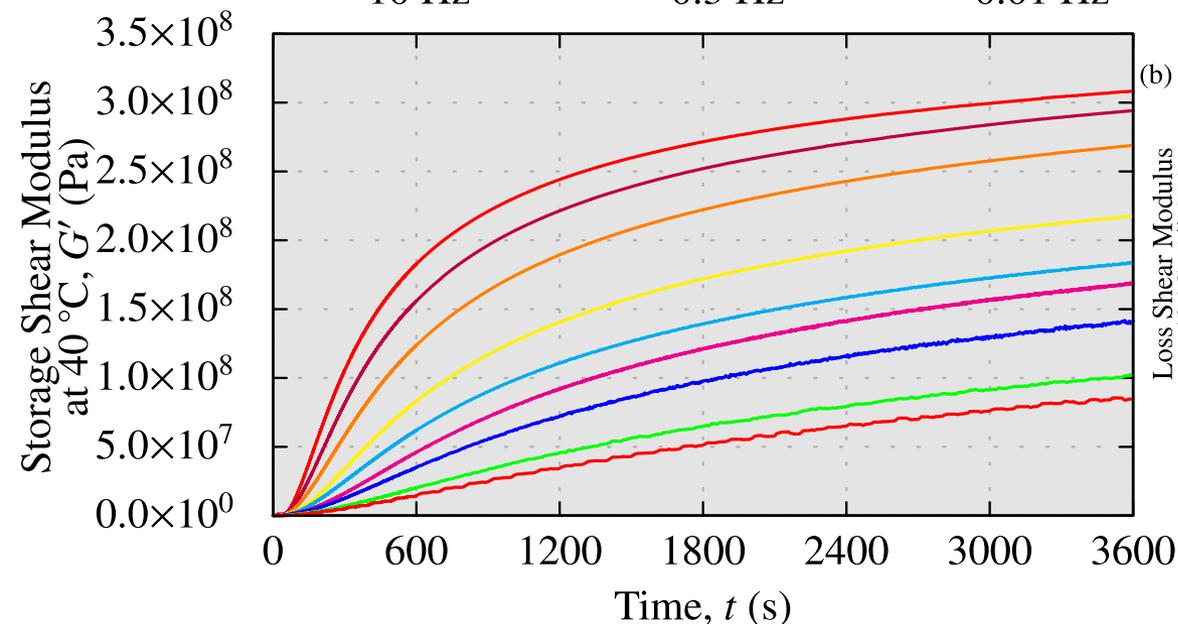
温度が上がると、早く硬化する様子が見て取れる。  
⇒ 温度依存の反応速度定数を同定出来そう。

# UV収縮 / 複素せん断弾性率測定実験

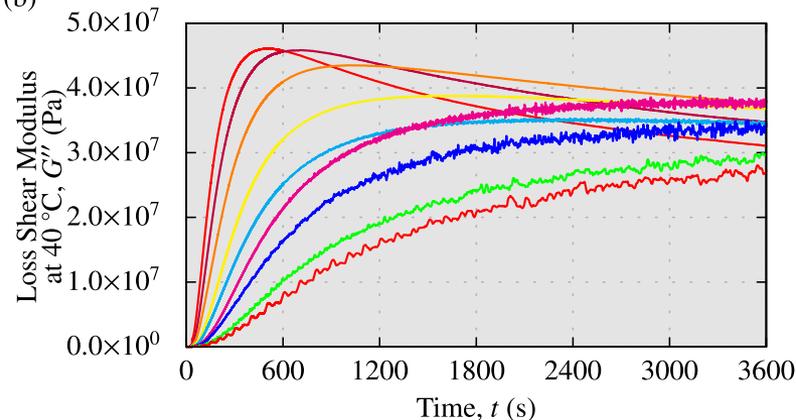
## 様々な振動数での弾性率測定結果 (温度は40°C固定)

左図: 貯蔵弾性率 $G'$ , 右図: 損失弾性率 $G''$

(a)



(b)

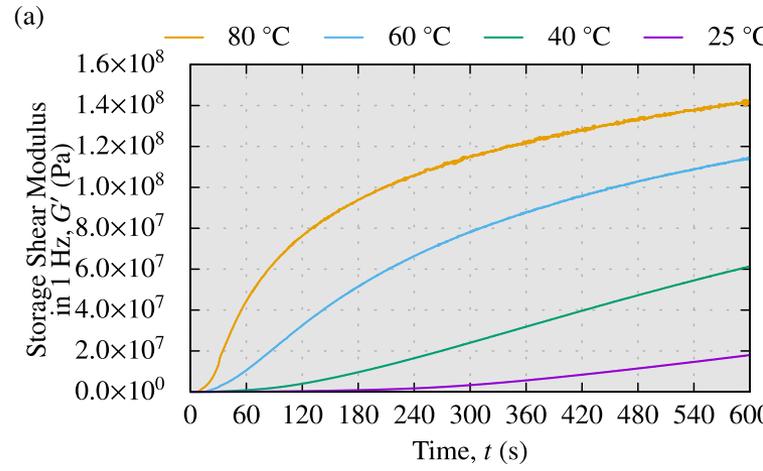


振動数が上がると、貯蔵弾性率が大きくなる様子が見て取れる。  
⇒ 一般化MaxwellモデルのProny級数および  
時間-(仮想)温度換算則を同定出来そう。

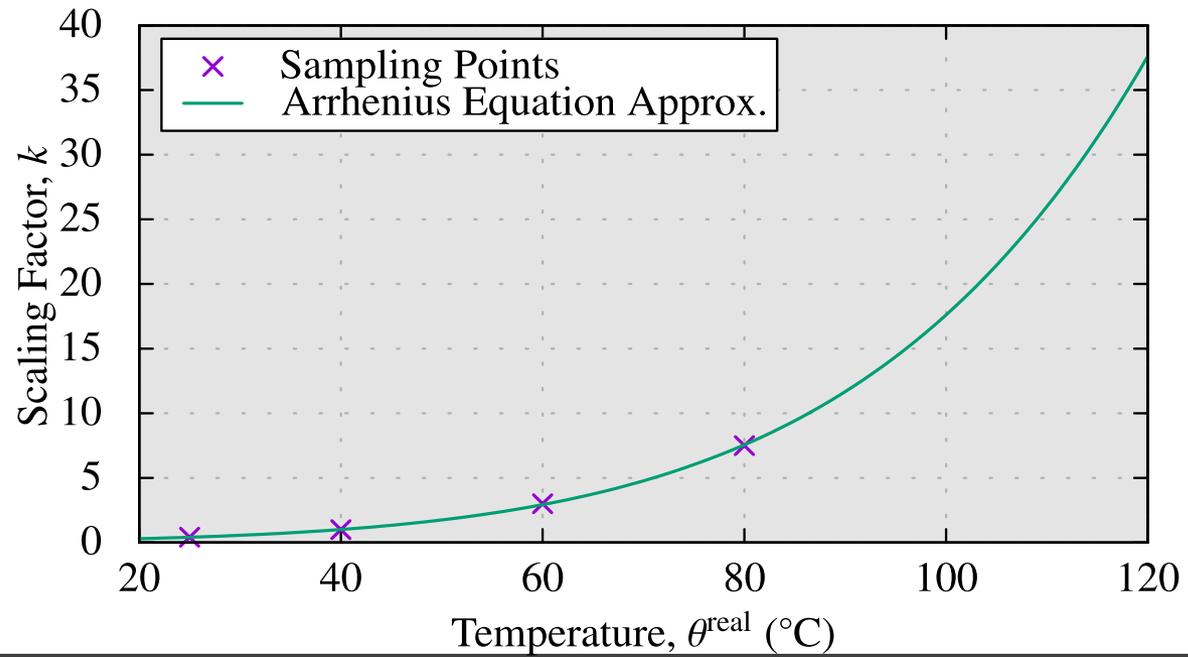
# 手法

# アレニウス定数の同定

- 先述の様々な温度での複素せん断弾性率の時間変化図(右図)から、反応速度定数 $k(\theta^{\text{real}})$ が同定できる。ただし、 $40^{\circ}\text{C}$ を基準( $k = 1$ )とする。
- 反応速度論に基づき、**アレニウスの式**でフィッティングする。



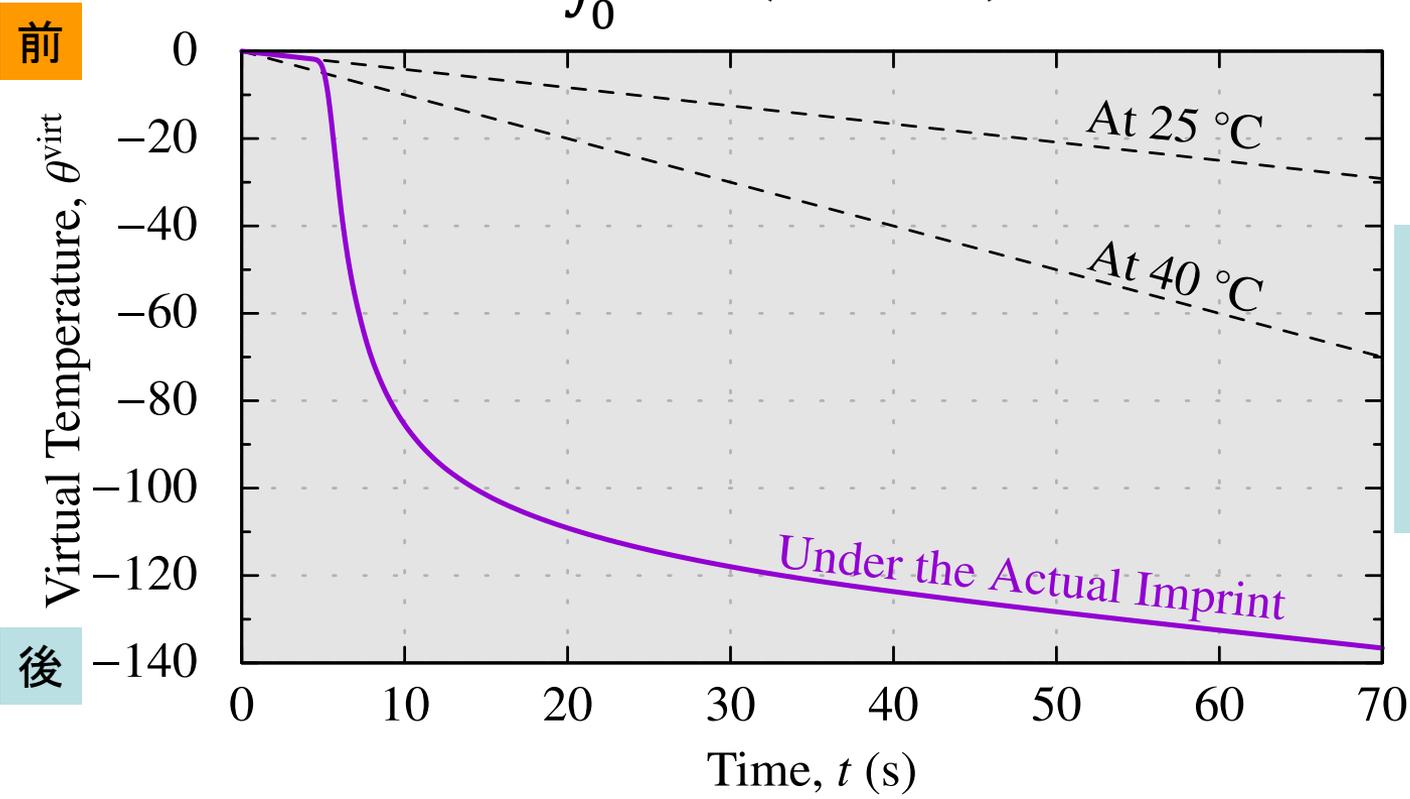
$$k(\theta^{\text{real}}) = C_1 \exp(-C_2/(\theta^{\text{real}} + 273.15))$$



# 仮想温度時刻歴の設定

- UV照射前( $t \leq 0$ )の仮想温度 $\theta^{\text{virt}}$ をゼロとする.
- UV照射後はその瞬間の反応速度 $k$ に従って次式の通り $\theta^{\text{virt}}$ を単調減少させる. これがUV硬化反応の進行度を表す.

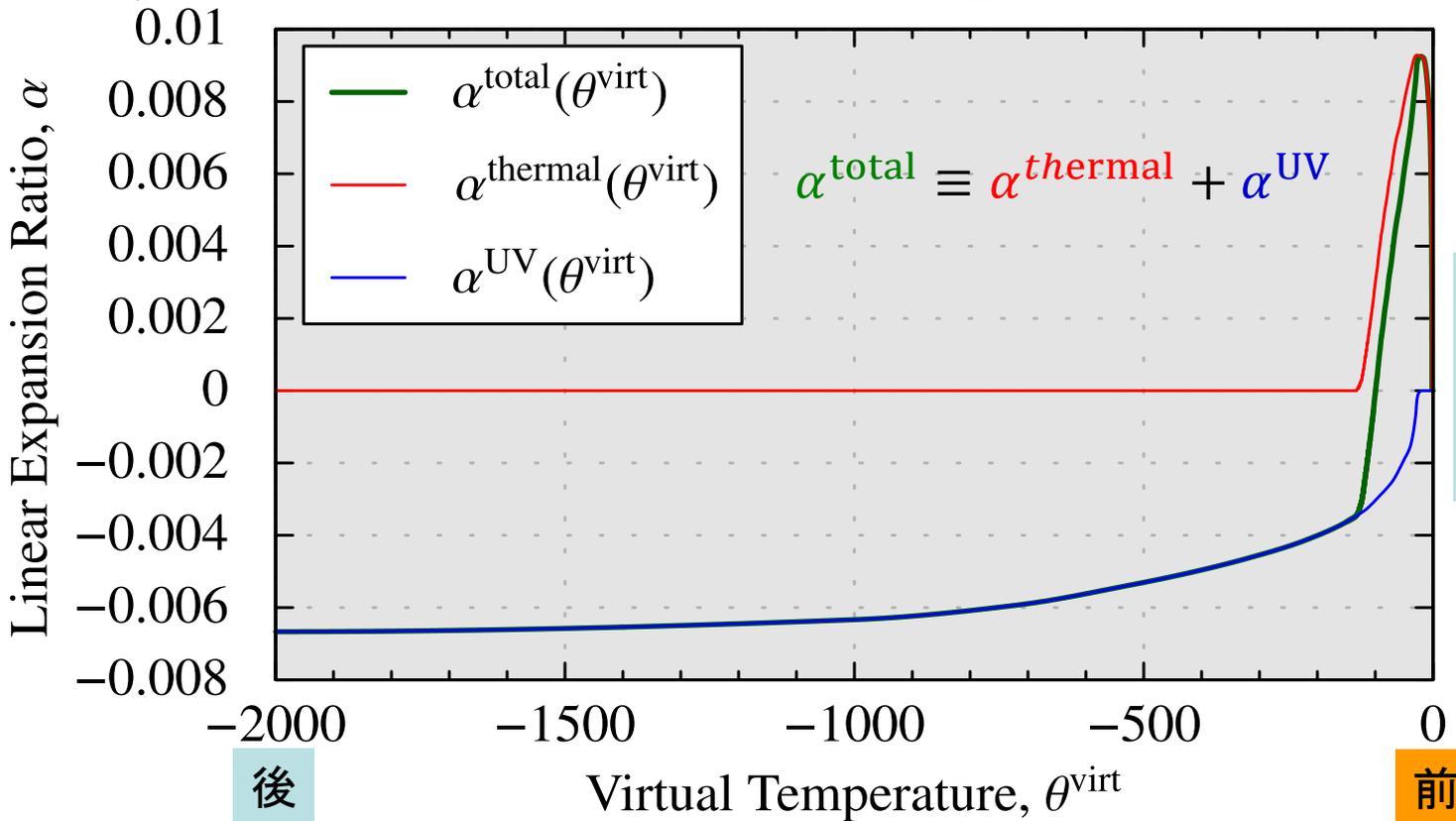
$$\theta^{\text{virt}}(t) \equiv \int_0^t -k(\theta^{\text{real}}(t)) dt$$



左の曲線を樹脂温度のテーブルデータとして与える.

# 仮想温度依存の膨張率の同定

- 先述の時間依存の熱変形およびUV収縮のグラフを仮想温度依存の形に変換する。
- 両者を合算したものが仮想温度依存の膨張率となる。  
⇒ 熱変形とUV収縮を同時に考慮できる。



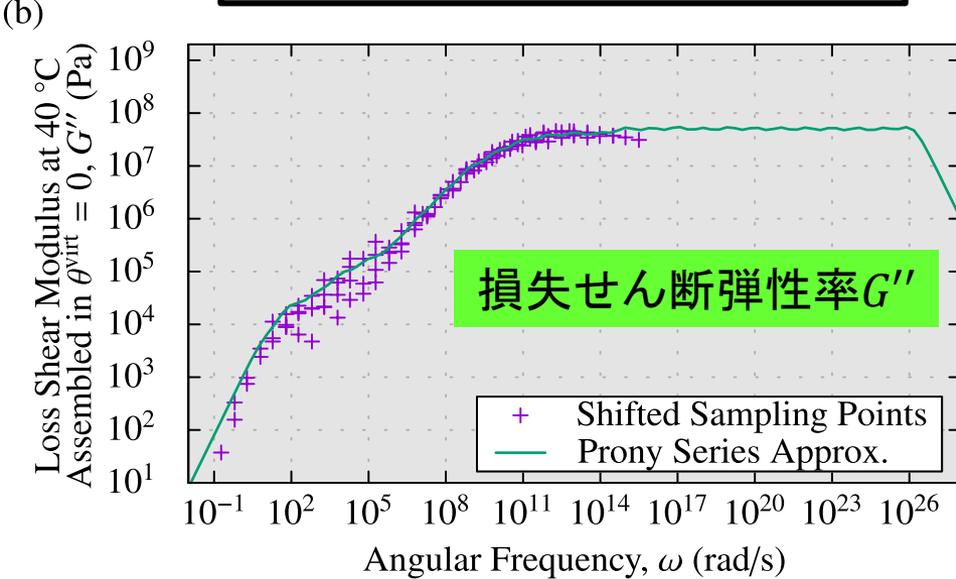
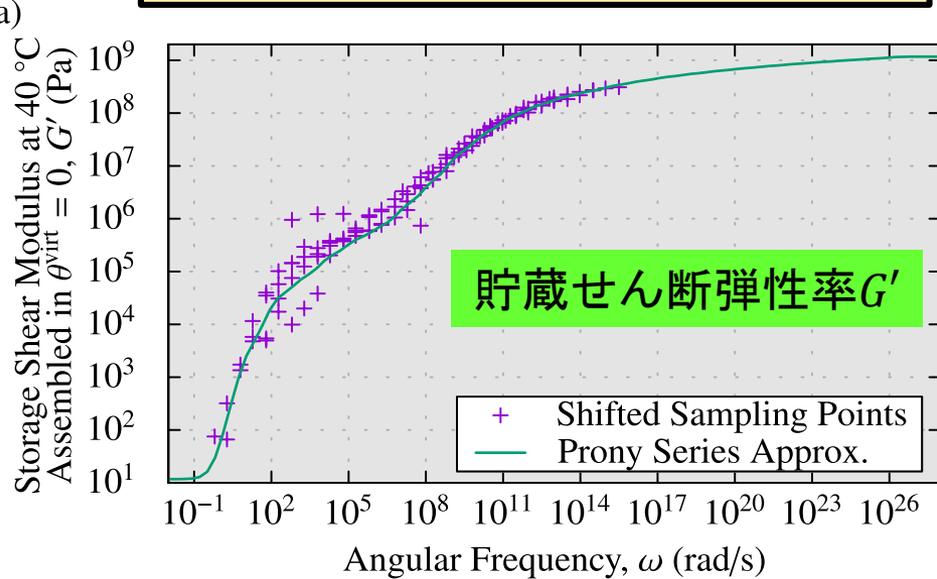
左の曲線を  
テーブル  
データで  
与える。

# 熱粘弾性特性の同定 (Prony級数)

- 貯蔵/損失せん断弾性率のマスターカーブをProny級数でフィッティングし, Prony係数( $g_i, \tau_i$ )を同定し, レジン物性とする.

$$G'(\omega) = G_\infty + G_0 \sum_i \left( g_i \frac{\omega^2 \tau_i^2}{1 + \omega^2 \tau_i^2} \right)$$

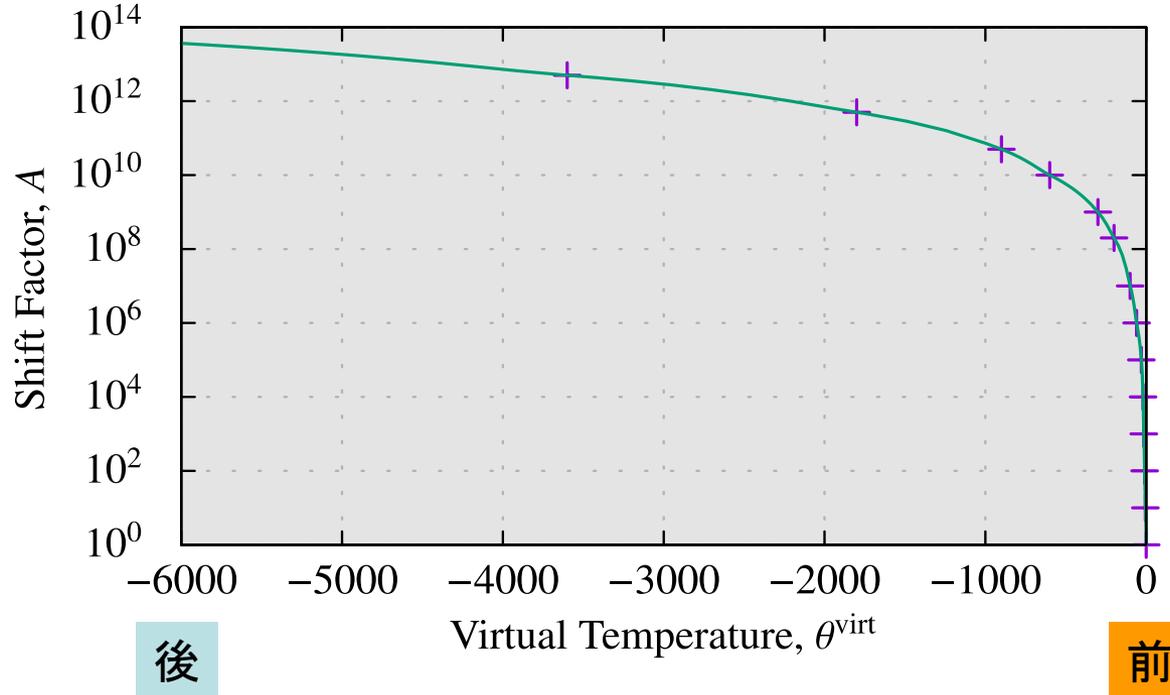
$$G''(\omega) = G_0 \sum_i \left( g_i \frac{\omega \tau_i}{1 + \omega^2 \tau_i^2} \right)$$



- 即時せん断弾性率  $G_0$  および体積弾性率  $K$  (一定) は完全硬化したUVレジンを用いて測定.
- 長期せん断弾性率  $G_\infty$  は妥当な値 ( $G_0 \times 10^{-9}$ ) に定めた.

# 熱粘弾性特性の同定（時間－仮想温度換則）

- マスターカーブを作成する過程で得られる時間シフト量をフィッティングすることにより、**シフトファクター（時間－仮想温度換算則）**を同定し、レジン物性とする。



- 上記曲線はWLF則等の理論式には乗らないため、テーブルデータで与える。

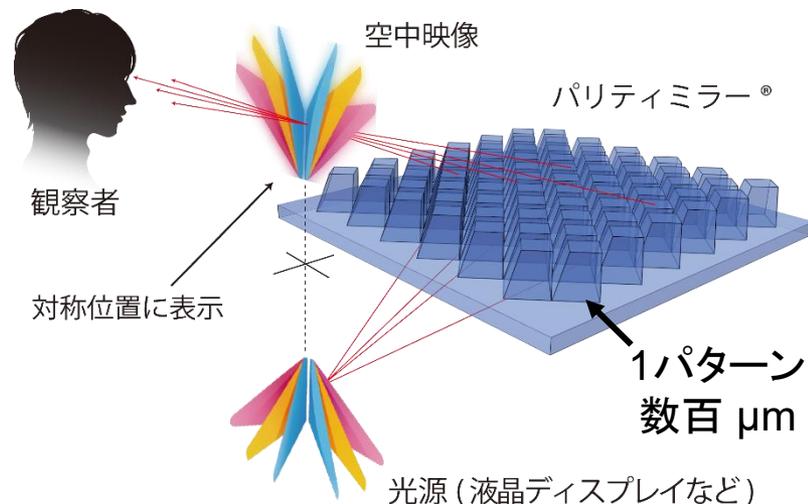
以上により、UVレジンのモデルパラメーター式が同定された。

# 結果と考察

# マイクロミラーアレイ成形解析

## 概要

- 空中ディスプレイ用のマイクロミラーアレイを対象.
- 繰り返し構造を持つことから、パターン1個のみを解析対象とし、周囲に周期境界条件を与える.
- パターンにUVレジンが充填された状態を初期状態とする.
- 汎用有限要素解析ソフトABAQUS/Standard 2017を使用.
- 要素には8節点六面体SRI要素(C3D8)を使用.



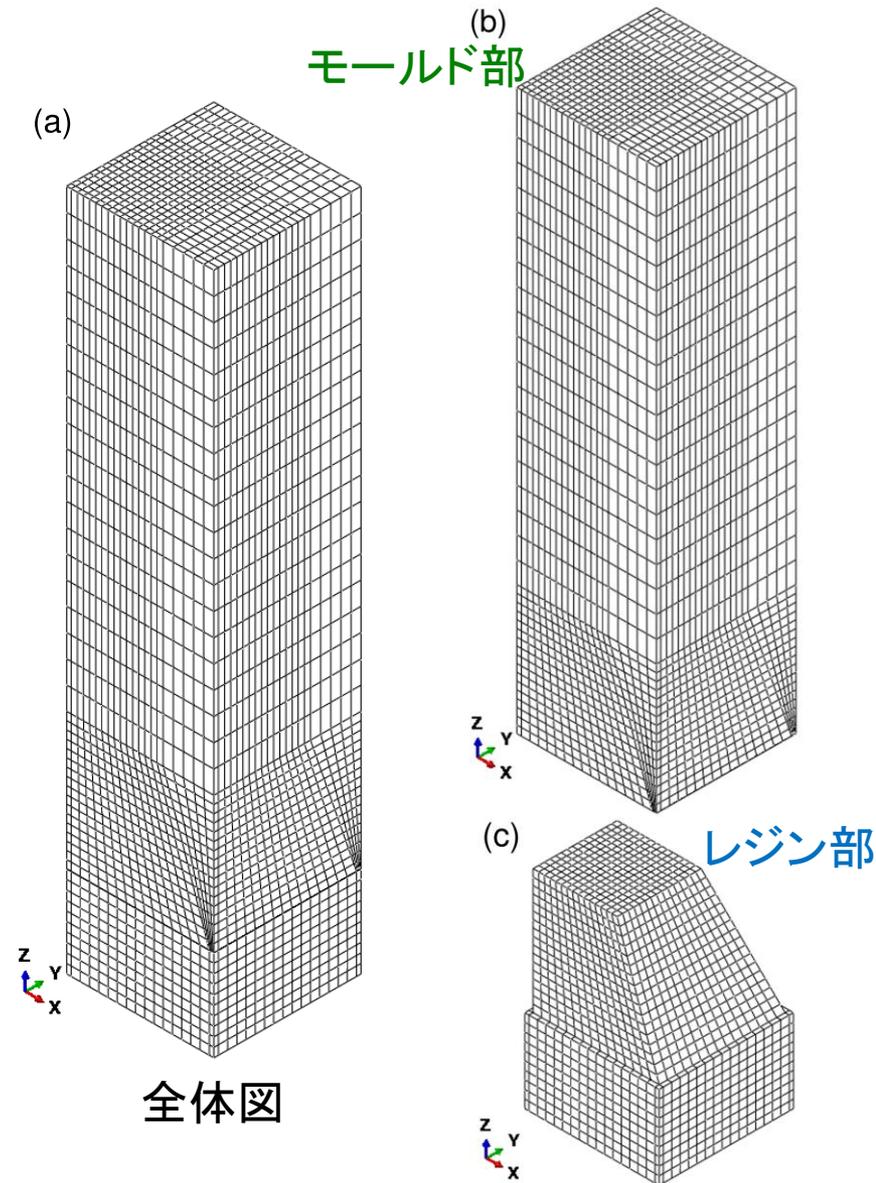
## マイクロミラーアレイの動作原理

<https://shinkachi-portal.smrj.go.jp/en/webmagazine/qriii/>

# マイクロミラーアレイ成形解析

## 概要

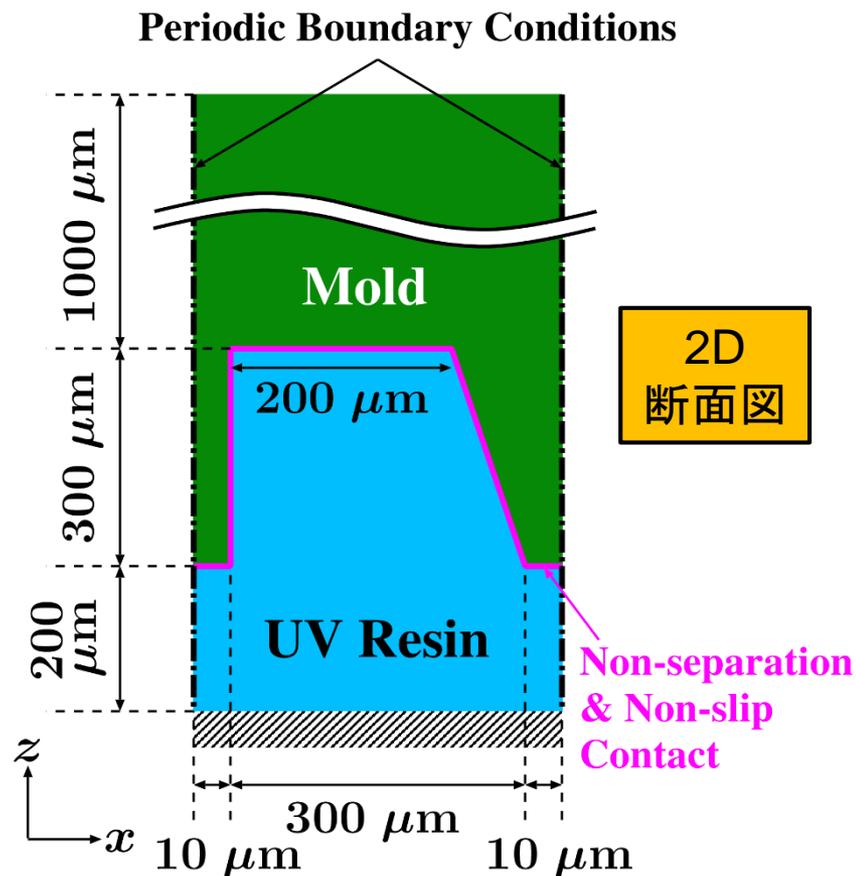
- 空中ディスプレイ用のマイクロミラーアレイを対象.
- 繰り返し構造を持つことから、パターン1個のみを解析対象とし、周囲に周期境界条件を与える.
- パターンにUVレジンが充填された状態を初期状態とする.
- 汎用有限要素解析ソフトABAQUS Standard 2017を使用.
- 要素には8節点六面体SRI要素(C3D8)を使用.



# マイクロミラーアレイ成形解析

## 成形解析のステップ

- **Step 1: 静止 (0 s)**
  - 重力を与えた静解析
- **Step 2: UV硬化/収縮 (500 s)**
  - 準静的解析
  - UVレジンの仮想温度を降下  
 $\theta^{\text{virt}} = 0 \rightarrow -312$
- **Step 3: 離型 (10 s)**
  - 準静的解析
  - 分離なし・滑りなし接触の除去
  - モールドを上方へ引き上げ
  - $\theta^{\text{virt}} = -312 \rightarrow -316$
- **Step 4: 暗硬化 (100000 s)**
  - 準静的解析
  - $\theta^{\text{virt}} = -316 \rightarrow -41164$

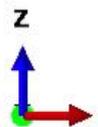
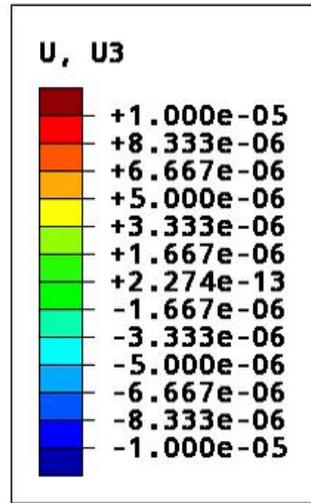


パート	割り当てる材料特性
モールド	Neo-Hooke超弾性特性
UVレジン	同定された熱粘弾性特性

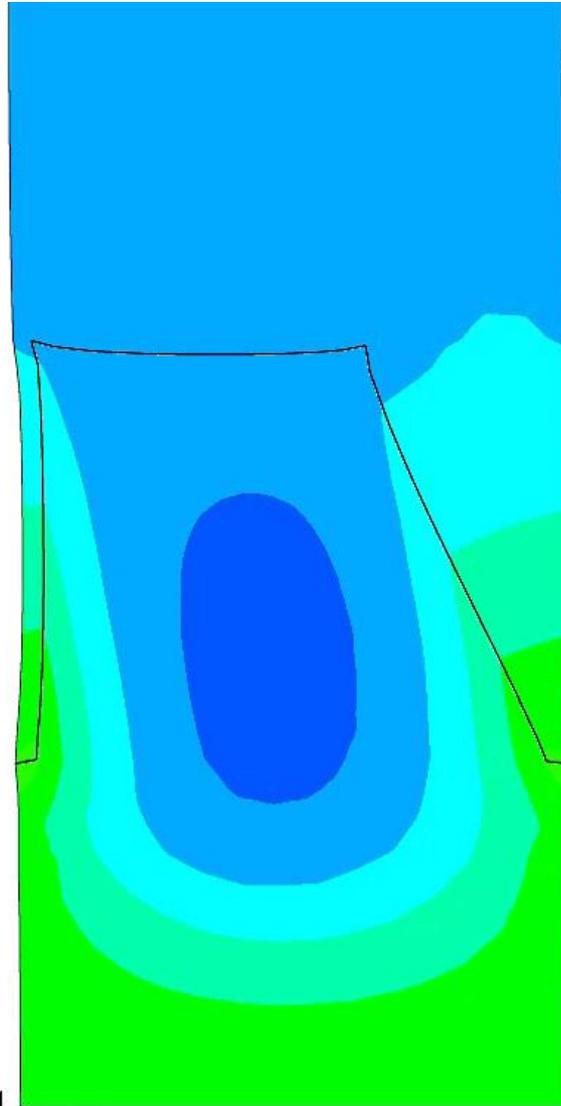
# 解析結果

## 中央Y断面 における Z方向 変位分布 の時刻歴

変形倍率  
10倍表示



Step: step1  
Increment 584: Step Time = 500.0  
Primary Var: U, U3  
Deformed Var: U Deformation Scale Factor: +1.000e+01

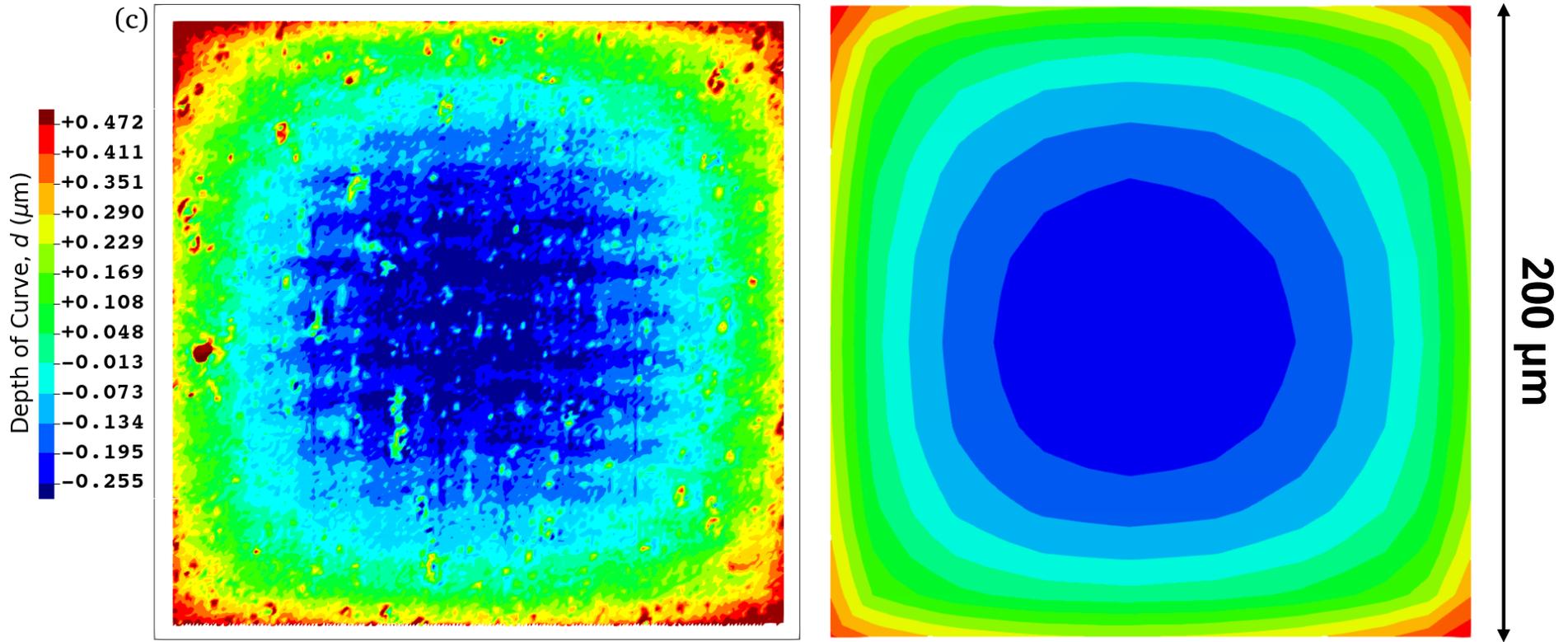


周期境界条件  
が正しく与えら  
れていること  
が確認できる。

UV照射直後に  
熱膨張した後、  
徐々に収縮して  
ゆく様子が再現  
出来ている。

# 実測と解析結果の比較

## パターン上面の湾曲深さ分布比較



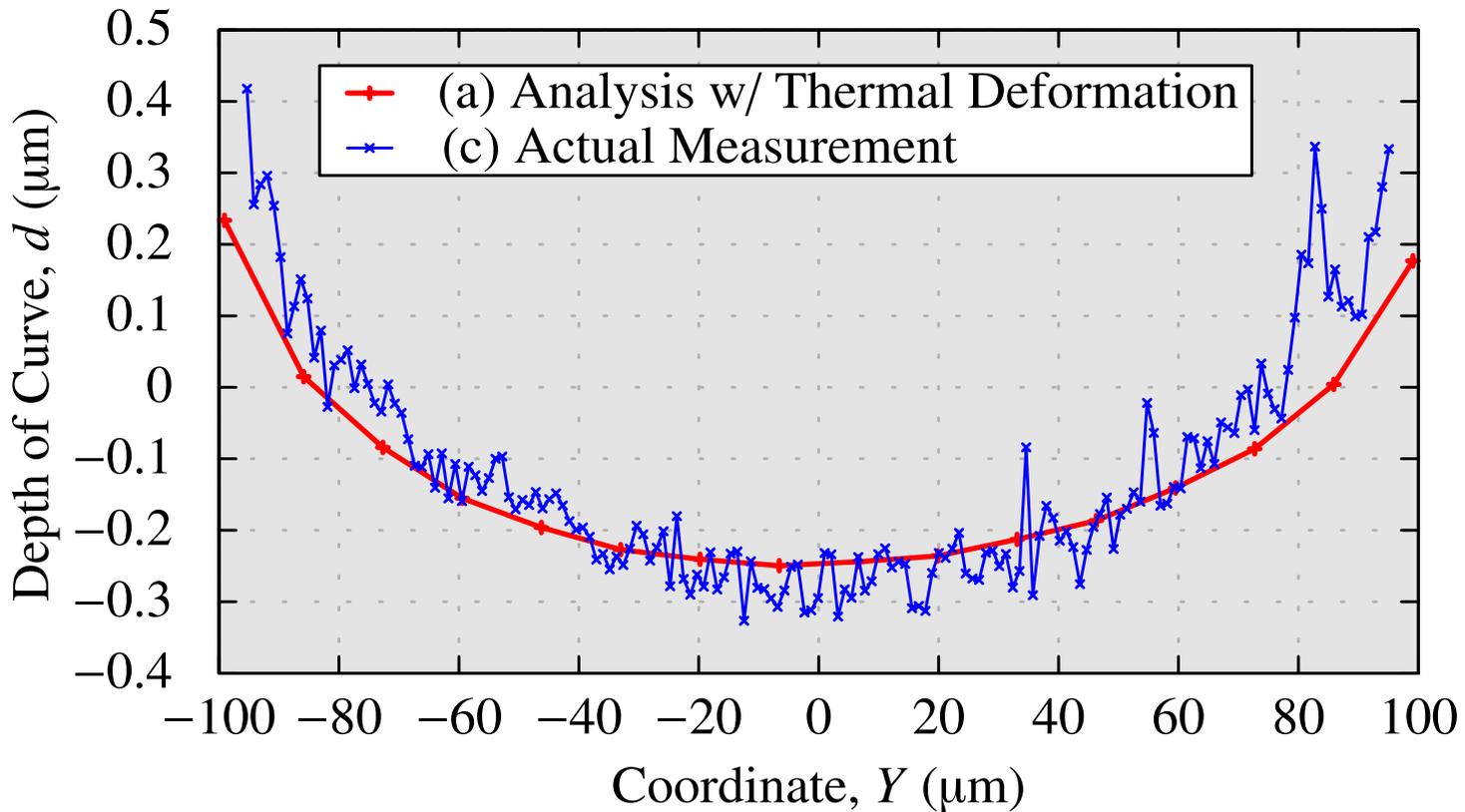
レーザー顕微鏡の実測

FEM解析結果

両者の湾曲の様子が良く一致している。

# 実測と解析結果の比較

## パターン上面の縦中心線上の湾曲深さ分布比較



両者は相当程度一致しているが、解析結果の湾曲深さは実測より約10%浅い結果となった。PDMSモールドの温度上昇による熱軟化等を考慮する必要があるかも知れない。

# まとめ

# まとめ

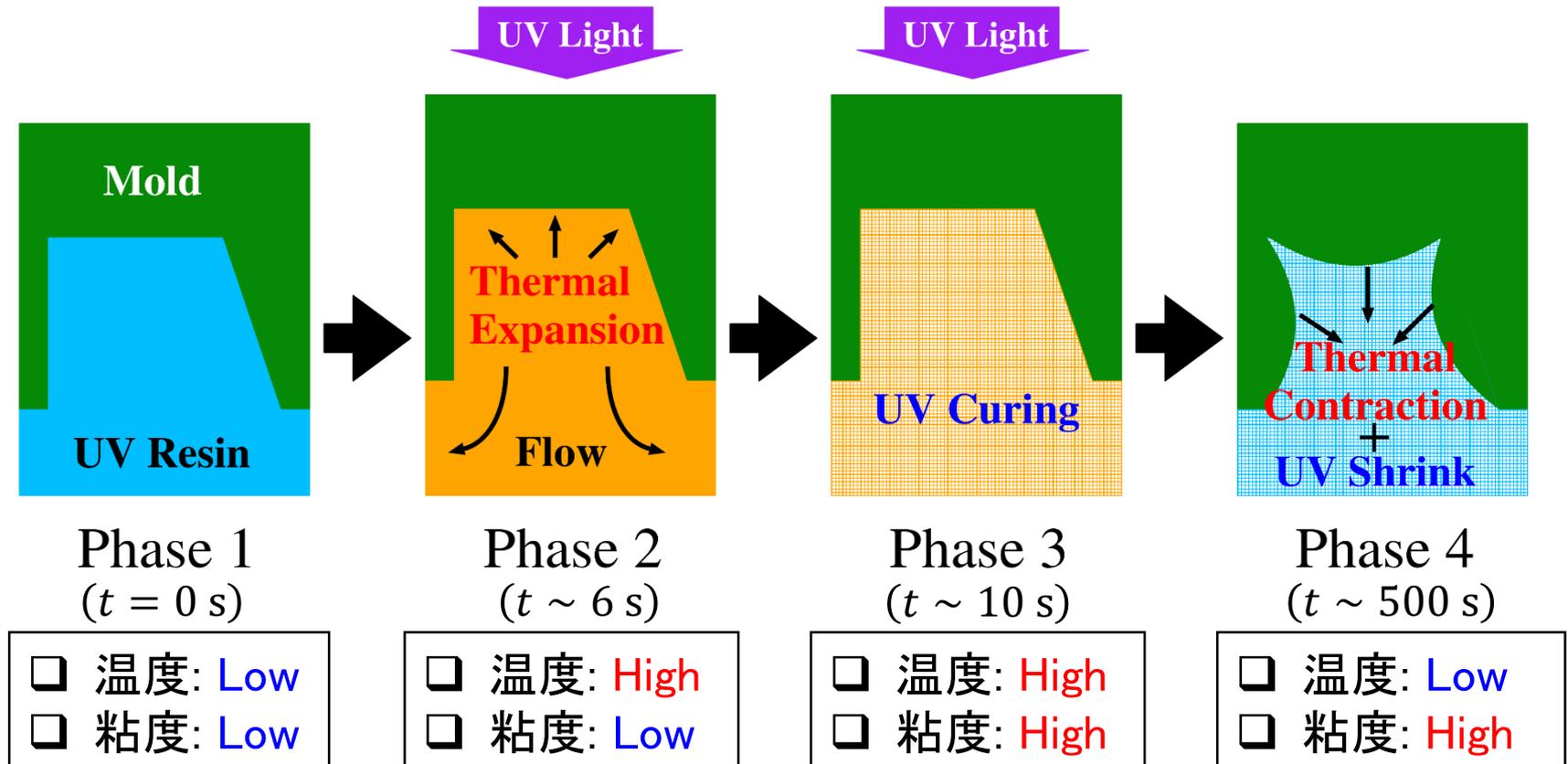
- 熱粘弾性構成則を用いたUVインプリントの形状変形解析手法を提案した.
- 仮想温度および反応速度論を導入し, UV硬化・UV収縮・熱変形・温度依存反応速度の全てを同時に考慮した.
- レオメータ実験等を通じ, UVレジンのモデルパラメーター式を同定した.
- マイクロミラーアレイ成形解析を行い, パターン湾曲が実測と誤差10%で一致すること確認した.
- 伝熱によるモールドの温度上昇と熱軟化等の考慮が今後の課題である.

ご清聴ありがとうございました.

# 付録

# UV反応熱が成形プロセスに与える影響

## UV反応熱の影響によりUVレジン表面湾曲が大きくなるメカニズム



「見かけの収縮=真の熱収縮+UV収縮」  
となるので湾曲量が増える。

# 「湾曲深さ」の指標

## □ 湾曲深さ, $D_i$ :

1. 対象表面を格子状に離散化し, 各格子点座標  $(x, y, z)$  を取得.
2. 最小二乗回帰によって全格子点の近似平面を計算.
3. 各格子点から近似平面への符号付き距離が「湾曲深さ  $D_i$ 」.

## □ 絶対平均湾曲深さ (MAD):

$$\text{MAD} = 2 \times \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |D_i|$$

## □ 二乗平均平方根湾曲深さ (RMSD):

$$\text{RMSD} = 2 \times \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (D_i)^2}$$