

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 5月31日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2010～2012

課題番号：22760095

研究課題名（和文） 熱ナノインプリント樹脂大変形のメッシュフリー解析手法の開発とプロセス最適化

研究課題名（英文） Development of large deformation meshfree method and process optimization in thermal nanoimprint

研究代表者

大西 有希（ONISHI YUKI）

東京工業大学・大学院情報理工学研究科・助教

研究者番号：20543747

研究成果の概要（和文）：浮動応力点メッシュフリー法の開発，および増分形陰的釣合方程式に基づく有限要素メッシュリゾーニング法の開発を行った．両方法共に加熱された樹脂やガラスなど柔らかい材料の大変形解析に対して精度と安定性を兼ね備えたこれまでにない解析方法である．これらの成果は熱ナノインプリント等の大変形を伴う加工プロセスの数値最適化に対する有効な手段になるものと期待される．

研究成果の概要（英文）：A floating stress-point integration meshfree method and a mesh rezoning finite element method based on the incremental equilibrium equation are developed. Both methods are novel numerical method to analyze large deformation of soft materials, such as heated polymers and glasses, stably and accurately. These outcomes are expected to be effective means of the numerical optimization for fabrication processes with large deformation like thermal nanoimprint.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	800,000	240,000	1,040,000
2011年度	800,000	240,000	1,040,000
2012年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			0
年度			0
総計	2,400,000	720,000	3,120,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・生産工学・加工学

キーワード：ナノ・マイクロ加工 熱ナノインプリント，メッシュフリー法

## 1. 研究開始当初の背景

微細パターンが描画された金型をガラス転移温度以上に熱した樹脂に押し込んでパターンを転写する熱ナノインプリント法は、次世代の量産向け微細加工技術として注目を集めている。ナノインプリントプロセスを用いた最初の量産品として大容量DTMハードディスクの販売が開始され、今後もインプリント適用製品、分野は拡大して行くものと考えられる。

ナノインプリントではその対象の小ささ故、実験費用が高いこと、成形された樹脂の状態を測定することが困難であること等の問題がある。従って実験の試行錯誤によるプロセス最適化は金額的にも時間的にもコストが高く、数値解析による成形解析を通じたプロセス最適化手法の確立が望まれている。

研究代表者らは熱ナノインプリント中の樹脂の粘弾性変形の有限要素解析に関する研究を本研究開始以前より世界に先駆けて行っていた。樹脂の粘弾性物性の測定と実験も併せて行い、幾つかのケースで成形形状が数値解析と良く一致していることを確認し、解析モデルの妥当性を検証して来た。しかし、本研究以前の研究はメッシュ固定のFEM解析である為、実際的なインプリント成形に数多く現れる高アスペクト比パターンの成形解析を行うことは不可能であった。(図1参照)

この問題を解決する為、研究代表者らはメッシュフリー粘弾性大変形解析の開発に着手していた。FEMではメッシュの破綻により早期に解析不能となる例題に対して当時開発中のメッシュフリー手法でも妥当な解が得られることを見出していた。しかし、当時開発中の解析手法は未だ開発の初期段階にあり、実際的な成形解析に適用する為には精度や安定性の向上が課題として残されていた。

## 2. 研究の目的

本研究では歪みが数百%に及ぶ大変形挙動をメッシュフリー法により解析する手法を開発し、数値解析による熱ナノインプリント成形のプロセス最適化手法を確立することを目標とした。期間内目標として、主として次の2項目を定めた。

- ・メッシュフリー法の精度と安定性向上の為の開発
- ・熱ナノインプリント実験を通じての開発手法の検証

## 3. 研究の方法

従来のメッシュフリー法が持つ問題点を克服するための様々なアイデアをテストするため、数多くの試作プログラムを作成した。

その結果、応力点積分、影響半径の動的制御、積分補正、増分形陰的釣合方程式の4つのアイデアを組み合わせた手法が精度と安定性に優れていることを見出した。特に増分形陰的釣合方程式を用いるアイデアは研究代表者独自のものである。

しかし、開発した上記手法では以下に挙げる幾つかの問題を解決することが困難であった。

- ・積分補正に要する計算時間が膨大
  - ・凹変形部や接触面の取り扱いが煩雑
  - ・異種材料を有する問題への拡張が煩雑
- これらの問題はいずれもメッシュフリー法に特有のものであり、これらを研究期間内に解決することは難しいと判断した。

そこで、研究期間内に熱ナノインプリント実験を実施することは諦め、代わりに独自の有限要素メッシュリゾーニング法を開発することへと研究目的を修正した。増分形陰的釣合方程式を用いるアイデアはそのままに、新たな有限要素メッシュリゾーニング法を開発して上述の問題を解決することを優先し、実験の実施は研究期間終了後に行うこととした。

## 4. 研究成果

### (1) 浮動応力点メッシュフリー法の開発

精度と安定性を兼ね備えたメッシュフリー解析手法の開発した。具体的には、

- ・応力点を用いた新しい応力積分法
- ・大変形時の影響半径の動的制御法
- ・パッチテスト通過のための積分補正法
- ・増分形陰的釣合方程式を用いた増分計算法の新しいアルゴリズムを提案し、浮動応力点メッシュフリー法を開発した。代表的な解析結果を図2に示す。樹脂変形等に現れる厳しい大変形を伴う解析に対し、従来手法では正しい解が得られない場合においても妥当な解が得られることを確認された。

ただし、上述の通り、計算時間の多さと処理の煩雑さの観点から、本手法を実用的な手法にするためには今一つ二つの技術的ブレイクスルーを要することを確認した。

### (2) 増分形陰的釣合方程式に基づく有限要素メッシュリゾーニング法の開発

従来の有限要素法において説くべき方程式を増分形陰的釣合方程式に変更することにより、精度と安定性を兼ね備えた有限要素メッシュリゾーニング法を開発した。メッシュリゾーニング法とは、解析の途中で解析領域のメッシュをリメッシュし、状態量を旧メッシュから新メッシュへとマッピングすることで解析を続行する手法である。厳しい大変形を伴う有限要素解析に有効とされる手法であるが、精度と安定性を兼ね備えた方

法は未だ確立されていない。

本手法は従来のメッシュリゾーニング時において釣合状態が時間的空間的に不連続となってしまう問題を本質的に解決する手法である。また、本手法の基本的な枠組みは従来の有限要素法を踏襲しているため、メッシュフリー法において見られた計算時間や煩雑さの問題は存在しない。代表的な解析例を図3に示す。図1および2に示した従来の有限要素法および浮動応力点メッシュフリー法よりも遥かに厳しい大変形の取り扱いに成功していることが分かる。

本手法は実用化に向けた技術的困難の要素が比較的少ないことから、メッシュフリー法よりも短期間の研究で多くの成果を挙げることが期待できる。本研究当初の目的である熱ナノインプリント実験を通じての手法検証についても近い将来に実現が可能であると考えている。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計4件)

- ① Yuki ONISHI, Kenji AMAYA. A Novel Static-Implicit Finite Element Formulation for Large Deformation Analysis Based on the Incremental Equilibrium Equation, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol. 61, pp. 135-144, Jan. 2013.
- ② Yuki ONISHI, Kenji AMAYA. Floating stress-point integration meshfree method for large deformation analysis of elastic and elastoplastic materials, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 92, pp. 36-55, Oct. 2012.
- ③ 大西有希, 天谷賢治. 内力増分を用いた浮動応力点積分の定式化によるメッシュフリー大変形解析, 日本機械学会論文集A編, Vol. 77, No. 782, pp. 1656-1670, Oct. 2011.
- ④ Y. Onishi, K. Amaya. A Novel Meshfree Method for Large Deformation Analysis of Elastic and Viscoelastic Bodies without using Background Cells, Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol. 4, No. 11, pp. 1673-1686, 2010.

[学会発表] (計13件)

- ① 大西有希, 天谷賢治. 増分形釣合方程式に基づく陰的有限要素法による大変形弾塑性リゾーニング解析, 第62回理

論応用力学講演会, 第62回理論応用力学講演会 講演論文集, Vol. 62, Mar. 2013, 東京工業大学.

- ② Yuki ONISHI, Kenji AMAYA. A Stable Rezoning Method for Large Deformation Finite Element Analysis using Incremental Equilibrium Equation, International Computational Mechanics Symposium (ICMS), Oct. 2012, Kobe, Japan.
- ③ Yuki ONISHI, Kenji AMAYA. A novel finite element formulation for large deformation analysis based on incremental equilibrium equation in conjunction with rezoning technique, 10th World Congress on Computational Mechanics (WCCM2012), Proceedings of the 10th World Congress on Computational Mechanics (WCCM2012), Jul. 2012, Sao Paulo, Brazil.
- ④ 大西有希, 天谷賢治. 増分形釣合方程式を用いた大変形有限要素解析におけるリゾーニング法の安定化, M&M若手シンポジウム, Aug. 2012, KKR函館.
- ⑤ 大西有希, 天谷賢治. 増分形釣合方程式に基づくRezoning付き有限要素法による静的陰解法大変形解析, 第17回計算工学講演会, 計算工学講演会論文集, Vol. 17, May. 2012, 京都教育文化センター.
- ⑥ 大西有希, 天谷賢治. 増分形釣合方程式に基づく大変形有限要素法の定式化, 第61回理論応用力学講演会, Mar. 2012, 東京大学.
- ⑦ Yuki ONISHI, Kenji AMAYA, Ryuta IMAI. Meshfree Large Deformation Analysis with Modified Formulation of Floating Stress-point Integration, 2nd International Conference on Particle-based Methods, Oct. 2011, Barcelona, Spain.
- ⑧ 大西有希, 天谷賢治. 浮動応力点積分メッシュフリー法を用いた大変形弾塑性解析, 第24回計算力学講演会, Oct. 2011, 岡山大学.
- ⑨ 大西有希, 天谷賢治. 内力増分を用いた浮動応力点積分の定式化によるメッシュフリー大変形解析, 第16回計算工学講演会, May. 2011, 東京大学.
- ⑩ 大西有希, 天谷賢治. 増分型仮想仕事式と浮動応力点積分に基づく大変形解析のためのGalerkinメッシュフリー法の定式化, 第60回理論応用力学講演会, Mar. 2011, 東京工業大学.
- ⑪ Y. ONISHI, KENJI AMAYA. A Meshfree Approach for Large Deformation Analysis in Thermal Nanoimprint, The

3rd Asian Symposium on Nano Imprint Lithography (ASNIL), 2010, Tsukuba, Japan.

- ⑫ 大西有希, 天谷賢治. 浮動応力点積分によるメッシュフリー大変形解析, 第23回計算力学講演会, 2010, 北見工業大学.
- ⑬ 大西有希, 天谷賢治. 浮動評価点積分による大変形解析のためのメッシュフリー法, 第15回計算工学講演会, 2010, 九州大学.

[図書] (計1件)

- ① E. Onate, D. R. J. Owen (Eds.), YUKI ONISHI. PARTICLE-BASED METHODS II Fundamentals and Applications, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Dec. 2011.

[その他]

ホームページ:

<http://www.a.mei.titech.ac.jp/~yonishi/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

大西 有希 (ONISHI YUKI)  
東京工業大学・大学院情報理工学研究科・  
助教  
研究者番号: 20543747

### (2) 研究分担者

なし

### (3) 連携研究者

なし

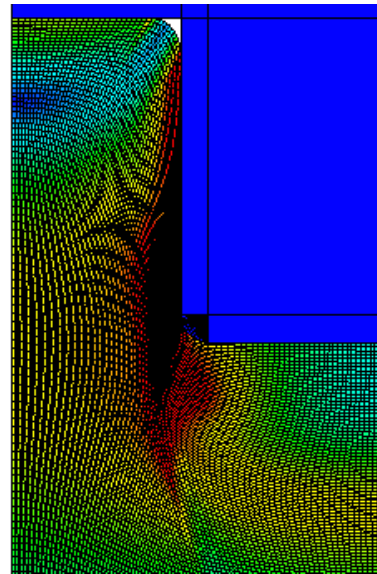


図 1: 従来法 (メッシュ固定の有限要素法) による代表的な解析例

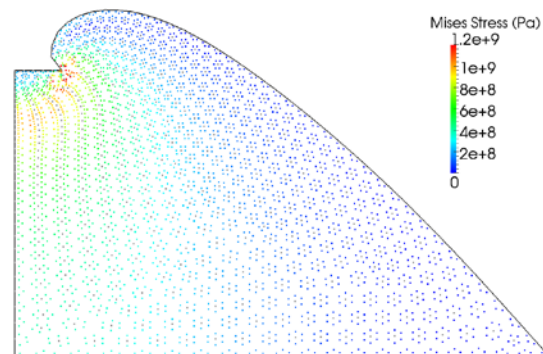


図 3: 浮動応力点メッシュフリー法による代表的な解析例

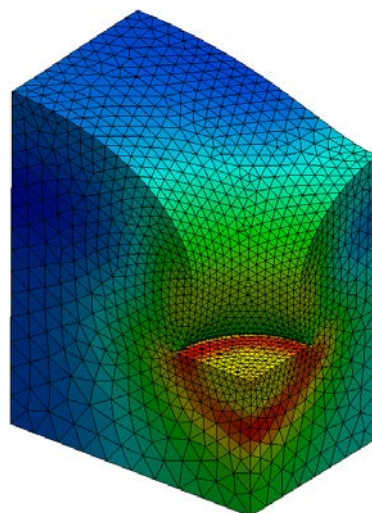


図 2: 増分形陰的釣合方程式に基づく有限要素メッシュリゾーニング法による代表的な解析例