

ディープラーニングを利用したナノインプリントプロセス・材料の設計 Study on process and material design for nanoimprint lithography based on deep learning systems

大阪府立大 工, 塚本 創, 亀山 開, 田邊 英毅, 山村 龍平,
川田 博昭, 安田 雅昭, ○平井義彦

Osaka Pref. Univ., College of Engineering

Sou Tsukamoto, Kai Kameyama, Hideki Tanabe, Ryuhei Yamamura,

Hiroaki Kawata, Masaaki Yasuda, ○Yoshihiko Hirai

E-mail: hirai@pe.osakafu-u.ac.jp

はじめに ナノインプリント技術は、マイクロスケールからナノスケールの多様な微細構造を、簡便なプロセスで作製できる技術として、これまでに多様な製品の産業化が進められてきた。ナノインプリントの一つの利点に、多様な材料を直接加工できるダイレクトナノインプリントがある。これまでに、ガラス材料や有機半導体材料などの多様な機能性材料の加工が報告されている。

多様な材料に対するプロセス設計では、材料のレオロジー特性をはじめとする物理・化学特性の把握が必要となるが、実験的に測定が困難な場合が生じることがある。そのため、限られた情報から経験に基づくプロセス設計を行う必要があった。ここでは、これまでの実験ならびにシミュレーション解析で得られた知識データベースをもとに、物理・化学的な意味づけが可能なニューラルネットワークを試作し、最適な材料・プロセス条件を推定するシステムの構築を試みた。

システムの概要 これまでに、実験データベースに基づく単純なニューラルネットワークシステムが報告されている[1]。ここでは、プロトタイプとしてプログラミング言語 Python[2]のライブラリーを用いたシステムを構築した。ナノインプリントプロセスのパラメータは、レオロジーなどの材料特性に係わる要素、温度や圧力などのプロセス条件に係わる要素、およびモールド形状などのトポロジカルな条件に係わる要素に分類でき、これまでに膨大なデータおよびノウハウの蓄積がある[3]。各要素の重みや寄与度のプロセス条件や材料の最適化に対応するため、ニューラルネットワークのノードを、図1に示すようにそれぞれの要素ごとにグループ分けしたニューラルネットワークを試作した。

結果 ナノインプリントに使用する未知の材料について、材料に添加する添加剤濃度の最適条件を推定することを試みた。ここでは、ポリスチレンのガラス転移温度を低下させて低温プレスでの成型性を向上させるため、グリセリンを添加した場合の成型高さを評価した。プレス条件と添加物濃度を20通りにランダムに変化させた実験値を学習させ、添加物濃度に対するパターン高さの予測を行った。

図2に、添加物濃度に対する成型後のパターン高さの推定結果を示す。各成型温度で、添加物による材料の軟化による成型性の向上が予測できている。

報告では、さらにシミュレーション解析に事づく知識データベースに基づき、実験データベースを補完したシステムによるプロセス設計・材料提案についても述べる。

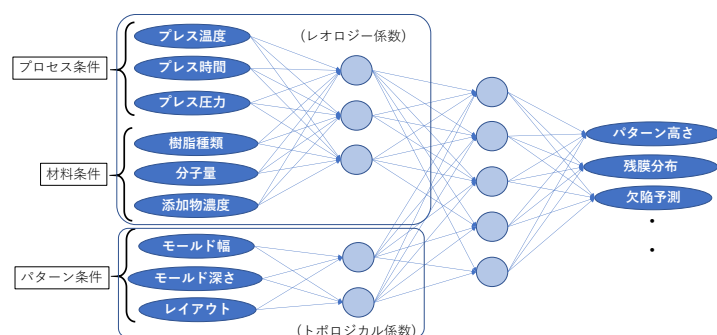


図1 システム例

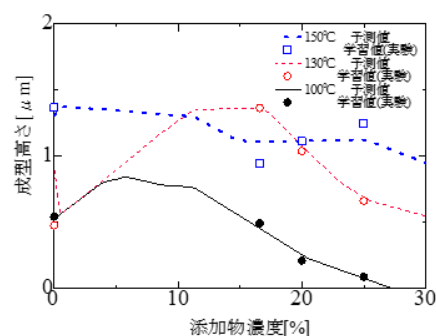


図2 未知材料に対する成型性予測

参考文献

[1] T. Akter, et al., Materials and Design, 160 (2018) 836–848.

[2] <https://www.python.jp/>

[3] 応用物理学会 ナノインプリント技術研究会編:ナノインプリント技術ハンドブック(オーム社, 2019).