

基板上の液滴形状のシミュレーション技術

親水／撥水パターン上の液滴形状を簡易・高速・高精度に予測



野田 祐樹

のだ ゆうき (中央)
y-noda@aist.go.jp
フレキシブルエレクトロニクス
研究センター
産総研特別研究員
(つくばセンター)

プリントエレクトロニクスの実現に向けて、有機半導体・強誘電体などの革新的印刷プロセスの開発と、そのための基盤となるマイクロ液滴挙動の解明と制御に取り組んでいます。

松井 弘之

まつい ひろゆき (右)
h-matsui@k.u-tokyo.ac.jp
所属は同上
産学官制度来所者
(つくばセンター)
東京大学大学院新領域創成科学研究科 (兼)

プリントエレクトロニクスに関する物性物理や表面科学を、実験と計算の両面から解明・理解し、それを物質開発やプロセス設計にフィードバックするための研究に取り組んでいます。

長谷川 達生

はせがわ たつお (左)
t-hasegawa@aist.go.jp
所属は同上
副研究センター長
(つくばセンター)

プリントエレクトロニクスの実現に向けて、有機半導体・導電体・強誘電体などの電子機能性材料を印刷プロセスに適用するための材料基盤技術の開発と、材料の特質に立脚した革新的印刷プロセスの開発に取り組んでいます。

関連情報：

● プレス発表

2013年7月31日「プリントエレクトロニクスのための液滴シミュレーション技術」

プリントエレクトロニクスの課題

印刷技術を電子デバイスの製造に応用する「プリントエレクトロニクス」技術が大きく注目されています。そこでは、印刷塗布した微小なインク液滴（数ピコリットル～数十ナノリットル）の基板上的形状を、精密に予測することが求められます。とりわけ近年、インクを弾きやすい撥水表面上に、インクの濡れやすい親水領域による微細パターンを形成することで、従来の印刷技術の限界を超える高精細化を実現する手法が注目されています。しかし、これまでのシミュレーション法では、このような親水／撥水境界を含む表面上での液滴形状の予測は容易ではないことが知られてきました。

「HyDro」の開発

液滴形状を数値的にシミュレートするため広く用いられてきた最急降下法では、液滴の接触線（基板表面に接した部分）を含むすべての表面に対し、表面自由エネルギーの勾配から解を探索する手法がとられていました。このため親水／撥水境界により表面自由エネルギーが不連続に変化する箇所を含むと、解が探索しづらくなり、最終的な液滴形状が得られないなどの問題が生じます。一方、解の探索をすべてランダムに行う直接探索法では、膨大な計算時間が必要となってしまいます。

そこで私たちは、液滴の表面形状を接触線部

分とそれ以外の部分に分け、前者には直接探索法、後者には最急降下法を適用するハイブリッド法を考案し、これによる液滴形状シミュレーションソフトウェア「HyDro」を開発しました。図1に、長方形の親水領域上に液滴を塗布した場合に、HyDroと従来法それぞれで、解の探索とともに表面エネルギーの和が減少する様子を示します。HyDroでは、全エネルギーの最も低い安定解に、素早く落ち着くことがわかります。またインクジェット印刷法による液滴塗布実験との比較から、HyDroにより高い精度で実験が再現されることが確かめられました。

HyDroにより、これまで予測できなかったストライプ・くし形・チェック模様などの複雑な親水パターン上のインク液滴形状を、簡易・高速・高精度に予測することができます。例えば、親水パターンの折れ曲がり部位におけるインクのはみ出し効果などを正確に予測でき（図2）、印刷製造する高精細配線のパターン設計や製品の不具合の解析に利用できます。さらに液滴塗布実験による精密観察とこのソフトによる解析を組み合わせることで、表面濡れ性のマッピング測定を行うことができます。

ソフトウェアについて

HyDroは市販のパソコン上でOSによらず動作し、現在、ウェブ上で無償公開しています。
(<https://sites.google.com/site/hydrojpn/>)

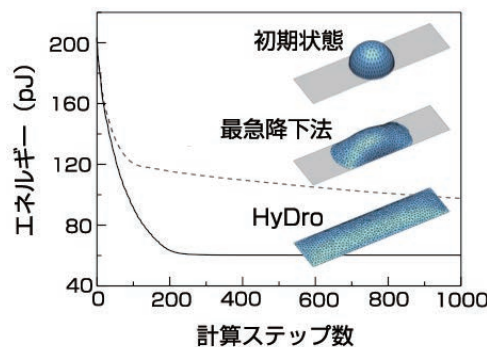


図1 親水／撥水パターン上の液滴形状シミュレーションにおけるHyDroと従来法の解の収束性の比較

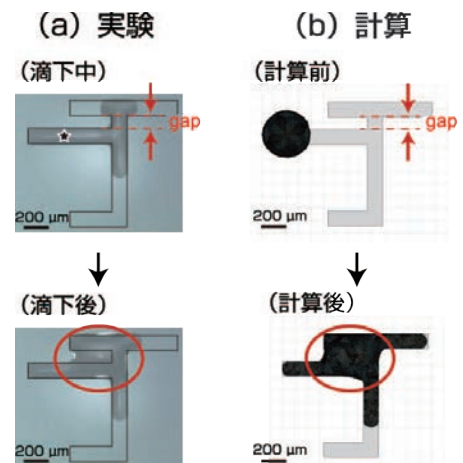


図2 配線パターン上にインクジェット塗布した液滴（左）とシミュレーションの比較（右）