

緩和時間測定と分子動力学 シミュレーションを用いた 易剥離フィルムのなじみ性発現機構解析

Study on the Conformability Expression Mechanism of Our Easy Peel-Off Films Using
Relaxation Times Measurement and Molecular Dynamics Simulation

岩本 浩介 *Kosuke Iwamoto*

イノベーション推進本部 先端技術研究開発センター 高度解析研究部

1 概要

易剥離フィルムは常温で簡単に貼る、剥がすことができ、糊残りが生じない利便性によって需要が拡大している¹⁾。このフィルム粘着剤の重要な特性として、なじみ性(濡れ性)がある。なじみ性が良いと、弱い力の印加でも短時間で被着体の凹凸に追従し粘着力を発揮できる。しかし、なじみ性をコントロールするためには、粘着剤のバルク物性だけでなく分子レベルの挙動を予測する必要があり、その設計難度は高い。そこで、本研究では機器分析と分子シミュレーションを複合的に用いることで、なじみ性と分子運動性の関係性を数値化・可視化できる技術を新たに開発した。

Easy peel-off films can be easily adhered and peeled off at room temperature, leaving no adhesive residue. Due to their convenience, demand for such films is expanding¹⁾. An important property of these films is wettability. If wettability is good, they can follow the surface asperity of the adherend with the application of a slight force in a short time and can exhibit sufficient adherence properties. However, in order to control the wettability of the films, it is necessary to predict not only the bulk physical properties but also the behavior of the adhesives at the molecular level, and their design difficulty is high. Therefore, in this study, we developed a new analytical method that can quantify and visualize the relationship between wettability and molecular mobility by using a combination of instrumental analysis and molecular dynamic simulation.

2 解析技術の特徴

- ・直接観察できないナノスケールの分子運動を可視化
- ・材料中の分子部分構造の運動性を数値化
- ・分子レベルの挙動から製品特性を予測

3 開発の経緯

易剥離フィルムは電子材料の加工時あるいは保管・輸送時の傷つき防止、スマートフォンの表面保護など複数の用途で利用されている。当社は易剥離フィルム用の粘着剤を開発しており、ポリエチレンオキサイド(EO)を側鎖に有するモノマーの使用で良好な特性が発現し、モノマーのEO鎖長を変化させることで粘着剤のなじみ性が変化することを見出した。しかし、EO鎖長となじみ性は単純な比例の関係になく、特性の制御が困難であった。

また、EO鎖長が異なるモノマーを使用した粘着剤のバルク物性となじみ性に相関が見られなかったため、粘着剤の分子レベルの挙動がなじみ性に影響すると推定した。しかし、この推定は従来の分析技術だけでは実証が困難だった。そこで、この機構解明を目的になじみ性と分子運動性の関係性を可視化できる分析手法の開発を試みた。

4 技術内容

本研究では機器分析と分子シミュレーションを複合的に用いることで、なじみ性と分子運動性の関係性を数値化・可視化できる技術を新たに開発した。以下に開発した分析方法で上記易剥離フィルム用粘着剤のなじみ性発現機構を解析した結果を示す。

1) 分子動力学シミュレーションではEO鎖長の異なる粘着剤のポリマードロップを作成し、被着体へ濡れ広がる挙動を可視化した。結果を図1に示す。図1からEO鎖長が短いモデルは、初期の濡れ広がり速度がその他のモデルよりも早く、なじみ性に優れると分かる。実際に易剥離フィルムを作成し検証した結果を図2に示す。フィルムと被着体が密着した領域が被着体全体に広がる時間でなじみ性を評価したところ、シミュレーションの結果と同様の傾向が確認できた。さらに、EO鎖長に対するなじみ性には極値が存在することが分かった。

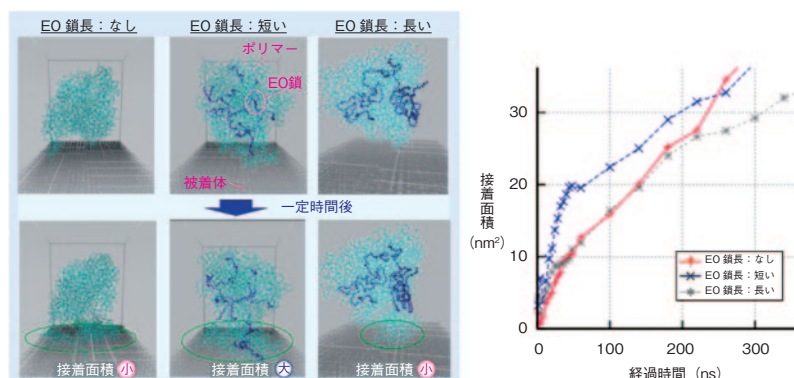


図1 シミュレーションによる粘着剤の被着体への濡れ広がり挙動検証結果

Figure 1 Analysis Result of Wetting Behavior of Adhesives to Adherent by Molecular Dynamics Simulation

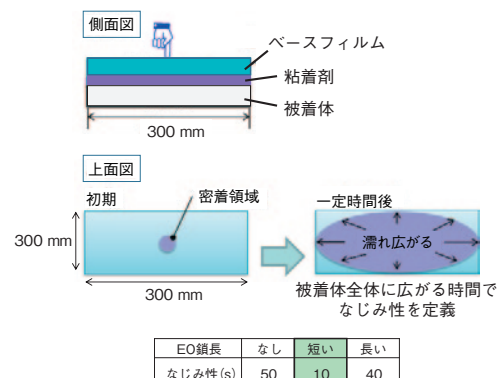
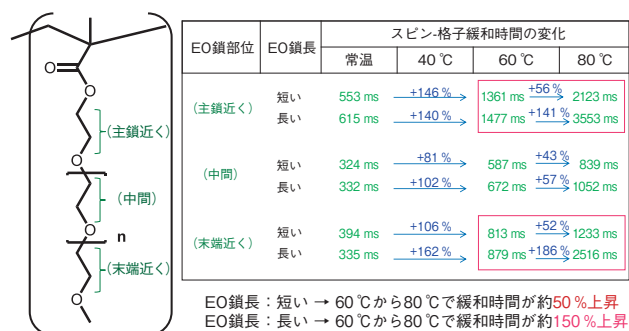


図2なじみ性の評価方法と評価結果

Figure 2 Performance Assessment Method and Results of Wetting Behavior of Each Adhesive

2) 核磁気共鳴装置(NMR)は分子の部分構造ごとの格子-スピン緩和時間を算出することができる。この緩和時間は分子の運動性と相関があり、検討した粘着剤では緩和時間が長いほど分子運動性が高いと言える²⁾。図3に温度変化時のEO鎖各部分の緩和時間変化を示す。図3から、EO鎖長によって昇温による緩和時間の変化量が異なることが分かる。これは、粘着剤中でEO鎖の拘束状態が異なることを示唆している。これは分子シミュレーションの結果とも整合する。図1でEO鎖の挙動に注目すると、短いEO鎖はポリマー中に伸びるように存在し、粘着剤の濡れ広がりを促進するような挙動を示すが、長いEO鎖は凝集し、濡れ広がりを阻害する挙動を示している。

3) 分子動力学シミュレーションと緩和時間測定から、検討試料のなじみ性発現機構を図4にまとめた。



EO鎖の粘着剤中での拘束状態が異なることを示唆

図3 加熱条件でのEO鎖部分構造のスピン-格子緩和時間測定結果

Figure 3 Measurement Results of Spin-lattice Relaxation Times of Polyethylene Oxide Chain Partial Substructures under Heating Conditions

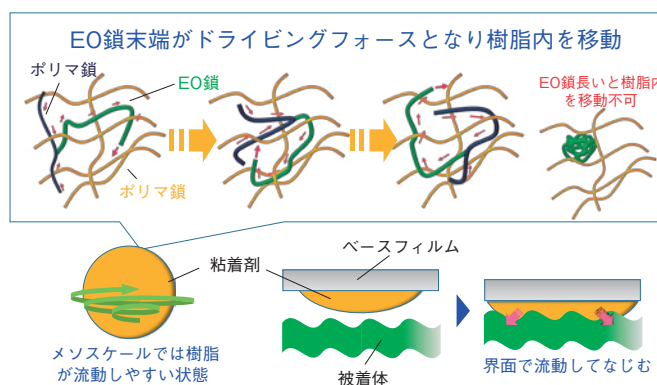


図4なじみ性発現の推定メカニズム

Figure 4 Mechanism of Wettability Triggered by Specific Chain Length of Polyethylene Oxide

5 今後の展開

- ・本手法による各種粘着剤への技術展開
- ・剥離性等の別特性の発現機構技術の確立

【参考文献】

- 1) 機能的な高分子フィルムの現状と将来展望、富士経済(2015)
- 2) T.D.W クラリッジ：有機化学のための高分解能NMRテクニック、東京、株式会社講談社、pp.13-44(2004)