

革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構
の解明

2019 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

陣内 浩司

東北大学 多元物質科学研究所
教授

原子分解能観察によるソフト/ハード界面の接着・破壊機構の解明

主たる共同研究者:

末永 和知 (大阪大学 産業科学研究所 教授)

溝口 照康 (東京大学 生産技術研究所 教授)

吉田 要 ((一財)ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 上級研究員)

研究成果の概要

本研究では、最先端電子顕微鏡法と理論計算を組み合わせ、高分子/無機接着界面(以下、異種界面)における接着・剥離の基本原則を説明することを目的としている。2022年度は、エポキシ樹脂とシリコン(Si)基板の異種界面を対象とし、下記研究に取り組んだ。

1. 陣内 G は、Si 基板/エポキシ樹脂の平滑接着界面を剥離させ、透過型電子顕微鏡(TEM)観察を行った。OH 終端 Si 基板との接着界面では主として樹脂の凝集破壊が起こる一方、H 終端界面では部分的に界面剥離が起こることを明らかにした。また、接着界面における硬化分子動力学計算を行い、無機基板の表面化学状態により接着エネルギーや界面近傍でのエポキシ樹脂構造が変化することを明らかにした。さらに、アンカー効果(物理的接着)が支配する接着界面の剥離・破壊メカニズムを明らかにするため、周期凹凸パターンを有する OH 終端 Si 基板・エポキシ樹脂界面の破壊面の TEM 観察を行い、凹部のサイズに依存して接着面の破壊メカニズムが異なること(ナノスケールの効果)の存在を示唆する結果を得た。
2. 吉田 G は、電子回折と電子エネルギー損失分光(EELS)による計測を行い、エポキシ樹脂の電子線照射耐性およびダメージメカニズムを明らかにした。
3. 末永 G では、EELS を用いた分子振動スペクトル測定法の手法開発を進め、原子レベルの空間分解能で分子振動スペクトルを計測可能であることを実証した。
4. 溝口 G は、機械学習による EELS スペクトル予測手法を開発しており、C-K 吸収端スペクトルからの基底電子状態予測や、20 原子以下程度の低分子で学習したモデルでの 100 原子以上で構成されるエポキシ樹脂系分子の EELS スペクトル予測に成功した。
5. 溝口 G は、ナノスケールの溝構造を有する酸化シリコン・エポキシ樹脂接着界面モデルについて引張・せん断 MD 計算を行い、ナノスケールの溝構造の存在によりズリ変形時の摩擦が顕著に大きくなることを明らかにした。

【代表的な原著論文情報】

- 1) R. Senga, Y.-C. Lin, S. Morishita, R. Kato, T. Yamada, M. Hasegawa, K. Suenaga, "Imaging of isotope diffusion using atomic-scale vibrational spectroscopy", *Nature*, vol. 603, pp. 68-72, 2022.
- 2) K. Yoshida, H.-H. Huang, T. Miyata, Y. K. Sato, H. Jinnai, "Electron Irradiation Damage of Amorphous Epoxy Resin at Low Electron Doses", *Microscopy*, 2023. DOI: 10.1093/jmicro/dfac068.
- 3) K. Hagita, T. Miyata, H. Jinnai, "Molecular Dynamics Simulations on Epoxy/Silica Interfaces Using Stable Atomic Models of Silica Surfaces", *Langmuir*, vol. 39, No. 20, pp. 7063–7078, 2023.
- 4) P.-Y. Chen, K. Shibata, K. Hagita, T. Miyata, T. Mizoguchi, "Prediction of the Ground-State Electronic Structure from Core-Loss Spectra of Organic Molecules by Machine Learning", *J. Phys. Chem. Lett.*, 2023. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.3c00142.