

未来社会創造事業 大規模プロジェクト型
年次報告書

H30 年度
研究開発年次報告書

平成 30 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：田中 敬二]

[国立大学法人九州大学大学院工学研究院・教授]

[研究開発課題名：界面マルチスケール 4 次元解析による革新的接着技術の構築]

実施期間：平成 30 年 11 月 15 日～平成 31 年 3 月 31 日

§1. 研究実施体制

(1) 「研究代表者」グループ(九州大学)

① 研究開発代表者: 田中 敬二 (九州大学 大学院工学研究院、教授)

② 研究項目

- ・界面選択分光法を用いた接着界面の構造・物性解析
- ・イオンスパッタリング併用 X 線光電子分光測定に基づく被着体の破壊面および剥離面の化学状態評価
- ・走査プローブ顕微鏡測定に基づく局所構造と力学特性評価
- ・全原子・祖視化分子動力学シミュレーションに基づく接着界面層の解析
- ・粒子追跡に基づく界面近傍における接着剤硬化過程の解析
- ・モデルポリスチレン系における界面層形成と接着力の時間依存性評価

(2) 「G1A-a」グループ(神戸大学)

① 主たる共同研究者: 西野 孝 (神戸大学 大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・ラマン分光法によるポリアミドの同種高分子界面の解析評価
- ・アイソタクチックポリプロピレン/オレフィン系接着剤の接着界面形成過程評価

(3) 「G1A-b」グループ(理化学研究所)

① 主たる共同研究者: 初井 宇記 (理化学研究所 放射光科学研究センター、チームリーダー)

② 研究項目

- ・原子・官能基レベルでの接着界面の可視化のための試料前処理法の研究開発
- ・原子・官能基レベルでの接着界面の可視化のための検出感度・空間分解能向上のための研究開発

(4) 「G1A-c」グループ(東京工業大学)

① 主たる共同研究者: 中嶋 健 (東京工業大学 物質理工学院、教授)

② 研究項目

- ・温度制御下で動作するナノレオロジーAFM の装置開発 (項目 1 a)
- ・巨視的変形下で動作するナノレオロジーAFM の装置開発 (項目 1 b)
- ・相溶ブレンド試料の粘弾性現象の解明 (項目 2 a)
- ・ナノ触診 AFM データの機械学習 (項目 3)

(5) 「G1A-d」グループ(九州先端科学技術研究所 (ISIT))

① 主たる共同研究者: 山田 淳 (九州先端科学技術研究所 (ISIT) マテリアルズ・オープン・ラボ (MOL)、研究所長(兼)ディレクター)

② 研究項目

- ・電子顕微鏡観察に基づく接着界面の3次元構造評価
- ・X線光電子分光測定に基づく被着体の破壊面や剥離面の化学状態評価

(6)「G1A-e」グループ(高エネルギー加速器研究機構)

- ① 主たる共同研究者:金谷 利治 (高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 大型陽子加速器施設、教授)
- ② 研究項目
 - ・雰囲気制御条件下における中性子反射率・散乱計の開発
 - ・空間分解中性子反射率法による接着界面計測技術の開発
 - ・アクリル系材料における接着・粘着力発現機構の解明

(7)「G1A-f」グループ(産業技術総合研究所)

- ① 主たる共同研究者:堀内 伸 (産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門、上級主任研究員)
- ② 研究項目
 - ・STEM-EELS による接着界面での相互作用の解析
 - ・結晶性高分子/アルミ融着界面の解析と接着メカニズム解析

(8)「G1A-g」グループ(京都大学)

- ① 主たる共同研究者:竹中 幹人 (京都大学 化学研究所、教授)
- ② 研究項目
 - ・スピンコート過程におけるブロックコポリマーの自己組織化の GI-SAXS 法によるその場観察
 - ・GISAXS-CT 法における測定システムの構築

(9)「G1A-h」グループ(九州大学)

- ① 主たる共同研究者:高原 淳 (九州大学 先導物質化学研究所、教授)
- ② 研究項目
 - ・加硫接着反応過程における化学状態評価

(10)「G1B」グループ(九州大学)

- ① 主たる共同研究者:吉澤 一成 (九州大学 先導物質化学研究所、教授)
- ② 研究項目
 - ・エポキシ樹脂と下記の各種表面間における接着相互作用エネルギーの理論的解析
 - アルミナ表面(吸着水の影響・温度の影響)
 - シリカ表面(吸着水の影響)
 - 窒化ホウ素及びグラファイト表面
 - 金表面

(11)「G1C-a」グループ(東北大学)

- ① 主たる共同研究者:小谷 元子 (東北大学 材料科学高等研究所、教授)
- ② 研究項目

・高分子接着現象の離散幾何学による表現

(12)「G1C-b」グループ(産業技術総合研究所)

- ① 主たる共同研究者:森田 裕史 (産業技術総合研究所 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター、研究チーム長)
- ② 研究項目
 - ・接着界面マルチスケール解析における理論・シミュレーション解析研究の実施
 - ・接着界面マルチスケール解析における数値・統計、マテリアルズインフォマティクス解析研究の実施

(13)「G1C-c」グループ(北九州工業高等専門学校)

- ① 主たる共同研究者:久池井 茂 (北九州工業高等専門学校 生産デザイン工学科、教授)
- ② 研究項目
 - ・データ駆動型モデリングによるアプローチ
 - ・有効モデルの抽出
 - ・機械学習環境の構築

(14)「G1C-d」グループ(九州大学)

- ① 主たる共同研究者:廣瀬 慧 (九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所、准教授)
- ② 研究項目
 - ・目的変数を接着強度, 説明変数を実験条件(温度, 材料など)としたときの重回帰モデルの構築
 - ・界面の形状、スペクトル解析で得られた固有値・固有関数等を用いた特徴量抽出

(15)「G2-a」グループ(神奈川大学)

- ① 主たる共同研究者:横澤 勉 (神奈川大学 工学部、教授)
- ② 研究項目
 - ・環状ポリエステル合成法の確立
 - ・環状ポリ(エーテルスルホン)合成法の確立
 - ・環状ポリエステルから鎖状ポリエステルへの変換反応の検討
 - ・環状ポリ(エーテルスルホン)から鎖状ポリ(エーテルスルホン)への変換反応の検討

(16)「G2-b」グループ(東京大学)

- ① 主たる共同研究者:伊藤 耕三 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科、教授)
- ② 研究項目
 - ・ポリロタキサンを用いた接着剤のタフ化
 - ・ポリロタキサンによるタフ化機構の解明
 - ・バイオベース接着剤の用途開拓(インフラ、輸送機等)および構造最適化
 - ・接着材料・接着条件探索のための最適化手法(機械学習)の導入

- ・高分子データベース化に向けたハイスループット構造解析手法の確立

(17)「G2-c」グループ(東京工業大学)

- ① 主たる共同研究者:大塚 英幸 (東京工業大学 物質理工学院、教授)
- ② 研究項目
 - ・自己修復性分子骨格の合成条件検討
 - ・新規エポキシ樹脂の開発
 - ・エポキシ樹脂の予備的機能評価
 - ・異種接着に向けた分子設計検討

(18)「G2-d」グループ(大阪市立大学)

- ① 主たる共同研究者:佐藤 絵理子 (大阪市立大学 大学院工学研究科、准教授)
- ② 研究項目
 - ・刺激応答性エポキシ化合物の設計と原料合成
 - ・刺激応答性エポキシ樹脂の合成と評価

(19)「G2-e」グループ(東京工業大学)

- ① 主たる共同研究者:佐藤 浩太郎 (東京工業大学 物質理工学院、教授)
- ② 研究項目
 - ・カテコール含有モノマーの合成および重合実験
 - ・フラン含有モノマーの合成および重合実験

§ 2. 研究実施の概要

接着界面におけるマルチスケール解析：

- ・位相敏感和周波発生分光法に基づきポリメタクリル酸メチルの分子配向の絶対評価を達成した。
- ・ゴムシートの粘着挙動において被着体界面における吸着層形成の重要性を示した。
- ・共焦点ラマン分光顕微鏡解析に基づき界面近傍の成分分析マッピングに成功した。
- ・軟 X 線ベースの接着界面可視化に向けた試料前処理法の指針を得た。
- ・ナノレオロジー原子間力顕微鏡 (AFM) によるナノスケールのマスターカーブ作成に成功した。
- ・接着界面評価用 Al 周期ナノ構造基板を作製した。
- ・中性子反射率計 SHARAKU において温度湿度制御下での測定を実現した。
- ・STEM-EELS に基づき接着工程におけるアルミ表面の化学変化を明らかにした。
- ・GISAXS-CT 測定システムを構築した。
- ・SK 吸収端 X 線微細構造スペクトルに基づき加硫接着反応過程の評価に成功した。
- ・理論的解析に基づき吸着水分子がエポキシ樹脂/被着材の接着に与える影響を定量的に示した。
- ・吸着分子鎖の AFM 像からメソスケールの界面構造を抽出し数理モデル解析を行うための指針を得た。
- ・実験データを深層学習用データに加工するインターフェースプログラムを開発した。
- ・実験・解析および理論・シミュレーションデータの相関を「見える化」するための機械学習環境を構築した。
- ・目的変数を接着強度、説明変数を実験条件としたときの重回帰モデルの構築指針を得た。

分子接着技術の確立：

- ・炭素-炭素二重結合含有環状ポリエステル合成法を確立した。
- ・界面制御に資する擬ポリロタキサンナノシートを発見した。
- ・自己修復性分子ビス（ヒンダードアミノ）ジスルフィド含有樹脂を合成した。
- ・熱膨張性マイクロカプセル含有エポキシ系接着剤の設計指針を得た。
- ・カフェ酸からのビニルカテコールの誘導およびその重合制御に成功した。
- ・機械学習によりスモールデータセットから 2 液硬化型エポキシ接着剤の反応条件の最適化に成功した。