

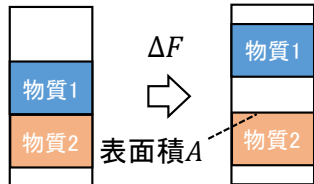
# 分子動力学シミュレーションによる 界面の親和性・接着性解析

親和性・接着性の解析では、表面の化学構造など様々な因子を考慮する必要があります。分子動力学シミュレーションでは、物質間の親和性・接着性の推定が可能です。また、接触角やX線光電子分光(XPS)などの分析手法と組み合わせることで、接着界面について分子レベルで考察することができます。

## 接着仕事 $W_A$ のシミュレーションと実験での算出について

接着仕事: 親和性・接着性を測る指標の1つ。

### 分子動力学(MD)シミュレーション

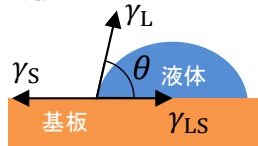


物質1と2を引き離す際の自由エネルギー変化  $\Delta F$  から算出。

$$W_A = -\frac{\Delta F}{A}$$

F. Leroy et al., *Macromol. Rapid Commun.*, 2009, 30, 864.

### 実験



接触角を測定し、以下の式から算出。

$$W_A = \gamma_L (1 + \cos \theta)$$

$\gamma_L$ : 液体の表面張力

$\theta$ : 接触角

$\gamma_S$ : 固体の表面張力  
 $\gamma_{LS}$ : 固体と液体の界面張力

## 適用例①: 物質間の親和性・接着性の予測ができます

(単位:  $\text{mN m}^{-1}$ )

MDシミュレーションでPETと各溶媒の接着仕事を計算したところ、実験で見られた溶媒間での接着仕事の差を再現。

|    | ホルムアミド | エチレングリコール |
|----|--------|-----------|
| MD | 84     | 77        |
| 実験 | 81     | 72        |

⇒ MDシミュレーションでは接着性を精度良く予測可能

## 適用例②: 接着界面について分子レベルでの詳細な解析が可能です

PET-溶媒(ホルムアミド)間の接着仕事へのプラズマ処理(極性官能基の付加)の影響を解析。

⇒ 付加された官能基の各原子と溶媒との相互作用を定量化

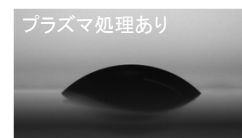
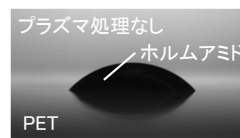
### XPS-気相化学修飾法

|          | C-OH/C | COOH/C |
|----------|--------|--------|
| プラズマ処理なし | 0.004  | -      |
| プラズマ処理あり | 0.008  | 0.021  |

PET表面のOH基とCOOH基量を取得

実験  
データを  
を反映

### 接触角



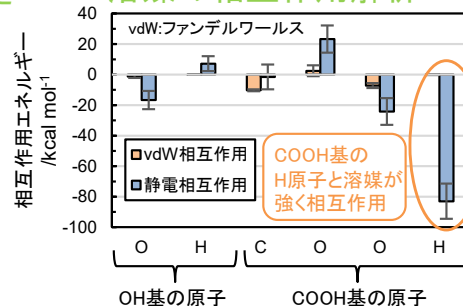
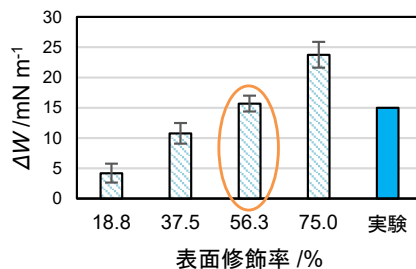
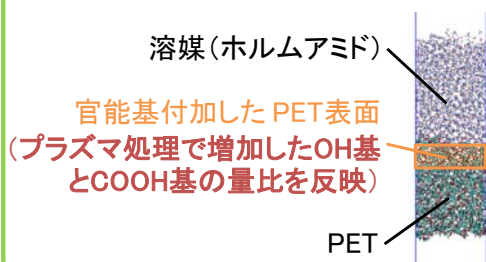
プラズマ処理による接着仕事の増加量  $\Delta W$  を取得

### MDシミュレーション

XPSの結果を基に  
界面モデル作成

実験(接触角)と同等の接着仕事の増加を示す表面修飾率の特定

付加された官能基の各原子と溶媒の相互作用解析



お客様のご希望に沿った計算モデルを作成し、物質間の親和性・接着性の予測や接着性に影響を与える因子に関する解析を行うことで、材料設計の指針獲得のお役に立ちます。