



## スマートフォン部品等の接着構造解析 —接着界面の製品設計に向けて—

研究・開発機関 : 日東電工株式会社、名古屋大学  
 利用施設 : スーパーコンピュータ「京」  
 計算規模 :  
 利用ソフトウェア : MODYLAS、LAMMPS

### Before

●スマートフォン内部の部品固定などの産業用途に使われる粘着テープや粘着シートの開発において、貼り合わせた際の接着界面挙動の理解が望まれます。しかしながら、実験的な方法だけでは、接着界面の原子～分子レベルの挙動を捉えることには限界があり、これを補う新しい技術が要求されていました。

### After

○「京」を用いることで現実スケールの接着界面に含まれる全原子の動的挙動の解明に取り組むことが可能となりました。  
 ○これにより、接着界面における原子～分子レベルの動的挙動を接着・剥離特性に関連付けて評価できる技術が得られました。

### ■背景と目的

産業界で貼り合わせ技術は様々な用途で使われています。例えば、スマートフォンを例にとると、前面カバーやタッチパネル、液晶ディスプレイ、電気回路基板などの部材が貼り合わされています(図1)。この構造に欠かせないものが、光学透過性や遮光・反射性など様々な特性を持った各種の両面接着テープや粘着シートです。このような貼り合わせには粘着剤が使われており、接着された界面現象の理解が製品開発上の重要な課題となっています。産業的には、安定して機能的な接着界面の設計が要請されており、接着界面の原子～分子レベルの設計技術とそれを支える評価、シミュレーション技術が必要になってきています。しかしながら、分子量数10万程度の高分子からなる粘着剤の接着界面現象には、粘着剤と被着体間の原子、分子レベルの相互作用に加えて、高分子鎖の滑りや解きほぐれといった動的挙動も含まれ、従来の実験的な評価方法や小規模モデルを使ったシミュレーションだけでは、接着界面現象の詳細理解が困難な場合があります。この課題を解決するために、スーパーコンピュータ「京」を利用して、大規模な接着界面モデルを用いた全原子系シミュレーション技術の開発を行いました。



図1 スマートフォン構造の一例

### ■利用成果

高分子の接着界面現象のシミュレーションには、しばしば粗視化分子動力学法が採用されます。この方法は、比較的計算負荷を小さくできる上、高分子鎖をバネとビーズの繋がりとして表現した動的挙動を解析でき、粘着剤やゴムの物質研究に威力を発揮します。しかしながら、粗視化の操作では、高分子を構成する複数の原子を一つの粒子とみなして計算するため、原子、あるいは官能基レベルの局所的なダイナミクスやそれに対応する相互作用の情報が消失してしまう場合があります。これに対して、全原子系分子動力学法では、粗視化による上述の懸念はなくなりますが、モデル内の原子数が多い場合は、計算負荷が過大となり、汎用コンピュータでは現実的な時間内にシミュレーションが終わらない問題がありました。

本シミュレーションでは、優れた並列性能を発揮する全原子系分子動力学アプリケーションのMODYLASとLAMMPSを使用し、スーパーコンピュータ「京」を利用することによって計算時間が短縮され、接着界面現象を現実的なスケールで全原子の挙動として解析できるようになりました。シミュレーションに用いた接着界面モデルの一例を図2に、粘着テープを被着体から剥がす過程に相当するシミュレーションの一例を図3に示します。

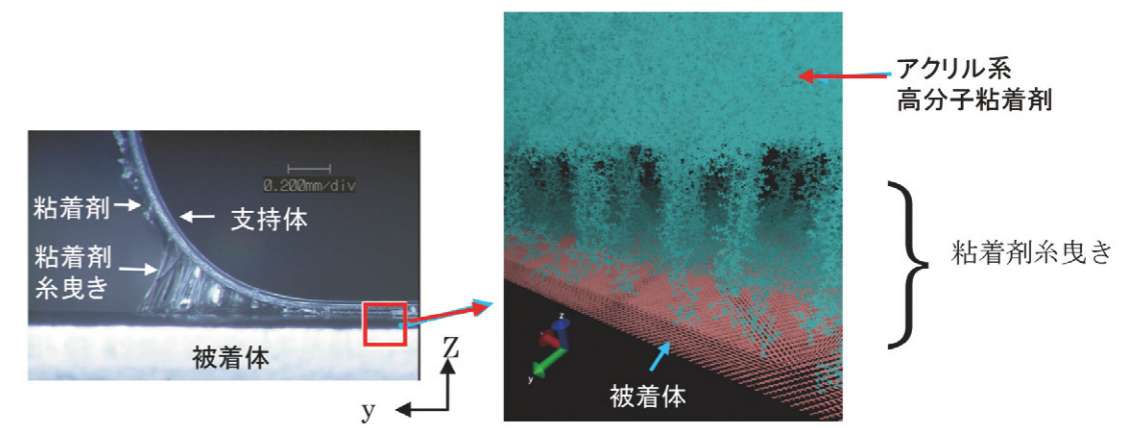


図2 シミュレーションに用いた接着界面モデルの一例

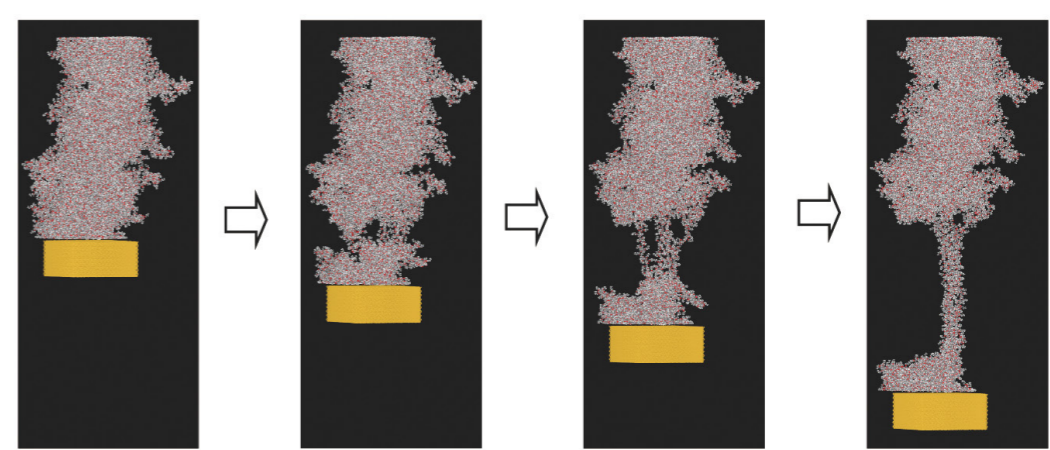


図3 粘着剤剥離過程のシミュレーションの一例

粘着剤が着いた状態から被着体を徐々に離していくと、剥離を妨げる抵抗力が働きますが、最後にはこの抵抗力は降伏します。この挙動は、高分子鎖の解きほぐれ挙動に関連することがわかります。このような抵抗力の調製は、粘着剤の製品設計に重要な要素であるため、本シミュレーションの活用が期待されています。