

粘着テープの剥離シミュレーション ～剥離手法と原子間結合の解析～

研究・開発機関 : リンテック株式会社
利用施設 : FOCUSスパコン A, R, W, Q システム
計算規模 : 計算時間 10 ~ 48 時間前後
利用ソフトウェア : LAMMPS

Before

- 粘着テープの設計を行う上で接着力を知ることは重要です。しかし、粘着テープを実際に剥がす剥離試験では接着力のバラツキが大きくなりがちで、性能評価の精度向上が困難な状況です。
- 顕微鏡などを用いた観察も行っていますが、やはり精度の高い性能評価につなげることは困難です。

After

- 分子シミュレーションにより高分子1本ずつが分離していく過程を明確に可視化でき、個々の原子に加わる力を計算することができました。
- これにより剥離の状況を理論的に把握でき、性能評価の精度向上が可能となり、的確な製品設計につながります。

背景と目的

商品ラベルやお菓子のおまけラベルなど日用品に貼られている“シール”は、工業製品としては“粘着テープ”、“粘着ラベル”などと呼ばれています。これらの製品は貼付する際に圧力を加えることで対象物に容易に貼り合せが可能であることから接着剤の一種として分類されています。粘着テープが容易に様々な対象物に貼りつけることができるポイントは温度です。通常、室温前後では粘着部分が柔軟な素材であることから様々なものに貼りつけることができるのですが、冷凍庫やさらに温度が低い環境でも貼り付けが可能な特殊な粘着テープもあります。

粘着テープは様々な産業分野で利用されており、紙・包装・製本、土木・建築・建材、自動車、鉄道、半導体、スポーツ用品、生体接着、DIY、文具、ホビーなど多岐にわたっています。また、実際の粘着テープの形態は、必要な機能を満たすために、一般的には表示層(表面基材)、粘着層(粘着剤)、剥離層(剥離紙・剥離フィルム)の3層構造です。

完全に固着するまでに長時間を要する一般的な接着剤と比較すると、粘着テープはその場で押し付ける(圧力を加える)だけで貼り付くため、取り扱いが容易です。また、紙・樹脂・金属・布など、幅広い対象物に対して接着状態を保持することができる点も特徴です。粘着テープがこのような特性を持っている理由としては、粘着層が高分子と呼ばれる柔軟な極細の糸のやうなもので成り立っており、室温で高分子全体がベタベタした状態であるために、様々な物体に貼ることができます。

本稿では、粘着テープの強度を測定する専用の機器による実験方法と、分子動力学(Molecular Dynamics)シミュレーションによる剥離状況の解析について紹介します。

利用成果

1. ピール(剥離)試験機の構造と剥離形態

図1は90度ピール試験機と呼ばれているもので、試験片と書かれているところが粘着テープで、ちょうど90度の角度で徐々に粘着テープを引っ張り上げて剥がし、引っ張られている力(応力)を測定します。また、図2は180度ピール試験機と呼ばれており、試験板の真ん中に貼られている粘着テープを180度の角度で引っ張り、図1と同様に引っ張られている力(応力)を測定します。また、任意の角度で粘着テープを引き剥がすことが可能なピール試験機もあります。

2. 分子動力学による剥離のシミュレーション

次に、分子動力学というシミュレーション手法を用いて粘着テープを剥がす現象を解析しコンピュータ上で可視化した事例を紹介します。分子動力学では、多数の高分子の糸をコンピュータ上で作成します(高分子はほとんどがC(炭素)とH(水素)とO(酸素)からできています)。その後、高分子を混ぜてほぼ均一な状態になったところ(平衡化計算)で、全ての原子に対してNewtonの運動方程式を解いて、全原子が時間経過とともにどのような動きをするのかを追跡できるようになります。これが分子シミュレーションの特徴です。

図3、4は剥離シミュレーションのある時点での状態を示しています。図3では、上部に動かない固定部を設けていて、そこに粘着テープを貼り、引張り部(基材はフィルム・紙など)から下に粘着テープが剥がされている状況を表しています。これにより粘着剤が下がっていく状態が分かります。

図4では、剥離シミュレーションにより、粘着テープを剥がす終盤で高分子が長くつながっていることや原子1個1個が判別でき、絡み合った粘着テープが徐々にほどけていく状況を観察することができます。

今後、個々の原子に加わる力を計算するという再現性の高い方法で、粘着テープを引き剥がす力を精度よく把握し、的確な製品設計につなげていきたいと考えています。

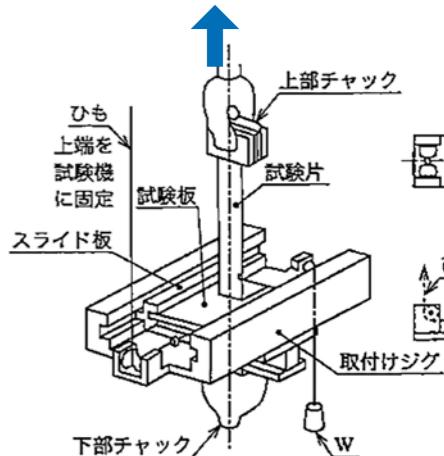


図1 90度ピール試験機

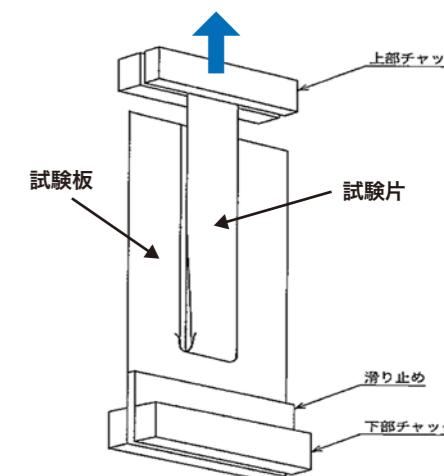


図2 180度ピール試験機

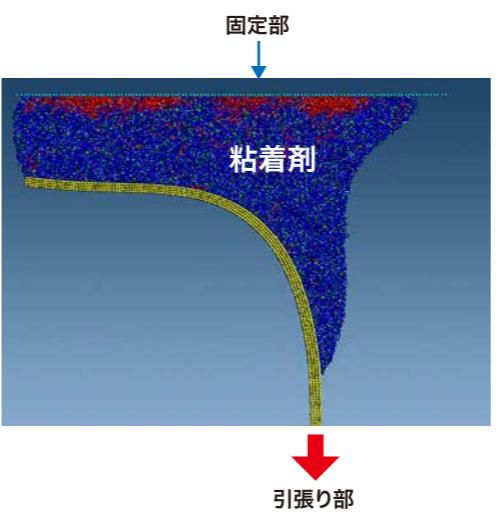


図3 剥離シミュレーション(引き剥がし)
(上部を固定、下部より引っ張り)

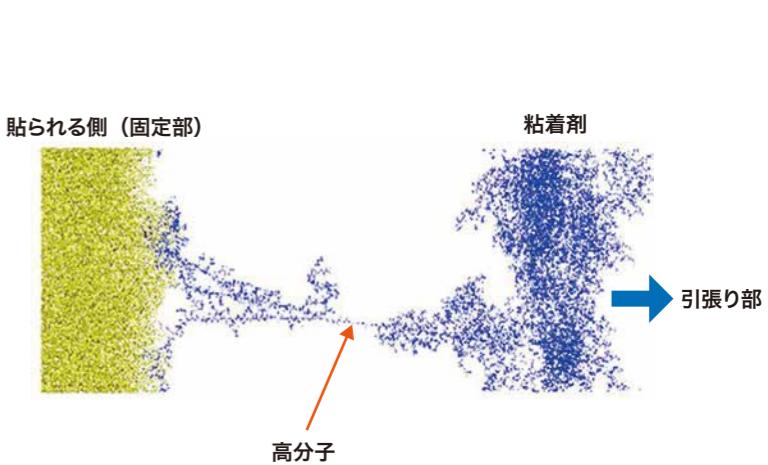


図4 剥離シミュレーション(剥がすプロセスの終盤)
(左部を固定、右部より引っ張り)

出典: 粘着剤-シリコンウェハ間の剥離現象の分子動力学解析(東京大学博士論文2022)

文責 リンテック株式会社 岩方 裕一