

## 機械学習を活用したフィルム表面の濡れ性に寄与する因子の解明

Machine learning proceeds understanding of the wettability of film surfaces.

産総研<sup>1</sup>, °田口諒<sup>1</sup>, 古賀健司<sup>1</sup>, 田嶋一樹<sup>1</sup>

AIST<sup>1</sup>, °Ryo Taguchi<sup>1</sup>, Kenji Koga<sup>1</sup>, Kazuki Tajima<sup>1</sup>

E-mail: r-taguchi@aist.go.jp,

薄膜の成膜や材料の接着において、基材（被着体）の表面特性を理解することは極めて重要である。近年の表面解析技術の成熟により、X線光電子分光法（XPS）や飛行時間型二次イオン質量分析法（TOF-SIMS）などの高度な装置を使用すれば、表層の化学組成を詳細に解析できる。一方、表面を簡便に調べる方法としては、固体表面の濡れ性（接触角）を評価する方法がある（図1）。一般的に固体表面は、分子間力由来の過剰なエネルギーを有しているため、その表面積を小さくしようとする力（表面自由エネルギー）が働く。固体表面に適切な液体を滴下すれば、その界面で相互作用が生じ、固体表面積を小さくするために液体は濡れ広がる。言い換えれば、接触角には固体表面の分子間力に基づく化学組成や化学結合に関する情報が含まれる。このような背景のもと、固体表面の組成や結合に由来する表面自由エネルギーを接触角から見積もる理論式が報告されている。たとえば、Owen・Wendtらは、表面自由エネルギーが分散成分と極性成分に分けられるとして、接触角からそれらの成分を算出する計算式を提案している<sup>1)</sup>。また、北崎・畑らは、接触角から分散成分、極性成分、水素結合成分の3成分に分ける理論式を提案している<sup>2)</sup>。その他にも、ルイス塩基、ルイス酸成分への成分分けを提案する報告や、成分分け自体を否定する提案など、複数の理論が乱立しており、どのような化学結合や化学組成が、どの程度接触角に寄与しているか、未だに解明されていないのが現状である<sup>3)</sup>。

上記背景より我々は、表面の化学組成と接触角の関係を定量的に明らかにできれば、接触角から化学組成情報を取得する簡便かつ強力な解析ツールになると考えて

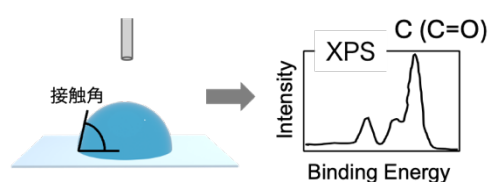


図1. 本研究コンセプト

いる（図1）。そこで本研究では、高分子フィルムを解析対象とし、機械学習を活用してフィルム表面の化学組成がその接触角に与える影響を解析した。化学構造や分子量が異なる高分子フィルムや高分子薄膜を用意し、液体試薬2μLをそれぞれの表面に滴下し、静的接触角を測定した。また、同様のサンプルのXPSスペクトルを取得した。複数のモデル構築を検討し、XPSスペクトルから接触角を予測する機械学習モデルを構築した。本発表では、接触角試薬の予測や特徴量重要度解析から、どのような化学組成が高分子フィルム表面の濡れ性に寄与しているか議論する。

1) D. K. Owens, R. C. Wendt, *J. Appl. Polym. Sci.* **1969**, *13*, 1741.

2) 北崎, 畑, 日本接着学会誌, 1972, 8.

3) J. W. Drelich, L. Boinovich, E. Chibowski, C. Della Volpe, L. Holysz, A. Marmur, S. Siboni, *Surf.*

*Innov.* **2019**, *8*, 3