

MERIT インターンシップ報告書

新領域創成科学研究科 物質系専攻

博士課程1年 MERIT13期生

藤岡秀太

概要

- インターンシップ実施期間
2025年11月4日～11月28日
- 受け入れ先
村田製作所 技術・事業開発本部 新規技術センター 先端技術研究開発部 (野洲事業所)
- 研究テーマ
樹脂/基板界面における反応および界面強度の計算

背景

熱によって硬化収縮する樹脂材料は、食品包装や自動車の部品、建築用材など、私たちの日常から工業的用途まで幅広く使用されている。とりわけ、既存のエレクトロニクス分野では接着材・封止材として広く展開されているが、樹脂と基板との熱膨張係数差による界面剥離など、接着強度に関する課題があり、樹脂/基板界面における詳細な分子挙動を明らかにする必要がある。樹脂の劣化機構について、界面近傍における自由空間に水が取り込まれることで樹脂の界面剥離が促進されることが考えられているが、界面近傍の分子を直接測定しようとする、例えば赤外分光法を用いたとしても界面における水分子と樹脂分子を明瞭に区別することは極めて困難である。こうした問題を解決する上で、分子動力学 (MD) シミュレーションを活用して分子挙動を明らかにする取り組みは非常に効果的であり、先行研究では Si 基板上におけるエポキシ樹脂の反応と歪み強度の計算を行い、界面近傍の自由空間が樹脂強度に大きく影響を及ぼすことを示している^[1]。

[1] S. Yamamoto *et al.*, *ACS Appl. Polym. Mater.*, 4, 8, 6038 (2022).

インターンシップにおける研究内容

本インターンシップでは、先行研究で実証されたシミュレーション結果の再現性の確認およびその他の樹脂や基板表面における適用可能性を検討した。大まかな計算の流れとしては、1. Si 基板表面の切り出しと樹脂層 (エポキシ主剤とアミン系硬化剤) の構築、2. 樹脂の反応計算、3. 面外方向の歪み-応力特性の計算となる。シミュレーションの結果、Si 基板表面が親水性のときには、樹脂層がバルク内部から崩壊していく凝集破壊が優位に生じ、

疎水的な基板表面上では界面剥離が優位に生じることが明らかとなり、先行研究と同様の傾向を再現することが確認された。一方で、印加する歪みのステップ量や平衡化ステップ数によって得られる結果は大きく変わるため、計算のパラメータ設定には注意が必要である。また、別の樹脂を用いて反応計算を行ったところ、樹脂材料側の親（疎）水性によらず、親水的な基板表面と樹脂分子との間で水素結合が形成され、界面剥離が生じにくいという結果が示唆されており、詳細な樹脂の界面剥離機構の解明や高性能な樹脂材料の設計指針に貢献することが期待される。

所感

本インターンシップでは企業での理論・シミュレーション研究開発という、普段実験メインで材料研究をしている私にとって馴染みのない経験であったが、同時に大変刺激的な内容になったと感じている。自身が所属する研究室での研究環境との乖離が小さく、比較的自由にテーマ設定して活発に議論することが可能であった点は印象的であった。また、実際に理論計算の現場を体験することで、自身の研究アプローチをより客観的に見ることができ、今後の研究指針を考える上での重要な機会の一つとなった。特に、実験と理論・計算分野との共同研究が重要だという認識がより強固なものとなった。研究開発以外の場面では、受け入れ先以外の部門での施設見学や様々なキャリアを持った社員の方々と雑談する機会を頻繁にセッティングしていただき、企業研究に対する解像度がより鮮明になった。社員の方との食事会にお誘いいただいたり、事業所のある野洲から京都・大阪へのアクセスも良いため、業務時間以外でも充実した生活を送ることができた。

謝辞

今回インターン生として受け入れ準備をしていただいた村田製作所の平井様、1か月もの間現地で直接指導していただいた渡邊様をはじめ、配属先部署の皆様には大変お世話になりました。あらためて感謝申し上げます。また、指導教員である有賀先生には本インターンシップへの参加を快諾していただきました。感謝申し上げます。最後に、「企業人材ニーズ vs 博士人材シーズマッチングワークショップ」を企画・運営していただいた MP-CoMS 事務局の皆様には、大変貴重な機会を作っていただきました。あらためて感謝申し上げます。