



# モデル界面を使った接着結合形態の推定

各種接着(接着剤/無機物質)の接着結合形態を推定します。

## 推定方法(炭素鋼とイソシアネートによる解析事例)

接着結合形態の推定例として、炭素鋼とイソシアネートの事例をご紹介します。

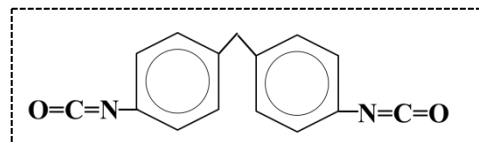
イソシアネートは、ウレタン系接着剤に使用される接着剤成分です。

### (1)接着結合のモデル界面の作成

モデル界面として、アセトンにイソシアネートを極少量を溶解し、溶液中に炭素鋼を浸漬し、炭素鋼表面にイソシアネートを吸着させます。(詳細な方法は、対象接着剤や表面処理剤によって変わります。)

### (2)表面分析と結合形態の推定

(1)で作製したモデル界面を表面分析(ToF-SIMS)により分析し、得られる分子の断片から炭素鋼とイソシアネートの結合形態を推定します。



イソシアネート(MDI)の構造  
MDI(methylenediisocyanate)

## 推定結果(ToF-SIMSによる接着結合形態の推定)

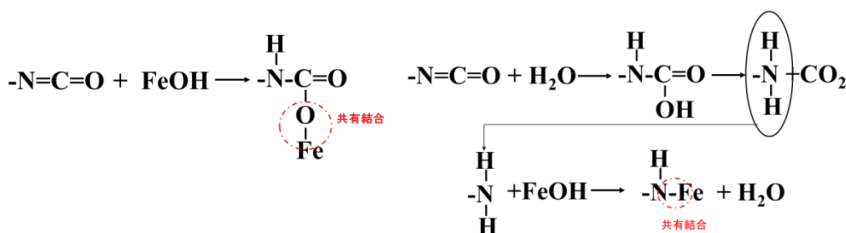
観察されたフラグメントには、炭素鋼に吸着したMDI分子の断片(表1)があり、これらは、一部イソシアネート基がアミンに変わっています(例えばm/z=106.08, 197.11がこれに相当)。これは炭素鋼表面の吸着水もしくは大気中の水分とイソシアネートの反応の結果と推定されます。また界面から観察されたフラグメント(Feを含む)には、炭素鋼表面に由来する、イソシアネートと炭素鋼の結合した形態を含むものがあります。m/z=71.96, 147.99は、上記アミンと炭素鋼上の水酸基が反応し、化学結合を生成した事が、m/z=99.93, 130.94は、イソシアネート基が炭素鋼表面とウレタン結合を生成した事が、それぞれ推定できます。

表1 MDI分子の断片

m/z (a.u.)	Fragment	Structure
106.08	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sup>+</sup>	
132.05	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> NO <sup>+</sup>	
197.11	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	
223.10	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	

表2 炭素鋼と界面領域由来の断片

m/z (a.u.)	Fragment	origin	Structure
71.96	FeNH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	Steel/MDI interface	
147.99	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NFe <sup>+</sup>	Steel/MDI interface	
99.93	FeO <sub>2</sub> C	Steel/MDI interface	
130.94	CHNO <sub>3</sub> Fe	Steel/MDI interface	



イソシアネートと炭素鋼表面の水酸基によるウレタン結合の生成

アミン(イソシアネートと水分反応生成物)と炭素鋼表面の水酸基との脱水縮合

推定される炭素鋼とイソシアネート(MDI)との相互作用

※ 各種接着剤成分や表面処理剤の界面結合形態などを推定できます。詳細は当社へご相談下さい。