

MI活用による耐皮脂軟化性 アクリルエマルションの開発

Development of a Sebum-Resistant Acrylic Emulsion Using Materials Informatics

荒木陽介 Yosuke Araki / 板野凧紗 Nagisa Itano / 宮崎祐樹 Yuki Miyazaki

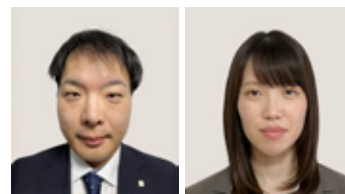
研究開発カンパニー 研究開発センター 機能性樹脂開発室

Functional Resins Development, R&D Center, R&D Company

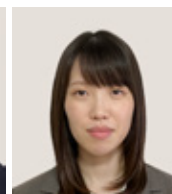
津村登紀 Toki Tsumura

研究開発カンパニー 研究企画部 MI推進課

Materials Informatics Section, Research Planning Department, R&D Company



荒木陽介



板野凧紗



宮崎祐樹



津村登紀

1

はじめに

近年、塗料・コーティング分野では環境負荷低減やVOC削減への要求を背景に、水性化が進展している。国内の塗料生産量推移を見ると、溶剤系塗料が減少傾向を示す一方、水性塗料は2020年以降も約40万トン規模の生産量を維持している¹⁾ (図1)。こうした中、水性塗料の主要バインダーであるアクリルエマルションには、優れた耐候性に加え、防汚性や耐薬品性などさまざまな機能が求められている。

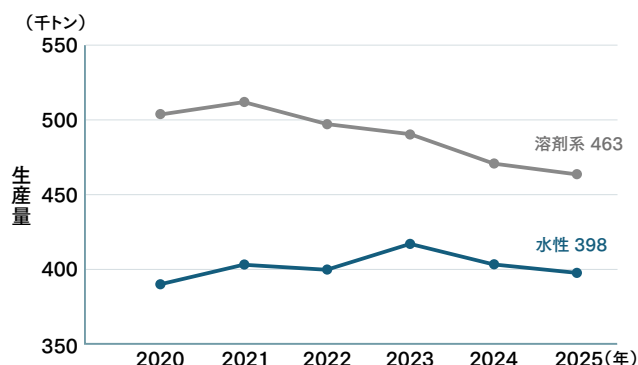


図1 国内塗料生産量の推移

人が頻繁に接触する建材や設備部材では、手指由来の皮脂成分が塗膜に付着・浸透することで塗膜が軟化し、汚れの付着や外観変化を引き起こすことがある (図2)。このた

め、皮脂に接触しても塗膜の硬さや外観を維持する耐皮脂軟化性は、美観や品質を長期間維持するうえで重要な性能である。しかし耐皮脂軟化性には、皮脂とポリマーとの親和性、エマルション粒子構造、造膜状態、架橋構造など多くの因子が関与しており、従来の経験則や一因子ずつの検討のみで最適な設計指針を得ることは容易ではない。

本稿では、耐皮脂軟化性の支配因子の1つである皮脂とポリマーとの親和性に着目し、マテリアルズインフォマティクス (MI) を活用して設計指針を導出するとともに、その知見を材料設計へ展開することで、耐皮脂軟化性に優れたアクリルエマルションを開発した事例について紹介する。

2

MI活用の考え方と開発コンセプト

耐皮脂軟化性のように複数の因子が複雑に関与する材料特性では、個々の因子の影響を把握するだけでなく、それらの関係性を整理し、設計指針として活用することが重要である。当社では、このような材料開発課題に対応するため、研究開発DXの一環としてMIの活用を推進している²⁾。

当社が目指すMIは、多量のデータを解析して材料を自動的に探索する手法ではない。まず研究者が現象を整理し、化学的知見に基づいて検証すべき仮説を設定する。そのうえで実験データを統計的に解析し、因子と性能との関係を

ドアの引手の外観



手に触れる頻度が少ない箇所



手に触れる頻度が多い箇所

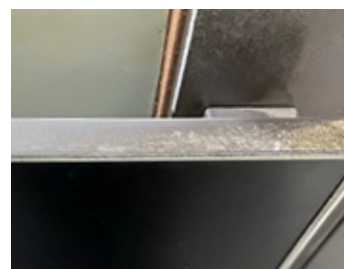


図2 人の接触に伴う塗膜外観の変化 (ドアの引手)

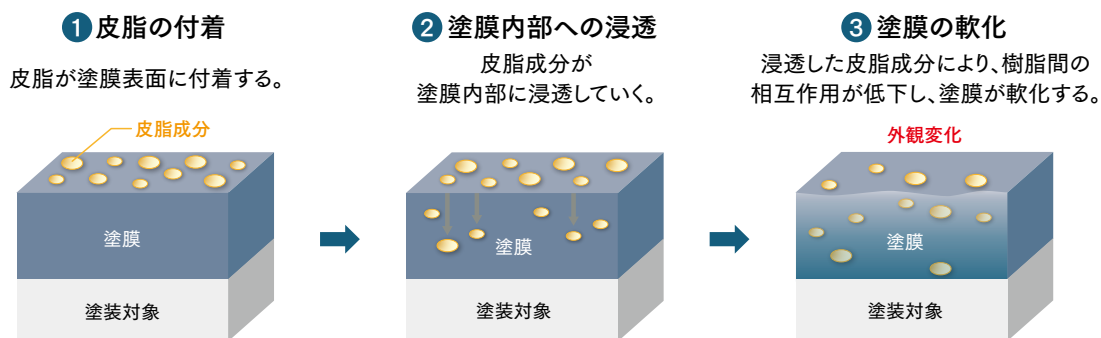


図4 皮脂による塗膜変化の進行（イメージ）

捉えることで、メカニズムの理解を深める。そして得られた知見を次の材料設計へ還元し、製品開発につなげることを重視している。つまり当社では、MIを研究者の知見や経験に代わるものではなく、それらを補完しながら、材料設計における仮説構築や意思決定を支援する手段として位置づけている。統計解析と科学的手法を組み合わせることで、複雑な課題を段階的に解きほぐし、開発の質とスピードの向上を目指している（図3）。

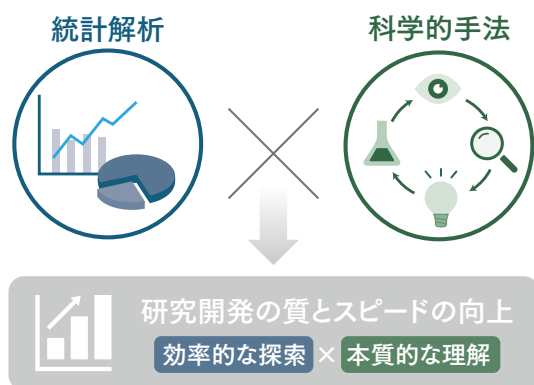


図3 当社におけるMI活用のイメージ

本開発では、この考え方にに基づき、耐皮脂軟化性に関与する複数の因子の中から「皮脂とポリマーとの親和性」に着目した。親和性の指標として溶解度パラメータ（SP）を用い、その3つの成分と耐皮脂軟化性との関係を解析することで、有望な材料設計領域の抽出を試みた。さらに、抽出した設計領域をアクリルエマルションの材料設計へ反映し、耐皮脂軟化性と実用性能を両立する製品の実現を目指した。なお、SPの詳細については次章で説明する。

3 耐皮脂軟化性向上に向けた技術課題

3-1 皮脂による塗膜軟化現象

人の皮脂は、主として脂肪酸、トリグリセリド、スクアレンなどの有機成分から構成されている。これらの成分が塗膜表面に付着すると、時間の経過とともに塗膜内部へ浸透する場合がある。浸透した皮脂成分がポリマー鎖の間に

入り込み、鎖同士の相互作用を弱めると、塗膜が可塑化されて軟化する。これが汚れの付着や光沢変化などにつながる（図4）。皮脂の浸透しやすさは、皮脂成分とポリマーとの親和性に大きく影響される。両者がなじみやすい場合には皮脂が塗膜へ浸透しやすく、なじみにくい場合には浸透が抑えられると考えられる。本検討では、この親和性を考えるための代表的な指標として溶解度パラメータ（SP：Solubility Parameter）に着目した。

3-2 アクリルエマルション設計の課題

SPには、その定義や分子間相互作用の捉え方に応じてさまざまな考え方がある。従来、ポリマー設計では、HildebrandのSPに代表される、分子間相互作用を1つの尺度で表したSP（以下、単一SP）が親和性の代表的な指標として広く用いられてきた^{3) 4)}。しかし、本開発で蓄積してきたアクリルエマルションの評価結果を整理すると、単一SPが同程度であるにもかかわらず、耐皮脂軟化性が異なる場合がある（図5）。このことから、単一SPは親和性を比較するうえで有用な指標であるものの、その値だけでは皮脂とポリマーとの相互作用の違いを十分に捉えられないと考えた。



図5 単一SPと耐皮脂軟化性

3-3 SPの3成分について

単一SPの分子間相互作用を分散力項（ δd ）、極性成分（ δp ）、水素結合成分（ δh ）の3成分に分解して捉える考え方がある^{5) 6)}。本検討では、各成分と耐皮脂軟化性との関係をより詳細に検討することとした。 δd は主に炭化水素

骨格などに働く分散力、 δp は分子の極性に由来する双極子間力、 δh は水素結合による相互作用を表す。3成分と皮脂との関係を以下に整理した(表1)。3成分の各値から、計算によって3成分の総合値(総合SP)を算出できる。単一SPと総合SPは、いずれも分子間相互作用を1つの値で表す類似の尺度であり、算出方法は異なるものの、比較的近い値を示す。一方、単一SPや総合SPが同等であっても3成分の内訳が同等とは限らない。例えば、 δd が高く δp が低いポリマーと、 δd が低く δp が高いポリマーが、同程度の総合SPを示すことがある。この場合、1つの値だけを見れば類似した材料であっても、皮脂成分との分子間相互作用は異なる可能性がある。

表1 SP 3成分と皮脂の関係

SP成分	主な相互作用	皮脂との関係
δd	London分散力 ファンデルワールス力	炭化水素鎖やスクアレンなど、 低極性部分との親和性
δp	双極子間力	エステル基、カルボニル基など、 極性部分との親和性
δh	水素結合	脂肪酸など、 水素結合性を有する成分との親和性

4 MIを活用した設計指針の導出

4-1 仮説設定と検証プロセス

本開発を進めるにあたり、当社MIにおける科学的手法の考えに基づき仮説を設定した。まず塗膜軟化に至る現象を整理し、複数ある因子の中から「皮脂とポリマーの親和性」に着目し、検証対象とした。さらに、3成分の分子間相互作用それぞれの寄与を解析することで耐皮脂軟化性に対する傾向を得られるのではないかと考えた。そこで耐皮脂軟化性に対する制御仮説を「 δd 、 δp 、 δh の各値と、それらの組み合わせが耐皮脂軟化性に影響する」とし、これに基づいて検証を行った。

従来の材料開発であれば、仮説検証においても一因子ずつ水準を変更しながら試作と評価を繰り返す方法が多く用いられてきた。この方法は各因子の影響を理解しやすいが、因子の増加や、複数因子の組み合わせによって多くの試作を必要とする場合がある。また、検討した条件の周辺に知見が限られ、設計領域の全体像を把握しにくいこともある。

本開発では、3成分と耐皮脂軟化性との関係を検証するため、実験計画法に基づいてモノマー組成を設計し、複数のアクリルエマルジョンを試作した。実験計画法を活用することで、限られた試作数で各因子の影響を効率的に評価できる。さらに、統計解析に適したデータを体系的に取得できるため、各SP成分の影響だけでなく、成分間の組み合わせによる影響についても、より詳細に解析することができる。

4-2 ロジスティック回帰による解析

試作したエマルジョンの耐皮脂軟化性の評価結果に対して統計解析を行い、耐皮脂軟化性の制御仮説の検証を行った。解析には、ロジスティック回帰を用いた。ロジスティック回帰とは、複数の因子から、ある結果が生じる確率を推定する統計解析手法である。つまり、特定の試験条件において、耐皮脂軟化性が良好となる確率を算出できる。本検討では、各樹脂の耐皮脂軟化性と δd 、 δp および δh の関係を解析し、これら3成分の組み合わせから、耐皮脂軟化性が良好となる確率を推定した。

解析では、各成分が単独で及ぼす影響に加えて、成分間の交互作用も考慮した。交互作用とは、ある因子の影響が、別の因子との組み合わせによって変化する関係をいう。例えば、 δp を高くしたときの効果が、 δd の高低によって異なる場合、 δd と δp の間に交互作用があると考えられる。耐皮脂軟化性のように複数の分子間相互作用が関係する性能では、1つの成分の大小だけでなく、成分同士のバランスを捉えることが重要である。また、交互作用によって因子と性能が非線形となる場合、従来の「一因子ずつ水準を変更する方法」では最適化が難しい場合が多い。

解析の結果、3成分と耐皮脂軟化性との間に統計的に有意性が認められた。この有意性は、ロジスティック回帰において算出される有意確率(p値)を用いて評価した。一般にp値が小さいほど得られた関係が偶然のばらつきとは考えにくいと判断され、0.05未満がその判断基準となる場合が多い。本解析ではp値0.0001未満であり、3成分と耐皮脂軟化性との間に統計的に有意な関連が認められた。また、解析によって得られたロジスティック回帰モデルによる性能区分と、実際の評価結果はおおむね対応していた。

以上から、従来の単一SPでは捉えにくかった耐皮脂軟化性を、3成分の分子間相互作用に分け、各成分の組み合わせとして整理することによって傾向を把握することが可能となった。そこで、この解析結果を用いて耐皮脂軟化性が良好となる設計領域の可視化を行った。

4-3 耐皮脂軟化性が良好となる領域の可視化

δd 、 δp 、 δh を3つの座標軸にもつ3成分の空間上に、

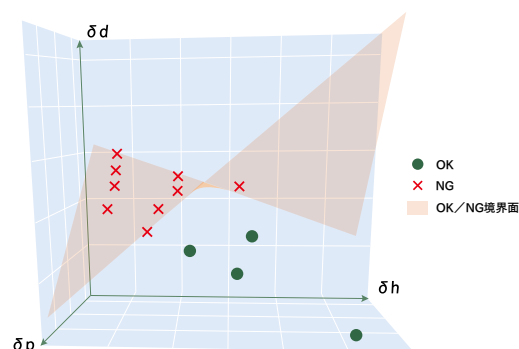


図6 δd 、 δp 、 δh と耐皮脂軟化性のプロット

試作したエマルジョンをプロットし、耐皮脂軟化性の評価結果を併せて示した(図6)。さらに、構築したロジスティック回帰モデルによる耐皮脂軟化性の良否を分ける境界面を表示した。これは、どのような3成分の組み合わせで良好な性能が期待できるかを可視化し、立体的に捉える方法である。これにより、単一SPだけでは捉えにくかった材料間の違いを把握できるようになるとともに、材料設計に活用できる連続的な設計領域として整理することも可能となった。

5

耐皮脂軟化性アクリルエマルジョンの開発

5-1 3成分の分子間相互作用から見いだした設計領域

解析の結果から、耐皮脂軟化性の良否を分ける境界面は、3成分の空間において非線形の複雑な形状を示した。ここから耐皮脂軟化性が良好となる領域は、概して「低 δd ・高 δp ・高 δh 」で特徴づけられる傾向があることがわかった。

この結果は、皮脂に多く含まれる低極性構造とポリマーとの親和性を抑えつつ、ポリマー側の極性および水素結合性を適切に調整することが、耐皮脂軟化性の向上に有効である可能性を示している。ただし、 δp または δh を単独で高くすればよいという単純な関係ではない。各成分の影響は交互作用を含むため、3成分のバランスとして設計することが重要であることも同時に示している。本検討で得られた設計領域は、耐皮脂軟化性の支配因子のすべてを説明するものではないが、皮脂とポリマーとの親和性を制御するための有効な設計指針の1つと位置づけられる。

5-2 解析結果を実際の材料設計へ展開

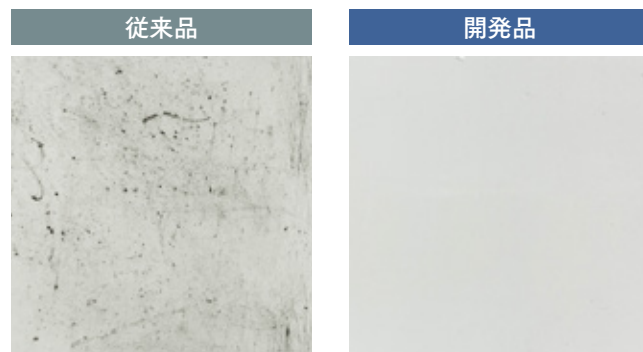
得られた設計領域を基に、耐皮脂軟化性の向上が期待されるアクリルエマルジョンを設計した。ただし、 δd 、 δp 、 δh はモノマーの化学構造によって同時に変化するため、それぞれを完全に独立して調整することはできない。また、モノマー組成を変更すると、塗膜硬度、造膜性、耐水性、耐候性など、実用上重要な他の性能にも影響する。

解析結果から、耐皮脂軟化性の向上には「低 δd ・高 δp ・高 δh 」の領域が有望であることが示された。そこで、各モノマーが3成分へ与える影響を考慮しながら各種モノマーの配合バランスを見直した。また、耐皮脂軟化性だけでなく、塗膜硬度や造膜性などの実用性能との両立を図るため、従来の材料設計知見を組み合わせ、最終組成を決定した。

5-3 開発結果と本検討の位置づけ

解析から得られた設計指針に基づいて試作・評価を行った結果、従来品を上回る耐皮脂軟化性を有するアクリルエマルジョンを開発することができた。実際に人の手が触れる環境下で約1カ月間の耐皮脂軟化性評価を行ったところ、従来品では塗膜の軟化、黒ずみが発生したのに対して、開

発品では外観変化はほとんど認められず、美観が維持された(図7)。この結果は、単一SPだけでは見えにくかった δd 、 δp 、 δh の内訳と、その組み合わせを考慮することが、耐皮脂軟化性を高める材料設計に有効であることを示している。



※約1カ月間人の手に触れる場所で試験

図7 約1カ月間の耐皮脂軟化性評価後の塗膜外観

本検討の成果は、性能のよい材料を見いだしたことだけではない。従来は暗黙知となることが多かった開発ノウハウについて、皮脂とポリマーとの分子間相互作用という観点から整理し、次の材料設計に活かせる指針として示すことができた。さらに、統計解析によって因子と性能との関係を捉え、設計領域として解釈可能な形で可視化したことで、性能向上が期待できる条件に試作を絞り込むことが可能となった。こうして得られた指針を当社の材料設計の知見と組み合わせることで、耐皮脂軟化性に優れたアクリルエマルジョンの開発へつなげることができた。

6

まとめ

本開発では、耐皮脂軟化性という複雑な性能に対し、MIによって有望な設計領域を抽出し、その知見を材料設計へ反映することで実際の製品開発につなげた。さらに、皮脂とポリマーとの親和性を3成分の分子間相互作用の組み合わせとして整理することで、耐皮脂軟化性向上のための設計指針を明確化することができた。これはMIが単なるデータ解析ではなく、研究者の知見と組み合わせることで材料設計を加速する有効な手段であることを示している。

今後も、MIを活用した材料設計を通じてさまざまな技術課題に取り組み、高機能材料の創出を進めることで、より付加価値の高い製品開発につなげていきたい。

参考文献

- 1) 経済産業省生産動態統計調査
- 2) 小畑裕作、『研究開発リーダー 9月号』、技術情報協会、2025
- 3) J. H. Hildebrand, R. L. Scott, The Solubility of Non-electrolytes, Reinhold Publishing Corp., 1949
- 4) 米澤節子, 小淵茂寿, 福地賢治, 下山裕介, 荒井康彦, 『分子構造に基づく溶解度パラメータの推算法』, 素材物性学雑誌, 19(1/2), 25-27, 2006
- 5) 小林敏勝, 『親和性をはかるー溶解性パラメーターー』, 色材, 77(4), 188-192, 2004
- 6) 前田守一, 『ゴムの耐油性とその考え方ー溶解度パラメータの取扱いについてー』, 日本ゴム協会誌, 58(3), 122-132, 1985