

# 量子化学計算による CF RTP 積層板の接着剤としてのシランカップリング剤の性能評価

(早大院基幹理工)○リ コウ・空岡 利奈・細井 厚志・国吉ニルソン

Performance evaluation of silane coupling agents as adhesives for CF RTP laminate by quantum chemistry calculation(Grad. Sch. Fundamental Sci. Eng., Waseda University)

○Hongyu Li, Rina Soraoka, Atsushi Hosoi, Nilson Kuniishi

**Abstract:** Carbon fiber reinforced thermoplastic (CF RTP) is lightweight, has high strength, and moldability, and is usually used as a composite material by joining with lightweight metals. It was proved by experiments that the bonding strength was improved by surface chemical treatment such as silane coupling treatment. However, the interfacial coupling mechanism has not been elucidated yet. In this study, the molecular structure of the silane coupling agent (KBE-9007) after pretreatment with water is used, and the bonding performance is evaluated by analyzing the interfacial bond mechanism with the CF RTP resin (PA6, PEEK) via quantum chemistry calculation. In order to conduct quantum chemical calculations, Gaussian16 was used for structural optimization calculations, transition state calculations, and vibration calculations on the molecules related to the reactions at the B3LYP/6-31g(d,p) level.

**Keywords:** Adhesion of dissimilar materials, Molecular Orbital method, Reaction Dynamics

炭素繊維強化熱可塑性プラスチック (CF RTP) は、軽量、高強度、成形性に優れ、軽量金属と接合して複合材料として使われている。シランカップリング処理等表面化学処理により接合強度向上したと実験で証明された。しかし、界面結合メカニズムまだ未解明である。本研究はシランカップリング剤 (KBE-9007) が加水予備処理後の分子構造を使い、Gaussian16 を使用し B3LYP/6-31G(d,p) のレベルにて量子化学計算を行い、反応に関わる分子の構造最適化計算、遷移状態計算、振動計算等を求めた。量子化学計算によって CF RTP 樹脂 (PA6, PEEK) との界面結合メカニズムを解析するによって接合の性能評価を行う。

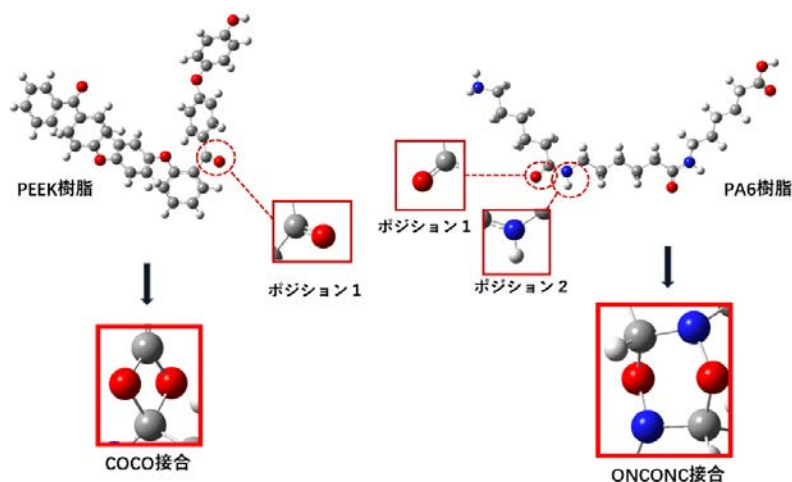


Fig. 1 樹脂表面で反応しやすいポジション及びシランカップリング剤分子との接合