理論計算による炭素繊維複合材の界面解析

Theoretical study of the surface between graphene and epoxy resin

伊藤忠テクノソリューションズ　°森 一樹 [1], 松本 信彦 [2], 河野 雄次 [3]

[1]ITOCHU Techno-Solutions Corp. [2]MITSUBISHI GAS CHEMICAL COMPANY, INC., [3]Yokohama National University , °Kazuki MORI[1], Nobuhiko MATSUMOTO[2] and Yuji KOHNO[3]

E-mail: kazuki.mori.013@ctc-g.co.jp

１．緒言

近年，炭素繊維複合材料の研究や炭素繊維複合材料の比強度が合金などに比較して非常に高く，構造部材の軽量化に大きな効果を発揮することから商品開発が盛んに行われている．炭素繊維と樹脂の界面及び界面構造が力学的特性に大きく関与していることが見えてきている．しかしながら，実験では界面の様子を正確に把握するのが難しいことから，界面を厳密に解析するためにナノシミュレーションの技術が必要になってきている.そこで我々はこれまでに，樹脂自体の特性について第一原理計算，分子動力学計算（MD）を用いて解析し報告を行い，炭素繊維と樹脂の界面せん断強度が大きい場合，樹脂単体での樹脂どうしの相互作用が強くなっており，せん断強度の要因の１つであることを示した[1]. 本発表では，共通なエポキシ樹脂に対して，硬化剤を変えた場合の炭素繊維界面近傍の樹脂の構造及び配向，界面エネルギーの算出及び界面エネルギーの大小の原因について，MD 計算及び第一原理計算を用いて解析を行った．さらに各反応機構についても考慮し検討をおこなった.

２．計算条件

エポキシ分子と硬化剤の構造最適化には分子軌道法ソフト Gasssian09 を用いて行った. 1 分子のエポキシ分子に 2 つの硬化剤が反応した分子について我々はこれまで検討してきたが，本研究ではエポキシ 2 分子，3 分子モデルをもちいて，反応起こりやすさも検討した.炭素繊維-樹脂モデルの計算には, MD 計算を用いてシミュレーションを行い，ソフトにはGROMACS 5.1.2 を使用し，力場にはOPLS-AA，樹脂及び炭素繊維の電荷は分子軌道法から算出した値を用いた. MD 計算から求まった構造を基に，界面エネルギーを算出した．またそれ以外に動径分布関数及び密度分布も解析を行った．界面エネルギーの大小の原因を探るために，グラフェンシート上に 1 分子の樹脂を配置したモデルを，第一原理計算のバンド計算を用いて解析を行った．バンド計算ソフトには，Quantum ESPRESSO を使用した．グラフェンのような分子構造では，ファン・デル・ワールス力の記述する必要があるために，vdw-DF2 のオプションを使用した．Quantum ESPRESSO の計算には exabyte.io 社のサーバ及びプラットホーム[2]を使用した.

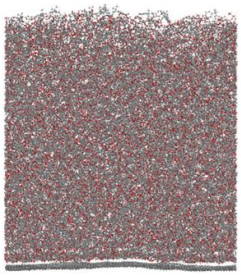

Fig. 1 Relaxation model of graphene and resin.

[1] K. Mori, N. Matsumoto, S. Nomoto, K. Tsuruta, *OJCM* , 7, 179, (2017)

[2] https://exabyte.io/