

湿潤環境でのプロトン移動とシランカップリングの耐久性低下に関する 第一原理シミュレーション

First-principles Simulation Study on the Proton Transfer and Weakening of Silane Coupling under Wet Conditions

名工大工 °尾形 修司, 浦長瀬 正幸

Nagoya Inst. Tech., °Shuji Ogata, Masayuki Uranagase

E-mail: ogata@nitech.ac.jp

シランカップリングは、有機樹脂材料に無機ナノ粒子を分散させたコンポジットの作成などで広く使われている技術である。OH 基で終端化されたシリカ基板表面にシランカップリングさせた場合、特にアルカリ環境においては時間経過共にカップリングが弱くなることが実験で知られている。本研究はそのミクロなメカニズムを明らかにする[1]。

我々は、水分-材料間でのプロトン移動の自由エネルギーを DFT レベルでの熱力学積分により計算し、中性環境あるいはアルカリ環境では、シリカ基板から脱プロトン化することを明らかにする。またその状況では、シランカップリングの化学ボンドが弱くなることをボンド破壊バリアエネルギーの低下として定量的に示す。さらに、DFT を用いた第一原理分子動力学シミュレーションにより、実際に、中性環境あるいはアルカリ環境ではシランカップリングの化学ボンドが容易に切断することを示す。

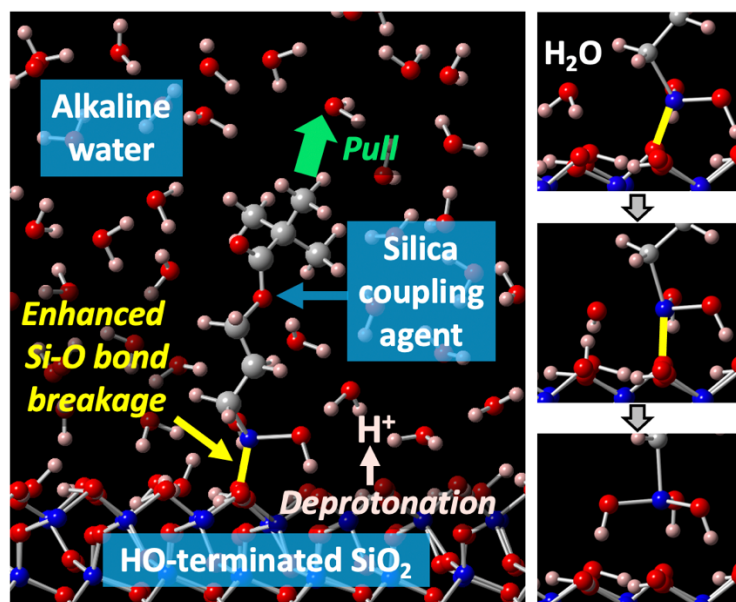


Fig. 1: Silane coupling to HO-SiO₂ under a wet condition. Present DFT-based free-energy calculations predict the deprotonation of HO-SiO₂. Thereby the Si-O bond of the silane coupling weakens.

参考 [1] S. Ogata and M. Uranagase: J. Phys. Chem. C, 125, 22907 (2021).

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c07251>