

γ-アルミナとエポキシ樹脂の界面における接着相互作用の理論的研究

(九大先導研¹) ○上部 岳洋¹・中村 伸¹・辻 雄太¹・吉澤 一成¹

Theoretical Study of Adhesion Interaction at the Interface between γ-Alumina and Epoxy Resin
(*Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu Univ.*¹) ○Takahiro Uwabe,¹ Shin Nakamura,¹ Yuta Tsuji,¹ Kazunari Yoshizawa¹

Adhesion of epoxy resin to metal surfaces is important in various industrial fields. However, the detailed mechanism remains unclear. Although various experimental studies have been carried out to elucidate it, it is difficult to analyze the adhesive interface at the molecular level. Therefore, theoretical calculations are very effective. Aluminum alloys are widely used in various industrial fields, such as structural materials for spacecraft, abrasives, and catalysts, because they are light, strong, and inexpensive. The aluminum surface is expected to be oxidized. Furthermore, OH groups are partially present on the oxide surface. In this study, we modeled the interface between three γ-alumina surfaces with different hydroxyl group concentrations, 3OH, 6OH, and 9OH nm⁻², and epoxy resin adhesive, and performed density functional theory calculations. The adhesion mechanism of the epoxy resin adhesives was analyzed by calculating the adhesion energy and the adhesion force. From the adhesion energy and adhesion strength, it was shown that the surface with the highest hydroxyl group concentration was the most suitable for the epoxy resin adhesive. The importance of the coordination bond to aluminum atoms at the interface between γ-alumina and epoxy resin was also suggested.

Keywords : Adhesion; Epoxy resin; Alumina ; DFT calculation ; Surface hydroxyl group

金属表面とエポキシ樹脂の接着は多くの工業分野に利用されており、重要な技術の一つである。しかし、接着界面での相互作用に関しては不明瞭な点が多い。接着機構を解明するため、これまでに様々な実験的研究が行われてきたが、分子レベルでの接着界面の解析は非常に困難である。そのため、理論計算が非常に有益である。アルミニウム合金は軽さと力学的強度を併せ持ち、安価であることから、宇宙船の複合材料、研磨剤、触媒など様々な産業に用いられている。また、これらの金属表面は酸化されており、さらに水酸基などで部分的に覆われていると考えられる。本研究では、水酸基濃度が3OH、6OH、9OH nm⁻²となる3つのγ-アルミナ表面とエポキシ樹脂との界面をモデリングし、密度汎関数計算を行うことで、エポキシ樹脂との接着機構を理論的に解析した。接着エネルギーや接着力を算出することにより、水酸基濃度が最も高い表面がエポキシ樹脂との接着に適していることが明らかとなった。さらにγ-アルミナ-エポキシ樹脂界面における相互作用の中でアルミニウムの配位結合が大きな役割を果たしていることも示唆された。