

湿潤環境での無機有機界面のプロトン化と接着力低下に関する第一原理シミュレーション

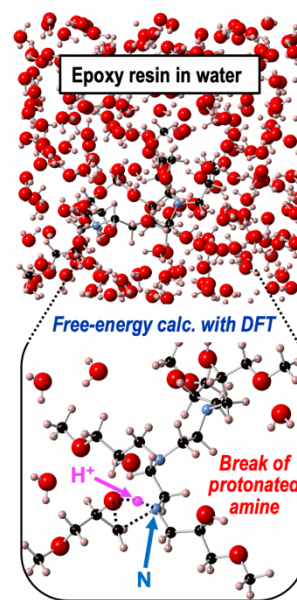
(名工大院工¹) ○尾形 修司¹・浦長瀬 正幸¹

First-principles simulations of protonation and adhesion weakening of organic-inorganic interface under wet conditions (¹*Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology*) ○Shuji Ogata,¹ Masayuki Uranagase¹

First, we theoretically investigate the protonation of the amine group in epoxy resins prepared using amine-based curing agents. DFT-based free-energy calculations show that the amine group of the epoxy resin is protonated at equilibrium depending on the location of the amine group when the epoxy resin is embedded in neutral or acid water. The energetic barrier for breaking the ether bond of the epoxy resin is substantially lowered as a result of the cooperative effect of H₂O dissociation [1]. Second, we address the issue of weakening of silane coupling agent to silica under neutral or alkaline condition. We find that the terminal -OH of silica is significantly deprotonated and that the transition-state barrier energy to break the Si-O bond of the silane coupling becomes less than 1 eV with the assistance of H₂O dissociation when 50% of the terminal -OH groups on silica is deprotonated [2].

Keywords : DFT, Epoxy resin, Silane coupling, Wet condition, Adhesion

接着剤を用いた接着やシランカップリングによる接合は、マルチマテリアル化やコンポジット化から産業界での需要が高まっているが、湿潤環境下でその接着力や強結合強度が低下することが知られており広範な利用の障害となっている。我々は第一に、アミン系硬化剤を用いたエポキシ樹脂（接着剤）について、中性あるいは酸性環境でアミン基がプロトン化することを DFT によるプロトン移動の自由エネルギー計算で明らかにし、そのプロトン化や水分子の存在により、化学ボンド破壊に要するバリアエネルギーが大きく低下することを明らかにする[1]。第二に、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シランカップリングに関して、水分-材料間でのプロトン移動の自由エネルギーを計算し、中性あるいはアルカリ環境でシリカ基板から脱プロトン化すること、さらに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明らかにする[2]。



[1] Ogata et al.: J. Phys. Chem. B (2021) 125, 8989.

[2] Ogata and Uranagase: J. Phys. Chem. C (2021) 125, 22907.