

炭素繊維-エポキシ樹脂界面の接着に関する分子論的研究

(九大先導研) ○瀬本 貴之, 辻 雄太, 田中宏昌, 吉澤 一成

Molecular study on adhesion between carbon fiber and epoxy resin

(IMCE, Kyushu-Univ.) ○Takayuki Semoto, Yuta Tsuji, Hiromasa Tanaka,

Kazunari Yoshizawa

【緒言】炭素繊維複合材料は軽量かつ高強度の高性能材料であり、金属に代替する材料として航空産業や自動車産業をはじめとする多くの工業分野で用いられている。その強度は炭素繊維と母材であるエポキシ樹脂等の高分子との接着性に強く依存する。炭素繊維の接着性に関する多くの実験的研究が行われており、酸化的表面処理により表面に生じたヒドロキシル基、カルボキシル基、カルボニル基、エーテル基、エステル基などの酸素原子を含む官能基が接着性を高めることが明らかとなっている[1,2]。しかしながら、それぞれの官能基が母材の高分子とどのように相互作用するのかは解明されていない。炭素繊維表面での接着機構や、酸化処理によって表面に生じた官能基の影響を理論的に解明することは、接着性を高めるための表面処理の技術に非常に有用な知見を与えると考えられる。本研究では炭素繊維とエポキシ樹脂との接着相互作用を量子化学計算に基づいて分子論的に解析する。

【計算方法】計算を実行するにあたり、炭素繊維表面をグラファイトの(110)面（アームチェア末端）でモデル化した。この表面をヒドロキシル基及びカルボキシル基で修飾した表面モデルをそれぞれ構築した。更に、表面に吸着した水分子の影響も考慮した。これらのグラファイト表面とエポキシ樹脂からなる接着モデルの構造を、量子化学計算プログラム CASTEP を用いて最適化した。計算には GGA-PBE 法を用い、系には周期境界条件を適応した。最適化構造をもとに発表者らが開発した手法[3-6]を用いて、炭素繊維・エポキシ樹脂間にはたらく接着力を理論的に評価した。

【結果および考察】図1に接着モデルの最適化構造を示す。接着モデルの最適化構造から炭素繊維表面のヒドロキシル基やカルボキシル基がエポキシ樹脂のヒドロキシル基と水素結合を形成して安定化することが明らかとなった。接着界面の結合エネルギーはヒドロキシル化された表面では 13.8 kcal/mol、カルボキシル化されたものでは 19.1 kcal/mol であった。両者の差は水素結合の数によるもので、より構造的自由度の高いカルボキシル基の方がより多くの水素結合を形成できるためだと考えられる。エポキシ樹脂分子モデルを最適構造の位置から炭素表面に対して垂直方向に引き離していき、変位 Δr に対するエネルギーをプロットした。得られたプロットをポテンシャル曲線に近似し、その微分から図2に示す接着力-距離曲線を

得た。最大接着力はヒドロキシル化、カルボキシル化された表面についてそれぞれ 0.52 nN、0.70 nN であり、カルボキシル化された表面の方が強い接着力を示す。得られた結果は過去の研究とよく一致し、この系の接着は水素結合に支配されているといえる[7]。

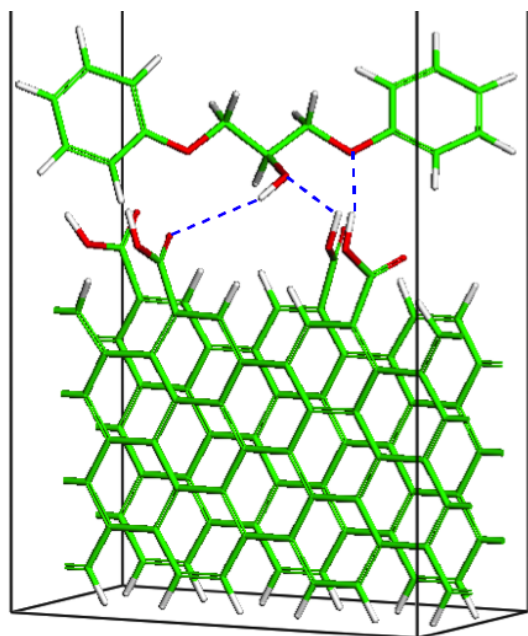


図 1. 接着モデルの最適化構造

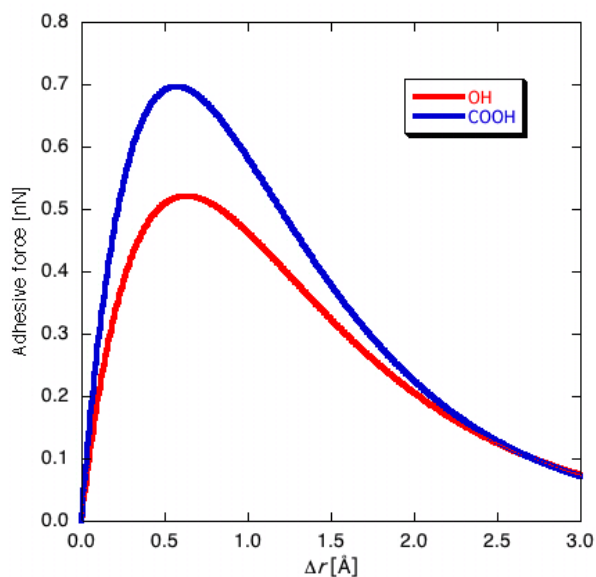


図 2. 接着力-距離曲線

【文献】

- [1] Zielke, U.; Hüttinger, K. J.; Hoffman, W. P. *Carbon* **1996**, *34*, 983.
- [2] Park, S.-J.; Kim, B.-J. *Mater. Sci. Eng. A*, **2005**, *408*, 269.
- [3] 大迫文裕, 吉澤一成, 高分子論文集 *68*, 72 (2011).
- [4] Semoto, T.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 11701.
- [5] 瀬本貴之, 辻雄太, 吉澤一成, 日本接着学会誌, *48*, 144 (2012).
- [6] Semoto, T.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2012**, *85*, 672.
- [7] Semoto, T.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *J. Phys. Chem.* submitted.