

エポキシ樹脂と窒化ホウ素の接着に関する理論的研究

¹九大・先導研, ²九大・分子システム, ³三菱ガス化学株式会社

○北村泰洋¹, 吉澤一成¹, 辻雄太², 染谷昌夫³, 高野俊彦³, 柳沼道雄³, 中西講平³

○Yasuhiro Kitamura¹, Kazunari Yoshizawa¹, Yuta Tsuji², Masao Someya³, Toshihiko Takano³, Michio Yaginuma³, Kohei Nakanishi³

¹Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University, Japan

²Education Center for Global Leaders in Molecular Systems for Devices, Kyushu University, Japan

³Mitsubishi Gas Chemical Company, Inc., Japan

【Abstract】

The adhesion between epoxy resin and h-BN or graphite is investigated by using density functional theory (DFT) calculations of periodic slab models. Epoxy resin is modeled by four fragments. We optimize the structure of these fragments on the h-BN basal surface. The potential energy surface for the process of detaching epoxy resin from the h-BN surface is obtained by using the nudged elastic band (NEB) method. The obtained potential energy curves are approximated by the Morce potential curve by using the least-squares method. The differentiation of the Morce potential curves gives adhesion force curves. The adhesion energy and adhesion force do not depend on the epoxy fragments. A detailed analysis shows that the adhesion force mainly stems from dispersion force. And we compare the adhesion force between epoxy resin and h-BN with that between epoxy resin and graphite, which has a structure similar to that of h-BN.

【序論】

エポキシ樹脂は現在、代表的な接着剤として幅広く知られている。高強度で、耐水性を持ち、軽量であるなどの特徴を有するため、飛行機や船舶、車などに利用されている。また、六方晶窒化ホウ素（以下 h-BN とする）は絶縁性を持ち、熱伝導性、潤滑性に優れ、耐食性、化学的安定性^[1]を持つため、潤滑剤やるつぼなどに幅広く利用されている。エポキシ樹脂と h-BN のナノコンポジット^{[2],[3]}はこれらの性質を併せ持つことから、回路基板などへの応用が大きく期待されている。また、これらの間の相互

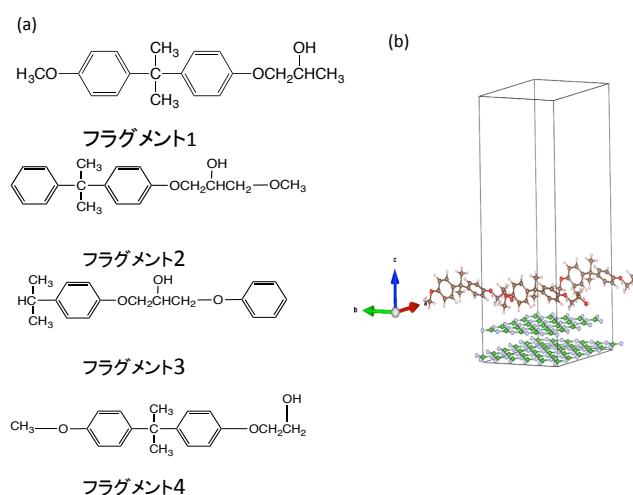


Figure 1. (a) Four fragment models for epoxy resin. (b) Optimized structure of a model of adhesion interface between an epoxy fragment (fragment 1) and h-BN surface.

作用が強くなることで、ナノコンポジットの性質の向上が期待されるため、これらの間の相互作用について明らかにすることが求められる。しかし、これらの間に働く相互作用について量子化学的な解析はなされていない。そこで、本研究では両者の間に働く接着相互作用について量子化学計算を用いて理論的に解析することを目的とした。また、h-BNと構造のよく似たグラファイトについても同様の計算を行うことで、両者の接着力の違いを比較、検討した。

【計算方法】

エポキシ樹脂は Fig.1a のように 4 つの部分構造でモデル化した。それぞれのエポキシ樹脂のフラグメントを 2 層から成る h-BN の(001)面上に配置し (Fig.1b)、第一原理分子動力学法によるアニーリングを行って、最安定構造に近いと推定される構造を得た。得られた最適化構造をもとに、エポキシ樹脂を表面から 3 Å だけ引き剥がした構造も最適化した。表面に吸着した構造と引き剥がされた構造の間の最小エネルギー経路を Nudged Elastic Band 法(NEB 法)によって計算した。得られたエネルギー曲線をモースポテンシャルによって近似し、それを引き剥がし距離で微分することで接着力を算出した。また、同様の計算をグラファイトについても行った。

【結果・考察】

Fig.2 に h-BN 表面とグラファイト表面での接着力のグラフを示す。これらの計算結果はエポキシ樹脂のフラグメント構造の種類にほとんどよらないことが分かった。また、接着力は表面の種類によらないことが分かった。

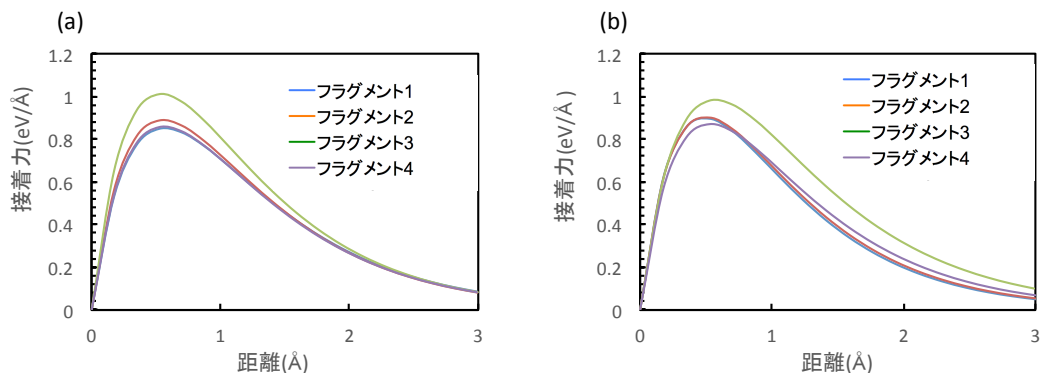


Figure 2. (a) Adhesion force for detaching epoxy resin from the h-BN surface. (b) Adhesion force for detaching epoxy resin from the graphite surface.

界面の相互作用を詳細に解析した結果、h-BN 表面及びグラファイト表面とエポキシ樹脂の間に水素結合などの相互作用は見られず、電荷の移動も見られなかった。また、Fig.3 に示すように全エネルギーは DFT 計算によるものと分散力の補正によって得られたものに分割することができるため、分散力の補正を加えず計算して得られた接着力と補正を加えて計算した接着力を比較することで、エポキシ樹脂と h-BN 表面及びグラファイト表面の間に働く接着力は、主に分散力によるものであることが分かった。

【参考文献】

- [1] Riedel, Ralf, and I-Wei Chen, eds. *Ceramics Science and Technology, Materials and Properties*. Vol. 2. John Wiley & Sons, 2011.
- [2] Wang, Z. et al. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **2011**, *18*, 1963
- [3] Lee, D. et al. *small* **2013**, *9*, 2602.

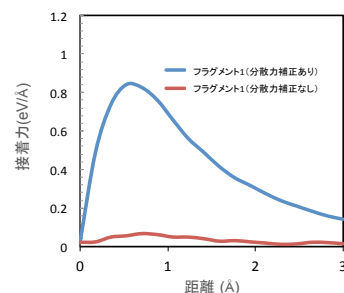


Figure 3. Adhesion force between epoxy resin (fragment 1) and h-BN calculated with a dispersion correction and without it.