

量子化学計算によるエポキシ樹脂の引張・せん断・はく離接着力の総合解析と分子論的理解

Comprehensive Analysis and Molecular Understanding of Tensile, Shear, and Peel Adhesive Force of Epoxy Resin Based on Quantum Chemical Calculations

住谷 陽輔*、辻 雄太*¹、上部 岳洋*、吉澤 一成*

Abstract

Material joining using adhesives is a fundamental technology that can replace mechanical joining and is applied in many advanced industries. Adhesion is an attractive phenomenon that occurs at interfaces, and numerous fundamental studies have been conducted to elucidate the theoretical background. It is also widely known that adhesive strength varies greatly depending on the direction, and various adhesion tests, such as tensile, shear, and peel, have been proposed. In this study, we developed a simple method to estimate these adhesive strengths based on quantum chemical calculations. First principles calculations based on quantum chemistry allow for accurate analysis of molecular interactions at the interface, and can provide a molecular understanding for adhesion. In this paper, we introduce our recent studies of adhesion based on quantum chemical calculations.

キーワード：量子化学計算、エポキシ樹脂、引張・せん断・はく離接着力

Keywords : quantum chemical calculation, epoxy resin, tensile/shear/peel adhesive force

1. 緒言

接着剤はエレクトロニクス・モビリティ・住宅・土木などあらゆる産業で使用されている。接着剤を用いた接合技術は、軽量かつ高強度の接合が得られる利点がある。さらに、接着剤は

被着材表面に均一に塗布でき、接着界面にかかる力を分散させ、高耐久性をもつ接合が可能である。また、接着剤に利用される高分子は塗料としても利用され、その応用は幅広い。

接着・塗装剤は、被着体表面に対して十分に高い接着強度を実現することが求められる。長

2022年12月28日受付

*SUMIYA Yosuke, UWABE Takahiro, YOSHIZAWA Kazunari
九州大学 先端物質化学研究所

*¹TSUJI Yuta
九州大学 総合理工学研究院