

## 酸化物材料の接着特性：密度汎関数理論研究

(九大先導研) ○住谷 陽輔, 上部 岳洋, 許斐 明日香, 吉澤 一成

**【背景】** 接着剤を用いた材料の接着技術は紀元前から存在したと言われており<sup>[1]</sup>、人類の文明の発展に大きく貢献してきた。現代ではエレクトロニクス・モビリティ・建築・土木といったあらゆる産業に接着技術が応用され、医療分野でも歯や体組織の接着に利用される。

一般に、多くの金属・セラミックス材料は空気中で酸化され、表層部には酸化物層が形成されている。この酸化物層が接着性に大きな影響を及ぼしている。そこで本研究では、様々な酸化物材料と接着剤との界面に対し密度汎関数理論(DFT)計算を行い、接着機構とその特性を考察した。具体的には、広く産業利用されているシリカガラス<sup>[2]</sup>・アルミナ<sup>[3]</sup>・酸化銅<sup>[4]</sup>と、優れた歯科材料として注目されているジルコニア<sup>[5]</sup>の合計4種類を扱った。

**【手法】** DFT 計算では、被着材表面は周期的スラブモデル、接着性高分子は部分構造を切り出した断片モデルとして扱った。電子状態計算には VASP プログラムを用い、汎関数は PBE、カットオフエネルギーは 500 eV とし、分散力補正を加えた。接着力は、接着剤分子を表面から垂直方向に変位させたエネルギー曲線を微分し、その最大値から見積もった。

**【結果・考察】** 各被着材の安定表面は図 1 に示される。シリカおよびアルミナ表面は親水的であり、空気中の水分子が化学吸着している。これによって生じた表面ヒドロキシ基は、接着剤分子のヒドロキシ基やフェニル基と強く相互作用した。表面ヒドロキシ基がない酸化銅表面の場合は、接着剤分子が配位不飽和な表面銅原子と配位結合によって強く接着した。ジルコニア表面に対しては、結晶多形・表面ヒドロキシ基の有無を考慮した解析を行い、それらの影響を明らかにした。結果の詳細は当日報告する。

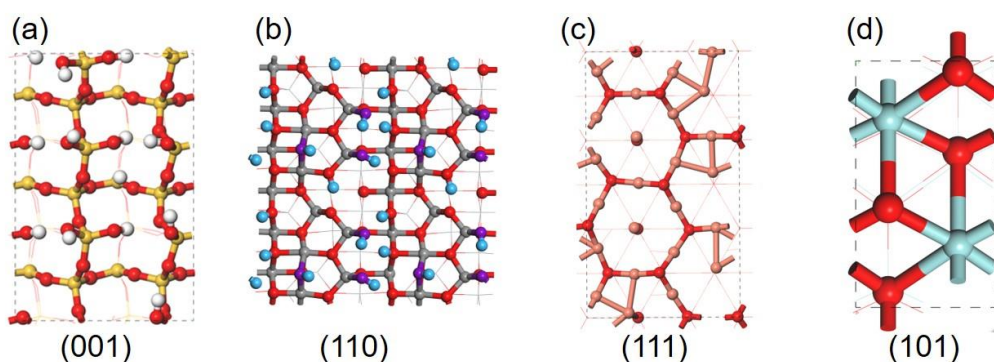


図 1 酸化物材料の安定表面。(a) シリカ (b) アルミナ (c) 酸化銅 (d) ジルコニア。

### 【参考文献】

- [1] 旧約聖書, 創世記 6 章 14 節.
- [2] Y. Sumiya, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, *ACS Omega* 2022, 7, 17393.
- [3] Y. Sumiya, T. Uwabe, Y. Tsuji, S. Nakamura, K. Yoshizawa, to be submitted.
- [4] Y. Sumiya, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, submitted.
- [5] T. Uwabe, Y. Sumiya, K. Yoshizawa, in preparation.