

## マレイン酸とアルミニウム表面の接着に関する、 IRおよび熱力学的研究

ドイツのBremenのFraunhofer Institute of Applied Materials Researchと、同じくSaarbrueckenのSaarland Universityの研究者たちは、マレイン酸とアルミニウム表面の接着に関する熱力学について、BIOVIA株式会社のDMol<sup>3</sup>を用いて、量子力学モデリングとIR分光法を組み合わせる研究を行いました。

本研究は、The Adhesion Societyより、Adhesion Society 2002: Distinguished Paper Awardを受賞しました。

接着科学の本質的な目的として、次のような2つのことが挙げられます。1つは、形成される接合部の機械的物性を理解しなければならないこと、もう1つは、長期間の耐久性を、ある程度正確に予測しなければならないことです。これらの2つの目的を達成するためには、接合部の接触面と表層部（接触面に近い領域で、バルク相の物性をもたない）に焦点を合わせて研究を行う必要があります。

一般的に利用されている古典的モデルには、接合部の物性を正確に予測できない場合が多いという事実による限界があります。しかし分子モデリング、この場合は量子力学モデリングでは、界面はもちろん界面層についても挙動を理解するのに重要な、界面熱力学の特性を予測できることがあります。

量子力学モデリングとIR分光法を組み合わせる研究の中で、Fraunhofer Institute of Applied Materials ResearchのBernhard SchneiderとSaarland UniversityのWulff Possartは、BIOVIA株式会社の密度汎関数理論（DFT）プログラムであるDMol<sup>3</sup>を用いて、無水マレイン酸の薄膜と自然に酸化されたアルミニウムとの接着について研究しました。

DMol<sup>3</sup>の活用により、計算データからは、無水マレイン酸がマレイン酸に加水分解されること、またジカルボン酸のマレイン酸が、酸化表面で1つの酸性基と2つのアルミニウム原子の間で架橋したキレート結合を形成し易いことが明らかになりました。さらにいくつかの検討により、大気中の湿気によって、このキレートがカルボニル酸素と表面のアルミニウム原子の間の単座配位結合に変わることもわかりました。

Dr Bernhard Schneiderは、本研究に用いられた計算化学技術の意義について次のようにコメントしています。「わたしたちは最初、接触面上の有機物の薄膜と基質表面の間で、どの様なタイプの結合が生じるかを解明しようとしていました。コンピュータを用いることにより、かなり詳細にIRスペクトルやXPSスペクトルを説明することができるとともに、さらに付着メカニズムだけでなく関連する熱力学についても理解できるという利点が得られることです。」

「わたしたちは将来、コンピュータ技術の利用を増やして、実験的手法では得られない接触面や接触相の機械的物性を予測するようになりたいと考えています。」

## 参考文献

1. Thermodynamic Data of Adhesion Phenomena Calculated with Molecular Modeling Methods, Schneider, B.; Possart, W.; Proceedings of the 25th Annual Meeting of the Adhesion Society; 2nd World Congress on Adhesion and Related Phenomena (WCARP-II); February 11-14, Orlando, FL, (2002), 216.

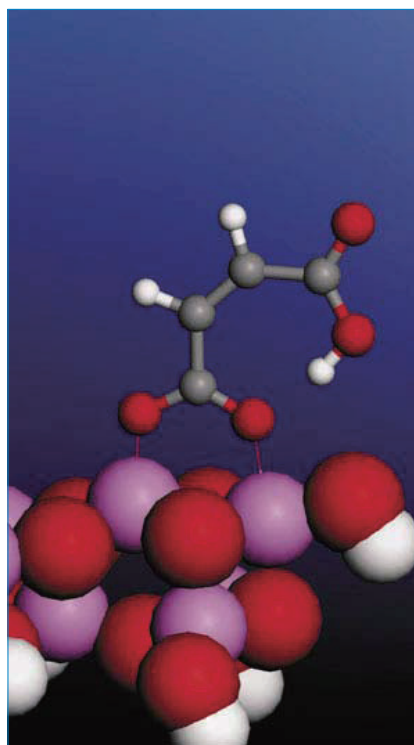
## Organization

Fraunhofer Institute of Applied Materials Research, Bremen, Germany.

Saarland University, Saarbruecken, Germany

## Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>



結合の2種類のタイプ: 二座配位子(上), 単座配位子(下)

