

反応経路自動探索法を使った複合材料形成過程研究の試み

(東北大院理) ○岸本 直樹、(東北大院工) 李 晶・大矢 豊大・岡部 朋永

kishimoto@m.tohoku.ac.jp

【序】近年、炭素繊維強化プラスチック CFRP など軽量で強度に優れた複合材料が航空機や自動車などに用いられて注目されている。我々は、複合材料の母材となる熱硬化性樹脂の反応過程を、量子化学計算法と分子シミュレーション法を組み合わせることで計算し、樹脂材料の設計に有力な計算手法 (GRRM/MC/MD 法) を確立することを目指している。

【方法】フェノール樹脂はフェノールとホルムアルデヒドの付加反応と脱水縮合反応を繰り返して生成する。まず、フェノールのオルト位とパラ位へのホルムアルデヒドの付加反応経路を GRRM プログラム[1]を用いて量子化学計算法で決定した。付加反応の GRRM 計算で得られた活性化エネルギーと反応熱の値を、架橋構造の形成過程を計算する MC/MD 法[2,3]に組み合わせることでレゾール樹脂を生成し硬化させた。

【結果と考察】連続溶媒和モデルを用いた溶液中のフェノールとホルムアルデヒドの付加反応を HF/3-21G 法で計算したところ、オルト位もパラ位も約 50 kcal/mol の活性化エネルギーを必要とした。また、反応熱はどちらも約 10 kcal/mol であった。下図に、ホルムアルデヒド:フェノール=2:1 の条件で硬化反応が進行する様子を示した。また、分子数の比を変えて得られた物性値の変化についても検討した[4]。

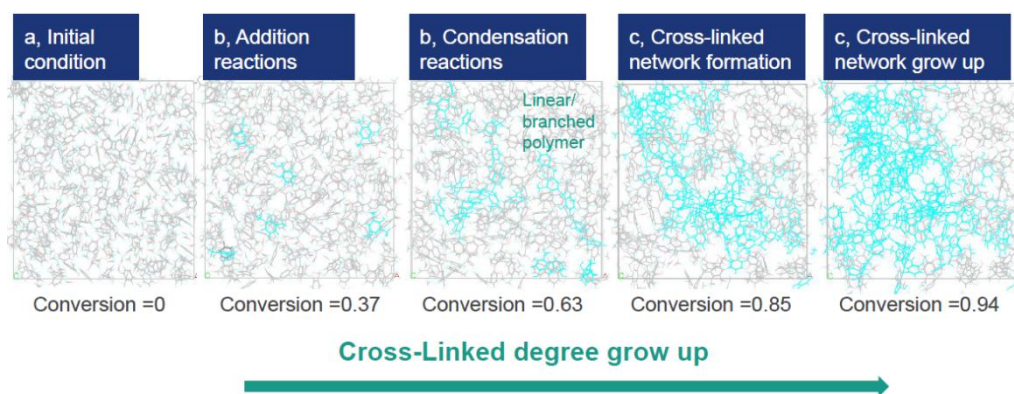


図 1. ホルムアルデヒドとフェノールの架橋構造が生成する過程. Conversion は反応したフェノール分子と全フェノール分子の比を示している[4].

【参考文献】

- [1] S. Maeda, Y. Osada, K. Morokuma, and K. Ohno, GRRM11, 2011.
- [2] T. Okabe, T. Takehara, K. Inose, N. Hirano, M. Nishikawa, T. Uehara, *Polymer* 54 (2013) 4660–4668.
- [3] T. Okabe, Y. Oya, K. Tanabe, G. Kikugawa, K. Yoshioka, *Eur. Polym. J.* 80 (2016) 78–88.
- [4] J. Li, J. Sakamoto, H. Waizumi, Y. Oya, Y. Huang, N. Kishimoto and T. Okabe, submitted for publication.