

分子触媒効果を用いた Cat-GRRM/MC/MD 計算法による架橋ネットワーク

ワーク高分子の生成プロセス解析と力学特性評価

(東北大院理) Yingxiao XI

xi.yingxiao.r3@dc.tohoku.ac.jp

我々は最近、エポキシ分子の熱硬化反応に於いて分子触媒の効果を入れた量子化学計算と古典分子動力学法を組み合わせたハイブリッド反応シミュレーション法 (cat-GRRM/MC/MD) を開発し、架橋ネットワーク構造を生成して樹脂の力学的特性の検討を行っている[1,2]。この方法により、エポキシ樹脂の生成プロセスと力学特性を詳細に解析している。本研究の目的は、エポキシ樹脂の硬化反応において、分子触媒がどのように作用し、最終的な物性にどのような影響を与えるかを明らかにすることである。

具体的には、アルコールやアミンおよび水分子 (R-OH、R-NH₂、R-NH、H₂O) がプロトン供与体として分子触媒となる反応経路を計算し、得られたエネルギー値と反応確率を分子動力学シミュレーションに適用することで、エポキシ樹脂の架橋反応過程とその力学特性を評価した。このアプローチにより、実験データに基づいたリアルなシミュレーションを実現し、架橋ネットワーク高分子の生成プロセスとその力学特性に関する新たな知見が得られた。エポキシ樹脂の硬化過程における分子触媒の効果を詳しく調べるため、自己触媒反応 (R-OH、R-NH₂、R-NH)、直接反応、および水触媒反応の3つの異なる反応経路を比較した。量子化学計算により得られた活性化エネルギーと生成熱のデータを用い、各反応経路の詳細な解析を行った。

また、本研究では、シミュレーション結果と実験データを比較するために、異なる条件下での架橋エポキシ樹脂の物理特性と力学特性を評価した。硬化剤とエポキシのみを含むモデル (システム1は直接反応、システム2は自己触媒反応) と、水分子を0.2% (システム3) および2% (システム4) の濃度で含むモデルを構築し、各条件下での密度、体積収縮、ヤング率、およびガラス転移温度の値を測定した。システム4の各値が実験測定値と概ね一致し、自己触媒および水触媒経路を含むことが、現実の反応シナリオに近いことが示唆された。本研究は、エポキシ樹脂の生成プロセスと力学特性評価における新しいアプローチを提供し、分子触媒効果の理解を深めるとともに、高性能材料の開発に貢献するものである。これにより、分子触媒を用いた新しい材料設計の方向性が示され、実験データに基づいたリアルなシミュレーションの実現が可能となった。

【参考文献】

- [1] Y. Xi, H. Fukuzawa, S. Fukunaga, G. Kikugawa, Y. Zhao, Y. Kawagoe, T. Okabe, N. Kishimoto, *Mol. Catal.*, 552, 113680(2024).
- [2] Y. Xi, H. Fukuzawa, G. Kikugawa, Y. Zhao, Y. Kawagoe, T. Okabe, H. Kishi, N. Kishimoto, *submitted*.