

分子シミュレーションによるビトリマー樹脂の自己修復機構の探索

と機械特性の評価

(東京理科大学先進工学部) 大矢豊大

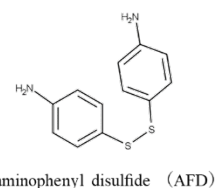
oya@rs.tus.ac.jp

近年、従来型熱硬化性樹脂に自己修復機能を付与した新規高分子材料「ビトリマー」が盛んに研究されている。ビトリマーは、外部応力により破壊された架橋構造が熱などの外部刺激によって再構築され、マクロスケールでも材料特性が回復する特徴を有する。この特性を制御することで、熱硬化性樹脂に由来する高強度・高剛性に加え、耐久性の向上や環境負荷低減が可能と期待されている。しかし現状のビトリマーは力学特性が十分ではなく、構造材料としての利用は限定的である[1]。そのため、自己修復性と力学特性発現のメカニズムを数値計算により解明することが重要である。

本研究では、量子化学計算 (QM) と分子動力学計算 (MD) を組み合わせ、ビトリマーの分子スケールにおける自己修復機構を調査した。ビトリマーは共有結合の組み換えといった量子化学的現象がマクロな熱機械特性に直結する高いマルチスケール性を有するため、QM あるいは MD 単独のアプローチでは現象の本質的理解は困難である。そこで、QM で得られた反応経路情報を MD に反映させることで、凝縮系における架橋構造の自己修復をより現実的に再現することを目指した。

対象としたのは、構造材料としての応用が期待される「ジスルフィド結合を有するエポキシビトリマー」である。本材料は、ジスルフィド結合を含むアミン硬化剤 (AFD, Fig1. (a)) とエポキシ主剤 (DGEBA, Fig1 (b)) の反応により得られる架橋構造であり、ジスルフィド結合の切断と再結合によって熱機械特性の回復が生じると考えられている。しかし、その具体的な反応経路を導出した例はこれまで報告されていない。そこで本研究では、量子化学計算による反応経路自動探索プログラム GRRM (Global Reaction Route Mapping) [2]を用いて、切断後のエポキシ硬化剤が再びジスルフィド結合を形成する経路を調査し、その結果を MD 計算に組み込むことで応力回復機構を再現した。

(a) アミン硬化剤



(b) エポキシ主剤

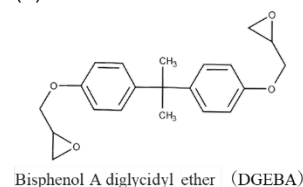


Fig1. curing agent and base resin.

Reference

- [1] H. Sharma, S. Rana, RSC. Adv., 12, 32569 (2022).
- [2] S. Maeda, K. Ohno and K. Morokuma, Phys. Chem. Chem. Phys., 15, 3683 (2013).