

樹脂の吸水能に対する添加剤効果の自由エネルギー解析

○向井西夜¹ 伊藤知樹¹ 森穂高¹ 泉龍介¹ 今井博和¹ 松林伸幸²株式会社デンソー¹ 阪大基礎工²SAYA_MUKAI@denso.co.jp

[研究背景・目的]

現在自動車における電子制御部品分野では、燃費向上・排出規制に伴い車載用の半導体を保護する樹脂材料には従来以上の熱的・化学的環境への耐久性が求められている。そのような環境では様々な特性を確保するために添加剤を混合するが、添加剤を混合することでどの程度薬品の吸収性が変化するのかを評価する手法の確立が必要であった。特に薬品種の中では加水分解等を引き起こす水の影響が重要だと考えられており、吸水のしにくさを評価することが必要である。吸水性を評価するには材料の化学的個性(メチル基・ヒドロキシ基など)と水分子との原子レベル相互作用を考慮するため全原子分子動力学(MD)計算が必要だが、時間的にも経済的にもコストと見合う計算は難しいとされていた。そこで本研究では中間状態の計算を必要としないエネルギー表示法を用いた自由エネルギー計算¹⁻²⁾を、添加剤が混合されたポリマー系に初めて応用し、材料の化学的個性と水分子との相互作用を反映させたポリマーコンパウンドの耐薬品性(自由エネルギー変化)を調べることを目的として実施した。

[計算内容]

MD 計算は 6800 原子、力場は AMBER 系の TEAM_LS、PPS に対して添加剤の混合比を 0, 1, 3, 5, 10, 50, 100% と変化させた。ここで 100% とは全ての材料が添加剤に置き換わっている系である。極性基を含む添加剤および樹脂との水分子の相互作用を調べるため自由エネルギー変化を計算した。MD 計算は GROAMCS、自由エネルギー計算はエネルギー表示法を適用した。吸水の自由エネルギーは $\Delta\Delta\mu = \Delta\mu_{\text{poly}} - \Delta\mu_{\text{wat}}$ で計算する。ここで $\Delta\mu_{\text{poly}}$ は樹脂中の水分子、 $\Delta\mu_{\text{wat}}$ は水中の水分子の溶媒和自由エネルギーである。

[結果]

図 1(a)は $\Delta\Delta\mu$ の添加剤混合比依存性を、図 1(b)は $\Delta\mu_{\text{poly}}$ 中の PPS 寄与分($\Delta\mu_{\text{PPS}}$)と添加剤寄与分($\Delta\mu_{\text{add}}$)の混合比依存性である。図より $\Delta\Delta\mu$ は混合比の増加に伴い減少しており、 $\Delta\mu_{\text{add}}$ も $\Delta\Delta\mu$ と同じ傾向で減少していることが分かる。これより $\Delta\Delta\mu$ の変化は添加剤増加によってもたらされていることが分かり、樹脂の吸水能に対する添加剤の影響が計算されていることを示している。自由エネルギーの減少は添加剤が混合されることで系内の極性基が増加し、水が極性基と相互作用し、系がより安定化したためであると考えられる。

[参照論文]

- 1) T. Kawakami, I. Shigemoto and N. Matubayasi, J. Chem. Phys. 2012,137 234903
- 2) T. Kawakami, I. Shigemoto and N. Matubayasi, J. Chem. Phys. 2014,140 169903

本研究は「京」以外の HPCI 共用計算資源の産業利用課題(トライアルユース)の利用研究課題を遂行して得られた(課題番号:hp160019)

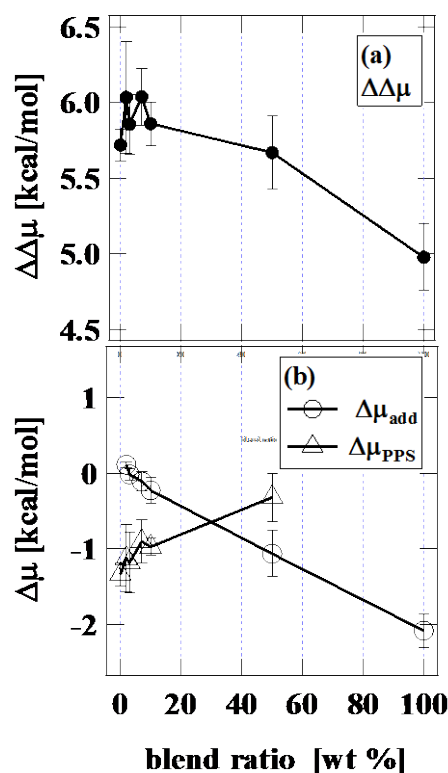


図 1 (a) $\Delta\Delta\mu$ の添加剤混合比依存性 (b) 自由エネルギーの PPS 寄与分 ($\Delta\mu_{\text{PPS}}$) と添加剤寄与分 ($\Delta\mu_{\text{add}}$) の添加剤混合比依存性