

## 熱硬化性樹脂に関する計算/計測融合研究

東北大学大学院工学研究科/グリーンクロステック研究センター

岡部朋永

計測・計算融合とは、実験計測と数値シミュレーションを相補的に用いることで、材料の構造や特性を多角的に解明する手法である。例えば、分子動力学 (MD) により構築した熱硬化樹脂モデルから熱機械特性を予測し、放射光施設 NanoTerasu による広角 X 線散乱 (WAXS) や陽電子寿命測定と突き合わせることで、モデルの妥当性を検証することが可能となる。この循環的な検証により、分子スケールでの架橋構造や自由体積、力学応答の計算結果を実験で裏付けつつ精緻化することができる。単独の実験や計算では得られない因果関係を明確にし、材料開発の効率性と信頼性を高める点に最大の意義がある。

エポキシ樹脂は高剛性・高耐熱性の特性から複合材料や電子部品封止材として広く利用されてきたが、従来の芳香族系は紫外光による黄変が課題であった。これに対し非芳香族エポキシ樹脂 (TEPIC 系) は高透明性と耐光性に優れ、高輝度 LED など次世代用途への適用が期待されている。本研究は分子シミュレーションと放射光・中性子実験を組み合わせることで、分子構造からマクロ特性までを一貫的に理解し、新規材料設計の指針を与えることを目的としている<sup>1)</sup>。

研究では、量子化学計算と分子動力学 (MD) を組み合わせた反応硬化シミュレーションが活用され、硬化反応過程を再現しつつヤング率、ポアソン比、ガラス転移点、熱伝導率などの物性を導出した<sup>2)</sup>。さらに NanoTerasu の放射光を用いた広角 X 線散乱 (WAXS) や陽電子寿命測定と比較することで、シミュレーションの妥当性を検証している。結果として、TEPIC 系樹脂モデルは実験と良好に一致し、側鎖長の違いによる自由体積や構造の緻密性の差が延性や剛性の違いを生むことが明らかになった。また応力一ひずみ特性も実験と整合し、鎖長が長いほど剛性は低下するが延性に優れることが示された。光学特性においても、従来の芳香族エポキシが紫外光を強く吸収し黄変を起こしやすいのに対し、TEPIC は紫外吸収が小さく耐光性に優れることが計算により裏付けられた。

これらの成果は、計算科学と実験計測の融合によって分子レベルからマクロ特性までを連続的に捉えるアプローチの有効性を示すものであり、非芳香族エポキシ樹脂が次世代材料として高いポテンシャルを持つことを明確にした。同時に、産学共創を基盤とするグリーンクロステック研究センターおよび数値シミュレーションプラットフォーム CoSMIC の役割も大きく、放射光施設 NanoTerasu やスーパーコンピュータ AOBA と結びつけることで、データ駆動型材料開発が加速している。こうした取り組みは、電子部品や複合材料の分野における持続可能な技術革新に資するだけでなく、社会課題解決型の研究の新しいモデルケースとなり得るものである。

### 参考文献

- 1) Tomonaga Okabe, Tomohiro Takehara, Keisuke Inose, Noriyuki Hirano, Masaaki Nishikawa, Takuya Uehara, "Curing reaction of epoxy resin composed of mixed base resin and curing agent: Experiments and molecular simulation", Polymer 54 (2013) 4660-4668.
- 2) Yoshiaki Kawagoe, Yuuki Kinugawa, Keigo Matsumoto, Naoki Kishimoto, Takahiko Kawai and Tomonaga Okabe, "Effects of chain length of nonaromatic epoxy resins on thermomechanical and optical properties: Experiment, ab initio, and molecular dynamics simulations", Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26, 24250-24260.