

# 利用事例紹介 18

## エポキシ樹脂/フェノール系硬化剤の比誘電率の計算

分子動力学法を用いて材料の電気的特性の一つである比誘電率が求められます。本事例では、エポキシ樹脂の硬化剤の違いによる比誘電率の計算結果を紹介いたします。また、本事例は新規化合物の開発や樹脂配合の際の指標に利用することができます。

### 計算フローチャート

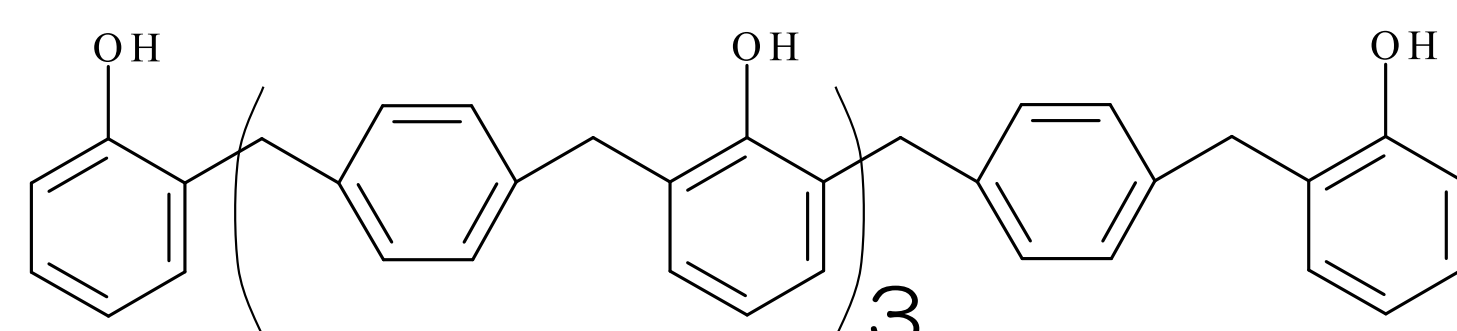
モデルの主な設定項目

モデル作成 モノマーモデル、ポリマーモデル、反応モデル（今回使用）

全原子モデル、力場：GAFF

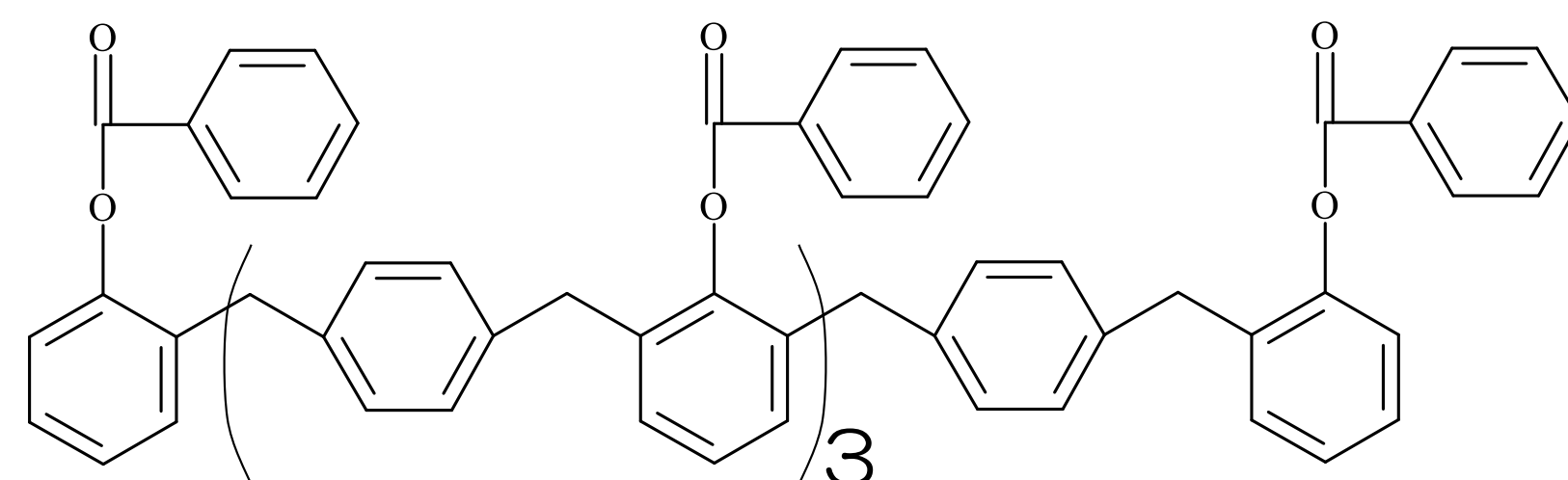
ビスフェノールA型エポキシ樹脂50分子、硬化剤20分子

初期配置作製 → 緩和後、圧縮（温度：473K）



架橋構造作製（温度：473K）

冷却過程（温度：473K～273K，20K毎）



双極子モーメントの計算

$$\epsilon - 1 = \frac{\langle M^2 \rangle}{3kTV\epsilon_0}$$

$\epsilon$ : 比誘電率  $\langle M^2 \rangle$ : 双極子モーメントの二乗の時間平均

$k$ : ボルツマン定数  $T$ : 温度  $V$ : 体積  $\epsilon_0$ : 真空の誘電率

### 計算結果

	ビスフェノールA型エポキシ樹脂 /フェノール系硬化剤	ビスフェノールA型エポキシ樹脂 /フェノール系硬化剤の活性エステル
反応度	88%	82%
双極子モーメント	38.3D	34.1D
密度	1.14g/cm <sup>3</sup>	1.14g/cm <sup>3</sup>
ガラス転移温度	423K 422K(参考文献値※)	406K 409K(参考文献値※)
比誘電率	4.03 4.1(参考文献値※, 296K)	2.84 2.9(参考文献値※, 296K)

参考文献値以外は293Kの値

※公開特許公報 特開2010-77343

本計算条件により、文献値に近い計算結果が得られました。