

# 利用事例紹介 20

## エポキシ樹脂/フェノール系硬化剤の誘電正接の計算

分子動力学法を用いて材料の電気的特性の一つである誘電正接を求めることができます。本事例では、計算条件としてフェノール系の硬化剤を2種類設定し、それぞれの誘電正接の計算結果を紹介します。

### 計算フローチャート

モデルの主な設定項目

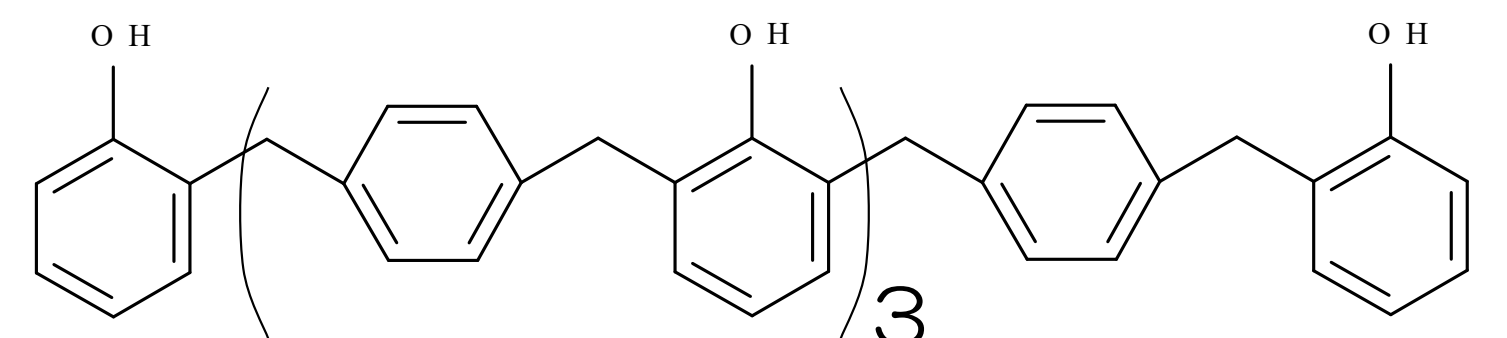
モデル作成 モノマーモデル、ポリマーモデル、反応モデル（今回使用）

全原子モデル、力場：GAFF

ビスフェノールA型エポキシ樹脂25分子、硬化剤10分子

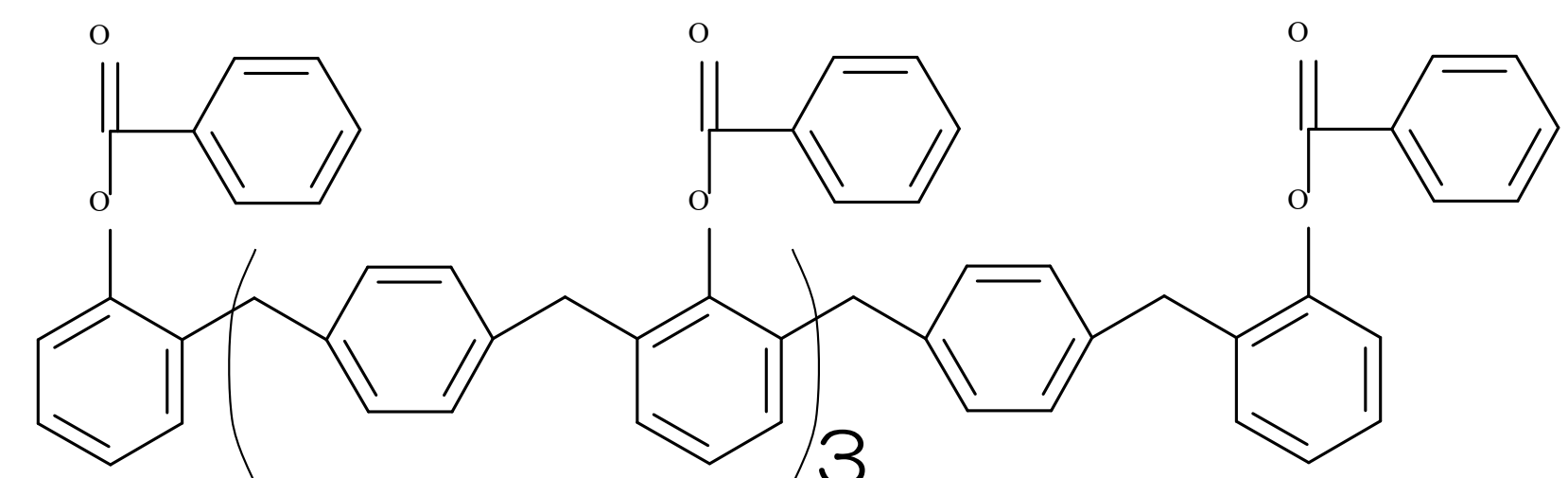
初期配置作製 → 緩和後、圧縮

(初期密度：0.1g/cm<sup>3</sup>、温度：473K)



フェノール系硬化剤

長尺セルの作製(z軸方向にセルを4個並べる)

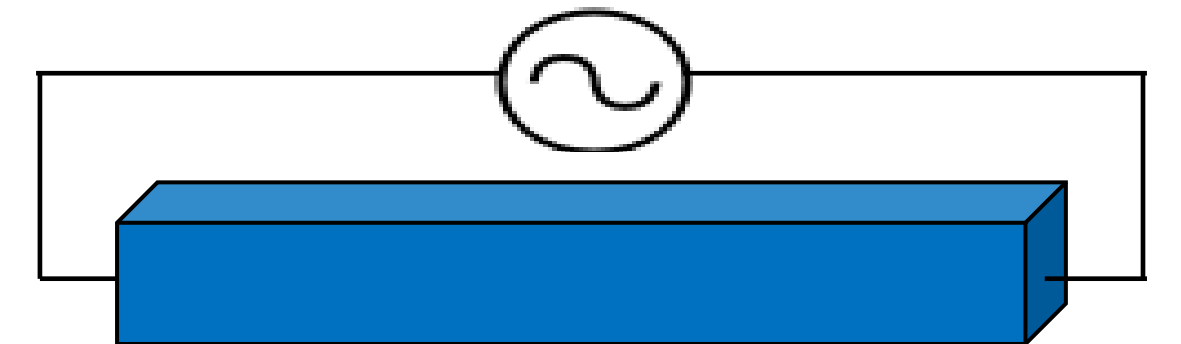


フェノール系硬化剤の活性エステル

架橋構造作製 (温度：900K)

冷却過程 (温度：900K～500K, 100K毎  
→473K～, 10K毎)

振動電場印加 (10GHz)、分極・複素誘電率の算出



$$E(t) = E_0 \cos(\omega t)$$

$$P(t) = P_0 \cos(\omega t + \phi)$$

$$\tan(\phi) = \frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'(\omega) - 1}$$

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \frac{4\pi P_0 \cos(\omega t)}{E_0}$$

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{4\pi P_0 \sin(\omega t)}{E_0}$$

$E(t)$ : 電場  $E_0$ : 定数

$P(t)$ : 分極  $P_0$ : 定数

$\varepsilon'(\omega)$ ,  $\varepsilon''(\omega)$ : 複素誘電率

$\omega$ : 角速度  $\phi$ : 位相差

$\tan(\phi)$ : 誘電正接

### 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 /同活性エステル
反応度	97%	97.5%
複素誘電率(実部)	1.23(C <sup>2</sup> /(Nm <sup>2</sup> ))	1.15(C <sup>2</sup> /(Nm <sup>2</sup> ))
複素誘電率(虚部)	0.0464(C <sup>2</sup> /(Nm <sup>2</sup> ))	0.0193(C <sup>2</sup> /(Nm <sup>2</sup> ))
誘電正接	計算値	0.0378
	参考文献値	0.032 (296K-1GHz) ※
		0.0168
		0.013 (296K-1GHz) ※

※公開特許公報 特開2010-77343

本条件で文献値に近い計算結果が得られました。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。