

利用事例紹介 2

エポキシ樹脂のガラス転移温度計算

分子動力学計算により原子の充填状態を再現することで、材料の密度を計算することができます。その計算結果を元に、ガラス転移温度や熔融温度などの材料の転移温度を予測できます。

これらの予測を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

モノマーモデラ

ユナイテッドアトムモデル、力場：dreiding

ビスフェノールF型エポキシ樹脂モノマー数：50

反応モデラ

初期配置作製

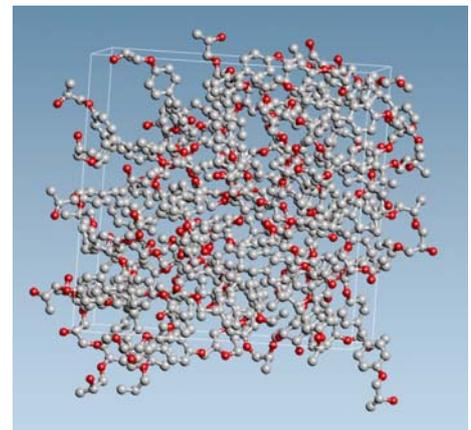
緩和後、圧縮

架橋構造作製

(温度：450K)

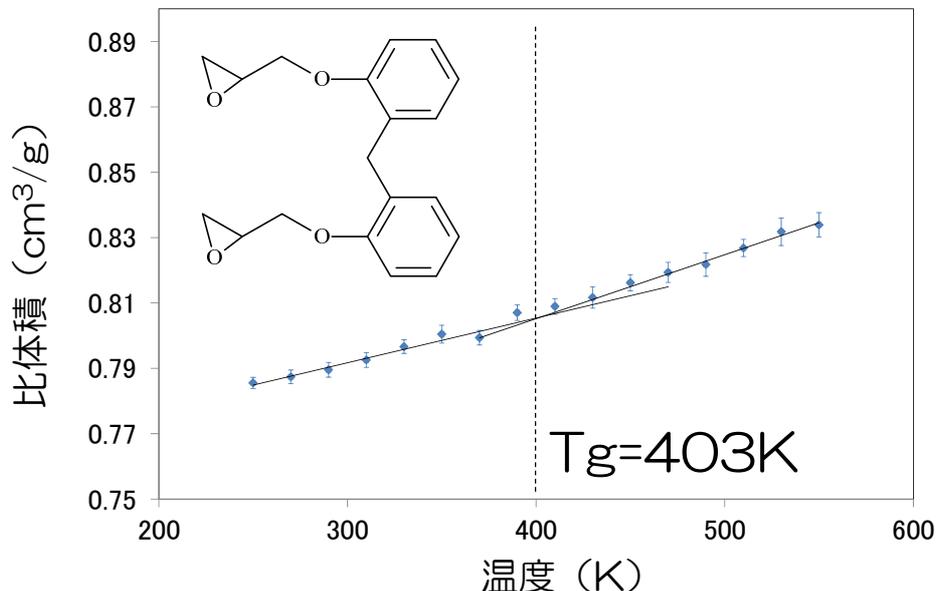
ガラス転移温度計算(密度計算)

(温度範囲：250K~550K)



架橋構造の例

計算結果



実測値(T_g=404K)に近い値が得られました。