

利用事例紹介 4

液晶性エポキシ樹脂の熱伝導率計算

原子を充填したモデルに対して、分子動力学計算によりエネルギーの入れ替えを行い温度勾配を作ることで、熱伝導率を計算することができます。高熱伝導率を有する液晶性エポキシ樹脂については、文献値に相当した高い値を得ることができました。

この手法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

モノマーモデラ 全原子モデル、力場：GAFF



反応モデラ 液晶性エポキシ樹脂(DGETAM):40
硬化剤(DDE):20



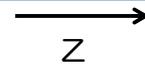
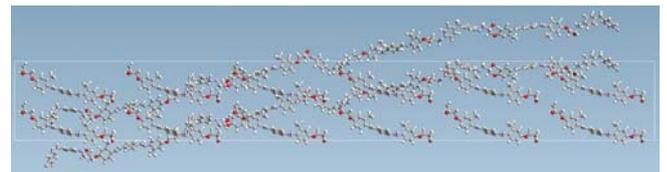
初期配置作製 (緩和後、圧縮)



架橋構造作製 温度：473K



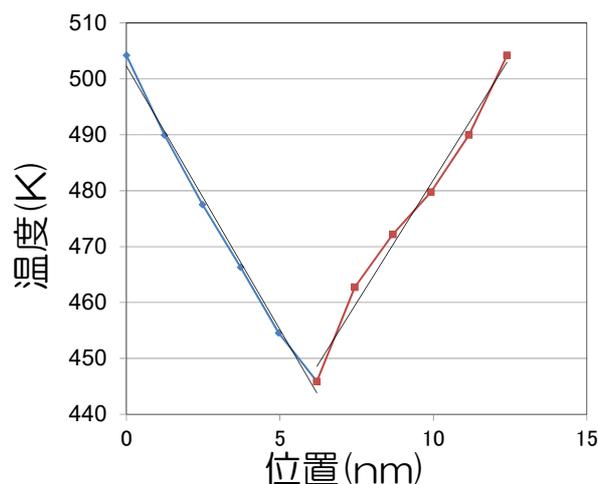
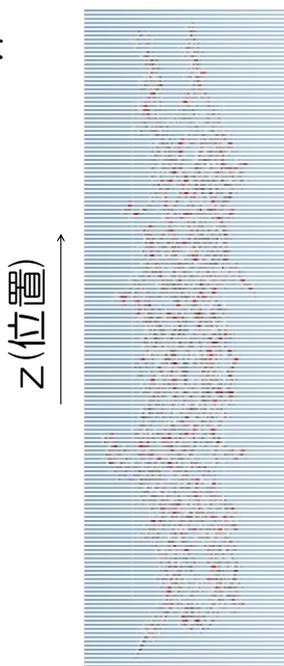
熱伝導率計算 温度：473K



初期配置の状態

Z軸方向に液晶部位が配向するように配置

計算結果



熱流束： $9.67 \times 10^9 \text{ W/m}^2$

温度勾配： $9.48 \times 10^9 \text{ K/m}$

熱伝導率： $1.02 \text{ W/m}\cdot\text{K}$

文献値 ($0.89 \text{ W/m}\cdot\text{K}$) に近い値が得られました。