

平成30年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価

Evaluation of Structure-Property Relationship of Epoxy Resin via Crosslinking Reaction

京都大学 工学研究科 機械理工学専攻 適応材料力学研究室 内藤 悠太

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、エポキシ樹脂の架橋反応における構造変化と物性変化の関係を評価することを目的に、**Material studio** を活用した分子動力学法による架橋反応シミュレーション、および形成した構造に対する粘弾性特性などの力学特性を評価する手法の構築を検討している。

先進材料である炭素繊維強化プラスチックの成形性と力学特性については、炭素繊維だけでなく、マトリクス樹脂の影響を適切に把握することが求められている。一方で、マトリクス樹脂として一般に広く用いられるエポキシ樹脂は、用いられる主剤と硬化剤の種類や配合比、温度・圧力といったプロセス条件などによって、架橋反応やそれに伴う分子構造形成が変化するため、これらが成形中の挙動や最終的に発現する力学特性に影響を及ぼす。このような観点で、分子シミュレーションを利用して、エポキシ樹脂の特性変化を把握することを検討している。

本年度は、エポキシ樹脂の架橋反応シミュレーションの手法の確認と検討のみの実施であり、具体的な成果は現時点で得られていない。次年度以降については、継続して検討を進める予定である。

発表論文 該当なし