

架橋エポキシ樹脂のコンピュータによる研究

BHPスチール研究ラボとロイヤル・メルボルン工科大学の研究者は、エポキシ樹脂の架橋密度と架橋位置のモデリングと予測、ならびにバリア性および接着特性の推定にBIOVIAのAmorphous CellおよびPCFF力場を使っています。

このシミュレーション法は、新しいエポキシ樹脂塗料の研究および設計に非常に価値があり、バリア性と接着性が向上したスチールの下塗り塗料として有益であると分かるはずで

す。新しく、かつ優れた塗装システムの探索には、詳しい知識と、有望な候補の構造／性質に関する理解とが必要で

す。有機塗料1のバルクおよび界面における性質の予測を可能にするコンピュータ利用技術は、実験を補完・精密化し、実験の指針として使用することができ、これによって新しい塗料システムの探索と設計を支援・強化・加速します。

メルボルン（オーストラリア）にあるロイヤル・メルボルン工科大学のIrene Yarovsky氏とポート・ケンブラ（オーストラリア）にあるBHPスチール研究ラボのEvan Enans氏は、学術誌Polymer²に、各種の架橋剤を使用して硬化させた架橋ポリマー網目構造、特に低分子量の水溶性エポキシ樹脂の分子モデルを構築するためのコンピュータ・シミュレーションを用いた方法を報告しています。これらのシステムは、鋼材用の下塗り塗料の有望な候補として現在さらに詳細な研究が進められています。

両研究者は、水を溶媒にしたそれぞれリン酸化エポキシ樹脂と架橋剤とから成る3種類の水性プライマーのモデル系（CYMEL 1158；トリプトキシメチルメラミンおよび／またはCYMEL 1172；テトラメチロール・グリコールウリル）を研究しました。

各樹脂／架橋剤／水系の原子モデル10個を適当な密度と濃度で発生させるためにAmorphous Cellを使用しました。得られた3D周期系は、PCFF力場を使用してNVTアンサンブルで平衡化させました。硬化過程をシミュレーションするため、系を600Kで100psMDシミュレーション加熱し、それから300Kでさらに200psMDシミュレーション平衡化しました。該当する活性部位が相互のカットオフ距離内に入ると脱離反応が起きるスクリプトを開発しました。反応半径は6オングストロームが最適であることがわかりました。反応による副生物はセルから除去しました（CYMEL 1158の場合はブタノール、CYMEL 1172の場合は水）。

このようにして創り出された網目構造のモデルは、収縮、浸透物質の輸送などの性質についてバルクで研究されました。また、界面接着現象を研究するためにこれらのモデルを各種表面に吸着させてみました。

このシミュレーションによって、上記3種類の塗料システムの熱力学的特性と輸送特性を得ることができました。詳細な点で、シミュレーションの結果は実験データと見事に一致することが確認されました。明らかになった点は次のとおりです：

Organization

BHP Steel Research Laboratories, Port Kembla, Australia
RMIT University, Melbourne, Australia

Products

BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell
PCFF (COMPASS is a newer force-field)

- 架橋密度および架橋する未反応部位。性能設計において重要です。
- 硬化収縮。有望な塗料の合成および環境性能に大きく関係します。
- バリア特性－架橋した系における酸および水の移動度－防食の観点から考察することが不可欠です。
- 接着特性。硬化エポキシ系とアルミナ間の界面をモデリングしました。その結果、塗料の設計に重要な特性が明らかになりました。

ポリマーのシミュレーションでは、現実的な架橋系を作り出す能力が長い間望まれてきました。しかし今や、Amorphous CellおよびBIOVIAの力場を使用すればこのような網目構造の開発は可能です。

Irene Yarovsky氏は「一度確立されてからは、このアプローチは候補ポリマーの大きなグループにさらに広範囲に適用されるようになり、BHP社は、これらのポリマーの合成と試験を、シミュレーションによって予測される最良の性能を示すポリマーに的を絞って行なうことができるようになった」と述べています。

参考文献

1. I. Yarovsky, Aust. J. Phys., 407, 50, 1997.
2. I. Yarovsky and E. Evans, Polymer, 963-969, 43, 2002.