

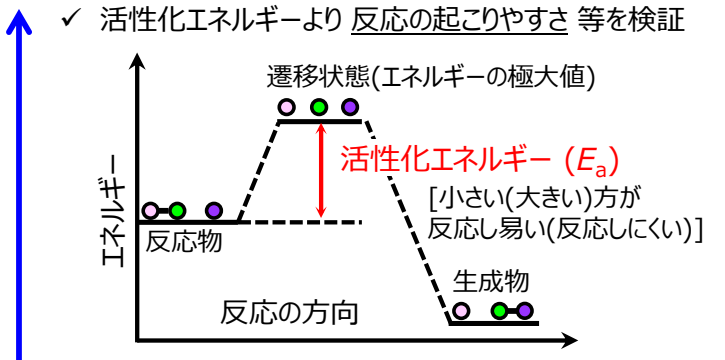
シミュレーションを活用した材料開発の設計指針提案 ～ゴムのオゾン劣化の化学反応解析～

量子化学計算を用いた反応経路探索および電子状態解析により、反応に関わるエネルギーの算出に加えて、反応因子の情報抽出が可能である。解析結果は分子構造の改善指針に繋げる事ができるため、実際の合成前に、効率的に設計指針を獲得することが可能である。

1. 量子化学計算を用いた反応経路探索と電子状態解析による材料開発の設計支援

① 反応経路探索(反応経路のエネルギー変化の検証)

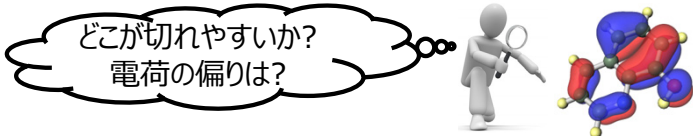
✓ 活性化エネルギーより 反応の起こりやすさ 等を検証



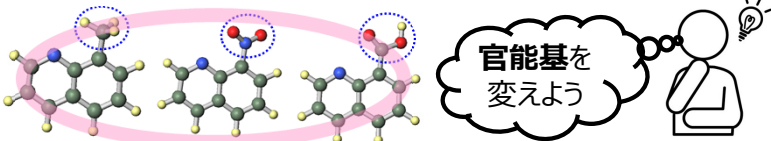
新規モデルでの検証

② 電子状態解析

✓ 分子軌道分布や結合次数の解析より、反応因子を特定



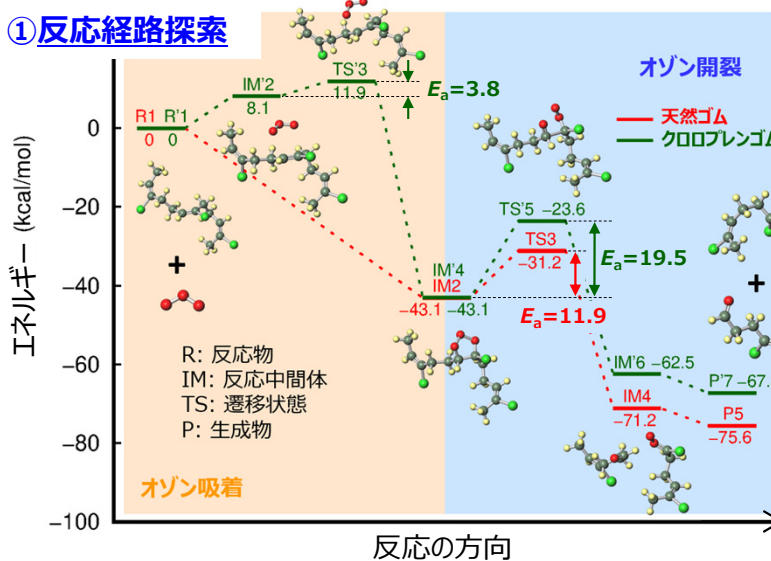
③ 反応性を改善する新規モデルの考案・検証



反応経路探索の豊富な経験と量子化学の高度な専門知識が必要!!

2. ゴムのオゾン劣化の反応経路探索と電子状態解析、新規耐オゾン性ゴムの理論設計

① 反応経路探索



天然ゴム
輪ゴム等に用いられる一般的なゴム



クロロプレンゴム
コンベアベルト等に用いられる耐オゾン性ゴム



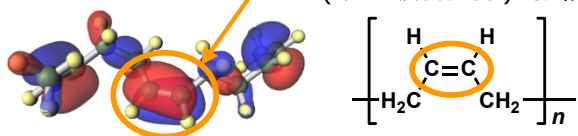
各反応の活性化エネルギー E_a (kcal/mol)

	天然ゴム	クロロプレンゴム
オゾン吸着	-	3.8
オゾン開裂	11.9	19.5

⇒ オゾン吸着、オゾン開裂ともにクロロプレンゴムの方が起こりにくい
⇒ 現実の耐オゾン性を再現

② 電子状態解析

C=C(オゾン吸着サイト)に振幅有

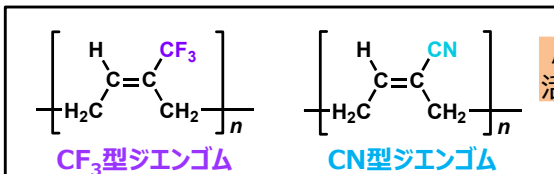


電子求引性の強い官能基をC=Cに付加し、HOMOを非局在化させる事で、オゾンとの反応性を低下出来ると予想

⇒ 耐オゾン性ゴムの設計指針を獲得

③ 新規モデルの考案・検証

電子求引性の強い CF_3 基、CN基を導入



反応経路探索による 活性化エネルギー算出

各反応の活性化エネルギー E_a (kcal/mol)

	CF_3 型ジエンゴム	CN型ジエンゴム
オゾン吸着	3.5	4.1
オゾン開裂	20.8	13.5

CF_3 型、CN型ともに、天然ゴムよりもオゾンと反応しにくい
⇒ 新規耐オゾン性ゴムの理論的に設計

本シミュレーション技術により、分子構造の改善指針をご提案できます。これにより、合成前の材料スクリーニング等が可能となり、効率的な材料開発を支援します。