

モデルベース研究による高分子材料特性解析

¹横浜市大・生命ナノ, ²広大院工

○石元孝佳¹, 大下浄治², 塚田学², 甲斐裕之²

Model-Based Research Toward Innovative Material Design: Prediction of Molecular Weight of Polymers

○Tatayoshi Ishimoto¹, Joji Ohshita², Satoru Tsukada², Hiroyuki Kai²

¹ Graduate School of Nanobioscience, Yokohama-City University, Japan

² Graduate School of Engineering, Hiroshima University, Japan

【Abstract】 Toward the design and manipulation of innovative materials, we proposed a new concept as the “model-based research (MBR)”. In the MBR, measurable physical and chemical properties are mathematically modelled by the explanatory parameters obtained by the computer simulation from atomistic point of view. To demonstrate the availability of MBR, we modelled the molecular weight with respect to the H₂O/silane molar ratio of the series of polysilsesquioxanes as an example. The calculated values of geometries, electronic structures, reactivity, and dynamics for bis(triethoxysilyl)methane, ethane, ethylene, and acetylene (BTES–M, –E1, –E2, and –E3) were used as the explanatory parameters. The equation $y = ax^n$ could reproduce the behavior of molecular weight for BTES series. Detailed understanding and discussion was theoretically possible based on the mathematical model of molecular weight because different explanatory parameters were contributed to the each a and n in the equation. We predicted the molecular weight of C₃H₆ and C₆H₄ as a spacer based on the obtained mathematical model. Experimental validation for these polymers clearly showed the possibility of qualitative categorization. Our proposed concept, MBR, is available and powerful tool to analyze the material science toward innovative material design.

【序】 省エネルギー社会の実現や大幅な CO₂ 放出量削減のためには、革新材料の創出を実現することが不可欠であるが、例えば熱マネジメント材料で重要な耐熱性と熱伝導率といった背反する両者の特性を同時に向上させることはもはや勘と経験に頼った従来型の材料開発では限界がある。近年、信頼性の高い開発を効率よく進めるための手段としてモデルベース開発(MBD: model-based development)が浸透しつつある。産業の基盤である材料に対する要求が高度化、多様化する中で、この MB D の概念を材料開発に適用することが出来れば、迅速かつ高効率に既存材料の機能を大幅に上回る革新的な材料設計が実現する。我々は、材料の機能・性質といった本質的・基礎的理解を徹底的に推進するための材料モデルベース研究(材料 MBR: model-based research)という新たな材料開発アプローチを提案している。我々が提案する材料 MBR ではミクロの領域での高度な観測や分子シミュレーションによって原子・分子スケールで材料の機能・特性を徹底的に理解し、数式モデルを構築する。得られた数式モデルに基づき要求性能を満たす高分子材料を提案し、合成、検証する。本研究では、有機-無機ハイブリッド高分子であるポリシルセスキオキサン(PSQ)を例に、ゾルーゲル反応の際に、水の添加量により分子量が異なることに着目し、モデル化を行った。

【方法 (実験・理論)】 本研究では、図 1 に示すような 4 種の PSQ を取り上げ、各 PSQ における種々の構造、電子状態、動特性について解析した。計算には PSQ モノマー

構造を取り上げ、B3LYP/6-31G**において計算を行った。動特性についてはHF/STO-3Gを用いて10000ステップの分子動力学計算を行った。

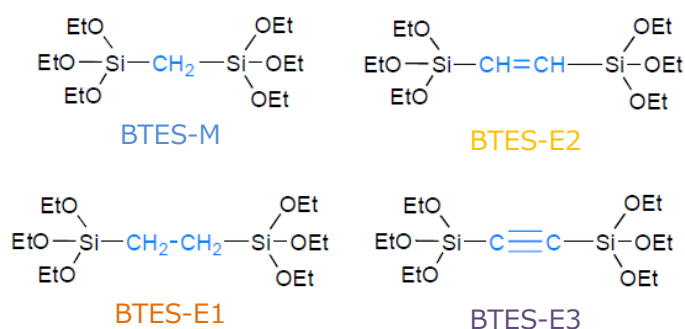


Fig. 1. Monomer structure of bis(triethoxysilyl)methane, ethane, ethylene, and acetylene.

【結果・考察】図2に水の添加量による分子量変化の実験結果および近似曲線を示す。ここでは、 $y=ax^n$ の関数を仮定したが、相関係数が0.9程度の高い値が得られ、近似曲線として適切な式を求めることが出来た。ここで、各PSQモノマーの計算結果と近似曲線に含まれる a と n の間の関係式を求めるために、LASSOを用いた。

モデル化の詳細および他のPSQモノマーにおける分子量変化の予測式については当日報告する。

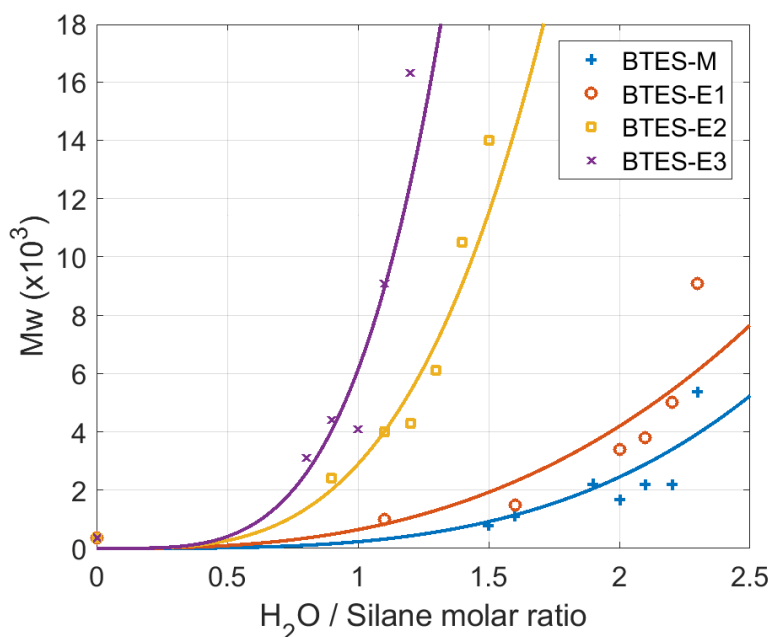


Fig. 2. Regression curves for BTES-M, -E1, -E2, and -E3 obtained by LASSO analysis. Experimental results of molecular weight are also plotted.

【謝辞】

広島大学次世代自動車技術共同研究講座の研究活動はマツダ(株)の支援により行われました。

【参考文献】

- [1] K. Yamamoto, J. Ohshita, T. Mizuno, and T. Tsuru, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **71**, 24 (2014).
- [2] T. Ishimoto, S. Tsukada, S. Wakitani, K. Sato, D. Saito, Y. Mahanishi, J. Ohshita, and H. Kai, *Submitted*.