

タイヤ素材に関する計算化学的研究の試み

Computational chemistry studies for tire materials

立教大理¹, 東大生研²

○石川雄太郎¹, 奥脇弘次¹, 川田修太郎¹, 土居英男¹, 望月祐志^{1,2}

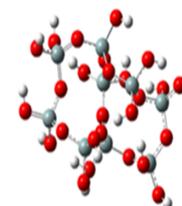
Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo². °Yutaro Ishikawa¹, Koji Okuwaki¹,

Shutaro Kawada¹, Hideo Doi¹, Yuji Mochizuki^{1,2}

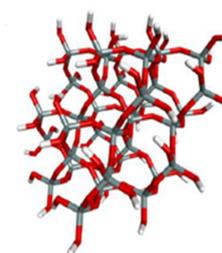
E-mail: yishikawa@rikkyo.ac.jp

【序】省燃費タイヤにおいて配合されるシリカナノ粒子(NP)は重要な役割を果たすとされるが、ゴム素材の高分子との結合・相互作用の原子レベルでの理解、それに基づく改良は未だ途についたばかりである[1]。一方、高分子の計算化学的な研究も進展してきており、モデル高分子での取り扱いから歩を進め、複雑な分子構造を持つリアルな系の多様なシミュレーションがマルチスケールで可能となってきた。そこで本研究では、タイヤゴムの材料分子とシリカ NP の複合系における界面の相互作用解析に加え、有効パラメータを非経験的に求めた上で粗視化シミュレーションを行うことにした。

【予備的な段階】右図の小型クラスター($\text{Si}_9\text{O}_{26}\text{H}_{16}$)をシリカ NP モデルとして、ゴム材料のイソプレン、スチレン、ブタジエン、それにエチレン、ベンゼンの計 5 種類を取り(組合せも有)、GAUSSIAN09 を使って DFT/6-31G* 計算で検討した。解析の結果、これらの分子の π 電子とシリカ表面のシラノール部分との OH/ π 相互作用が安定化に本質的である(B3LYP でなく B97D が好ましい)ことが分かった。また、分子間では CH/ π 相互作用も認められた。



【フラグメント分子軌道計算】右図の大型シリカ NP ($\text{Si}_{38}\text{O}_{100}\text{H}_{48}$)に、ゴム系の分子としてポリイソプレン(5 個)とスチレン・ブタジエンゴム(5 個)との界面をモデルとして設定した。次に、MOE を用いて AMBER10: EHT 力場で温度を 300K と 400K の二通りの MD シミュレーションを実行し、10 個の構造サンプルを抽出した。それらに対し、ABINIT-MP[2]を用いてフラグメント分子軌道(FMO)計算を MP2/6-31G* レベルで行い、シリカ NP とゴム系分子間、並びに鎖間の相互作用エネルギー(IFIE)を解析した。結果として、スチレン・ブタジエンゴムの方がポリイソプレンよりもシリカ NP と強く安定化の相互作用すること、またポリイソプレン間よりもスチレン・ブタジエンゴム間の方が安定化の度合いが大きいことが示唆された。



【粗視化シミュレーション】当日のポスターでは、FMO 計算によって非経験的に算定した α パラメータを使ったゴム/フィルター複合系の粗視化シミュレーション(OCTA/J-OCTA[3]を利用)の計算結果も報告する予定である。

【謝辞】本研究開発は文科省 FS2020 プロジェクトから支援を受けている。また、日頃ご議論いただいている佐藤弘一氏(ブリヂストン)、加藤幸一郎氏(みずほ情報総研)、小沢拓氏(JSOL)に深謝する。

【文献】[1] <<http://www.bridgestone.co.jp/corporate/news/2014111902.html>>. [2] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310. [3] <<http://octa.jp>> & <<http://www.j-octa.com/>>.