

有機・無機複合シリカエアロゲルの柔軟性： 分子シミュレーションからの考察

Origin of Flexibility of Organic-Inorganic Aerogel; Insights from Atomistic Simulations

AGC¹, [○]浦田新吾¹, 郭 安聰¹, 室伏 英伸¹

AGC Inc.¹, [○]Shingo Urata¹, An-Tsung Kuo¹, Hidenobu Murofushi¹

E-mail: shingo-urata@agc.com

1. はじめに

シリカエアロゲルは、直径数 nm サイズの微粒子が 50 ~ 100nm サイズの空隙を作りながら数珠状に連なる非常に疎な構造を有する。この特異的な構造により、非常に優れた断熱性、遮音性を示す。しかし、シリカを基本構造とするため柔軟性に欠け、その脆さが実用化に向けた大きな課題となっている。本研究では、3 種類のエアロゲルポリマーを分子シミュレーションにより作成し、ポリマー構造と機械特性との関係を調査することで、有機・無機複合エアロゲルの柔軟性の要因の解明を試みた。

2. 分子シミュレーション

エアロゲル構造をモノマーから重合して作成するため、Reactive force field モデル(ReaxFF)による反応分子動力学法を採用した。また、エアロゲルのモノマーとして、Tetramethoxy -silane (TMOS)、Methyl-trimethoxysilane (MTMS)、1,2-bis(methyldiethoxysilyl)ethane (BMDEE)の3種類を用いた。これらのモノマーは予め完全に加水分解したものと仮定し、全てのシリコン原子が1つのネットワークとして繋がるまで重合シミュレーションを実施した。得られた構造を図1に示す。変形解析の一例として、各ポリマーを歪-0.6まで圧縮したのち、元のサイズに戻す繰り返し変形を与えた場合の応力・歪曲線を図2に図示する。TMOSは非常に大きなループとなり、圧縮変形による塑性変形が顕著であることが明確である。これとは対照的に、MTMS、BMDEEはループが非常に小さいことから、高い柔軟性を有することが理解できる。特に、BMDEEは応力がほぼゼロの状態でも元の構造に戻ることができる。詳細な構造解析から、BMDEEは圧縮変形前後で Q^n 分布がほとんど変化しておらず、有機・無機ハイブリッド化により、結合を損なわず、柔軟に変形可能なネットワーク構造が形成されることが明らかとなった。

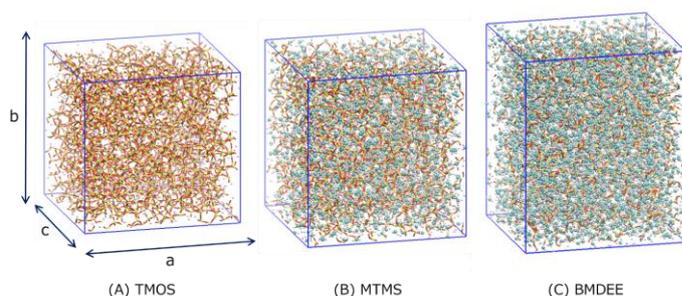


図 1. 3 種類のポリマーの重合後のポリマー構造
(A) TMOS、(B) MTMS、(C) BMDEE.

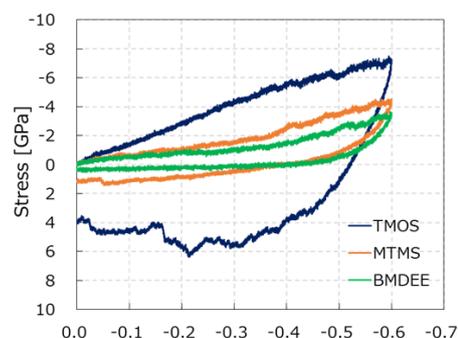


図 2. 圧縮・引張りの繰り返し変形における応力・歪曲線