

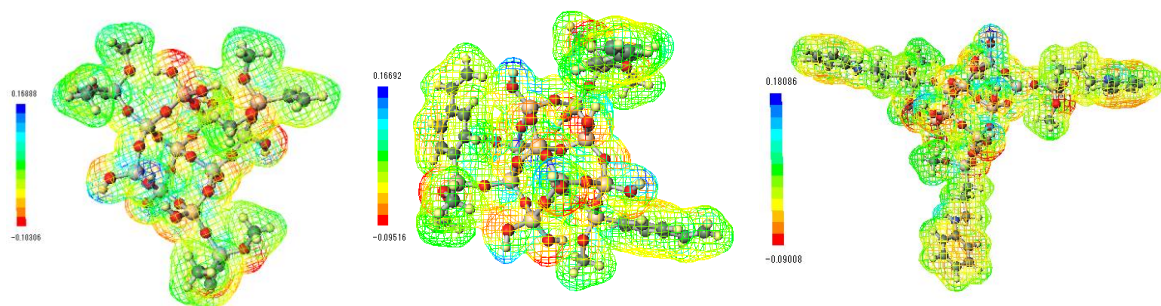
# 分子動力学法による シランカップリング剤処理したシリカの 高分子材料との相互作用の評価

## 取組のきっかけ

- ◆ シランカップリング剤で処理をしたシリカをホワイトカーボンと呼びます。高分子材料にホワイトカーボンを混ぜると強度が増すことが知られています。多様なシランカップリング剤から最適な選択をすることが難しいのが現状です。（社内の技術蓄積や提供企業の情報を基にした経験的な選択）
- ◆ 選択の目安とするために、分子動力学シミュレーションで強度向上の予測をすることを目的としました。

## 成果の概要

- ◆ 高分子材料として天然ゴム、SBRゴム、CRゴムを用いました。市販のシランカップリング剤から特徴的な3種類を選びました。連続体モデル、NVT伸長法というシミュレーション手法を用いました。静電的な相互作用が強度向上に大きく寄与していることがわかりました。



用いたシランカップリング剤の構造と表面電荷の様子

## 成果の活用方法

- ◆ 強度が向上するシランカップリング剤の選択の目安を得ることが出来ます。
- ◆ ゴム以外の高分子材料でも同様の強度向上の予測を行うことが出来ます。