

## 分子動力学法によるエポキシ系熱硬化性樹脂の熱伝導計算

(積水化学工業株式会社) ○洲上 唯一・釣本 輝希・矢原 和幸

Thermal Conductivity Calculation of Epoxy-Based Thermosetting Resins Using Molecular Dynamics Method (*Sekisui Chemical Co. Ltd.*) ○Yuitsu Sugami, Teruki Tsurimoto, Kazuyuki Yahara

For improving the performance and reducing the size of electronic devices, there is an increasing demand for resins with high heat dissipation capability (high thermal conductivity) that constitute heat dissipation sheets. Simulations are expected to aid in the design of high thermal conductivity resins; however, the calculation of the thermal conductivity of thermosetting resins by all-atom molecular dynamics is still at a developmental stage, and the amount of computational data and accumulated knowledge remains insufficient. In this study, cured products of resins and curing agents were prepared using curing reaction calculations, with the aim of obtaining fundamental insights for thermal conductivity calculations.

Calculations were performed for various epoxy monomers and curing agents using RadonPy, a Python library that supports automation of polymer property calculations <sup>1)</sup>. In addition, since it has been shown that orientation arising from molecular arrangement contributes to high thermal conductivity, this study also employed an orientation index (order parameter) to compare with thermal conductivity <sup>2)</sup>. As a result, the order parameter showed a positive correlation with thermal conductivity. Furthermore, decomposition of the thermal conductivity components supported the conclusion that higher rigidity contributes to high thermal conductivity.

**Keywords :** *Molecular Dynamics; Epoxy; Curing Reaction; Thermal Conductivity*

電子機器の高性能化・小型化のため、放熱シートを構成する樹脂の高放熱性（高熱伝導率）が求められている。高熱伝導率樹脂の設計のため、シミュレーションの活用が期待されるが、全原子分子動力学法による熱硬化性樹脂の熱伝導率計算は途上段階であり、計算データ数や知見が不足している。本研究では、硬化反応計算を用いて樹脂と硬化剤の硬化体を作成し、熱伝導率計算における基礎知見の獲得を目的とする。

種々エポキシモノマーと硬化剤を対象として、高分子物性計算の自動化支援 Python ライブラリである RadonPy を用いて計算を行った <sup>1)</sup>。また、分子配列による配向が高熱伝導率に寄与することが示されていることから、本研究においても配向指標（オーダーパラメータ）を用いて、熱伝導率との比較を行った <sup>2)</sup>。結果として、オーダーパラメータは熱伝導率と正の相関を示した。また、熱伝導率の成分分解から剛直性が高熱伝導性に寄与していることを支持していた。

1) RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. Y. Hayashi, J. Shiomi, J. Morikawa, *et al.*, *npj Comput Mater.* **2022**, 8, 222.

2) Discovery of liquid crystalline polymers with high thermal conductivity using machine learning. H. Maeda, S. Wu, R. Marui, *et al.*, *npj Comput Mater.* **2025**, 11, 205.