

プログラム名：超薄膜化・強靱化「しなやかなタフポリマー」の実現

PM名：伊藤 耕三

プロジェクト名：Li 電池セパレータ薄膜化プロジェクト

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平成 2 7 年 度

研究開発課題名：

多孔高分子膜のメゾ構造と力学シミュレーション

研究開発機関名：

株式会社 MCHC R&D シナジーセンター

I 当該年度における計画と成果

1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

【バッテリーセパレータ】高分子多孔膜からなるバッテリーセパレータ（BS）の薄膜化ならびにタフ化実現に向けて、高分子多孔膜のメゾスコピックな多孔構造とその力学特性の相関を明確化し多孔構造の設計指針確立を目指す。H27年度は主に課題1、課題2に対して技術確立をなす。

- ・課題1：BSのメゾスコピックな構造を3次元で定量化する構造解析技術の確立－BSに対する3次元構造解析の確立
- ・課題2：力学応答シミュレーション技術の確立－「孔が無いポリマーフィルム」の力学応答を定量的に再現するシミュレーションモデルの構築、3次元再構成された現世代BS構造体への当該モデルの適用
- ・課題3：多孔膜構造と力学応答の因果関係解析－3次元構造解析から得られる構造情報と実験で評価される力学応答の相関の有無の整理

【共通課題G1】破壊の横断的共通課題に対しシミュレーションにより取組み、担当アカデミアを取りまとめるサブリーダーの立場からプログラムの目標達成を支援する。当初計画したG1-2に加え、期中でG1-1が追加された。

- ・G1-1（モデル樹脂を用いた破壊機構の解明）－非晶系の衝撃破壊強度理解のためのシミュレーションモデルの構築
- ・G1-2（亀裂進展機構の解明）－ゴムや樹脂で見られる亀裂進展の特徴的な挙動の整理、および、シミュレーションによる再現の見通

2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

2-1 進捗状況

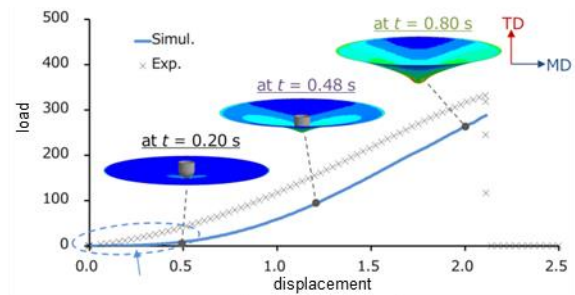
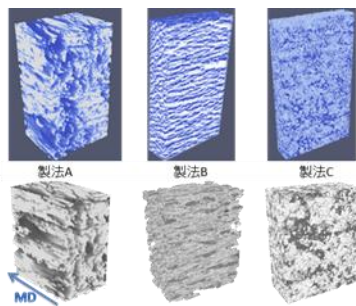
【バッテリーセパレータ】H27年度の中心課題である1及び2については概ね計画に従い進捗し、要所で高強度化の方向性を三菱樹脂㈱と議論の上、その開発を支援した。更に、当初予定されていなかった破壊直前の構造観察を追加することができた。結果の一部については、第64回高分子学会年次大会特別セッション（平成27年5月27日）における三菱樹脂㈱の「ポリマーのタフ化による電池の性能向上」の発表に提供した。

【共通課題G1】当初計画したG1-2では、き裂進展に関わる既往研究調査を行い現象理解のための仮説を立案、シミュレーション担当アカデミアの課題設定を支援した。FEM計算によるき裂速度転移現象の再現成功につながった点は当初計画を上回る進捗といえる。粗視化シミュレーションによるき裂進展現象へのアプローチは難易度高く進捗遅延。G1-1で開発されている分子破断の計算技術を適用して平成28年度の研究加速をはかる。

2-2 成果

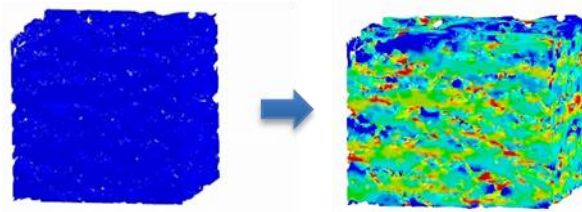
【バッテリーセパレータ】

課題	今期成果
課題 1 BS のメゾスコピックな構造を 3 次元で定量化する構造解析技術の確立	<p>FIB 加工ダメージを回避した“真実断面”の 2 次元イメージング技術を確立。これに基づき 3D 再構成を達成した</p> <p>①製法・強度が異なる数種の BS に対し 3D 再構成を適用。製法による 3D 構造の差異をプロジェクトにフィードバックした。</p> <p>②3D 再構成結果を課題 2 のシミュレーションとリンクできることを示した。</p> <p>③突き刺しによる破壊直前の構造の観察が可能となった。</p>
課題 2 力学応答シミュレーション技術の確立	<p>①突き刺し試験に対するマクロなシミュレーションモデルを確立。各種フィルム（孔無、製法の異なる BS）の挙動を再現し、高強度化の方向性をプロジェクトに提案した。</p> <p>②課題 1 に対する結果として得られた 3D 再構成構造体の一部分について、有限要素法によるメゾ多孔体の変形挙動解析が可能であることを示した。力学応答と多孔体構造の因果関係が示唆された。</p>
課題 3：多孔膜構造と力学応答の因果関係解析	<p>①課題 1 で得られた数種の BS について構造上の特徴定量化を実施した。</p>



課題 1 製法の異なる多孔膜の 3D 構造

課題 2 突き刺し試験のモデルと破壊直前の変形



課題 2 3D 再構成された多孔膜モデルに対する変形のシミュレーション

【共通課題 G1】

課題	アカデミア	各機関の成果要約
G1-1	名大・岡崎先生	非晶系の衝撃破壊強度理解のための分子動力学シミュレーションを可能とする基礎技術として、副緩和計算手法の開発と切断のポテンシャル関数の導出を実施。シャルピー試験における応力変化を FEM で解析。ノッチ先端の局所的な変形を想定した分子動力学シミュレーションの条件設定に関する根拠を得た。
	北大・グン先生	ダブルネットワークゲルの引張試験における破壊機構を解析。降伏挙動が 1st ネットワーク支配であること、降伏応力が理論予測よりもずっと小さいことを見出した。
G1-2	東大・梅野先生	FEM によりき裂速度モード転移の定性的再現に成功。非線形弾性および粘性緩和とモード転移の関係について、現象論的な理解を得た。
	京都工繊大・浦山先生	非線形弾性パラメータとき裂進展挙動の関係を実験的に解析。非線形弾性パラメータでエネルギー解放率をスケールすることによりき裂先端形状の挙動を普遍的に説明できることを見出した。
	お茶大・奥村先生	ゴム・エラストマー素材で確認されているき裂進展速度のスケーリング則を二つの異なるポリエチレンフォーム素材で実験的に確認した。また、粘弾性を取り入れた格子モデルを用い、対応する数値シミュレーションを行い、実験結果と類似したスケーリング則を見出し、ゴムのタフ化に対する指針が示唆された。さらに、格子モデルを単純化したモデルでの理論的研究も開始した。

2-3 新たな課題など

【バッテリーセパレータ】 特に無し

【共通課題 G1】 特に無し

3. アウトリーチ活動報告

該当なし