

平成 27 年 3 月 31 日

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： 破壊機構の分子解明プロジェクト

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平成 26 年度

研究開発課題名：

分子動力学シミュレーションによる高分子材料破壊の分子機構の解明と

破壊シミュレーション手法の確立

研究開発機関名：

名古屋大学

研究開発責任者

岡崎 進

# 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

しなやかで強靱な高機能高分子材料の実現に向けて、燃料電池高分子電解質膜、リチウムイオン電池セパレータ、車体構造用樹脂、タイヤ、透明樹脂などの高分子材料に対し、主として分子動力学シミュレーションに基づいて破壊の分子機構を解明し、破壊シミュレーション手法を確立する。このため、上述の各種高分子に対する共通基盤としての方法論の確立に向けて、平成26年度においては、プロジェクト間の共通課題の抽出、研究対象としての共通高分子系の選択等をPM、各開発企業等と共に検討し、設定する。その上で、これらを通して課題全体におけるシミュレーションの役割を明らかにし、担当するシミュレーション研究の具体的な計画を立てる。一方で、各プロジェクト固有の個別の課題についても各開発企業と共同で検討、明確化し、具体的な研究計画を立てるとともに、可能な系については先行的に研究を開始する。また、研究に不可欠な高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLASに対し、現在実施中の「京」プロジェクトと連携し、またポスト「京」プロジェクトの28年度からの本格実施に先立って、高分子研究用の機能追加、ロードアンバランスの解消等の整備、高度化を開始する。

## 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

共通課題ならびに各プロジェクト個別課題の抽出、設定に関わる綿密な検討をPMならびに各PLと開始し、1月開催の理論・シミュレーションと実験との連携研究会、また、多くの打ち合わせ会議等を経て、概ねの方向性を得た。現在、具体的な計画の詳細について詰めを行っているところである。

一方で、上記課題に対する研究推進体制を確立するため、平成26年末から博士研究員の公募を行い、3名を雇用した。これら博士研究員に加え、研究室スタッフ、また平成27年度からの新規大学院生を参画させ、体制を構築しつつある。

MODYLASの開発においては、「京」プロジェクト、ならびにポスト「京」プロジェクトと連携し、高分子破壊の分子機構の研究に必要なシミュレーション機能、高分子特有の計算条件での高速演算の実現など、本研究において必要なソフト開発項目の抽出、整理を行い、具体的な開発方針の策定を行った。

### 2-2 成果

共通課題に関しては、これまでに以下の2課題を設定した。

#### (1) 共通モデル樹脂を用いた破壊機構の解明

PS、PC、PMMA等の非晶系を共通物質として、耐衝撃強度と副分散との相関を実験研究者と共同で明らかにする。本グループにおいては、全原子分子動力学シミュレーションに基づいて、副分散に関わる側鎖などの局所的な運動を明らかにする。また、共通モデル樹脂の破壊の分子動力学シミュレーションを実施し、その分子機構を解明する。

#### (2) 亀裂進展機構の解明

ゲル、ゴム等における亀裂進展の分子機構を他グループの実験やメソスケールシミュレーションと連携して解明する。本グループにおいては、特に分子動力学シミュレーションに基づいて、マイクロ過程を明らかにする。

また、個別のプロジェクト固有の課題については、高分子電解質膜ならびに二次電池セパレータに対して、以下の課題を設定した。

#### (1) 高分子電解質膜

全原子シミュレーション、ならびにそれに基づいて構築した粗視化モデルを用いたシミュレーションにより、フッ素系高分子電解質膜のモルフォロジーを明らかにする。特に、乾湿サイクルによる膜構造の変化等を分子レベルで解明する。

#### (2) 二次電池セパレータ

二次電池セパレータとしての理想的な多孔体構造設計の中で、セパレータ中のイオン輸送の最適化のために必要な界面近傍のイオン伝導度の基礎データを提供する。

これらの計画の下で現在計算準備中であるが、課題のいくつかについては平成 26 年度すでに予備計算を開始した。PS、PC、PMMA、ロタキサラン等については用いるべき力場の検討を終え、ポテンシャル関数改良のための量子化学計算に着手しつつある。さらには、高分子電解質膜に対しては既存の力場を用いて予備検討を行っているところであるが、今後、綿密な準備を整えた後、大規模系に対する計算へと移行する。

### 2-3 新たな課題など

共通課題の解決に向けては、実験グループとの連携を具体的に設計していく必要がある。特に散乱実験からのデータは、シミュレーションにとって極めて重要である。一方で、シミュレーショングループ間でも調整が必要である。

### 3. アウトリーチ活動報告

特になし。