

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：車体構造用樹脂強靱化プロジェクト

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平 成 27 年 度

研究開発課題名：

構造用樹脂材料と複合材料の強靱化のための

ボトムアップ型マルチスケール解析

研究開発機関名：

国立大学法人東京大学

研究開発責任者

梅野 宜崇

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

■目標1：構造用高分子材料のマルチスケール解析手法の確立および高精度な材料構成式構築

(1) ボトムアップ粗視化マルチスケール解析手法の整備

全原子モデル解析の結果を基礎に、多段階的・ボトムアップ的に粗視化粒子モデルを構築する。変形・破壊シミュレーションへの適用という目的を踏まえ、機械的特性を適切に再現するという設計指針の下で、粗視化モデルの超原子エネルギー関数を決定する。

(2) ポリマー変形・破壊のマルチスケール解析

構築した粗視化粒子モデルを用いて、ポリマーの変形・破壊シミュレーションを行う。多軸応力、ひずみ速度などの条件をパラメータとして、それぞれに対して応力ひずみ関係を導出する。

(3) FEM 解析と実測データ照合による構成式の構築と設計指針の提案

粗視化モデル解析の結果をもとに材料構成式を導出し、FEM シミュレーションに適用する。

■目標2：プログラム共通課題 G1-2「き裂進展機構の解明」

この共通課題における最重要課題の一つとして、「モード転移」と呼ばれる現象のメカニズムを明らかにするということが挙げられる。本機関では数値解析によってモード転移現象を再現し、そのメカニズムを明らかにすることを目的として、FEM 解析を行う。

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

粗視化モデル構築と変形・破壊シミュレーションにおいては、代表的な構造用高分子材料であるポリカーボネート(PC)を対象とした。粗視化モデル構築の前段階として、比較的小規模な系に対する全原子モデル解析を実施し、粗視化モデル作成の基準となる機械的特性を取得した。全原子計算の結果を再現できるように結合原子モデルおよびメゾ粗視化モデルを作成した。

百万原子相当の系に対して変形・破壊の粗視化モデル解析を実施し、多軸応力負荷の下での破壊挙動を調査した。その結果、単軸引張と多軸引張とでは応力ひずみ関係や変形挙動に違いが生じることを示すことができた(図1)。実測による破断強度との比較より、具体的な材料構成式を構築するための基礎的な方針が得られており、大規模粗視化モデル解析と並行して構成式構築を進めている。

以上の粗視化モデル解析と並行し、プログラム共通課題 G1-2「き裂進展機構の解明」の一環として、ゴムの動的き裂進展のシミュレーションを実施した。実際の材料物性、試験方式を模擬することで、モード転移を再現することに成功した(図2)。き裂周辺の応力分布を精査することで、転移現象発現の要因を示した。なお、ゴムのき裂進展に関する取り組みは本機関の当初の研究計画にて予定されていなかったが、本機関の所有する解析技術を活用することで、プログラム全体に対しても大きな貢献が期待できるため、今後も本機関の主要課題として継続する。

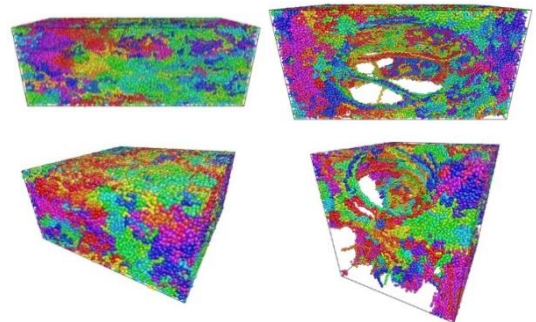


図1: 多軸応力に対するPCの変形挙動

2-2 成果

粗視化モデルの構築と変形・破壊シミュレーションにおいては、全原子モデル解析による応力・ひずみ関係を良く再現できる粗視化粒子モデルの構築に成功した。この粗視化モデルは材料構成式の導出に用いるのみならず、粗視化モデルそれ自体として、分子レベルでの破壊メカニズム解明に役立てることができる。ここでは PC を対象としたが、一般の材料に対して同様のア

プローチが可能であるため、ゴム材料などをターゲットとすれば、共通課題への展開も可能である。ひずみ速度に対する破断強度の関係を外挿することにより実験値に近い結果が得られることが分かり、材料構成式構築の基礎的な指針を得ることに成功した。

FEM 解析による特筆すべき成果としては、以下の 2 点が挙げられる。すなわち、ゴムの動的き裂進展におけるモード転移現象を FEM 解析によって再現したという点、転移現象の発現メカニズムに対して明瞭な説明を与えたという点である。これらの成果は先行研究において実現されておらず、本機関と実験担当機関の連携により初めて達成されたものである。現在、上述のゴムの動的き裂進展の FEM 解析技術に関して、特許化およびシミュレータの開発を検討している。

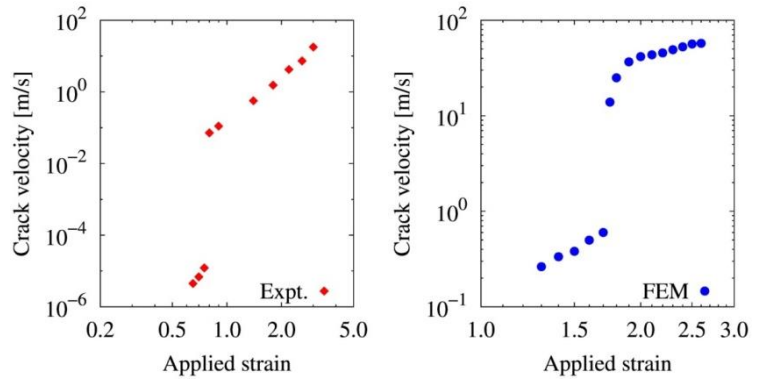


図 2: 投入ひずみ量とき裂進展速度の関係。

左: 実験結果, 右: FEM 解析

2-3 新たな課題など

粗視化モデルの作成は概ね順調に進んでいる。その一方で、き裂進展の FEM 解析では解決すべき問題が明確化されつつある。本 FEM 解析の結果によって、「なぜ」モード転移が発生するのかという問いに対して明瞭な答えを与えることができた。その一方で、「どうすれば」モード転移現象をコントロールすることができるのかという点については検討の余地が残されている。言い換えれば、モード転移機構の定性的な描像を示すことには成功したが、定量的評価を十分な精度で与えるには至っていない。この問題を解決することが材料のタフ化に直結すると考えられ、特許化およびシミュレータ開発を進めるにあたっては、信頼度の高い定量的評価の実現が必要である。

この課題は具体的には以下の課題に帰着する。

(a) FEM 解析の精度改善: FEM 解析の結果を材料特性の評価に結びつけるためには、実験結果を定量的に再現できることが必要である。現在までに本機関が実施した数値解析は、定性的には実験結果を再現しているものの、定量的には実験結果との間に無視できない差異が生じており、改善が必要である。

(b) モード転移現象の定式化: これまでにき裂進展を取り扱う複数の物理モデルが提案されているが、モード転移現象を想定したモデル、特に本研究で示したような力学的挙動に基づいた定式化はこれまでになされていない。そのため、モード転移現象を記述可能な新たな物理モデルを構築する必要がある。

3. アウトリーチ活動報告

該当なし。