

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29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

樹脂の変形・破壊機構を分子スケールから理解するために、粗視化粒子 (Coarse-Grained Particle; CG) モデルによる分子動力学 (Molecular Dynamics; MD) シミュレーションを行う。CG モデルは、全原子モデルよりボトムアップ的に構築する。樹脂の特性の違いによる影響を包括的に理解するため、これまでに本機関にて作成済みのポリカーボネート (PC) の粗視化モデルに加えて、ポリブチレンテレフタレート (PBT) の CG モデルを作成する。

■目標 2：プログラム共通課題 G1-2「亀裂進展機構の解明」への取り組み

有限要素法 (Finite Element Method; FEM) 解析に基づいたゴム材料の亀裂進展シミュレーションを行う。特に、引裂きエネルギーに対する亀裂進展速度の急激な変化 (速度転移現象) の発現メカニズムの詳細を明らかにする。

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

(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

以下に示す手順で、PBT の CG モデル構築を行った。

- 粗視化粒子とみなす原子集団を決定する。ここでは PBT の式単位を 4 粒子で表現する (Fig.1)。
- 全原子 (all-atom; AA) MD 解析により、CG モデル構築のために必要な基礎データ (分子鎖の伸長に伴う結合長変化など) を収集する。
- AA-MD 解析結果を再現できるように、CG モデルのポテンシャルパラメータを決定する。

AA-MD 解析の結果、PBT の一分子鎖を伸長すると、コンフォメーションが秩序化されることが明らかになった。PBT は結晶性樹脂であり、分子鎖におけるコンフォメーションの秩序化が物性に重要な役割を果たすと考えられることから、この秩序化を再現できるように CG モデルを構築した。

構築した CG モデルを用いて得られた PBT 分子鎖のコンフォメーションの例を Fig. 2(a) に示す。AA-MD 解析で確認された特徴的な秩序化傾向 (Fig. 2(b)) が良く再現されている。また、粗視化粒子間の結合長、結合角および二面角といった構造パラメータが良く再現できていることが確認された。作成した CG モデルによる変形解析は次年度に実施する予定である。

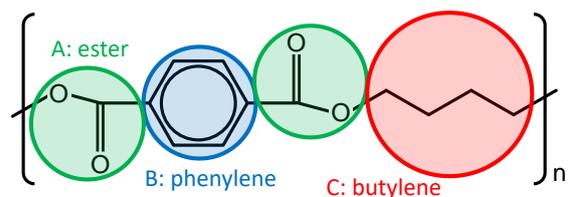


Fig. 1: PBTの構造式およびその粗視化表現。

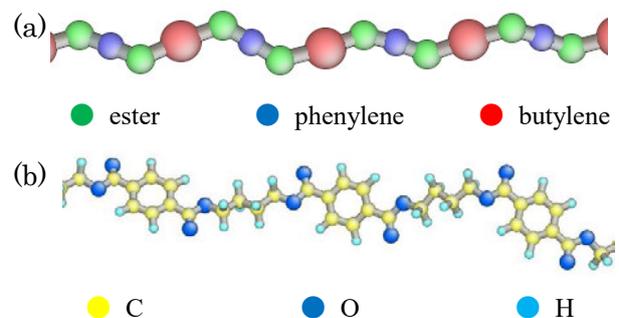


Fig. 2: 伸長状態におけるPBT分子のコンフォメーション。(a) CGモデル, (b) AAモデル。

(2) プログラム共通課題 G1-2 「亀裂進展機構の解明」 への取り組み

前年度までに、亀裂進展における速度転移現象を FEM 解析によって再現することに成功しており、亀裂先端での特徴的な力学挙動に基づいて転移現象が理解されることを示した。しかしながら、亀裂先端における力学挙動の本質は明らかとなっておらず、その解明が課題として残されていた。今年度は、この課題を解決するために、亀裂先端の振る舞いを簡素化した力学モデルを構築した (Fig. 3(a))。この簡素化モデルによって、FEM 解析にて亀裂先端で見られていた非単調な力学応答 (Fig. 3(b)) が、定性的に再現されることが示された (Fig. 3(c))。これは、亀裂速度転移現象の本質的メカニズムが、粘弾性体に対するステップ的荷重負荷によるものであることを強く示唆している。

また、両課題 1,2 を横断する取り組みとして、樹脂の亀裂進展解析を実施した。CG-MD 解析の結果に基づいて PC に対する材料構成式をボトムアップ的に構築し、亀裂進展の FEM シミュレーションを行った。亀裂先端の形状など、定性的にゴム材料とは異なる結果が得られたが、材料特性と亀裂進展挙動に関するより詳細な検討は今後の課題である。

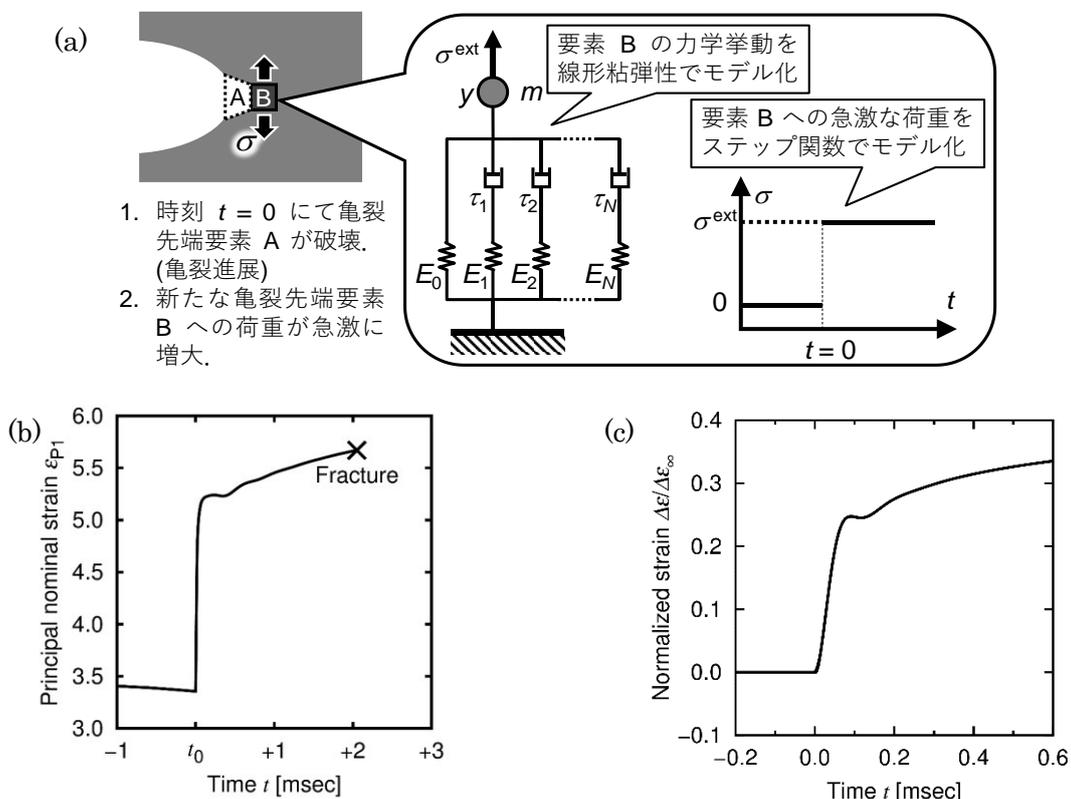


Fig.3 (a) 亀裂先端の挙動を理解するための簡素化力学モデル. (b) FEM亀裂進展解析での亀裂先端のひずみ挙動. (c) 簡素化モデルで得られたひずみ挙動.

2-2 成果

ボトムアップマルチスケール解析では、結晶性樹脂材料である PBT のための CG モデルを構築した。伸長状態における PBT 分子鎖の秩序的なコンフォメーションを再現できる CG モデルを作成したことにより、結晶性樹脂の変形・破壊シミュレーションが可能となった。PBT に対する実際の変形・破壊シミュレーションが実現された。

シミュレーションは今後の課題であるが、昨年度までに実施した非晶性樹脂 PC の変形解析の結果と比較することで、変形・破壊の微視的挙動における結晶性の影響を評価できることが期待される。

有限要素法による亀裂進展解析では、亀裂先端の力学的挙動を記述するために簡素化されたモデルを導入することで、亀裂先端の挙動が粘弾性モデルの枠組みで記述できることを示した。その結果、お茶の水女子大学の研究グループにより提案されている亀裂進展の理論モデル (N. Sakumichi and K. Okumura, Sci. Rep. 2017) との関連性が明らかとなり、速度転移現象に関する多角的な検討が可能となった。

2-3 新たな課題など

粗視化モデル解析については、予定通り PBT での変形・破壊シミュレーションを実施する。FEM によるゴム材料の亀裂進展解析については、理論モデルと比較可能な条件で FEM 解析を実施することで、両者の整合性を検討する。樹脂材料に対する亀裂進展解析では、ボトムアップ的に構築した材料構成式および破壊基準の妥当性評価が必要である。また、材料特性と亀裂進展挙動に関する検討も今後の課題である。

3. アウトリーチ活動報告

該当なし。