

中嶋 健

東京工業大学物質理工学院
教授

熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御

§ 1. 研究実施体制

(1) 中嶋グループ

- ① 研究代表者: 中嶋 健 (東京工業大学物質理工学院 教授)
- ② 研究項目: 革新的な高性能熱可塑性エラストマーの創成とそのナノメカニクス解析
 - ・ナノ触診原子間力顕微鏡による熱可塑性エラストマーの変形挙動解析
 - ・革新的な高性能熱可塑性エラストマーの創成

(2) 高原グループ

- ① 主たる共同研究者: 高原 淳 (九州大学先端物質化学研究所 教授)
- ② 研究項目: 3次元ネットワーク変形の時空間階層構造評価
 - ・3次元ネットワーク変形、崩壊の放射光 X 線散乱・分光
 - ・ループ系・非ループ系 3次元ネットワークの設計とその構造・物性評価

(3) 森田グループ

- ① 主たる共同研究者: 森田 裕史 (産業技術総合研究所機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 研究チーム長)
- ② 研究項目: 粗視化シミュレーションを用いたエラストマー材料の動的解析
 - ・ブリッジ・ループ鎖の割合の解析
 - ・応力鎖および動的ネットワーク構造の可視化解析
 - ・ブリッジ鎖制御プロセス解析

(4) 下川グループ

- ① 主たる共同研究者: 下川 航也 (埼玉大学大学院理工学研究科 教授)
- ② 研究項目: TPE の応力鎖ネットワークの 3 次元ネットワークによる数学的モデル化
 - ・ネットワークのモデル化
 - ・最適構造の提案

(5) 小谷グループ

- ① 主たる共同研究者: 小谷 元子 (東北大学大学院理学研究科 教授)
- ② 研究項目: 高分子鎖最適構造の数理モデル構築
 - ・高分子鎖の幾何学的記述子の開発
 - ・高分子最適構造成型制御のための数理モデル

§ 2. 研究実施の概要

革新的な高性能熱可塑性エラストマー (TPE) を設計するために、応力下にある TPE 材料を対象にその力学的な意味での動的ネットワークの役割を明らかにすることが本研究で行う重要な課題である。また我々は本研究課題を、実験とシミュレーション、そして数学が協奏する新しいモデルとして捉えており、研究者間の連携を重視している。

初年度である本年度は、グループ間の連携を強化するために全構成員からなるキックオフミーティングに加え、各グループ間で複数回の打ち合わせを行った。中嶋および高原グループがそれぞれ実験家の立場でモデルサンプルの探索を行い、設計指針を検討した。次年度以降は同一試料の解析を行い、そのデータをデータ同化シミュレーション担当の森田グループに提供する。本年度、森田グループによって可視化された動的ネットワーク鎖に対しては、グラフ理論によってそれを解析すること、およびその際のデータ作成の指針が森田・下川・小谷グループの議論によって定まった。本年度中に得られたそれぞれの成果を簡単に以下にまとめる。

中嶋グループはナノ触診原子間力顕微鏡 (AFM) を用い、変形下にある熱可塑性エラストマー (TPE) の力学物性解析を行った。試料としてスチレン-イソプレン-スチレン (SIS) トリブロック共重合体を用い、図に示したように変形によってマイクロ構造および局所物性に大きな変化が現れることを確認した。

高原グループでは高輝度放射光 X 線を用いた小角散乱を利用することによってさまざまな力学刺激下における TPE のその場分子凝集構造解析を行った。その結果、体心立方格子状に充填されたハードセグメントドメインのドメイン間隔が、伸長に伴って増大することを確認した。またビデオ観察から同時に求めたマクロのひずみとの比較から、一軸変形および二軸変形とも基本的にはアフィン変形仮説が成立していることを突き止めた。

森田グループでは TPE 内部の分子鎖構造を解析するため、シミュレーションを最も有用なツールとして活用している。本年度は TPE の bridge 鎖、loop 鎖の割合について検討し、さらにそのネットワーク構造についてグラフ理論を用いた数学的解析を行った。その結果、完全グラフに近いグラフ構造をとっているひずみ 0% から出発し、伸長に伴って、ドメイン分裂によるエッジ数の減少、ドメインの合一分裂を伴うエッジ数の増加を確認した。さらにひずみ 500% では、限られたドメイン間が bridge 鎖で繋がれたグラフになっていることが示された。

下川グループでは、森田グループから得られた応力鎖ネットワークのシミュレーションデータの数学的解析を開始した。球ドメイン構造の伸長による応力鎖ネットワーク構造の変化を数学的に記述するため、3 次元ネットワークのトポロジ的な記述、および、その変化の様子の記述を考察した。

小谷グループは森田グループのネットワークデータを、情報科学手法を用いた巨大ネットワーク解析に適用するための必要なデータサイズおよび指標を分析し、森田グループと情報を共有した。

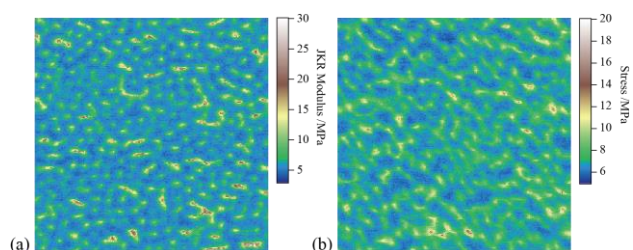


図 ナノ触診 AFM による SIS ミクロ相分離構造の観察 (a)未伸長、(b) 100%伸長試料。

また相分離の数理モデルとして知られる共連続・多重連続場と極小曲面の特異集合のなすネットワークの関連性を明確にするために外部の研究者と議論を行い、その関連性は離散極小曲面論と特異点解析の問題として解釈することができることが分かり、次年度以降の数理モデル構築に対する方針が定まった。