

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2017 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

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. 研究成果の概要

本研究は、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、応力下にある TPE 材料を対象にその動的ネットワークの役割を明らかにすることを目的としている。また我々は本研究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。各グループは相互に深く関連しながら研究を推進しており、論文や試作品という形で結実しつつある。

中嶋・高原グループは共通試料で、それぞれ実空間、逆空間の手法で TPE 内部のナノ構造に迫り、TPE 内部のハードセグメントドメインの変形・分裂・融合が生じていること、応力鎖が形成する動的ネットワークが存在することなどを明らかにした。元々は森田グループの粗視化分子動力学(MD)法で見出されていたことではあるが、それを実験的に確認できたことになる。またそれは現行の TPE の弱さの原因を特定したことを意味しており、今後の革新的な高性能 TPE の創成の指針ができあがったことになる。

シミュレーションの森田グループおよび小谷・下川らの数学グループは、それぞれのレベルでこの複雑な TPE をモデル化しており、高性能 TPE がもつべき最適構造の探索を始めている。特に森田・小谷グループの連携によるグラフ理論を活用した記述子の探索、機械学習による最適化は論文として成果が現れた。下川・小谷グループの連携による、数学的なネットワークの材料系への応用によって、最適なネットワーク構造の探索を行う準備も整った。

実験グループのブレンド技術と相まって新規の TPE ブレンド物が試作され、その複雑な応力ネットワーク構造が再び実験的に調べられ、シミュレーション・数学でその意味を解明する。そのような「協奏」が既にうまく回り始めているのを実感している。新たに合成の専門家をチームに招き、また TPE 関連企業との連携も着実に進んでおり、今後、社会実装も視野に活動を行っていくことができる段階まで到達した。

§ 2. 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 先導物質化学研究所、教授)
- ② 研究項目: 一軸・二軸伸長変形下における3次元ネットワーク変形の時空間階層構造評価
 - ・一軸・二軸伸長変形下における3次元ネットワーク変形、崩壊の放射光 X 線散乱
 - ・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 材料科学高等研究所、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

【代表的な原著論文情報】

- [1] “Direct visualization of a strain-induced dynamic stress network in a SEBS thermoplastic elastomer with in situ AFM nanomechanics”, Haonan Liu, Xiaobin Liang and Ken Nakajima, Japanese Journal of Applied Physics, vol.59, p.SN1013, 2020
- [2] “In Situ Synchrotron Radiation X-ray Scattering Investigation of a Microphase separated Structure of Thermoplastic Elastomers under Uniaxial and Equi-biaxial Deformation Modes”, Macromolecules, vol.53, pp.8901-8909, 2020.
- [3] “Recoverably and destructively deformed domain structures in elongation process of thermoplastic elastomer analyzed by graph theory”, Polymer, vol. 188, p.122098, 2020
- [4] “Machine learning analysis of the bridge chains in thermoplastic elastomer obtained by CGMD simulation”, Nihon Reoroji Gakkaishi, vol. 48, pp.79-84, 2020