

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

2021 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

本研究では革新的な高性能熱可塑性エラストマー (TPE) の設計を最終目標として、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。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、研究者間の連携を重視している。例えば、中嶋グループと天本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、その結果を森田グループにフィードバックしてきた。森田グループのデータ同化シミュレーションと小谷グループ・下川グループの数学をベースにした新しい着想は、実験グループに新しいアイデアを提供し、それに基づき新規 TPE ブレンド物が試作された。そのような「協奏」がうまく回り始めているのを真に実感したのが今年度であった。

合成グループの参画も研究の加速に大いに貢献した。社会実装を視野に入れた試作品作成の段階では、ナノ構造ポリマー研究協会傘下の TPE 技術研究会に協力を仰ぎ、産業界との連携も着実に進んでいる。その結果として従来品のもつ力学物性値を凌駕する TPE 材料の創成に繋がった。

特に顕著な成果として、中嶋グループによる TPE ブレンド系の相分離構造・力学物性解析とそれを基にした森田グループのデータ同化型シミュレーションによって、TPE ブレンド系における力学特性の詳細が明らかになった。長いハードセグメント鎖を含む系では、それが形成する大きなハードセグメントドメインがフィラーのような役割をし、高伸長時に大きな応力を生み出すメカニズムを、解析することに成功した。

小谷・下川らの数学グループの連携によって、テンション・テンソルという新概念が提案された。さらにテンション・テンソルから材料研究者が普段利用する応力テンソルが導かれることも証明された。それによって材料研究者が求める材料特性との対応付けが容易となり、研究を加速することが可能となった。

§ 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) 天本グループ

- ① 主たる共同研究者: 天本 義史 (九州大学 先導物質化学研究所 助教)
- 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ヨ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) “A Mathematical Model of Network Elastoplasticity”, Hiroki Kodama and Ken’ichi Yoshida, *Proc. R. Soc. A*, vol.478, 20210828, 2022.

- 2) “Coarse-Grained Molecular Dynamics Study of Styrene-block-isoprene-block-styrene Thermoplastic Elastomer Blends”, *ACS Appl. Polym. Mater.*, Vol 4, pp.2401–2413, 2022.
- 3) “Insulating Polymer Blend Organic Thin-Film Transistors Based on Bilayer-Type Alkylated Benzothieno[3,2-*b*]naphtho[2,3-*b*]thiophene”, Ryo Miyata, Satoru Inoue, Ken Nakajima and Tatsuo Hasegawa, *ACS Appl. Mater. Interf.*, vol.14, pp.17719–17726, 2022.
- 4) “Direct Visualization of Interfacial Regions between Fillers and Matrix in Rubber Composites Observed by Atomic Force Microscopy-Based Nanomechanics Assisted by Electron Tomography”, Makiko Ito, Haonan Liu, Akemi Kumagai, Xiaobin Liang, Ken Nakajima and Hiroshi Jinnai, *Langmuir*, vol.38, pp.777–785, 2022.