
1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

タイヤ用ゴム材料などの高分子材料の太規模シミュレーションに関する基礎技術について検討する。本研究ではゴム材料の粘弾性シミュレーションを行い、ゴムの架橋構造、フィラー構造が物性発現に果たす役割について検討する。これにより、シミュレーション技術の高度化を図り、ゴム材料の研究開発に役立つ知見を得ることを目的とする。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

タイヤ用ゴム材料は架橋高分子中にフィラーと呼ばれるナノ粒子が充填された複雑なコンポジット材料であり、シミュレーションは物性機能発現機構の解明に寄与すると期待されている。本シミュレーション技術は次世代の高機能ゴム材料の設計開発に応用できるため、本研究は産業利用の観点から大きな意義を持つテーマである。

3) スーパーコンピュータを利用する必要

自社のコンピュータシステムで実施可能な粗視化分子動力学シミュレーションの粒子数は数万粒子程度であるが、ゴム材料のモデル系としては小さいためシミュレーションから得られる情報に限界がある。名古屋大学情報基盤センターの大規模計算環境でノード間並列計算を行うことにより数十万から数百万粒子のシミュレーションが可能になることから、ゴム材料のモデルについてこれまでできなかった様々な検討が可能となる。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由)

9

※内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

(1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)

昨年度検討したゴム材料の粘弾性シミュレーション技術を応用して、ゴムの架橋構造や自由末端鎖が粘弾性特性に及ぼす影響について調べた。本技術は、線形粘弾性理論に基づいて粗視化MDシミュレーションで得られた緩和弾性率を積分変換して動的粘弾性 G' 、 G'' 、 $\tan \delta$ のマスターカーブを求めるもので、振動シミュレーションで求めた動的粘弾性に温度時間換算則を適用する方法に比べてより簡便にマスターカーブを得ることができることから、構造因子に関する系統的な検討を行うのに適している。自由末端鎖および架橋点数を変えたモデル高分子系に本技術を適用し $\tan \delta$ を求めた。自由末端鎖の有無、架橋数により $\tan \delta$ の形状が変化する結果が得られ、ゴムの粘弾性に対する自由末端鎖、架橋密度の役割に関する理解が深まった。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

9

本研究により高分子材料のシミュレーション技術の高度化が進んでいる。本技術はまだ発展途上であるが、本年度の研究で得られた知見を高機能ゴム材料の開発に応用することで、より高性能の次世代ゴム材料の開発に結び付くと期待している。

3) その他の成果
