



## 新材料開発技術 4D NANO DESIGN

研究・開発機関 : 住友ゴム工業(株)  
 利用施設 : (公財)計算科学振興財団 FOCUSスパコン  
 計算規模 : 最大1024コア  
 利用ソフトウェア : OCTA/COGNAC, VSOP

### Before

●ゴムはナノレベルの構造や各種配合物の特性が複雑に関係してタイヤとしての性能を生み出しており、その関係を調べ、材料設計を行うことはこれまで容易ではありませんでした。

### After

○ゴム中のナノレベルでの分子の挙動を調べ、表現し、素材のシミュレーションを行うことで、これまではっきりと見えなかったナノの世界を鮮明に「見える化」して、その素材を適切に用いることで材料開発のスピードを向上させることが可能となりました。

### 背景と目的

タイヤ業界では、近年の環境・エネルギー問題に対する意識の高まりを受け、2010年よりタイヤの転がり抵抗性能とウェットグリップ性能の両性能をグレーディングシステム(等級制度)に基づいて表示するラベリング制度が開始されています。このように、タイヤ性能に対する要求がますます高まり、求められる性能が多様化・高度化するにつれ、ゴム素材開発の進化と一層のスピードアップが望まれてきています。

そこで、タイヤ用新材料を効率的に開発するために、①調べる、②予測する、③作る、④引き出すという四つの技術コンセプトを融合させ、ナノレベルで分子の挙動を表現しながら、材料シミュレーションと解析を行うことで科学的・合理的に材料開発を行い、素材を自在にコントロールすることを可能にした新材料開発技術“4D NANO DESIGN”を確立しました。



図1. 4D NANO DESIGN のコンセプト

### 利用成果

本技術開発において、タイヤの燃費性能やグリップ性能に関係するゴム内部のエネルギーロスの発生状態をマイクロメートルスケールで予測するFEMシミュレーション、そのエネルギーロスを制御するためにポリマーとシリカなど配合物との結合やシリカ粒子の3次元配置をナノメートルスケールで予測する分子動力学(Molecular Dynamics:MD)シミュレーションなどで構成されるマルチスケールシミュレーションを開発し、実用化しました。このうちMDシミュレーションの開発・実行において、FOCUSスパコンを利用しました。

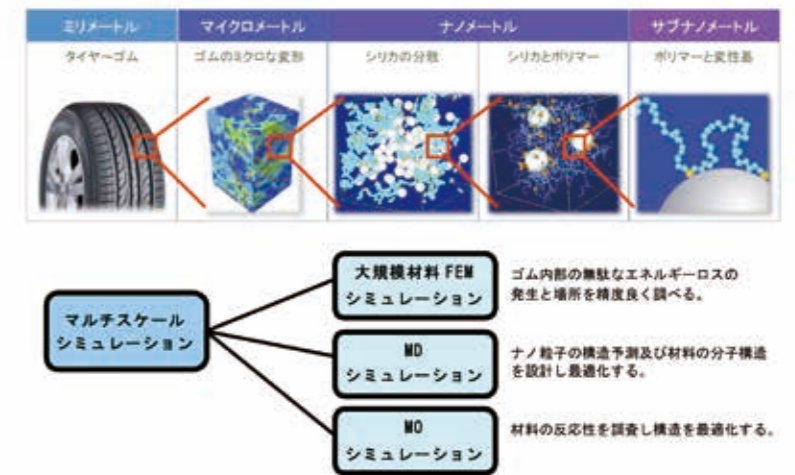


図2. マルチスケールシミュレーションの概念図

### FEMシミュレーション

ゴムが変形を受けた際、内部のフィラー(タイヤ用ゴムの原材料で数十ナノメートルの粒子)凝集構造および周囲のゴム相の変形挙動がゴムの物性に及ぼす影響を検討するため、マイクロメートルスケールのフィラー充填ゴムのFEモデルを作成し、ゴム中のエネルギーロスの発生箇所など、マイクロメートルスケールの変形挙動を予測するシミュレーションを実施しました。図3に引っ張り時の変形図(ひずみ分布)を示します。不均一に分散したフィラーとフィラーに挟まれたポリマー部分で大きなひずみが生じており、この部分で大きなエネルギーロスが発生していることがわかります。

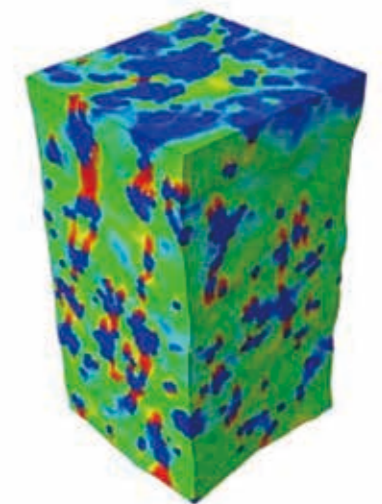


図3. 引っ張り時の変形図(ひずみ分布)

### MDシミュレーション

ゴムのエネルギーロスをより低減させるためには、分子骨格にフィラーと強く相互作用する変性基を有するポリマーを用いる事が有効であることが知られています。そこで、変性ポリマーを配合した際のゴム中のフィラーの分散状態を評価するために、粗視化分子動力学法に基づくフィラーの分散シミュレーションを行いました。図4aに示すような凝集したフィラーおよび変性基を有するポリマーを粗視化粒子でモデル化した初期配置モデルに対して解析の結果、ポリマーの変性基との結合によりフィラーが分散した終状態(図4b)が得られました。

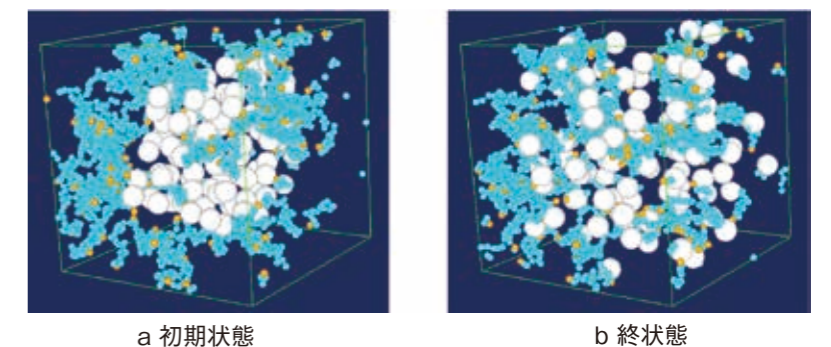


図4. 変性ポリマーのフィラー分散評価