

## ゴム破壊現象の解明による 高性能・長寿命タイヤの開発 — 充填剤/高分子間の構造に関する検討 —

研究・開発機関 : 住友ゴム工業株式会社  
 利用施設 : スーパーコンピュータ「京」、FOCUSスパコン  
 計算規模 : 約1.4億粒子  
 利用ソフトウェア : LAMMPS、J-OCTA/VSOP

### Before

- 「京」を活用することにより、摩耗に強い分子構造を解明することができ、2015年には、2011年当時の代表的なタイヤのトレッドゴムに対し、低燃費性能とウェットグリップ性能は維持しながら耐摩耗性能200%を実現するゴムを開発し、コンセプトタイヤとして発表しました。
- しかし、「京」活用成果に基づく耐摩耗性能を向上させたタイヤの商品化には至っていませんでした。

### After

- 「京」活用成果に基づき耐摩耗性能に優れた新しいゴム材料を開発し、2016年に乗用車用タイヤとして商品化しました。
- さらに、充填剤の表面改質剤の結合数を制御することにより、更に高強度化できる可能性があることを明らかにしました。

### 背景と目的

ゴムはナノレベルの構造や各種原材料の特性が複雑に関係してそのマクロな性能を生み出していますが、中でもゴムの破壊現象は、分子レベルで生じる破壊が起点となり、ゴム中を亀裂が成長・進展し、やがて破壊に至る現象と考えられ、実験的に、この広いスケール範囲にまたがる現象を観察することは容易ではありませんでした。そこで我々は、各種原材料とゴムの耐摩耗性能との関係を解析するため、「京」を活用し大規模な分子シミュレーション技術を開発しました(図1)。

当技術により2015年には、2011年当時の代表的なタイヤのトレッドゴム(路面と接する部分)に対し、低燃費性能とウェットグリップ性能(濡れた路面に対する性能)は維持しながら耐摩耗性能200%を実現するゴムを開発し、コンセプトタイヤとして発表しました。しかし、「京」活用成果に基づき耐摩耗性能を向上させたタイヤの商品化には至っていませんでした。

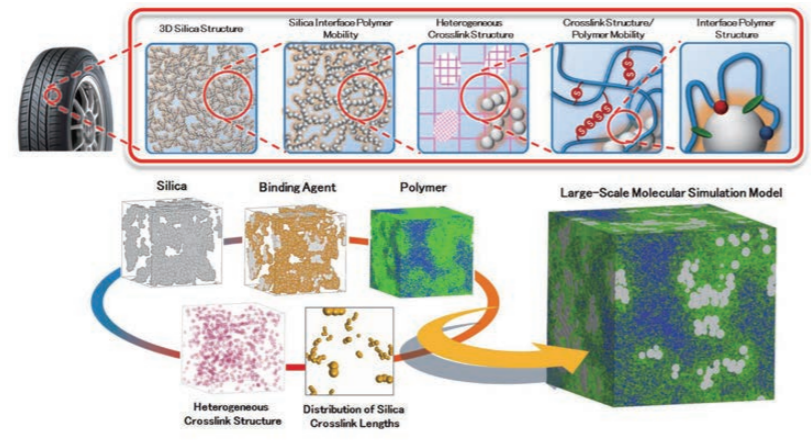


図1 「京」を活用した大規模な分子シミュレーションモデル

### ■ 利用成果

#### 耐摩耗性能を向上させる新規シランカップリング剤の開発と商品化

シリカとポリマーを結合させるシランカップリング剤の長さが、ゴム中のボイド(空隙)生成に及ぼす影響を調べました。図2の左側が従来のシランカップリング剤で、右に行くほどシランカップリング剤が長いケースのシミュレーション結果を示しています。このシミュレーションから、中央のようにシランカップリング剤を長くすると、ボイド生成が抑えられることがわかりました。シランカップリング剤が長いと、シリカ界面でのシランカップリング剤の可動域が大きくなり、変形時に発生するストレスが低減されるためと考えられます。一方、右側の図のようなシランカップリング剤を長くしすぎると、シリカとポリマーの界面でボイドが生じやすくなることもわかり、最適なシランカップリング剤の長さがあることがわかりました。

住友ゴムでは、この新しいシランカップリング剤を採用した商品として、2016年11月に乗用車用タイヤ、ダンロップ エナセーブNEXTIIIを発売しました。

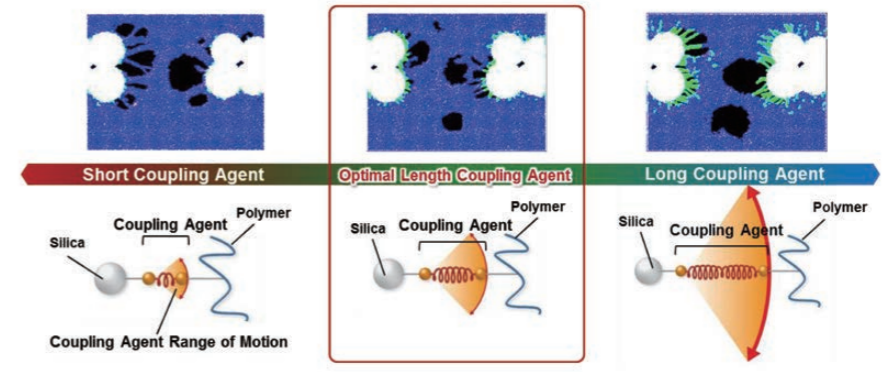


図2 大規模分子シミュレーションモデルによる新規シランカップリング剤の開発

#### 充填剤の表面改質条件がゴム強度に及ぼす影響評価

シランカップリング剤に着目してゴムの更なる高強度化を目指した取り組みとして、シランカップリング剤の構造、特に長さや結合の数が、ボイド生成に及ぼす影響を調べました(図3)。右図のグラフは伸長時の応力とボイド生成量の変化を示しています。シミュレーションの結果、結合の数を増やすことで、更に高強度化できる可能性があることがわかりました。

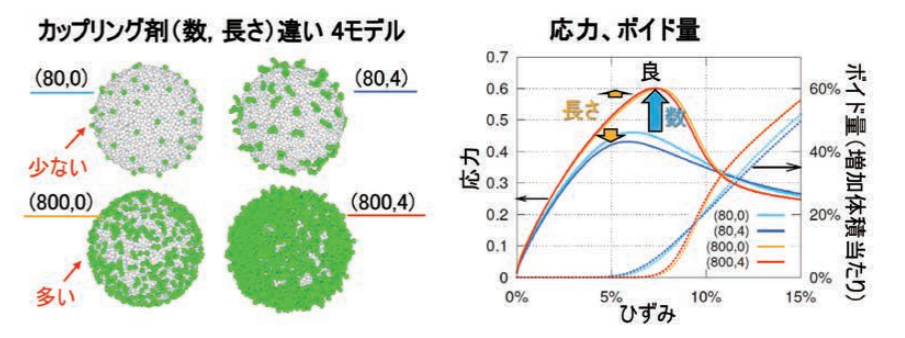


図3 充填剤/高分子間の構造がゴム強度に及ぼす影響評価 (右図の実線は応力、破線はボイド量)

### ■ まとめ

住友ゴムでは、安全性・低燃費性能・省資源という、相反するタイヤの主要性能を高い次元で両立するために、タイヤ用ゴム材料の研究開発にシミュレーションを活用してきました。「京」では、ゴム材料の高強度化を目的として、大規模分子動力学シミュレーションを実施し、得られた成果に基づき新しいゴム材料を商品化しました。さらに、充填剤の表面改質剤の結合数を制御することにより、更に高強度化できる可能性があることを明らかにしました。

今後も、シミュレーションを活用して新たなゴム材料を生み出し、高い安全性と環境負荷低減を両立したタイヤを開発していきます。