

仮想実験プロトタイプ AMUSE

(Advanced Materials design Using Simulation Engines)

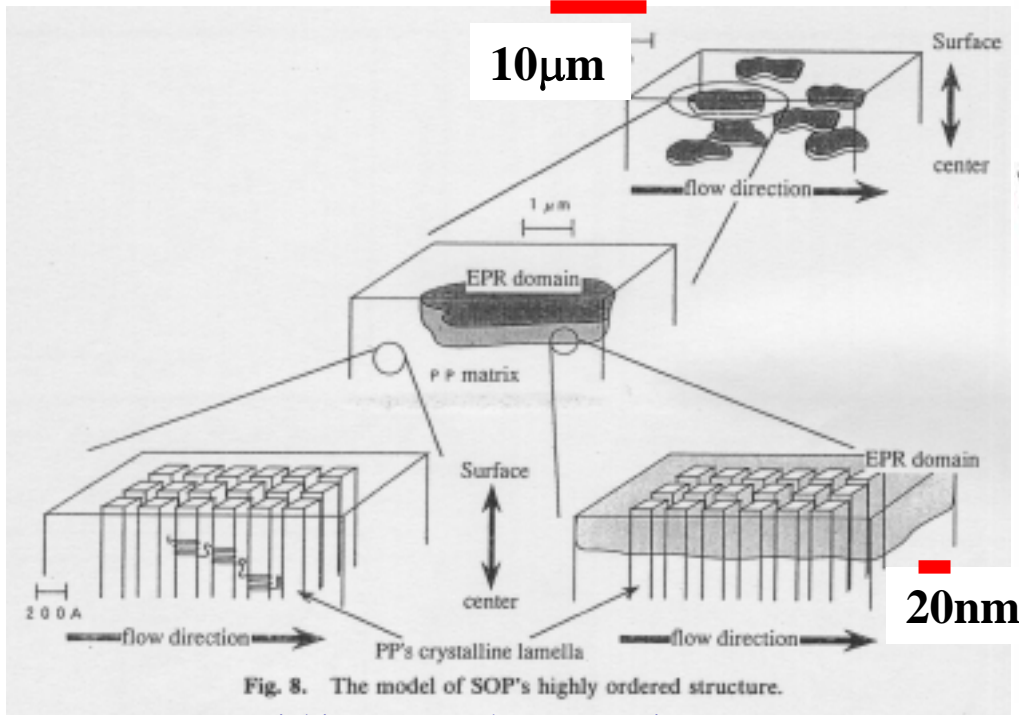
田崎弘恭
JCII, 土井プロジェクト

概要

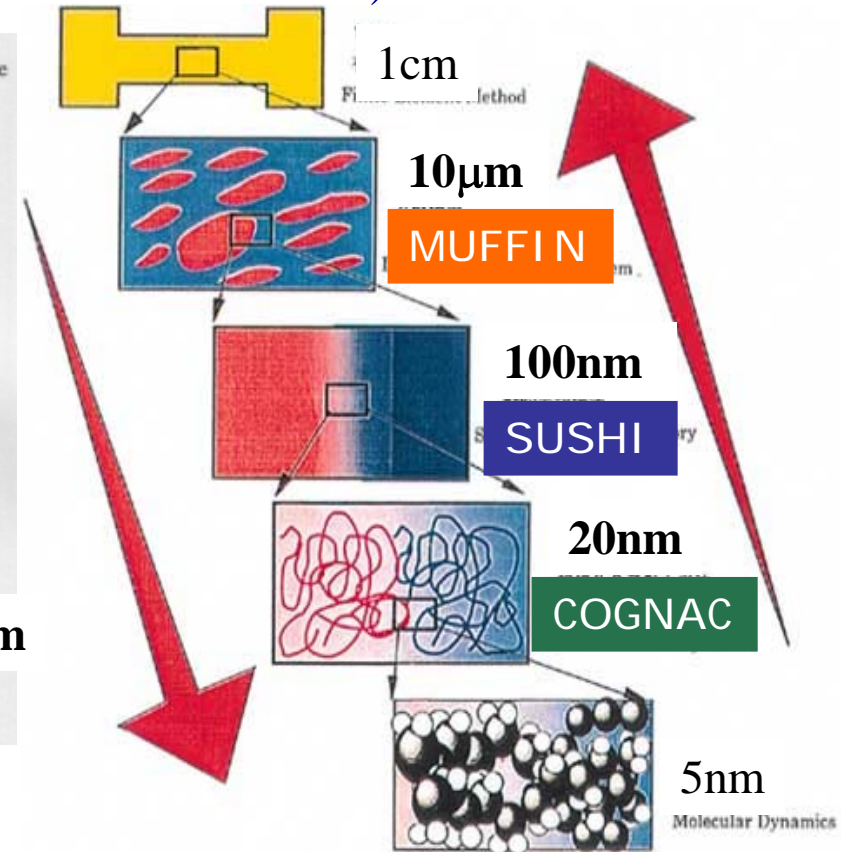
- はじめに
- 半結晶高分子のラメラ構造
- PP/elastomerブレンドのバルク弾性率
- PP/elastomerブレンドの界面強度
- 結論

はじめに

AMUSEとは、2以上のシミュレーションプログラムとプラットフォームを協調することによる仮想実験を実施する先進の試みである。
 テスト材料：Polypropylene(PP) materials (PP/elastomer blend)



T. Nomura, T. Nishio, H. Tanaka, K. Mori,
 Japanese Journal of Polymer Science and Technology,
 vol.52, N0.2, pp.90-96 (1995))



究極の目標：シームレスズーミング !!

PP 材料の重要な特性

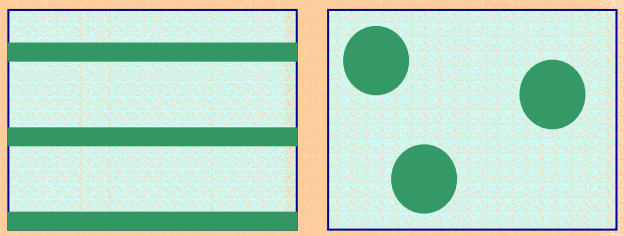
PP材料設計

靱性

耐性

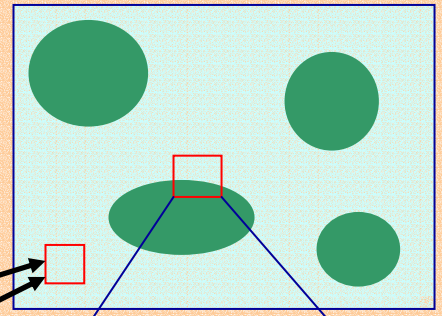
- 結晶相と非晶相を含む半結晶ラメラ構造
- 分子量とポリプロピレンの立体規則性に関するタイ分子
- ポリプロピレン結晶の配向
- ポリプロピレン/エラストマブレンドのモルフォロジ
- ポリプロピレン/エラストマ界面構造

2.

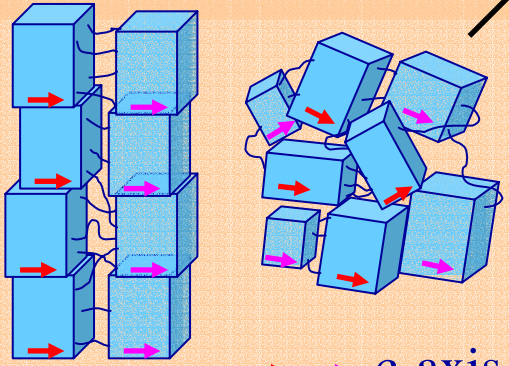
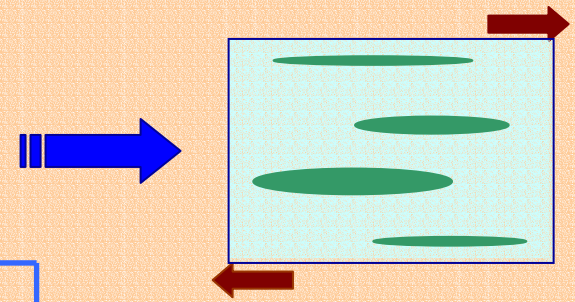


モルフォロジー

MUFFIN



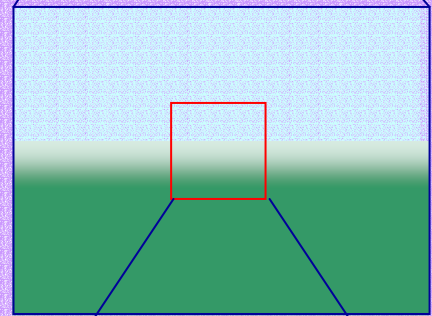
バルク弾性率



結晶配向

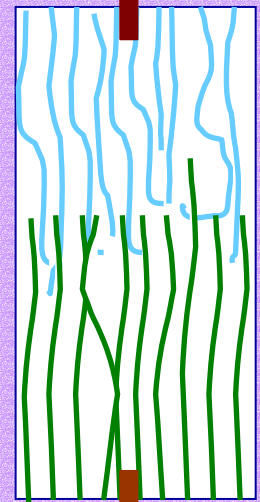
3.

SUSHI

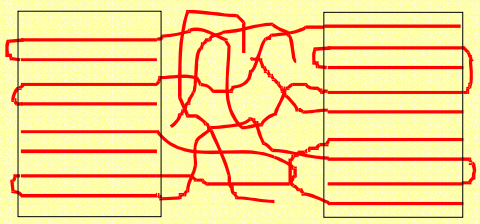


future work

界面特性

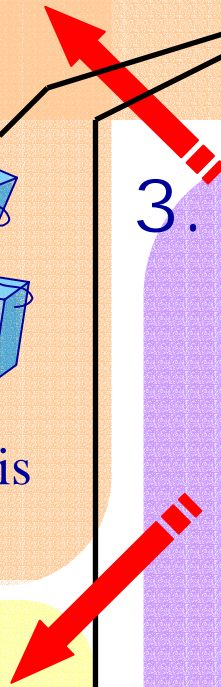
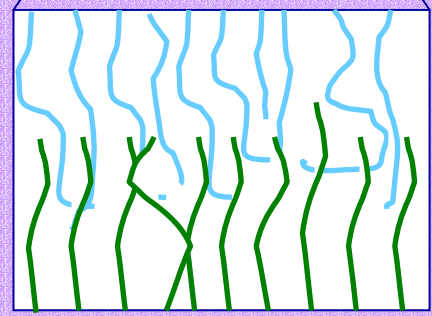


1.



ラメラ構造

COGNAC



1. 半結晶高分子のラメラ構造

- SUSHIからCOGNACへのズーミングにより、初期の半結晶ラメラ構造を生成。
- 結晶-非晶層モデルによりPP結晶の弾性挙動を予測。

2. ポリプロピレン/エラストマブレンドのバルク弾性率

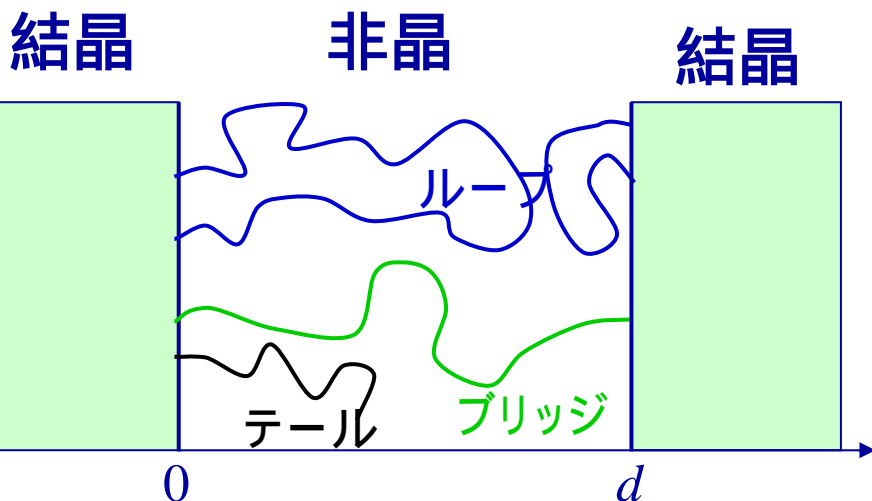
- SUSHIからMUFFINへのズーミングによりPP材料の弾性率を予測。

3. ポリプロピレン/エラストマブレンドの界面強度

- SUSHIからCOGNACへのズーミングにより、界面での高分子の初期構造を生成。
- ポリプロピレン/エラストマブレンドの界面強度を予測。
- 界面の物理的性質よりバルクの力学的性質を予測。(今後)

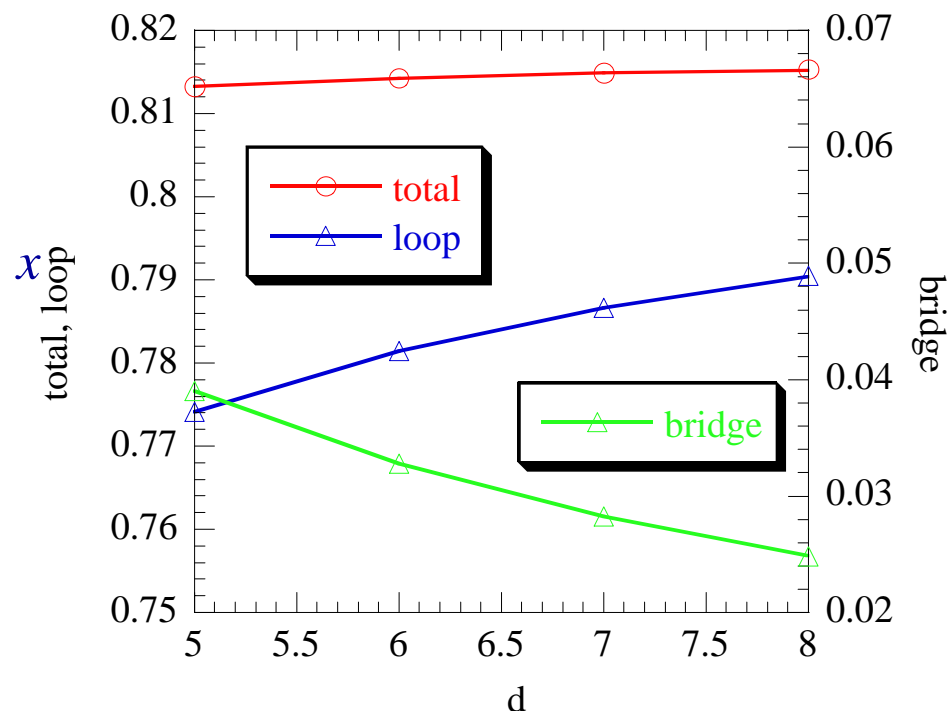
半結晶ラメラ構造

非晶部での高分子鎖の構造を計算 (SUSHI).



パラメータ：
 長周期、結晶化度、
 分子量、分子量分布、
 分岐構造、...

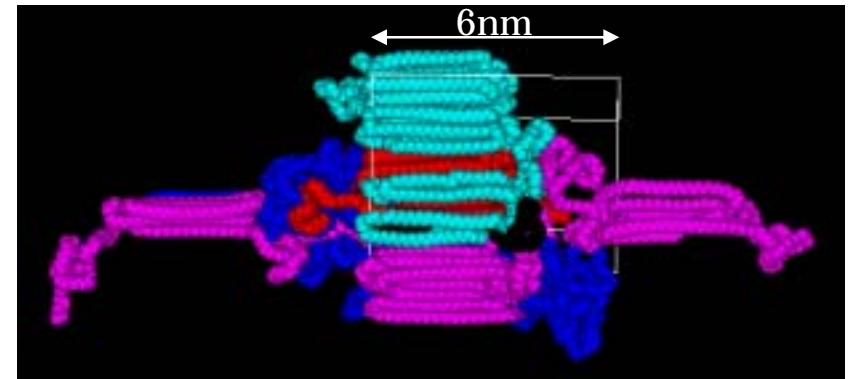
無限鎖でのループとブリッジの比



半結晶ラメラ構造

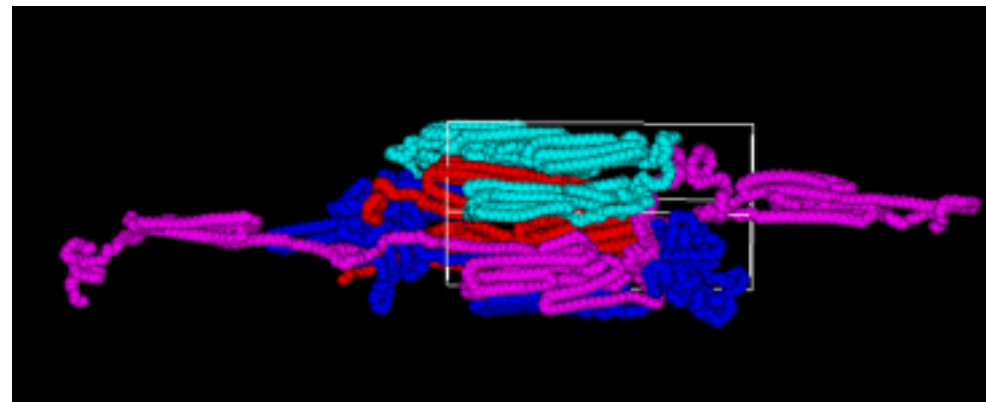
COGNACの機能により半結晶ラメラ構造を生成

COGNACは、SUSHIで得られたループとブリッジの構造分布より、半結晶ラメラ構造を生成する。



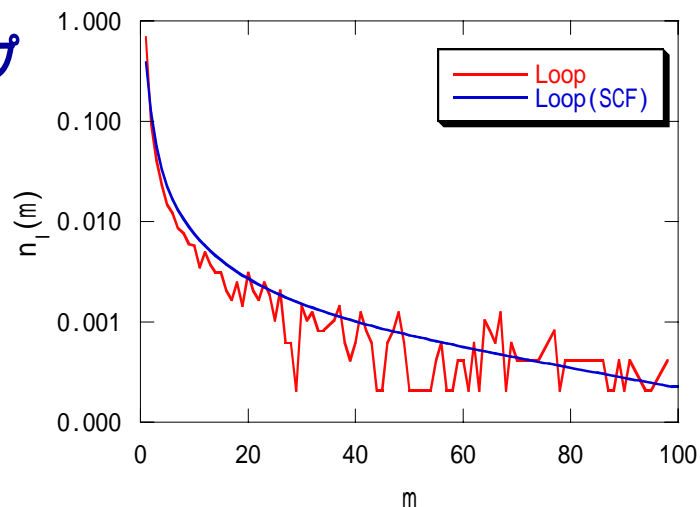
伸張

ラメラ構造を伸張する分子動力学シミュレーション

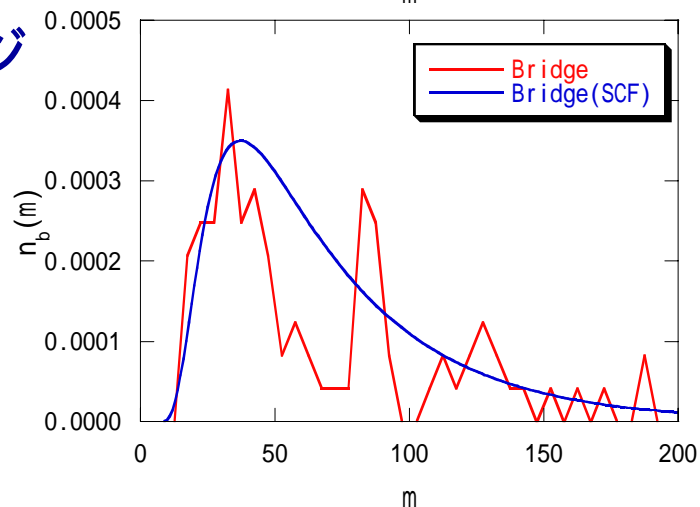


半結晶ラメラ構造

ループ

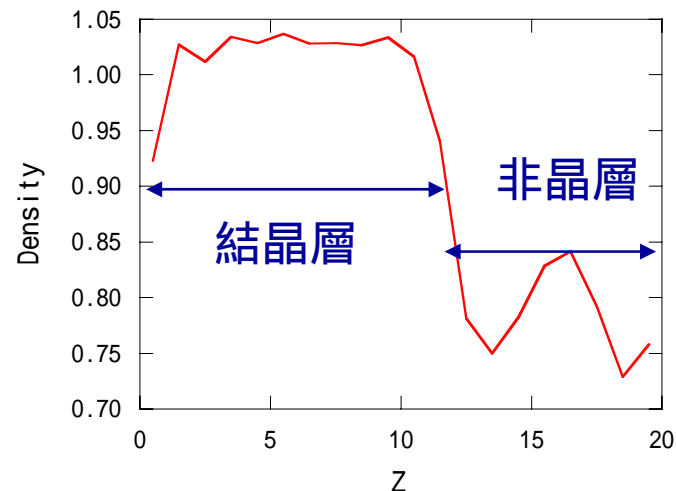


ブリッジ



ビーズ-スプリングモデル
4鎖、1200ビーズ

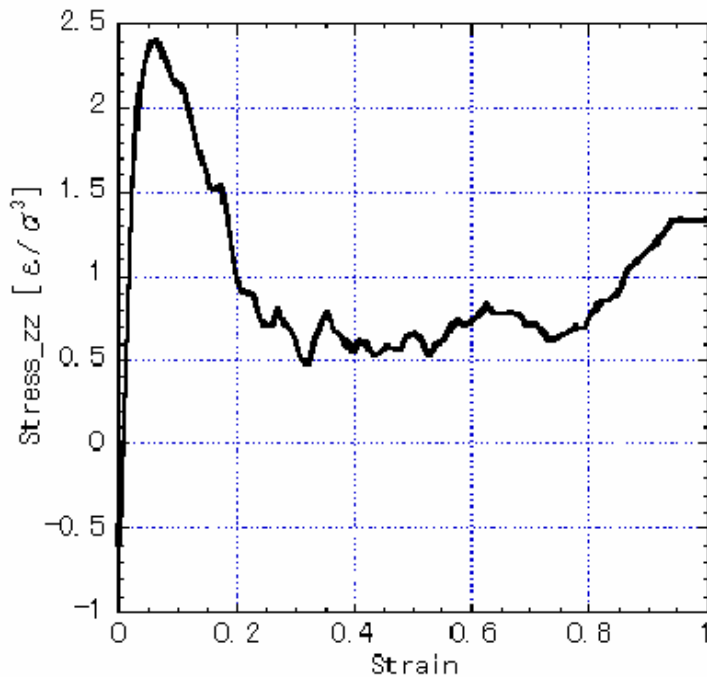
密度プロファイル



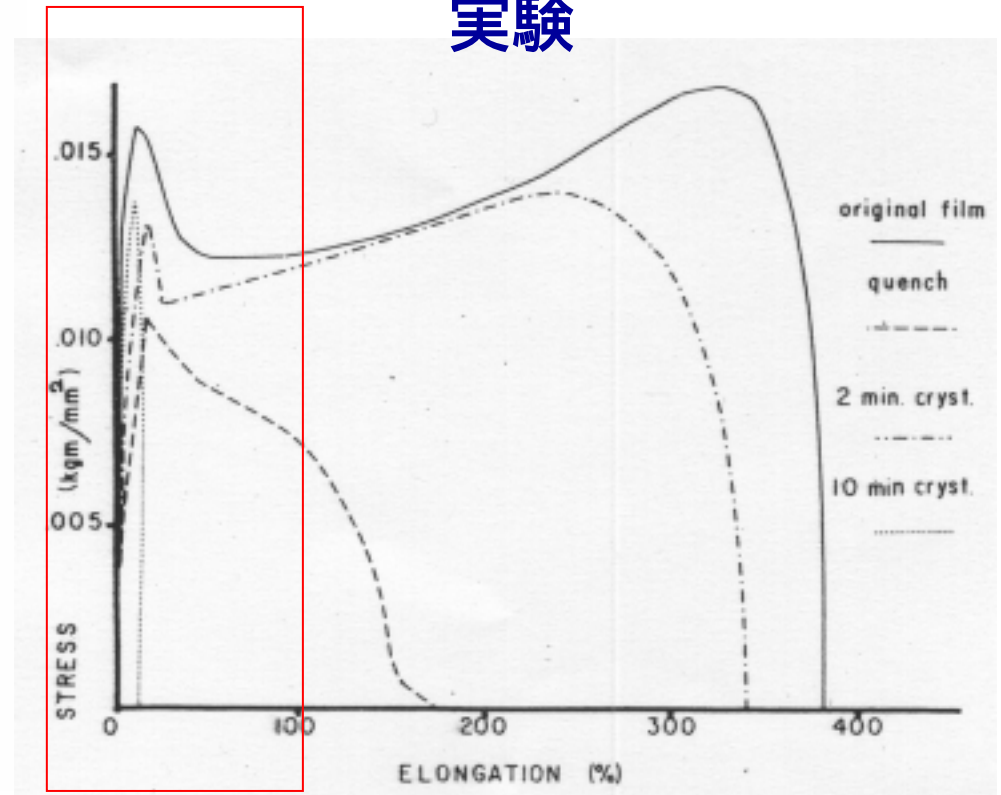
半結晶ラメラ構造

応力-歪み曲線

シミュレーション



実験



L. Barish, J. Appl. Polymer Sci., 6, 617 (1962)

ポリプロピレン/エラストマブレンドの バルク弾性率

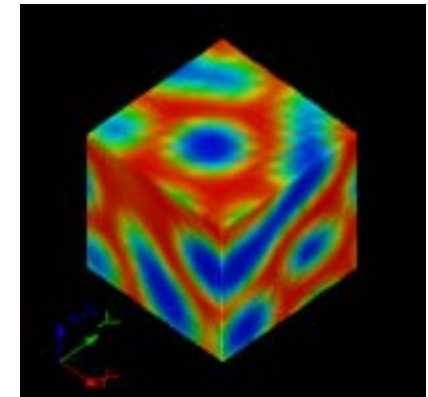
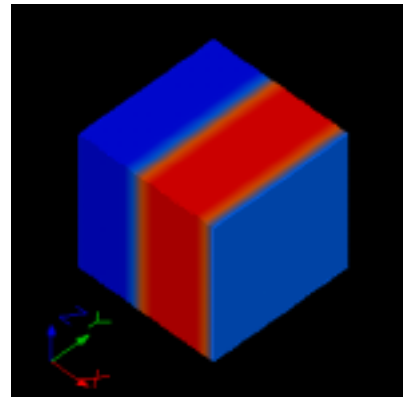
OCTA

野田 & 佐々木

SUSHIからMUFFINへのズームング

SUSHI

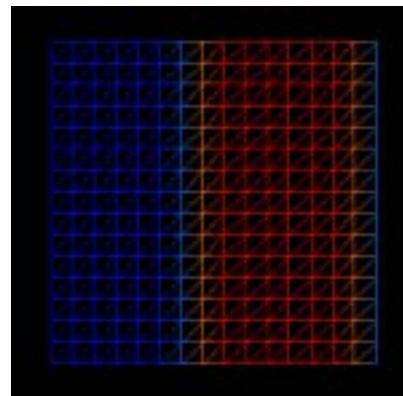
PP/elastomer ブレンド
のモルフォロジー



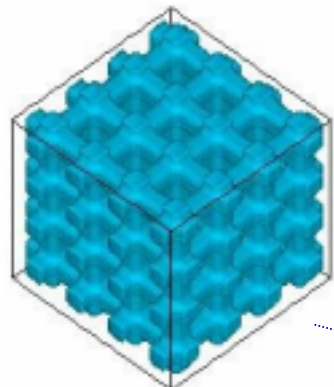
成分Aの体積分率

MUFFIN

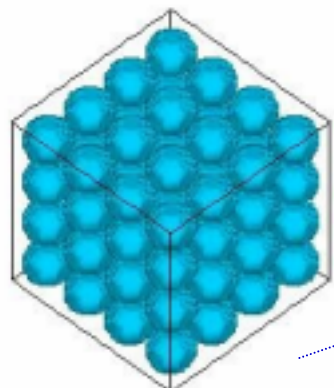
何らかのモルフォジ
ーを持つ材料の弾性率



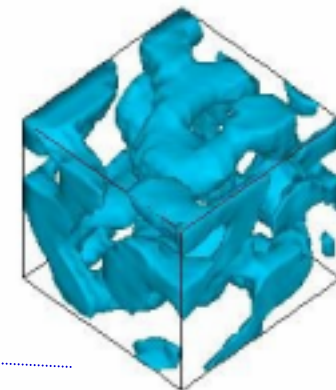
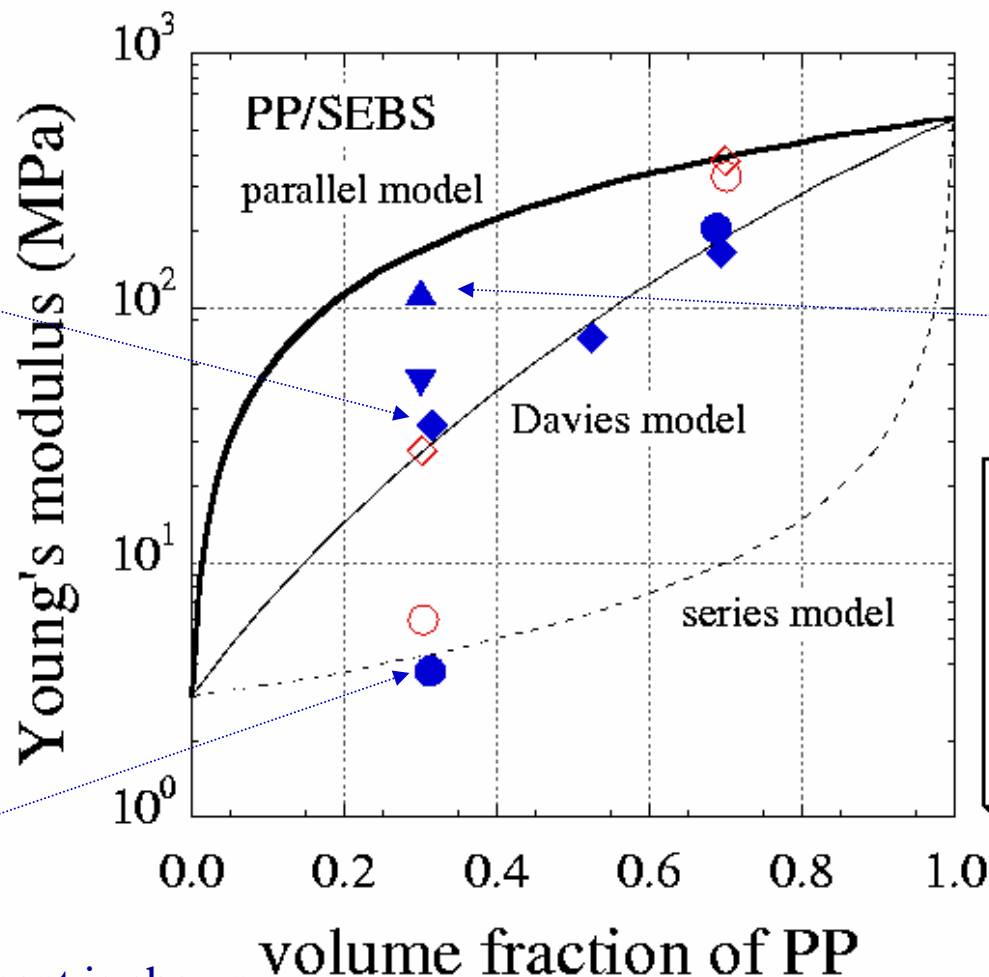
ポリプロピレン/エラストマブレンドの バルク弾性率



Bicontinuous



Dispersed



WI & NI

- Dispersed(exp.)
- ◇ Bicontinuous(exp.)
- Dispersed(simul.)
- ◆ Bicontinuous(simul.)
- ▲ WI(simul.)
- ▼ NI(simul.)

The only minor component is shown.

ポリプロピレン/エラストマブレンドの バルク弾性率

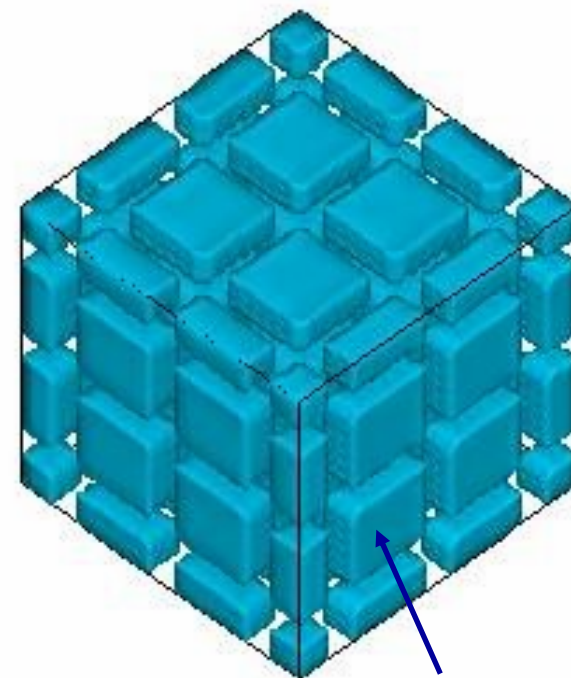
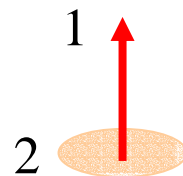
OC_{TA}

野田

配向結晶の弾性率の計算

COGNACで得られた
非等方の弾性率を利用

C軸
(molecular axis)



結晶

高配向の場合
(非等方)

$$E_{1,ave} : 1100 \text{ (MPa)}$$

$$E_{2,ave} : 58 \text{ (MPa)}$$

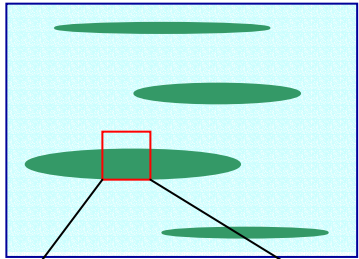
ランダムな場合(等方)

$$E_{ave} : 550 \text{ (MPa)}$$

ポリプロピレン/エラストマ ブレンドの界面強度

OCTA

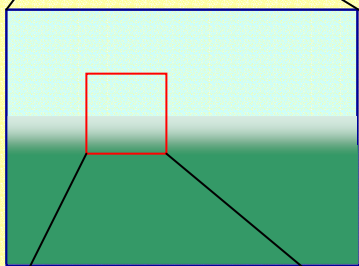
横溝 & 青柳



MUFFIN

せん断場下での構造形成

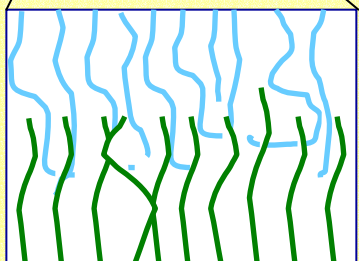
せん断場下でのPP/elastomerモルフォロジーの予測



SUSHI

界面厚、鎖の構造

界面での鎖の構造の予測



COGNAC

応力-歪み曲線

界面強度の予測

MUFFIN

耐性 etc. (将来)

界面強度を考慮したバルク物性の予測 (将来)

ポリプロピレン/エラストマ ブレンドの界面強度

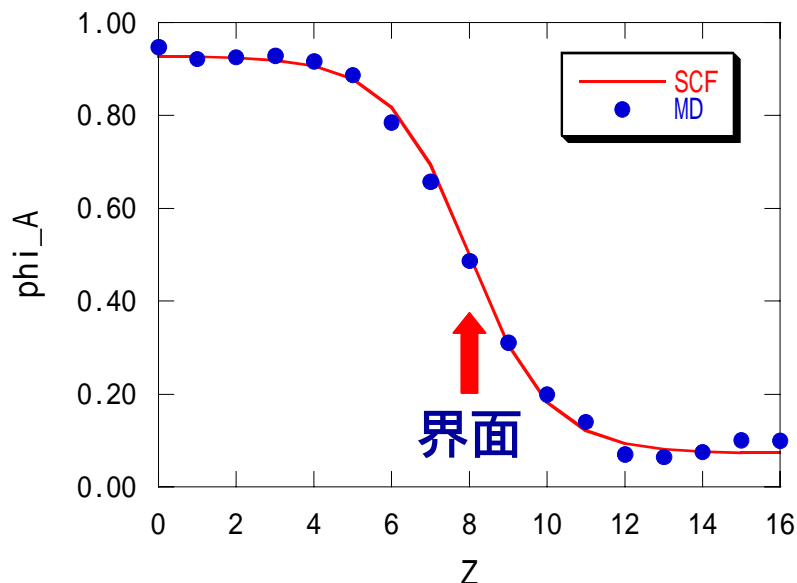
OCTA

青柳

SUSHIからCOGNACへのズームングにより
界面での高分子鎖の初期構造を生成。

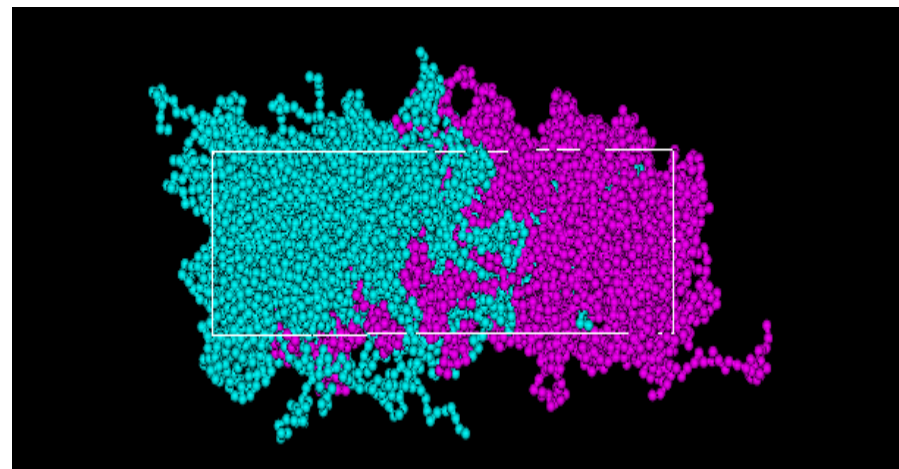
SUSHI

1D calculation
ノイマン境界条件



COGNAC

ビーズ-スプリング(1bead=1SCF segment)
Staggered reflective boundary condition



ポリプロピレン/エラストマ ブレンドの界面強度

OCTA

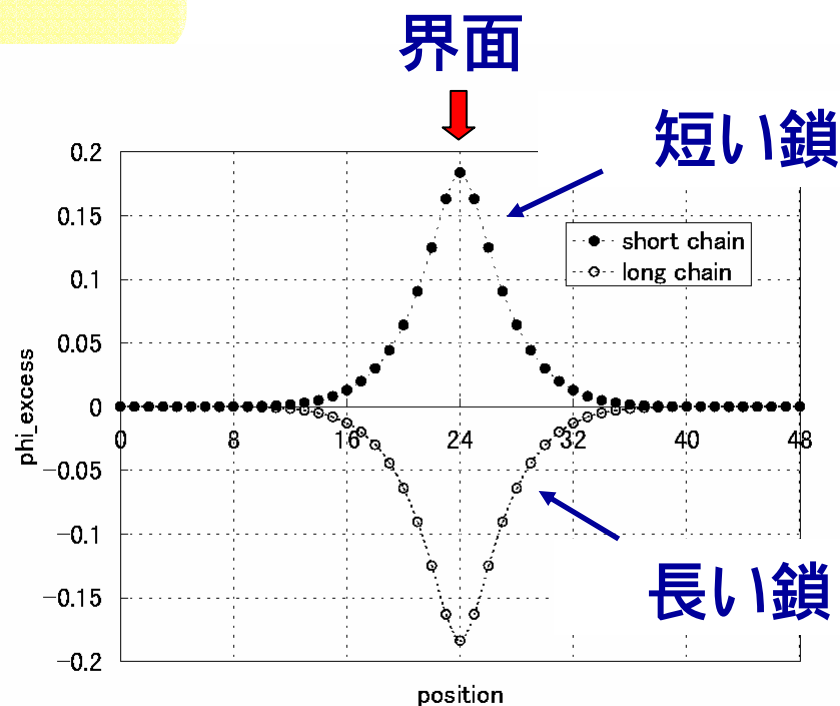
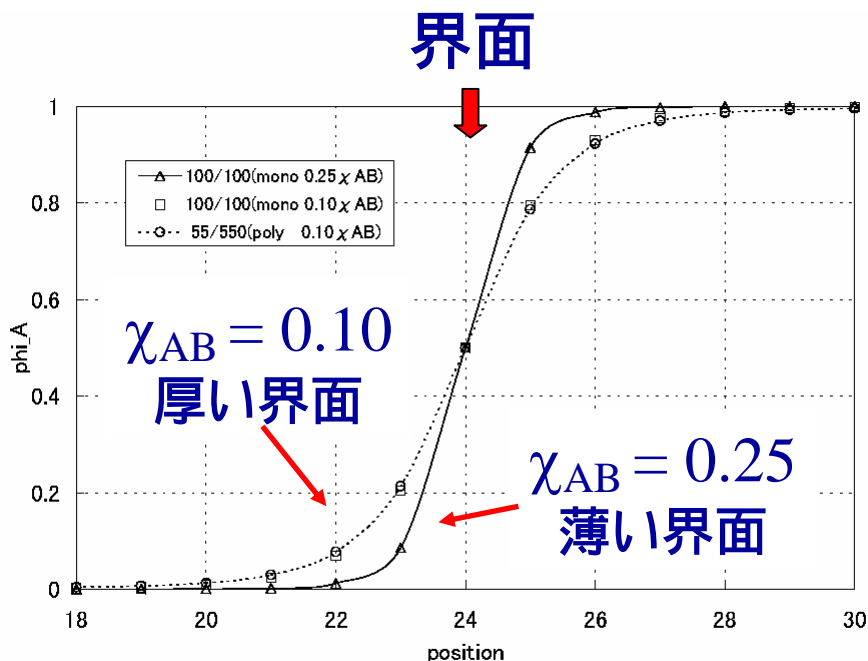
横溝

界面の特性への多分散性の効果

AB高分子ブレンド

単分散 : A100 / B100

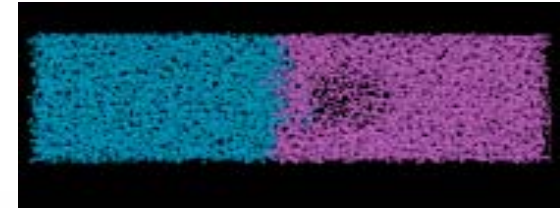
多分散 : A55, 550 / B55, 550



ポリプロピレン/エラストマ レンドの界面強度

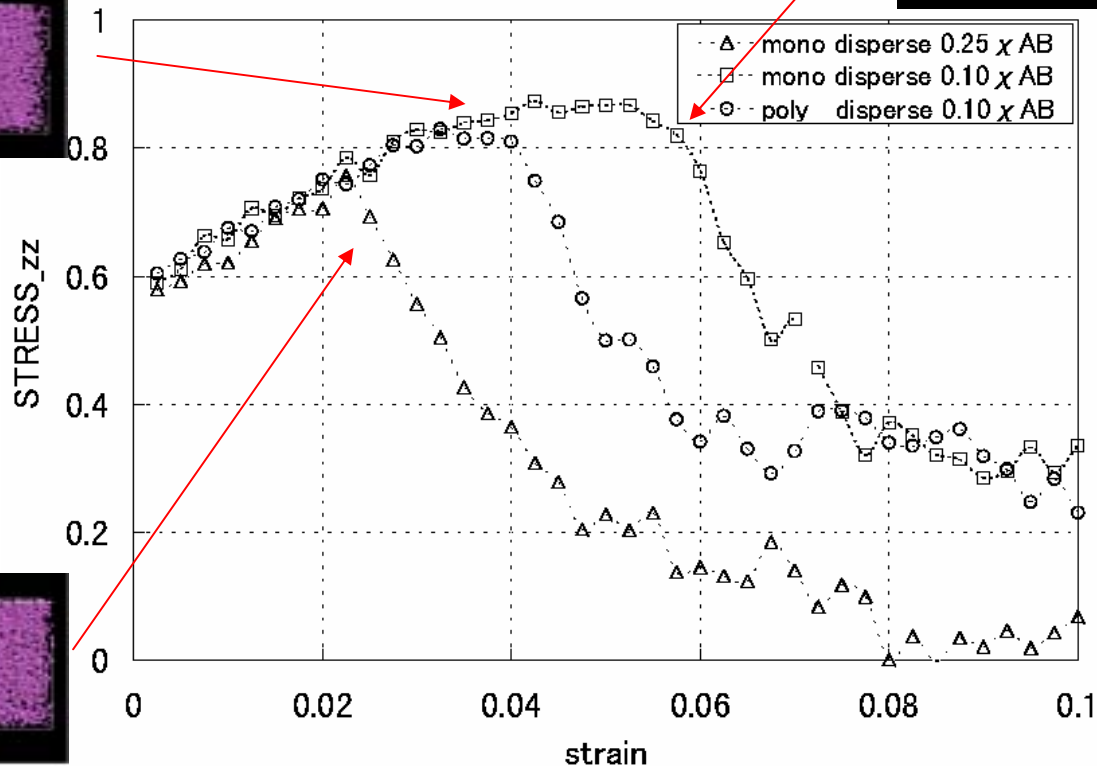
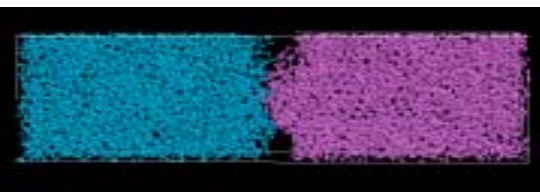
応力-歪み曲線への多分散性の効果

多分散
厚い界面



単分散
厚い界面

単分散
薄い界面



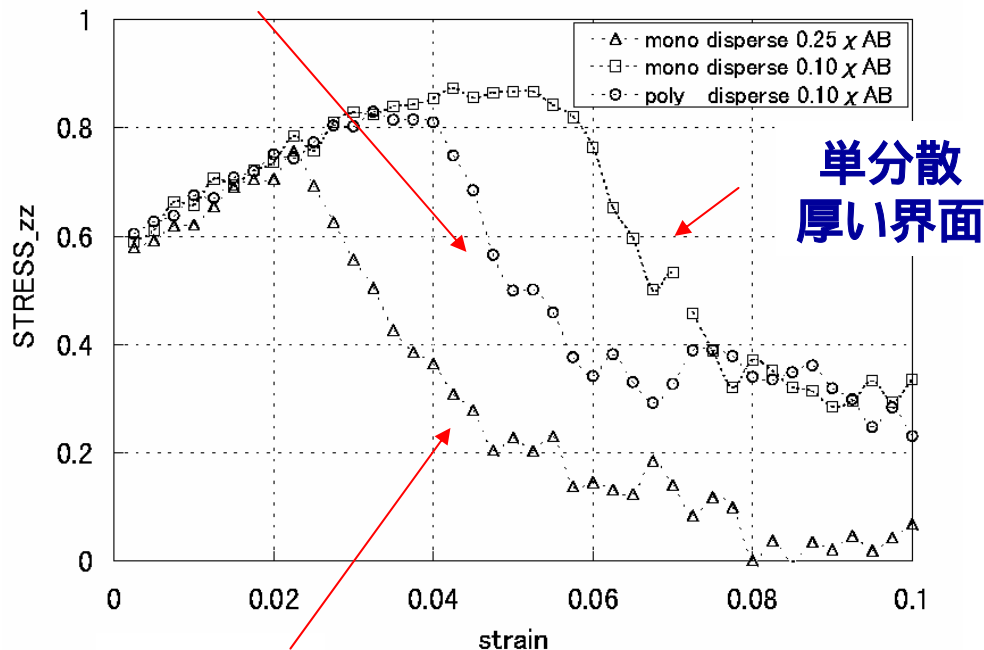
ポリプロピレン/エラストマ ブレンドの界面強度

OCTA

横溝

シミュレーション

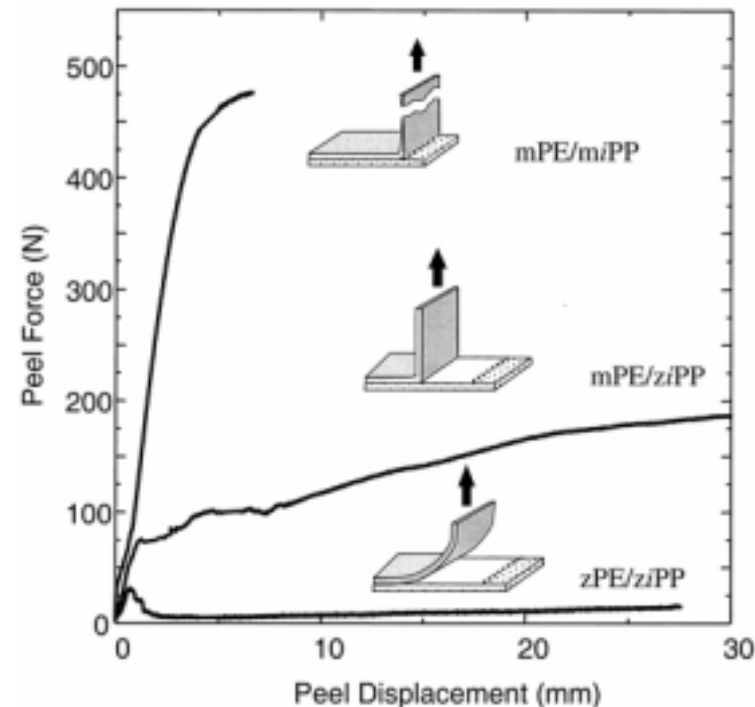
多分散
厚い界面



単分散
厚い界面

単分散
薄い界面

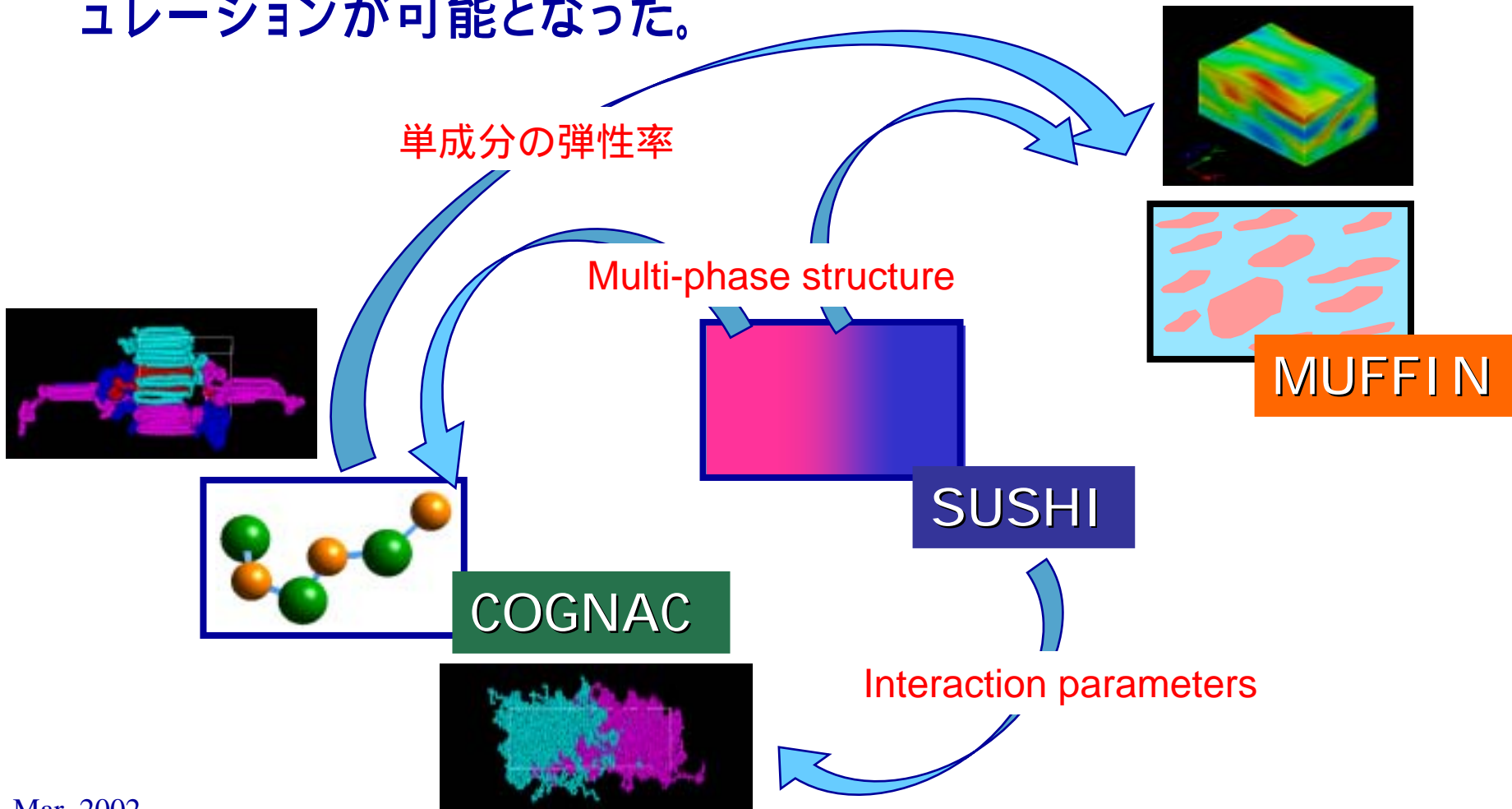
実験



Kimberly A. Chaffin, Frank S. Bates, et al.,
Science 2000, 288, 2187-2190.

結論

プラットフォーム上でシミュレーションプログラムを連携させることで、従来の手法では扱うことが難しかった多くの現象に対するシミュレーションが可能となった。



Acknowledgements:

This work is supported by the national project, which has been entrusted to the Japan Chemical Innovation Institute (JCII) by the New Energy and Industrial Technology Development Organization (NEDO) under METI's Program for the Scientific Technology Development for Industries that Creates New Industries.

End