

PLATFORM for DESIGNING HIGH FUNCTIONAL MATERIALS

高機能材料設計プラットフォーム



NEDO

New Energy and Industrial Technology
Development Organization (NEDO)
Key Technology Development Department

研究開発概要

Introduction

1. 研究開発の背景とねらい

高分子材料は、その軽量性、成形加工性、透明性等の点から構造物や輸送 機器等の構造物をはじめ、電気・電子情報産業における光電子基礎素材等としても大きな期待を集めていると同時に、廃棄、リサイクル等の課題の解決にも寄与できることが求められています。

しかし、高分子材料はその構成成分や分子構造の多様性から、要求されている機能を発揮する材料候補が膨大な数にのぼり、最適な物質設計は困難を極めている。現状においては、こうした材料の開発は、多くの試行錯誤的実験の繰り返しにより行われているのが実状であり、今後ますます高度化・複雑化していく材料開発には、十分対応ができない状況となってきています。こうした現状を打開し、優れた機能を有する高分子材料を創出するためには、新しい計算手法を活用したシミュレーション技術による材料設計の高度化・高速化をはかり、より効率的な材料開発技術を確立することが強く求められています。

本研究開発は、新規材料の創出及び開発の効率化を実現するために、従来困難であった高分子材料の構造や特性の予測を計算機実験によって可能とするための新規シミュレーション技術の実用化を目指した技術開発を行なうことを目的とします。これにより、新製造技術関連分野、航空・宇宙関連分野、新エネルギー・省エネルギー分野等での新規産業の創出に資すると期待されています。

2. 研究開発内容

「高機能材料設計プラットフォーム」においては、以下の2つのサブテーマについて研究開発を行います。

① メソ領域の状態変化を対象としたシミュレーションプログラムの開発

高分子材料を対象に 10^{-9} 秒から 10^5 秒、 10^{-9} mから 10^3 mのメソ領域における材料内部の状態変化を扱うシミュレーションプログラムを開発します。

② ミクロ・メソ・マクロ領域間の“シームレスズーム”シミュレーションを可能にする統合環境（材料設計プラットフォーム）の開発

で開発したメソ領域の状態変化を扱うシミュレーションプログラム及びミクロ・マクロ領域のシミュレーションプログラムを系統的に連携させ、計算機上でミクロ・メソ・マクロ領域を自由に行き来し、高分子材料の構造や特性を予測・再現することのできる統合環境「材料設計プラットフォーム」を開発します。

3. 研究開発期間

本研究開発の実施期間は、平成10年度から平成13年度までの4年間です。

1. Research and Development

Background and Its Purpose

Polymeric materials are regarded as a potential structural material for architectures, transport vehicles, etc. as well as a photoelectron base material in the electric and electronics information industries, due to their lightness, moldability and transparency. At the same time, polymeric materials need to have environmentally friendly properties such as being recyclable, thus reducing waste.

However, designing the most appropriate material is extremely difficult, as the diversity of molecule structure and constituents of polymeric materials means that there is an enormous number of possible materials which possess the required functions. Current research and development methods depend much on trial-and-error, and such methods will not be able to cope with material designing which is becoming more advanced and complicated.

In order to move beyond the current situation and produce polymeric materials with excellent functions, more efficient research and development methods need to be established by advancing and speeding up the design of materials, using simulation technology realized through new calculation methods.

This research and development project aims to develop technologies for utilizing new simulation technology which enables prediction of structures and properties of polymeric materials, which has thus far been difficult, by computer experiments in order to make the creation and the development of new materials more efficient.

It is hoped that this research and development will contribute to the creation of new industries in various fields such as environment protection, aerospace, new energy and energy conservation.

2. Research and Development Content

The project has two research themes:

(1) Development of a simulation program for change of state in the mesoscopic range

A simulation program for change of state within polymeric materials in the mesoscopic range of 10^9 to 10^5 seconds and 10^{-9} to 10^{-3} m, will be developed.

(2) Development of an integrated environment that enables a “seamless zooming” simulation between micro, meso and macroscopic ranges (Platform for designing materials)

By systematically combining micro and macroscopic range simulation programs and the above mesoscopic range simulation program, an integrated environment which will enable free movement between micro, meso and macroscopic regions on computers, and prediction and reproduction of structure and properties of polymeric materials, will be developed.

3. Period of the Research and Development

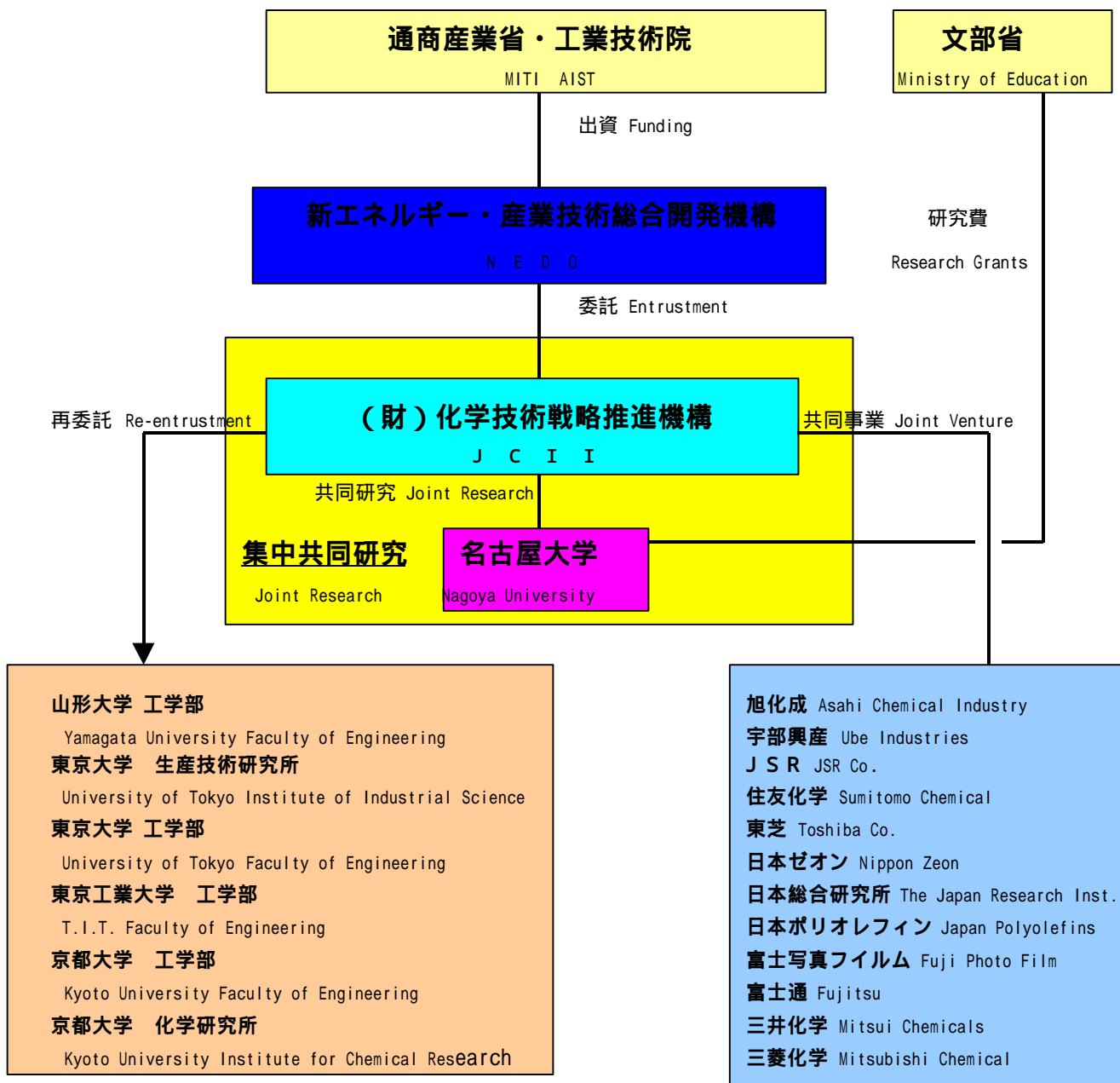
The research and development of the project is four years from FY1998 to FY2001

研究開発の体制

Implementation of Research and Development

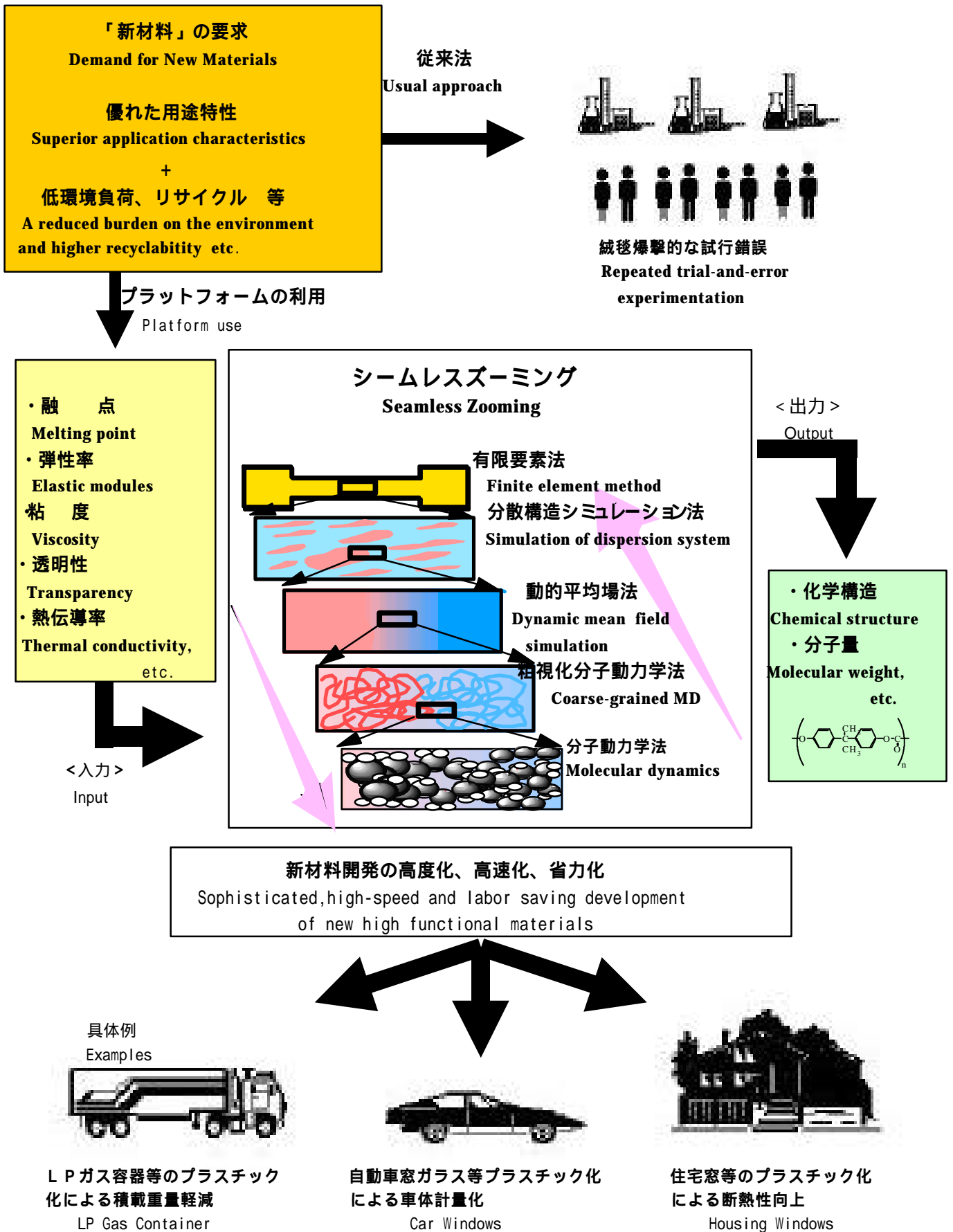
本研究開発は、通商産業省の新規産業創出型産業科学技術研究開発制度により、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) が「財団法人 化学技術戦略推進機構」に委託して実施しています。なお、当該財団は、民間企業並びに大学の研究開発の参画を得て、研究開発責任者 (土井正男名古屋大学教授) の下に集結して、本プロジェクトを実施しています。

The implementation of this research and development has been entrusted to the Japan Chemical Innovation Institute by the New Energy and Industrial Technology Development Organization (NEDO) under MITI's Program for the Scientific Technology Development for Industries that Creates New Industries. The Japan Chemical Innovation Institute is carrying out the research and development with cooperation from private enterprises and academia, under the leadership of the project leader, Dr. Masao Doi of Nagoya University.



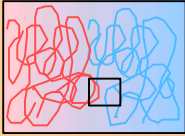
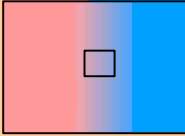
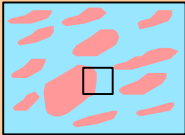
高機能材料設計プラットフォームの概要

Outline of Platform for Designing High Functional Materials



メソ領域シミュレーション法の関連

Relationships Between Meso-simulation Method

手 法 Method	機 能 Functions	入 力 Input	出 力 Output
<p>粗視化分子動力学法 Coarse-grained MD</p> 	<p>長い多くの高分子が絡み合いながら動く様子をみせる Simulate the motion of polymer chains under the condition of entanglement effect</p> <p>$10^{-9} \sim 10^{-3}$ sec $10^{-9} \sim 10^{-7}$ m</p>	<p>高分子鎖の要素特性 長さ 分枝構造 混合比</p> <p>Elementary properties of polymer chain Length of chain Branch structure Mixing ratio</p>	<p>高分子鎖の全体特性 鎖の配向と絡み合い 均一液体の粘弾性 レオロジー特性</p> <p>General properties of polymer chain Entanglement Viscoelasticity Rheological properties</p>
<p>動的平均場法 Dynamic Mean Field</p> 	<p>高分子混合系の作る空間的な構造を見せる Simulate dynamics of spatial structure of polymer mixture</p> <p>$10^{-8} \sim 1$ sec $10^{-8} \sim 10^{-6}$ m</p>	<p>高分子鎖の全体特性 境界条件</p> <p>General properties of polymer chains Boundary conditions</p>	<p>高分子が作る自己組織構造とその界面特性 界面エネルギー 界面の合体、分裂 過程の運動法則</p> <p>Self-organization structure & properties of interface Interfacial energy Velocity of polymer at interface, association and segregation process</p>
<p>分散構造シミュレーション法 Simulation of Dispersio System</p> 	<p>高分子と固体微粒子との混合系や混じり合わない高分子の混合系の作る不均一構造をみせる Simulate heterogeneous structure of polymer and solid-particle mixture</p> <p>$10^{-3} \sim 10^5$ sec $10^{-6} \sim 10^{-3}$ m</p>	<p>界面特性 混合分率 混合条件</p> <p>Properties of interface Mixing ratio Mixing condition</p>	<p>材料の特性 強度 弾性率 熱伝導性</p> <p>材料の内部構造</p> <p>Materials properties Elastic modulus Thermal conductivity</p> <p>Internal structure</p>

粗視化分子動力学シミュレーション法の研究開発

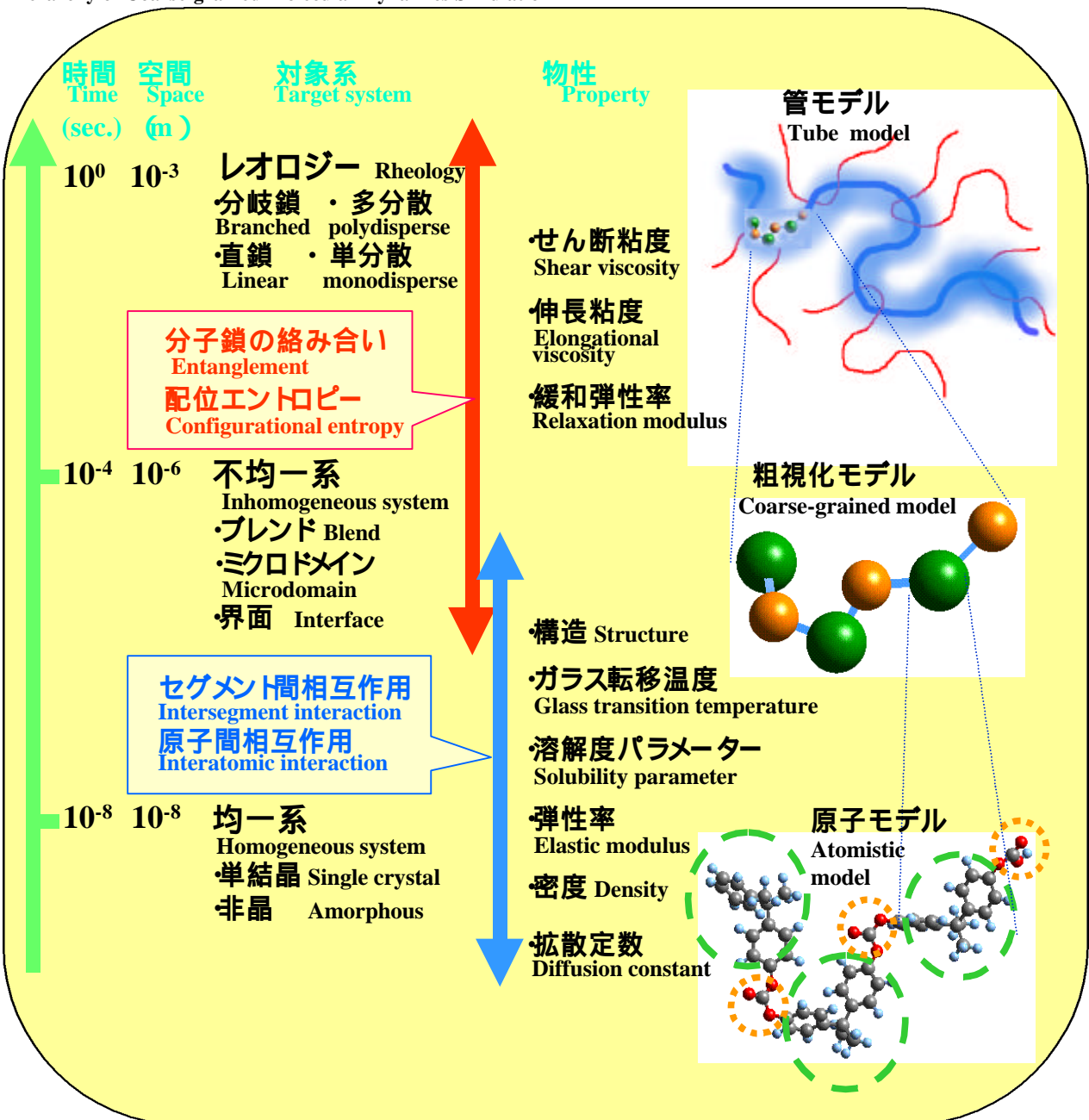
Research and Development of Coarse-grained Molecular Dynamics Simulations

本研究では、目的とする現象・物性に応じた時間・空間スケールまで粗視化した高分子鎖のモデルを構築し、分子動力学シミュレーションにより解析します。また、粗視化モデルのパラメータをよりミクロなレベルのモデルから決定する手法も開発していきます。さらに、多種多様なモデルを扱える汎用性の高い分子動力学シミュレーションエンジンの設計・開発も行います。これらにより、例えば分子鎖の拡散やガラス転移、結晶化などを解析可能にしていきます。また、管モデルと同等のレベルまで粗視化を進めることで、秒のオーダーの長時間緩和が支配的なレオロジーまで予測可能にします。

Various models of polymer chains, coarse-grained in time and space scales, are being developed and analyzed molecular dynamics (MD) simulations of polymeric materials. Methods of determining parameters in coarse-grained models from microscopic models will also be developed. Also under way is the design and development of general-purpose and easily-extensible MD simulators which can handle wide varieties of coarse-grained models. Through such development, it will be possible to research, for example, molecular diffusion, glass transition, crystallization, and rheological properties.

粗視化分子動力学シミュレーションの階層

Hierarchy of Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation



動的平均場シミュレーション法の研究開発

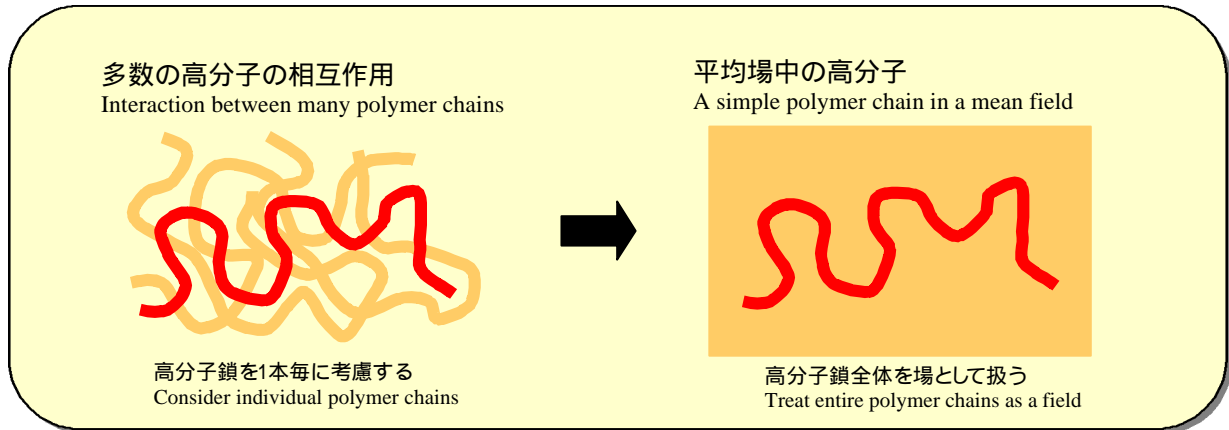
Research and Development of Dynamic Mean Field Simulation Method

動的平均場シミュレーション法は、高分子の複雑な相互作用を「平均場」としてモデル化し、高分子の集合状態の変化・発展を解析して、高分子のメソ領域の構造と物性を予測する事を目的としています。メソ領域は、原子スケールとマクロスケールの中間に位置する領域で、高分子の個々の特徴が、実際の材料物性にどのように関係しているかを解明するために、重要な役割を果たしていると考えられています。

Simulations using the mean field theory aim to predict the structures and properties of polymers at the mesoscopic scale. The method is based on the concentration field approximation for model polymer systems. The mesoscopic scale extends between the atomic scale and the macroscopic scale, and it plays an important role in the analysis of material properties, especially in predicting actual polymer characteristics.

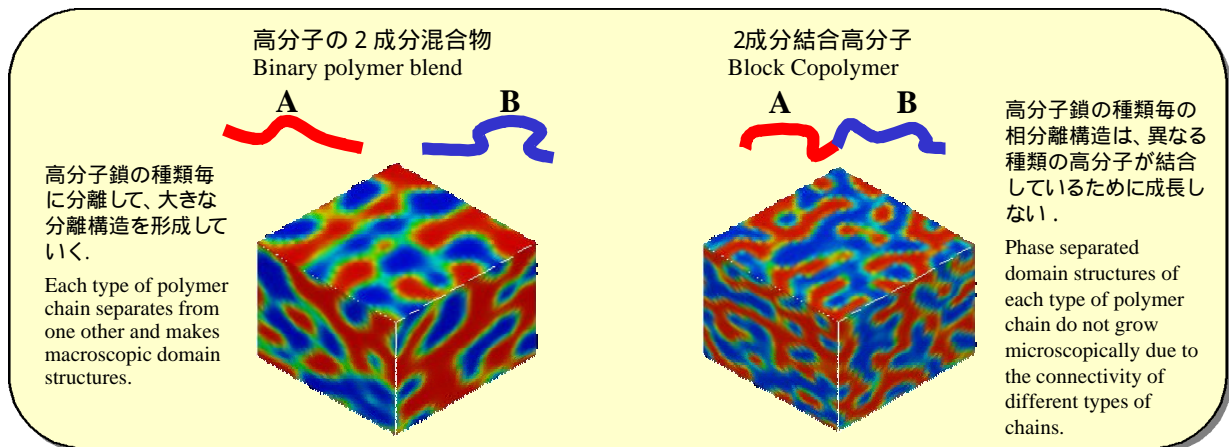
平均場近似の考え方

Concept of Mean Field Approximation



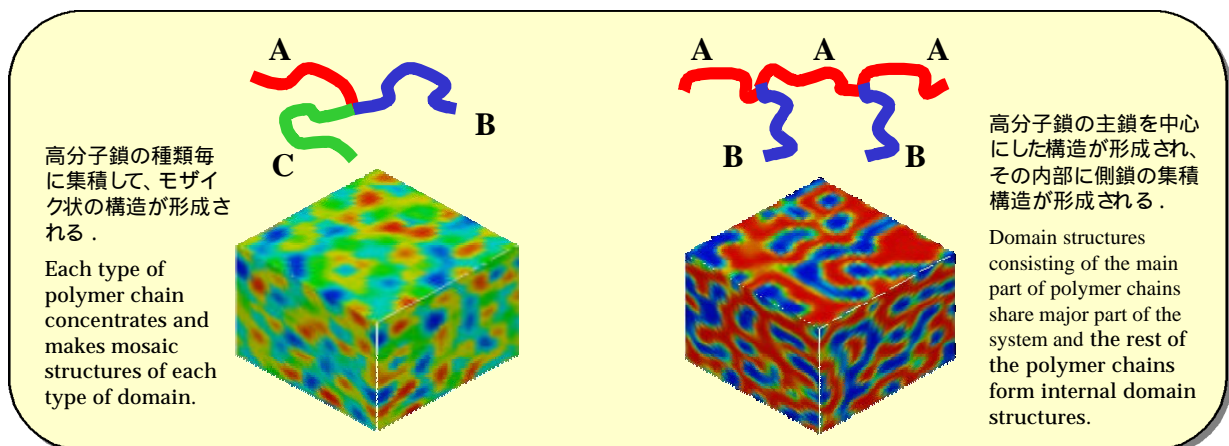
高分子系の相分離構造

Domain Structures of Phase Separated Polymer Systems



結合様式の違いによる構造変化

Dependence of Domain Structures on the Polymer Chain Architecture



分散構造シミュレーション法の研究開発

Research and development of simulations of dispersion system

分散構造シミュレータでは空間的にも時間的にも大きなスケールの高分子系の現象 (空間スケール $0.1 \mu\text{m}$ 程度から $100 \mu\text{m}$ 程度、時間スケールは $\sim\text{sec}$ のオーダー) を取り扱う。そのような大きなスケールの高分子系の問題を解くために連続体モデルで表現された粗視化モデルを用いる。

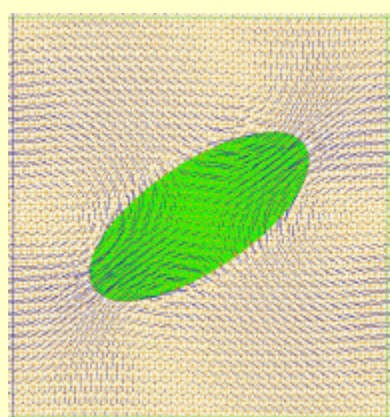
Lagrangian-Eulerian描像や Euler 描像により有限要素法や有限差分法を用いて、主に以下のような問題を解くためのシミュレータを構築することを目標とする。

“Simulator of Dispersion System” deals with large scale spatio-temporal behaviors of polymeric systems ($\sim 0.1 \mu\text{m}$ to $\sim 100 \mu\text{m}$, $\sim \text{sec}$). In order to solve such large scale problems of polymeric systems, we use coarse-grained models in which the system can be treated as a continuum system.

We aim to construct simulators to solve following problems using the finite element or the finite difference method in the Lagrangian-Eulerian or Eulerian pictures.

1. 多成分液滴分散系のダイナミクス

Dynamics of multi-component droplet systems

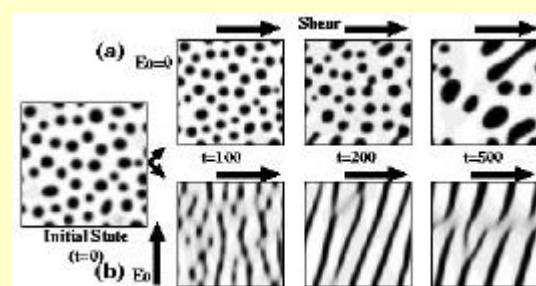


Step Shear
を印加した後の
液滴のまわりの流れ場

Velocity
field around
a single
droplet under
a shear flow

2. 外場下での高分子混合系のドメイン構造のダイナミクス

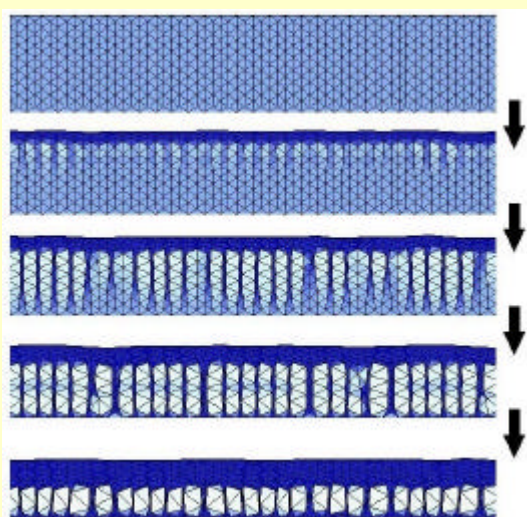
Dynamics of phase separated domain of polymer mixture under external fields



電気粘性流体にずり流動を印加した後の
(a)無電場下(b)電場下での分散構造の時間発展
Time evolution of domain structures of an electric rheological fluid in (a) no electric field (b) an imposed electric field under a shear flow.

3. ゲルの膨潤と収縮過程のダイナミクス

Swelling and shrinking dynamics of gels



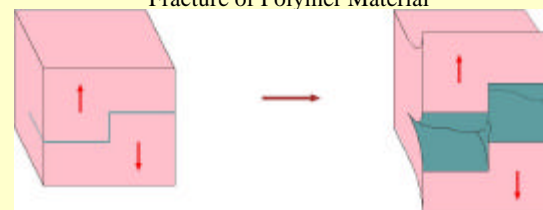
ゲルの収縮過程における膨潤相 (薄色)・収縮相 (濃色) 相分離によるバンブーパターン形成の様子
The bamboo-like shrinking pattern of gel due to phase separation into swollen and shrunken state.

4. 高分子材料の破壊

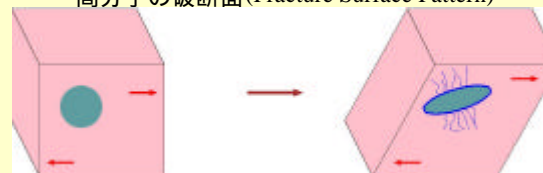
Fracture of polymeric materials

高分子材料の破壊特性

Fracture of Polymer Material



高分子の破断面 (Fracture Surface Pattern)



クレーズ及びキャビテーション (Craze & Cavitation)

5. 濡れ現象や溶媒の蒸発と関係した相分離の問題

Phase separation dynamics related to wetting and/evaporation phenomena

プラットフォームの研究開発

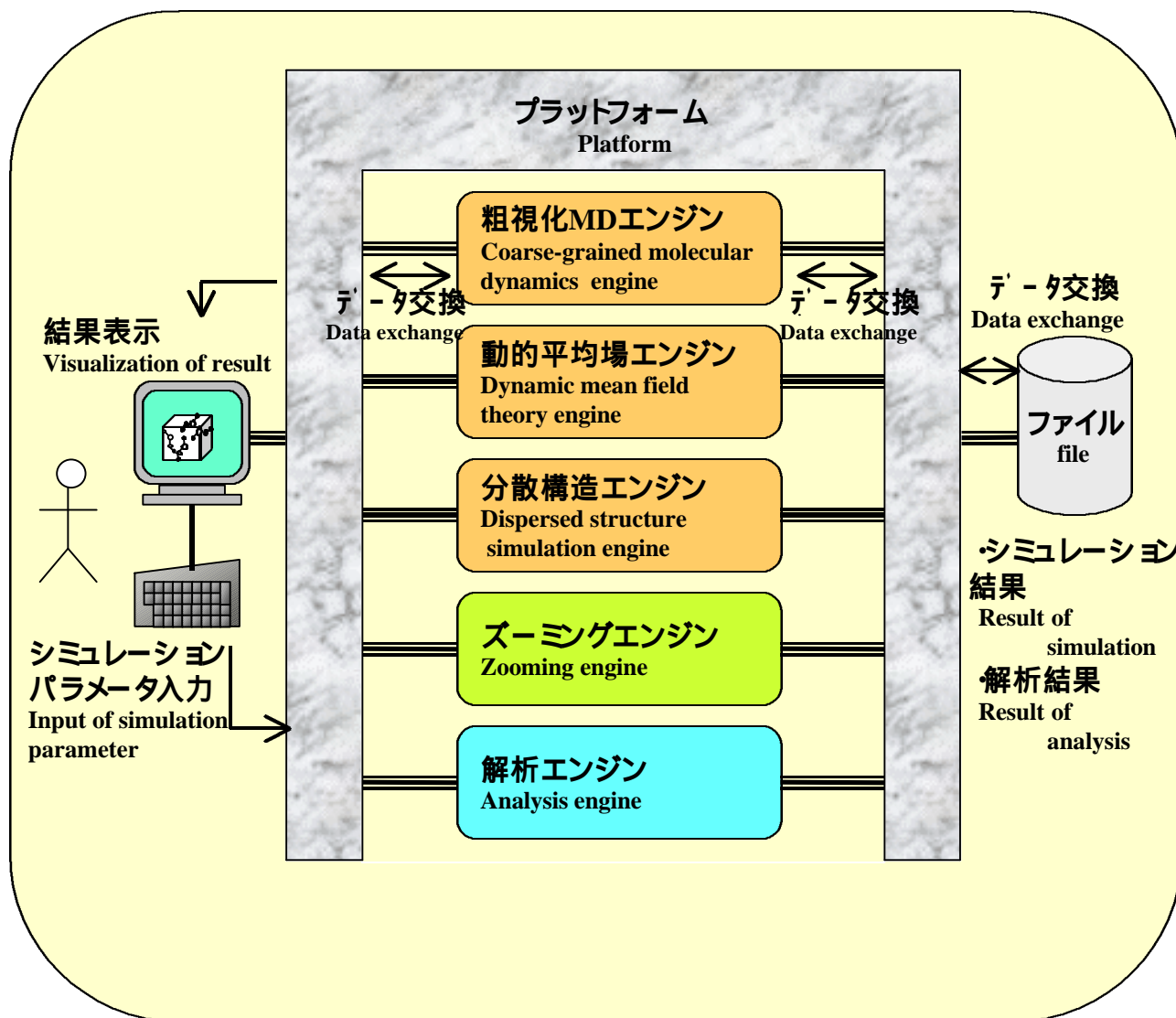
Platform Development

本研究では、メソ領域のシミュレーションを行うエンジン、シミュレーションエンジンを接続するズームエンジン、シミュレーションの結果を解析する解析エンジン等のエンジン群を、その上で統合的に動作させるプラットフォームを研究開発します。プラットフォームは、エンジンの実行に必要なデータを準備し、エンジンを実行させ、エンジンのシミュレーション結果データをディスプレイに表示し、ディスクファイルに書き込みます。プラットフォームは最終的には、材料開発研究者が、様々なスケールで、統合的に物質のシミュレーションを実行し、物質の構造と物理的性能の関係についての、理解を深めることを、支援することにより、材料開発研究者が新規のより良い高機能材料を、設計することを目指しています。

A platform on which cooperatively engines for mesoscopic simulations, zooming engines for connecting simulation engines, and analysis engines for analyzing the results of simulations can be operated in an integrated manner are being developed. The platform prepares the input data of the engines, operates the engines and displays the resulting data and records the data on disk files. We are aiming at providing researchers a platform that will help simulate materials at various scales and understand the relations between structures and physical properties. This will guide the researchers to design new and better high functional materials.

プラットフォーム概要

Outline of the Platform



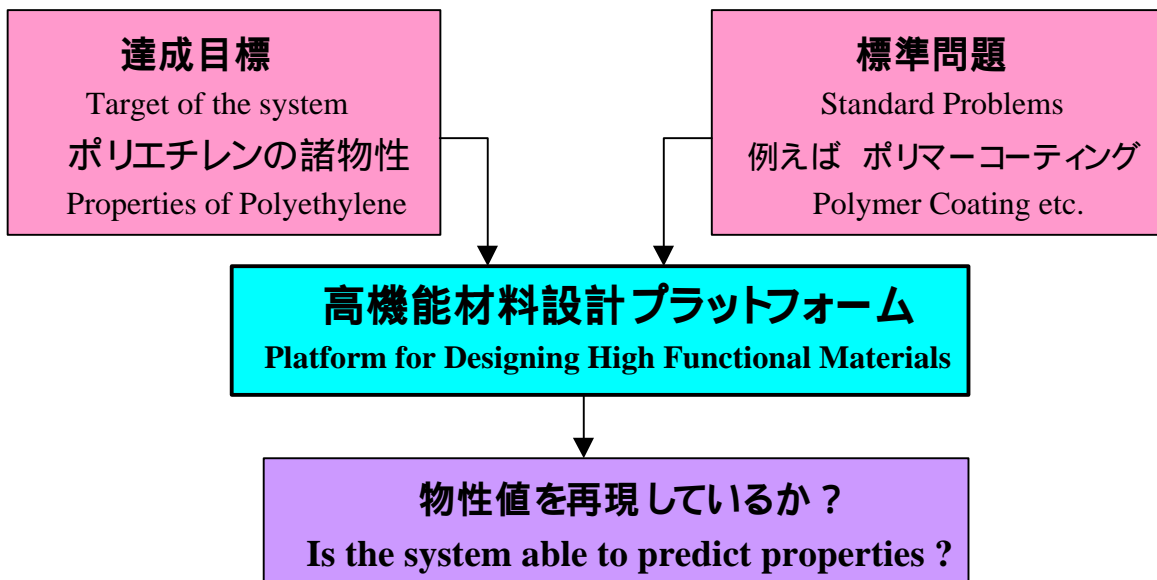
検証研究

Verification Research

高分子材料の構造や特性に関するシミュレーション結果の再現性を検証します。

ひとつは「基本計画」にあるポリエチレンの成型加工性（伸張粘度、ずり粘度）、熱物性（融点）、力学物性及び光学物性を高精度で予測します。
また、企業が共通に関心のあるテーマを「標準問題」に設定し、シミュレーション及びプラットフォームの有用性を検証します。

The repeatability of the results of simulations on structures and the characteristics of polymeric materials will be verified. The moldability (elongational viscosity and shear viscosity), thermal properties (melting point), mechanical properties (elastic modules) and optical properties (transparency) of polyethylene accurately, which are considered to be the targets of the system as a whole, will be predicted. We will also designate some “standard problems”, of interest to many chemical companies, and verify the effectiveness of our simulation programs and platform.



成果の活用分野

Application Areas of Project Results

高機能材料設計プラットフォームは新規材料の創出及び開発の効率化を実現するために、従来困難であった高分子材料の構造や特性の予測を計算機実験によって可能とする新規シミュレーション技術の実用化を目指しており、これにより、新製造技術関連分野、環境関連分野、航空・宇宙関連分野、新エネルギー・省エネルギー分野等での新規産業の創造に資すると期待されています。

This project aims at overcoming previous difficulties and development technology for the practical application of advanced simulation technology to predict structures and the characteristics of polymeric materials by computer simulation. In this way, this project will contribute to the creation of new industries in fields related to new manufacturing technologies, environment preservation, aerospace, new energy and energy saving and so on.

