

SPring-8・地球シミュレータを利用した次世代タイヤ材料の研究開発

内藤正登*1,4, 岸本浩通*1, 吉永寛*1, 萩田克美*2, 荒井隆*2,
篠原佑也*3, 雨宮慶幸*3, 富田佳宏*4, 数納広哉*5, 新宮哲*5

*1 SRI 研究開発 (株) , *2 防衛大応物, *3 東大院新領域, *4 神戸大院工, *5 海洋研究開発機構

m-naito.az@srigroup.co.jp

概要： 環境性能（低燃費性）と安全性能（高グリップ性）を高次元で両立させた次世代タイヤ材料を開発するためには、ナノ粒子（フィラー）充填によってゴム中に形成される、ナノからミクロンスケールまでの階層構造が生み出す『補強効果』を明らかにする必要がある。本研究は、SPring-8の時分割二次元極小角・小角 X 線散乱（2D-USAXS-SAXS）データをもとに、地球シミュレータ上で、二次元パターンリバースモンテカルロ法（2Dp-RMC）によりフィラー三次元構造モデルを構築し、次いで、求めた構造情報を用いて大規模な非線形有限要素（FEM）シミュレーションを行うことにより、フィラー充填ゴムの内部の階層的なフィラー凝集構造および凝集構造の変形挙動が、ゴムの物性に及ぼす影響を検討した。

1 はじめに

近年、地球温暖化・石油資源の枯渇といった地球環境問題が取り上げられる中、自動車業界においては世界的な競争のもと、ハイブリッドカー、バイオディーゼルやバイオエタノールなどに代表される技術の開発が活発に進められている。一方、タイヤは転動時や制動時（グリップ）にエネルギーロスを発生させる事によって自動車の快適性や安全性を高めているが、そのエネルギーロスの割合は燃費の約20%にも達しCO₂排出量およびエネルギー問題に関与している。その為、背反性能を示す安全性能（高グリップ性）と環境性能（低燃費性）を高次元で両立させるタイヤ材料を開発することが急務となっている。このような特性は、ゴムにカーボンやシリカなどのナノ粒子（フィラー）を充填した際に発現する『補強効果』、即ち強度や繰り返し変形時のヒステリシスロスの増大メカニズムに密接に関係している。『補強効果』の起源はゴム中に形成される階層的なフィラー凝集構造および凝集構造の変化と関係していると考えられている。我々は、SPring-8と地球シミュレータを相互利用し、フィラー充填ゴムの『補強効果』のメカニズム解析に取り組んだので報告する。

2 SPring-8 2D-USAXS-SAXS 実験とリバースモンテカルロ法

2D-USAXS および SAXS 実験は、SPring-8 の BL20XU(カメラ長 160.5 m)と BL40B2(カメラ長約 3 m)の二つのビームラインを利用することによ

り、5 μm–60 Å の大きさに対応する二次元散乱像を得ることに初めて成功した^{[1],[2]}。試料は、単分散粒径シリカを体積分率 $\phi=0.2$ 配合したゴムを用い、自動延伸機を用いて延伸/除荷過程における散乱像を取得した（図 1）。二次元散乱像からゴム

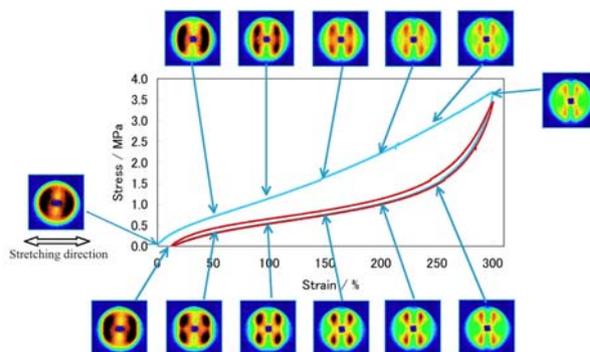


図 1 2D-USAXS 像と引張物性の同時計測結果

中のフィラー三次元構造モデルを構築するために、2Dp-RMC の開発を行った。従来の RMC 計算は、液体金属など等方的な散乱像を示す材料を対象とし、一次元散乱プロファイルを計算すれば良い。しかし、異方的な散乱像を計算するには、大規模計算が必要となる。我々は、世界最高レベルの計算能力を有する地球シミュレータを用いて、二次元散乱像に拡張した 2Dp-RMC を世界で初めて開発した。実測および RMC 計算から求めた構造因子 $S(q_x, q_y)$ を図 2 に示す。図に示すように、ほぼ完全に一致している。また、RMC 計算から得られたフィラー三次元構造モデルを図 3 に示す。このように、延伸過程におけるフィラー構造の変化を二次元散乱像から可視化することに初めて成功した。

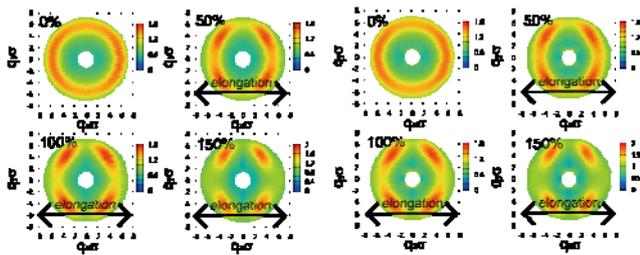


図2 (左) 実測の $S(q_x, q_y)$, (右) RMC 計算による $S(q_x, q_y)$

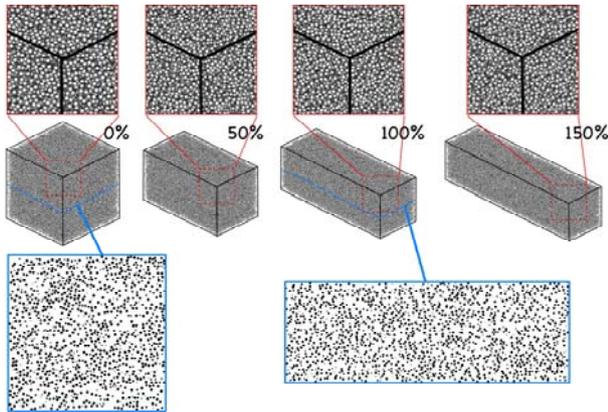


図3 RMC 計算から求めたフィラー三次元構造モデル

3 大規模有限要素シミュレーション

次に、ゴムが変形を受けた際、内部のフィラー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に、2Dp-RMC 計算によって決定した三次元構造を用いて、大規模非線形 FEM シミュレーションを行った。数百を超える多数のフィラー粒子を含んだゴムの変形挙動を、高解像度でシミュレートするためには、大規模並列計算が必要であり、汎用 FEM プログラムでは実現困難である。そこで今回、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトで開発された構造解析プログラム FrontSTR をベースに、ゴム材料の大規模並列計算を可能とした Advance/FrontSTR/Rubber を新たに開発し、地球シミュレータ上で計算を実行した。シミュレーションモデルは、2Dp-RMC 計算によって決定した三次元構造を用いて作成した (図4)。ゴム部を分子鎖網目モデルに基づく粘弾性モデルで表現し、フィラー部はゴム部に比べ十分固い弾性体として扱った³⁾。伸張時の内部のストレッチ分布を図5に示す。伸張方向に近接するフィラー間で大きなストレッチが生じ、この変形集中により局所的に応力が増大し、巨視的な剛性増大を促している。このとき、図中、実線で囲った部分の複数の粒子は、伸張時において、周囲が大きく変形しているにもかかわらず凝集構造を維持

している。これは、フィラーの三次元配置に依存しており、フィラーの『補強効果』発現メカニズムの一因になっていることが分かった。

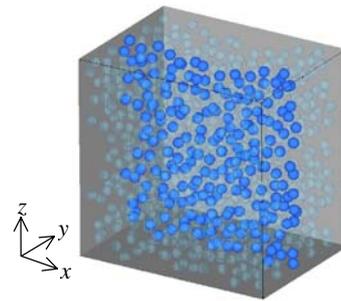


図4 シミュレーションモデル

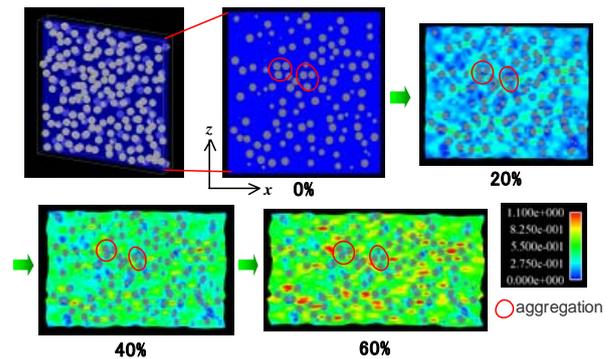


図5 引張り方向ストレッチ分布

4 まとめ

本報は SPring-8 と地球シミュレータを相互利用して、フィラー充填ゴムの『補強効果』発現メカニズムを検討した内容の一部であり、さらに詳細な解析を行うことで新材料創出のための知見を得ようとしている。今後、次世代スーパーコンピュータおよび SPring-8 を利用することで、現在は扱えない分子レベルからの解析が可能になると考え、その取り組みに向けた準備を行っている。

本研究は文部科学省戦略活用プログラムのもとで行われた。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] Y. Shinohara, et Al., "Real Time Observation of Filler Aggregate Structure Using Two-Dimensional Ultra-Small-Angle X-ray Scattering" SPring-8 Research Frontiers 2004, 88-89
- [2] Y. Shinohara, et al., "Characterization of two-dimensional ultra-small-angle X-ray scattering apparatus for application to rubber filled with spherical silica under elongation", J. Appl. Cryst. (2007)
- [3] 東, 内藤, 富田, 「ゴムのひずみ速度依存性構成式とカーボンブラック充填ゴムの変形挙動シミュレーション」日本機械学会論文集 73, 729, p.558, 2007