

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5530480号
(P5530480)

(45) 発行日 平成26年6月25日(2014.6.25)

(24) 登録日 平成26年4月25日(2014.4.25)

(51) Int.Cl.

F I

GO 1 N 33/44 (2006.01)

GO 1 N 33/44

GO 6 F 19/00 (2011.01)

GO 6 F 19/00 1 1 0

請求項の数 3 (全 16 頁)

(21) 出願番号 特願2012-151705 (P2012-151705)
 (22) 出願日 平成24年7月5日(2012.7.5)
 (65) 公開番号 特開2014-16163 (P2014-16163A)
 (43) 公開日 平成26年1月30日(2014.1.30)
 審査請求日 平成25年12月19日(2013.12.19)

(73) 特許権者 000183233
 住友ゴム工業株式会社
 兵庫県神戸市中央区脇浜町3丁目6番9号
 (74) 代理人 100104134
 弁理士 住友 慎太郎
 (72) 発明者 上野 真一
 兵庫県神戸市中央区脇浜町3丁目6番9号
 住友ゴム工業株式会社内

審査官 赤坂 祐樹

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 高分子材料のシミュレーション方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

フィラーと、該フィラーに対する親和性を高める変性剤が配合された高分子材料との反応を、コンピュータを用いて評価するためのシミュレーション方法であって、

前記コンピュータに、前記高分子材料を少なくとも一つのポリマー粒子でモデル化したポリマーモデルと、前記変性剤を少なくとも一つの変性基粒子でモデル化した変性剤モデルとを含む変性ポリマーモデルを複数個設定する工程、

前記ポリマー粒子間、前記変性基粒子間及び前記ポリマー粒子と前記変性基粒子との間に、粒子間の距離が、予め定められたカットオフ距離以下になったときに斥力が生じる斥力ポテンシャルを定義する工程、

前記コンピュータに、互いに向き合う一对の面を少なくとも含む仮想空間を設定する工程、

前記フィラーを、前記仮想空間の前記一对の面でモデル化した一对のフィラーモデルを設定する工程、

前記フィラーモデルと前記ポリマー粒子との間及び前記フィラーモデルと前記変性基粒子との間に、互いの距離が、予め定められたカットオフ距離以下になったときに、引力及び斥力が生じる相互ポテンシャルを定義する相互ポテンシャル設定工程、

前記コンピュータが、前記フィラーモデルと、前記仮想空間に配置された前記変性ポリマーモデルとを用いて分子動力学計算を行うシミュレーション工程、並びに、

前記シミュレーション工程の結果から、前記変性基粒子のフィラーに対する親和性を評

10

20

価する評価工程とを含み、

前記相互ポテンシャル設定工程は、前記変性基粒子と前記フィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離が、前記ポリマー粒子と前記フィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離よりも大に設定され、

前記シミュレーション工程は、前記フィラーモデルから前記仮想空間内に距離 L_1 を隔てたフィラー近接領域内に、変性基粒子が進入した個数を単位ステップ毎に取得する工程を含み、

前記評価工程は、前記コンピュータが、少なくとも 2 つの単位ステップ毎に、前記フィラー近接領域に進入した前記変性基粒子の個数の平均値を求める工程を含むことを特徴とする高分子材料のシミュレーション方法。

10

【請求項 2】

前記フィラー近接領域に進入した前記変性基粒子の個数の平均値は、5～100 万の単位ステップ毎に求められる請求項 1 に記載の高分子材料のシミュレーション方法。

【請求項 3】

前記変性ポリマーモデルは、前記ポリマー粒子間及び前記ポリマー粒子と前記変性基粒子との間に結合鎖が定義され、

前記結合鎖は、前記斥力ポテンシャル及び前記相互ポテンシャルよりも大きな引力が定義された結合ポテンシャルが定義される請求項 1 又は 2 に記載の高分子材料のシミュレーション方法。

20

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、フィラーと、変性剤が配合された高分子材料との親和性を正確に評価しうる高分子材料のシミュレーション方法に関する。

【背景技術】

【0002】

一般に、高分子材料中に配合されるフィラーの分散性は、ゴムの強度に大きな影響を与えることが知られている。このようなフィラーの分散性を向上させるために、高分子材料中に、フィラーに対する親和性を高める変性剤が配合される。

30

【0003】

近年、ゴム配合の開発のために、フィラーの分散性を、コンピュータを用いて評価するためのシミュレーション方法（数値計算）が種々提案されている。この種のシミュレーション方法では、予め定めた仮想空間に、フィラーをモデル化したフィラーモデルと、変性剤が配合された高分子材料をモデル化した変性ポリマーモデルとを配置して、分子動力学（Molecular Dynamics：MD）計算による緩和計算が行われる。また、変性ポリマーモデルには、例えば、変性剤をモデル化した変性基粒子が含まれる。そして、シミュレーションの結果から、フィラーモデルと変性ポリマーモデルの変性基粒子との親和性（近づきやすさ）が評価される。関連する技術としては、次のものがある。

【先行技術文献】

40

【特許文献】

【0004】

【特許文献 1】特開 2006-64658 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかしながら、従来のシミュレーション方法では、フィラーモデルと変性ポリマーモデルの変性基粒子との親和性を評価する方法が確立されていなかった。従って、従来の方法では、オペレータによる試行錯誤によって親和性が評価されていたため、多くの時間を要していた。

50

【0006】

また、フィラーモデルと、変性ポリマーモデルの変性基粒子との間には、引力及び斥力が生じるポテンシャルが夫々設定されるため、分子動力学計算において、フィラーモデル及び変性基粒子が接近と離間とを繰り返す。これにより、シミュレーションに多くの時間を要するため、計算コストが増大するという問題があった。また、フィラーモデルと変性基粒子との距離が、単位ステップ毎にバラつくため、親和性を正確に評価するのが難しいという問題があった。

【0007】

本発明は、以上のような実状に鑑み案出されたもので、フィラーモデルから仮想空間内に距離 L_1 を隔てたフィラー近接領域内に、変性ポリマーモデルの変性基粒子が進入した個数を単位ステップ毎に取得する工程と、少なくとも2つの単位ステップ毎に、フィラー近接領域に進入した変性基粒子の個数の平均値を求める工程とを含むことを基本として、フィラーと、変性剤が配合された高分子材料との親和性を短時間で正確に評価しうる高分子材料のシミュレーション方法を提供することを主たる目的としている。

【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明のうち請求項1記載の発明は、フィラーと、該フィラーに対する親和性を高める変性剤が配合された高分子材料との反応を、コンピュータを用いて評価するためのシミュレーション方法であって、前記コンピュータに、前記高分子材料を少なくとも一つのポリマー粒子でモデル化したポリマーモデルと、前記変性剤を少なくとも一つの変性基粒子でモデル化した変性剤モデルとを含む変性ポリマーモデルを複数個設定する工程、前記ポリマー粒子間、前記変性基粒子間及び前記ポリマー粒子と前記変性基粒子との間に、粒子間の距離が、予め定められたカットオフ距離以下になったときに斥力が生じる斥力ポテンシャルを定義する工程、前記コンピュータに、互いに向き合う一對の面を少なくとも含む仮想空間を設定する工程、前記フィラーを、前記仮想空間の前記一對の面でモデル化した一對のフィラーモデルを設定する工程、前記フィラーモデルと前記ポリマー粒子との間及び前記フィラーモデルと前記変性基粒子との間に、互いの距離が、予め定められたカットオフ距離以下になったときに、引力及び斥力が生じる相互ポテンシャルを定義する相互ポテンシャル設定工程、前記コンピュータが、前記フィラーモデルと、前記仮想空間に配置された前記変性ポリマーモデルとを用いて分子動力学計算を行うシミュレーション工程、並びに、前記シミュレーション工程の結果から、前記変性基粒子のフィラーに対する親和性を評価する評価工程とを含み、前記相互ポテンシャル設定工程は、前記変性基粒子と前記フィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離が、前記ポリマー粒子と前記フィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離よりも大に設定され、前記シミュレーション工程は、前記フィラーモデルから前記仮想空間内に距離 L_1 を隔てたフィラー近接領域内に、変性基粒子が進入した個数を単位ステップ毎に取得する工程を含み、前記評価工程は、前記コンピュータが、少なくとも2つの単位ステップ毎に、前記フィラー近接領域に進入した前記変性基粒子の個数の平均値を求める工程を含むことを特徴とする。

【0009】

また、請求項2記載の発明は、前記フィラー近接領域に進入した前記変性基粒子の個数の平均値は、5～100万の単位ステップ毎に求められる請求項1に記載の高分子材料のシミュレーション方法である。

【0010】

また、請求項3記載の発明は、前記変性ポリマーモデルは、前記ポリマー粒子間及び前記ポリマー粒子と前記変性基粒子との間に結合鎖が定義され、前記結合鎖は、前記斥力ポテンシャル及び前記相互ポテンシャルよりも大きな引力が定義された結合ポテンシャルが定義される請求項1又は2に記載の高分子材料のシミュレーション方法である。

【発明の効果】

【0011】

本発明の高分子材料のシミュレーション方法は、コンピュータに、高分子材料を少なくとも一つのポリマー粒子でモデル化したポリマーモデルと、変性剤を少なくとも一つの変性基粒子でモデル化した変性剤モデルとを含む変性ポリマーモデルを設定する工程と、フィラーを、仮想空間の一对の面でモデル化した一对のフィラーモデルを設定する工程と、コンピュータが、フィラーモデルと、仮想空間に配置された変性ポリマーモデルとを用いて分子動力学計算を行うシミュレーション工程を含む。

【0012】

また、変性基粒子とフィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離は、ポリマー粒子とフィラーモデルとの間に定義される相互ポテンシャルの強度及びカットオフ距離よりも大に設定される。

10

【0013】

これにより、本発明では、仮想空間において、フィラーモデルを一对の面に固定させた状態で、変性ポリマーモデルのみを分散させることができる。従って、本発明では、フィラーモデルと、変性ポリマーモデルとの緩和計算を短時間で行うことができる。しかも、フィラーモデルは、変性ポリマーモデルに対して、相互ポテンシャルを面全体で作用させることができるため、変性ポリマーモデルの緩和計算を効率的に短時間で行うことができる。

【0014】

さらに、本発明のシミュレーション方法では、フィラーモデルから仮想空間内に距離L1を隔てたフィラー近接領域内に、変性基粒子が進入した個数を単位ステップ毎に取得する工程と、少なくとも2つの単位ステップ毎に、フィラー近接領域に進入した変性基粒子の個数の平均値を求める工程とを含む。

20

【0015】

これにより、本発明のシミュレーション方法では、フィラー近接領域内に進入した変性基粒子の個数が単位ステップ毎にバラついていても、少なくとも2つの単位ステップ毎に、該変性基粒子の個数の傾向（平均）を把握することができる。従って、本発明のシミュレーション方法は、フィラーと、変性剤が配合された高分子材料との親和性を正確に評価することができる。

【図面の簡単な説明】

【0016】

30

【図1】本実施形態のシミュレーション方法を実行するコンピュータ装置の斜視図である。

【図2】本実施形態のシミュレーション方法のフローチャートである。

【図3】変性ポリマーモデルを設定する工程のフローチャートである。

【図4】変性ポリマーモデルの概念図である。

【図5】一对の変性ポリマーモデルの部分拡大図である。

【図6】仮想空間の概念斜視図である。

【図7】フィラーモデルと変性ポリマーモデルとの間の相互ポテンシャルを説明する概念図である。

【図8】複数の変性ポリマーモデルが配置された仮想空間を示す概念図である。

40

【図9】本実施形態の緩和計算後の仮想空間を示す概念図である。

【図10】シミュレーション工程のフローチャートである。

【図11】(a)は、フィラー近接領域内に進入した変性基粒子の個数と、単位ステップとの関係を示すグラフ、(b)は、(a)のグラフを2つの単位ステップ毎に変性基粒子の個数の平均値を求めたグラフである。

【発明を実施するための形態】

【0017】

以下、本発明の実施の一形態が図面に基づき説明される。

本実施形態の高分子材料のシミュレーション方法（以下、単に「シミュレーション方法」ということがある）は、フィラーと、該フィラーに対する親和性を高める変性剤が配合

50

された高分子材料との反応を、コンピュータ 1 を用いて評価するためのものである。

【0018】

前記フィラーとしては、例えば、カーボンブラック、シリカ又はアルミナ等が含まれる。また、前記高分子材料としては、例えば、ゴム、樹脂又はエラストマー等が含まれる。さらに、前記変性剤としては、例えば、水酸基、カルボニル基又は原子団の官能基等が含まれる。

【0019】

図 1 に示されるように、前記コンピュータ 1 は、本体 1 a、キーボード 1 b、マウス 1 c 及びディスプレイ装置 1 d を含む。この本体 1 a には、例えば、演算処理装置 (CPU)、ROM、作業用メモリ、磁気ディスクなどの記憶装置及びディスクドライブ装置 1 a 1、1 a 2 が設けられる。また、記憶装置には、本実施形態のシミュレーション方法を実行するための処理手順 (プログラム) が予め記憶される。

10

【0020】

図 2 には、本実施形態のシミュレーション方法の具体的な処理手順が示されている。このシミュレーション方法では、先ず、変性ポリマーモデル 2 が設定される (工程 S 1)。

【0021】

図 3 には、本実施形態の工程 S 1 の具体的な処理手順が示される。

工程 S 1 では、先ず、高分子材料をモデル化したポリマーモデル 3 が設定される (工程 S 1 1)。図 4 に示されるように、ポリマーモデル 3 は、少なくとも一つ、本実施形態では複数のポリマー粒子 4 でモデル化される。このようなポリマーモデル 3 は、高分子材料を分子動力学で取り扱うための数値データ (ポリマー粒子 4 の質量、体積、直径及び初期座標などを含む) である。これらの数値データは、コンピュータ 1 に入力される。

20

【0022】

前記ポリマー粒子 4 は、例えば、一つのポリマーモデル 3 に対して、複数個、本実施形態では 1000 個設けられる。また、ポリマー粒子 4、4 間には、それらを伸縮自在に拘束する結合鎖 5 が設けられる。これにより、ポリマーモデル 3 は、ポリマー粒子 4、4 間の相対距離が安定して保持される直鎖状の三次元構造をなしている。

【0023】

図 5 に拡大して示されるように、結合鎖 5 には、結合ポテンシャル P が定義される。この結合ポテンシャル P は、例えば、下記式 (1) で定義される。

30

【0024】

【数 1】

$$P = \begin{cases} -0.5kR_0^2 \ln\left(\frac{r_{ij}}{R_0}\right)^2, & r_{ij} < R_0 \\ \infty, & r_{ij} \geq R_0 \end{cases} \quad \dots(1)$$

ここで、各定数及び変数は次のとおりである。

k : 各粒子間に定義される結合ポテンシャル P の強度に対応する定数

r_{ij} : 各粒子間の距離

R_0 : 伸びきり長

40

なお、粒子間の距離 r_{ij} 及び伸びきり長 R_0 は、各ポリマー粒子 4 の中心間の距離として定義される。

【0025】

上記式 (1) において、粒子間の距離 r_{ij} が、予め定められた伸びきり長 R_0 未満の場合には、結合ポテンシャル P は粒子間の距離 r_{ij} に従って、該粒子間に拘束を付与することができる。これにより、結合鎖 5 は、粒子間の距離 r_{ij} が 0 以下、又は伸びきり長 R_0 以上にならないような復元力を与えるものとして定義される。

【0026】

一方、上記式 (1) において、前記距離 r_{ij} が伸びきり長 R_0 以上となる場合には、結

50

合ポテンシャルPに ∞ が設定される。従って、結合鎖5には、伸びきり長 R_0 以上伸びることのできない、所謂伸び限界が定義される。

【0027】

結合ポテンシャルPの強度k及び伸びきり長 R_0 の各値は、適宜設定することができるが、例えば、論文(J. Chem Phys. vol.92, No.8, 15 April 1990)に基づいて設定されるのが望ましい。本実施形態では、強度kに30、伸びきり長 R_0 に1.5が設定される。

【0028】

次に、前記変性剤をモデル化した変性剤モデル7が設定される(工程S12)。図4及び図5に示されるように、変性剤モデル7は、少なくとも一つ、本実施形態では1つの変性基粒子8でモデル化される。このような変性剤モデル7は、変性剤を分子動力学で取り扱うための数値データ(変性基粒子8の質量、体積、直径及び初期座標などを含む)である。これらの数値データは、コンピュータ1に入力される。

【0029】

次に、ポリマーモデル3と、変性剤モデル7とを結合して変性ポリマーモデル2が設定される(工程S13)。この工程S13では、ポリマーモデル3のポリマー粒子4と、変性剤モデル7の変性基粒子8との間に、前記結合鎖5が設定される。この結合鎖5も、上記式(1)で定義された結合ポテンシャルPで定義される。

【0030】

次に、図5に示されるように、ポリマー粒子4、4間、変性基粒子8、8間及びポリマー粒子4と変性基粒子8との間に、斥力ポテンシャルQが定義される(工程S2)。この斥力ポテンシャルQは、例えば、下記式(2)で定義される。

【0031】

【数2】

$$Q = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right], & r_{ij} < 2^{\frac{1}{6}} \sigma \\ 0, & r_{ij} \geq 2^{\frac{1}{6}} \sigma \end{cases} \quad \dots(2)$$

ここで、各定数及び変数は、Lennard-Jonesポテンシャルのパラメータであり、次に示すものを除いて、上記式(1)の定数及び変数と同一である。

ε : 各粒子間に定義される斥力ポテンシャルQの強度に対応する定数

σ : 各粒子間に定義される斥力ポテンシャルQが作用する距離に関する定数(分子動力学の分野では、LJ球の直径と呼ばれる)

【0032】

上記式(2)において、粒子間の距離 r_{ij} が、予め定められたカットオフ距離 $2^{1/6}\sigma$ 未満となる場合には、粒子間の距離 r_{ij} が小さいほど、斥力ポテンシャルQが大きくなる。一方、上記式(2)において、粒子間の距離 r_{ij} がカットオフ距離 $2^{1/6}\sigma$ 以上となる場合には、斥力ポテンシャルQにゼロが設定されるため、粒子間に斥力が生じない。

【0033】

また、結合鎖5が設けられるポリマー粒子4、4間及びポリマー粒子4と変性基粒子8との間において、斥力ポテンシャルQと結合ポテンシャルPとが等しくなる。これにより、変性ポリマーモデル2は、直鎖状の三次元構造を維持する。

【0034】

本実施形態の斥力ポテンシャルQは、下記の斥力ポテンシャルQ1～Q3が含まれる。

ポリマー粒子4－ポリマー粒子4 : 斥力ポテンシャルQ1

変性基粒子8－変性基粒子8 : 斥力ポテンシャルQ2

ポリマー粒子4－変性基粒子8 : 斥力ポテンシャルQ3

【0035】

また、各斥力ポテンシャルQ1～Q3の強度 ε の値としては、適宜設定することができ

る。本実施形態では、上記論文に基づいて、各強度 ε に 1.0 が設定される。これにより、各粒子間には、同一の強度を有する斥力ポテンシャル $Q_1 \sim Q_3$ を作用させることができる。

【0036】

次に、図 6 に示されるように、予め定められた体積をもつ仮想空間 6 が設定される（工程 S 3）。前記仮想空間 6 は、互いに向き合う少なくとも一対の面 11、11、本実施形態では、3 対の面 11、11 を有する立方体として定義される。これらの各面 11 は、変性ポリマーモデル 2（図 4 に示す）が通過不能に定義される。

【0037】

また、一対の面 11 が直交する方向において、該一対の面 11 の間隔 D_1 （即ち、1 辺の長さ L_3 ）は、変性ポリマーモデル 2 の慣性半径（図示省略）の 2 倍以上、より好ましくは 4 倍以上に設定されるのが望ましい。これにより、後述する分子動力学計算において、変性ポリマーモデル 2 の仮想空間 6 内での回転運動をスムーズに計算することができる。

【0038】

次に、フィラーをモデル化したフィラーモデル 12 が設定される（工程 S 4）。このフィラーモデル 12 は、本実施形態では、仮想空間 6 の上下に配された一対の面 11、11 でモデル化される。これにより、一対のフィラーモデル 12、12 は、仮想空間 6 において、移動不能に定義される。

【0039】

次に、フィラーモデル 12 と変性ポリマーモデル 2 との間に、相互ポテンシャルが定義される（工程 S 5）。本実施形態の工程 S 5 では、図 7 に示されるように、フィラーモデル 12 とポリマー粒子 4 との間及びフィラーモデル 12 と変性基粒子 8 との間に、引力及び斥力が作用する相互ポテンシャル R が定義される。相互ポテンシャル R は、例えば、下記式（3）で定義される。

【0040】

【数 3】

$$R = \begin{cases} 4\pi \rho_{\text{wall}} \varepsilon_{\text{wall}} \left[\frac{1}{5} \left(\frac{\sigma_{\text{wall}}}{r} \right)^{10} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{\text{wall}}}{r} \right)^4 \right], & r < r_c \\ 0, & r \geq r_c \end{cases} \quad \dots(3)$$

ここで、各定数及び変数は次のとおりである。

ρ_{wall} ：相互ポテンシャルの壁面の密度に関する定数

$\varepsilon_{\text{wall}}$ ：相互ポテンシャルの強度に対応する定数

σ_{wall} ：仮想空間の面（フィラーモデル）に直交する方向の斥力長さに関する定数

r ：フィラーモデルとポリマー粒子との間及びフィラーモデルと変性基粒子との間の距離

r_c ：カットオフ距離

なお、フィラーモデル 12 と各粒子 4、8 との間の距離 r 及びカットオフ距離 r_c は、フィラーモデル 12 の面と、各粒子 4、8 の中心との間の最短距離で定義される。

【0041】

上記式（3）で定義される相互ポテンシャル R は、上記式（2）で定義される斥力ポテンシャル Q を、フィラーモデル 12 の面 11 で積分したものである。

【0042】

また、上記式（3）において、前記距離 r が、予め定められたカットオフ距離 r_c 以上となる場合は、相互ポテンシャル R は作用しない。

【0043】

さらに、前記距離 r が相互ポテンシャルの定数 $\sigma_{\text{wall}} \times 2^{1/6}$ 未満になると、相互ポテンシャル R は、フィラーモデル 12 と各粒子 4、8 との間に斥力を生じさせる。一方、距離 r が相互ポテンシャルの定数 $\sigma_{\text{wall}} \times 2^{1/6}$ を超えると、相互ポテンシャル R は、フィ

10

20

30

40

50

ラーモデル 1 2 と各粒子 4、8 との間に引力を生じさせることができる。このように、上記式 (3) では、フィラーモデル 1 2 と各粒子 4、8 との間に、引力及び斥力を定義することができる。

【0044】

また、本実施形態では、下記の相互ポテンシャル R_1 、 R_2 が定義される。

フィラーモデル 1 2 - ポリマー粒子 4 : 相互ポテンシャル R_1

フィラーモデル 1 2 - 変性基粒子 8 : 相互ポテンシャル R_2

【0045】

各相互ポテンシャル R_1 、 R_2 の定数 ρ_{wall} 及び定数 σ_{wall} の各値としては、適宜設定することができる。本実施形態では、上記論文に基づいて、次の値が設定される。

相互ポテンシャル R_1 : $\rho_{wall} = \sigma_{wall} = 1.0$

相互ポテンシャル R_2 : $\rho_{wall} = \sigma_{wall} = 1.0$

【0046】

同様に、各相互ポテンシャル R_1 、 R_2 の強度 ε_{wall} には、次の値が設定される。

相互ポテンシャル R_1 : $\varepsilon_{wall} = 1$

相互ポテンシャル R_2 : $\varepsilon_{wall} = 5$

【0047】

さらに、各相互ポテンシャル R_1 、 R_2 のカットオフ距離 r_c には、次の値が設定される。

相互ポテンシャル R_1 : $r_c = 1.12$

相互ポテンシャル R_2 : $r_c = 2.5$

【0048】

上記のように、本実施形態では、相互ポテンシャル R_2 の強度 ε_{wall} ($= 5$) が、相互ポテンシャル R_1 の強度 ε_{wall} ($= 1$) よりも大に設定される。これにより、変性基粒子 8 のフィラーモデル 1 2 に対する引力及び斥力の強度が、ポリマー粒子 4 のフィラーモデル 1 2 に対する引力及び斥力の強度よりも大に設定される。

【0049】

また、本実施形態では、相互ポテンシャル R_2 のカットオフ距離 r_c が 2.5 に設定されるため、フィラーモデル 1 2 及び変性基粒子 8 間において、距離 r が $2^{1/6}$ (1.12) から 2.5 未満の広範囲に亘り、引力を作用させることができる。一方、相互ポテンシャル R_1 は、カットオフ距離 r_c が 1.12 に設定されるため、フィラーモデル 1 2 及びポリマー粒子 4 において、斥力のみを作用させることができる。従って、変性基粒子 8 は、ポリマー粒子 4 に比べて、引力を優先的に作用させることができる。

【0050】

このように、各相互ポテンシャル R_1 、 R_2 において、強度 ε_{wall} 及びカットオフ距離 r_c が上記の範囲に設定されることにより、変性基粒子 8 のフィラーモデル 1 2 に対する親和性を、ポリマー粒子 4 のフィラーモデル 1 2 に対する親和性よりも高くすることができる。

【0051】

次に、図 8 に示されるように、仮想空間 6 の中に、複数の変性ポリマーモデル 2 が配置される (工程 S6)。図において、黒丸は、変性基粒子 8 である。本実施形態では、仮想空間 6 に、20 ~ 40 本程度の変性ポリマーモデル 2 がランダムに初期配置される。

【0052】

次に、フィラーモデル 1 2 と、変性ポリマーモデル 2 とを用いて分子動力学計算による緩和計算が行なわれる (シミュレーション工程 S7)。

【0053】

本実施形態の分子動力学計算では、例えば、仮想空間 6 について所定の時間、変性ポリマーモデル 2 が古典力学に従うものとして、ニュートンの運動方程式が適用される。そして、各時刻でのポリマー粒子 4 及び変性基粒子 8 (図 4 に示す) の動きが、単位時間毎に追跡される。また、仮想空間 6 内の粒子、体積及び温度は、夫々一定に保たれる。

【0054】

本実施形態のシミュレーション工程S7では、仮想空間6において、フィラーモデル12を一对の面11に固定させた状態で、変性ポリマーモデル2のみを対象に緩和計算が行われる。従って、本実施形態では、フィラーモデル及び変性ポリマーモデルを対象に緩和計算が行なわれていた従来の方法に比べて、計算時間を短縮しうる。

【0055】

また、フィラーモデル12は、面11全体において、該面11と直角に交わる方向に、相互ポテンシャルRを作用させることができる。これにより、フィラーモデル12は、変性ポリマーモデル2に対して、同一方向の相互ポテンシャルRを面11全体で作用させることができるため、変性ポリマーモデル2の緩和計算を効率的に行うことができる。さらに、フィラーモデル12は、仮想空間6の一对の面11に固定されるため、図9に示されるように、変性基粒子8のフィラーモデル12に対する近づきやすさ、即ち親和性を直感的に把握することができる。

10

【0056】

図10には、本実施形態のシミュレーション工程S7の具体的な処理手順が示されている。

本実施形態のシミュレーション工程S7は、先ず、変性ポリマーモデル2の前記斥力ポテンシャルQ（図5に示す）のみを無効にして、分子動力学計算が行われる（第1計算工程S71）。

【0057】

20

ここで、斥力ポテンシャルQのみを無効にするとは、前記結合ポテンシャルP及び相互ポテンシャルRを上記のように設定したまま、各粒子4、8間の斥力ポテンシャルQをゼロに設定することである。本実施形態では、上記式（2）において、強度 ε に0が設定されることにより、斥力ポテンシャルQがゼロに設定される。

【0058】

このように、斥力ポテンシャルQのみを無効にすることにより、隣接する変性ポリマーモデル2、2は、仮想空間6において、互いに斥力が働くことなく接近でき、かつ干渉することなく通過することができる。従って、第1計算工程S71では、変性ポリマーモデル2を効率良く緩和することができる。

【0059】

30

次に、図9に示されるように、フィラーモデル12から仮想空間6内に距離L1を隔てたフィラー近接領域13内に、変性基粒子8が進入した個数が取得される（工程S72）。この変性基粒子8の個数は、単位ステップ毎に、コンピュータ1のメモリ又は記憶装置等に記憶される。

【0060】

ここで、前記フィラー近接領域13は、フィラーモデル12に近接した変性基粒子8を判別するための領域である。従って、フィラー近接領域13内の変性基粒子8の個数を取得することにより、フィラーモデル12と変性基粒子8との親和性を容易に把握することができる。

【0061】

40

上記作用を効果的に発揮させるために、距離L1は、相互ポテンシャルRの定数 σ_{wall} （図示省略）の $2^{1/6}$ （1.12）～2.5倍が望ましい。なお、前記距離L1は、相互ポテンシャルRの定数 σ_{wall} の $2^{1/6}$ 倍未満になると、フィラー近接領域13内の変性基粒子8とフィラーモデル12との間には斥力のみが生じる。このため、変性基粒子8がフィラー近接領域13に進入しても、早期にフィラー近接領域13から脱出するため、フィラーモデル12と変性基粒子8との親和性を十分に把握できないおそれがある。逆に、前記距離L1は、相互ポテンシャルRの定数 σ_{wall} の2.5倍を超えると、相互ポテンシャルR2のカットオフ距離 r_c （＝2.5）を超えるため、変性基粒子8とフィラーモデル12との間には相互ポテンシャルR2（即ち、引力）が作用しない。このため、フィラーモデル12に近接した変性基粒子8を、十分にカウントできないおそれがある。なお、

50

本実施形態の距離 L_1 は、相互ポテンシャル R の定数 σ_{wall} (図示省略) の 2 倍である。

【0062】

図 11 (a) には、フィラー近接領域内に進入した変性基粒子の個数と、単位ステップとの関係を示すグラフが示される。このグラフに示されるように、フィラー近接領域 13 内に進入した変性基粒子 8 の個数が、単位ステップ毎に、ジグザグ状にバラついている。これは、相互ポテンシャル R_2 の引力及び斥力により、分子動力学計算において、変性基粒子 8 がフィラー近接領域 13 への進入及び脱出を繰り返すためである。

【0063】

次に、第 1 計算工程 S_{71} の処理が、所定のステップ数に達したかを判断する (工程 73)。この工程 73 では、コンピュータ 1 が、所定のステップ数に達していないと判断した場合には、前記工程 $S_{71} \sim S_{72}$ が行われる。一方、所定のステップ数に達したと判断した場合には、次の第 2 計算工程 S_{74} が行われる。なお、変性ポリマーモデル 2 を効率良く緩和するために、第 1 計算工程 S_{71} での分子動力学計算は、1000~1000 万ステップ程度実行されるのが望ましく、本実施形態では 100 万ステップ実行される。

【0064】

次に、変性ポリマーモデル 2 の斥力ポテンシャル Q を有効にして分子動力学計算が行われる (第 2 計算工程 S_{74})。本実施形態では、上記式 (2) において、強度 ε が元の値 (本実施形態では、1.0) に戻されることにより、斥力ポテンシャル Q を有効にすることができる。このように、本実施形態では、第 2 計算工程 S_{74} で斥力ポテンシャル Q の計算が行われるため、第 1 計算工程 S_{71} で斥力ポテンシャル Q の計算が省略されることに起因する誤差を、最小限に抑えることができる。

【0065】

次に、前記工程 S_{72} と同様に、フィラー近接領域 13 内に進入した変性基粒子 8 の個数が単位ステップ毎に取得される (工程 S_{75})。しかる後、第 2 計算工程 S_{74} の処理が、所定のステップ数に達したかが判断される (工程 S_{76})。

【0066】

この工程 76 では、第 2 計算工程 S_{74} の処理が、所定のステップ数に達していないと判断した場合、前記工程 $S_{74} \sim S_{75}$ が行われる。一方、所定のステップ数に達したと判断した場合、シミュレーション工程 S_7 が終了する。なお、シミュレーション結果の誤差を最小限に抑えるために、第 2 計算工程 S_{74} は、100~100 万ステップ程度が望ましく、本実施形態では 30 万ステップ実行される。

【0067】

次に、前記シミュレーション工程 S_7 の結果から、変性基粒子 8 のフィラーモデル 12 に対する親和性が評価される (評価工程 S_8)。

【0068】

前記評価工程 S_8 は、先ず、前記工程 S_{72} 及び前記工程 S_{75} において、単位ステップ毎に取得されたフィラー近接領域 13 内の変性基粒子 8 の個数をもとに、コンピュータ 1 が、少なくとも 2 つ、本実施形態では 2 つの単位ステップ毎に、フィラー近接領域 13 内の変性基粒子 8 の個数の平均値が求められる (工程 S_{81})。図 11 (b) に示されるように、本工程 S_{81} では、単位ステップ毎にバラつきやすいフィラー近接領域 13 内の変性基粒子 8 の個数を均すことができる。これにより、変性基粒子 8 の個数が単位ステップ毎にジグザグ状にバラついても、変性基粒子 8 の個数を正確に把握することができる。従って、本実施形態の評価工程 S_8 は、フィラーと、変性剤が配合された高分子材料との親和性を短時間で正確に評価することができる。

【0069】

このような作用を効果的に発揮するために、変性基粒子 8 の個数の平均値は、より好ましくは 5 以上の単位ステップ毎に求められるのが望ましく、さらに好ましくは 20 以上の単位ステップ毎に求められるのが望ましい。なお、平均値を求める単位ステップの数が多いと、計算コストの増加分に対して、十分な精度を得ることができないおそれがある。このような観点より、前記変性基粒子 8 の個数の平均値は、より好ましくは 100 万以下の

単位ステップ毎に求められるのが望ましく、さらに好ましくは1万以下の単位ステップ毎に求められるのが望ましい。

【0070】

次に、フィラーモデル12と変性ポリマーモデル2との親和性がオペレータによって判断される（工程S82）。前記親和性の判断は、シミュレーション工程S7終了時の変性基粒子8の個数の平均値が、全ての変性基粒子8の $(2 \times L1 / L3) \times 100 \sim 100\%$ であるか否かで判断されるのが望ましい。これにより、オペレータは、親和性の判断を定量的に行うことができる。

【0071】

前記工程S82では、前記親和性が良好であると判断された場合、本実施形態のシミュレーション方法による一連の処理が終了する。一方、前記親和性が良好でないと判断された場合、例えば、変性ポリマーモデル2やフィラーモデル12の設定条件が変更され、ステップS1～S7が行われる。これにより、変性ポリマーモデル2を確実に分散させる条件等を、的確に解析することができる。

【0072】

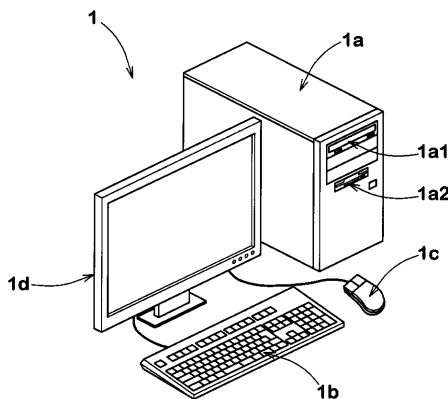
以上、本発明の特に好ましい実施形態について詳述したが、本発明は図示の実施形態に限定されることなく、種々の態様に変形して実施しうる。

【符号の説明】

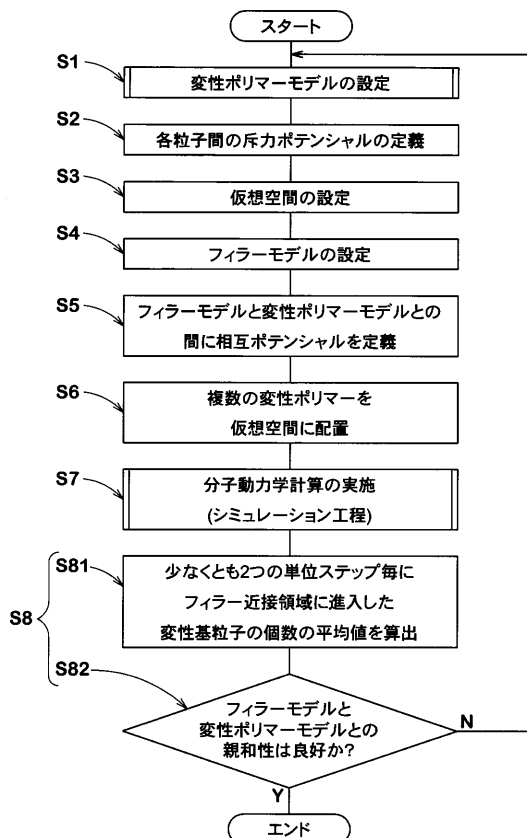
【0073】

- 1 コンピュータ
- 2 変性ポリマーモデル
- 6 仮想空間
- 8 変性基粒子
- 12 フィラーモデル
- 13 フィラー近接領域

【図1】



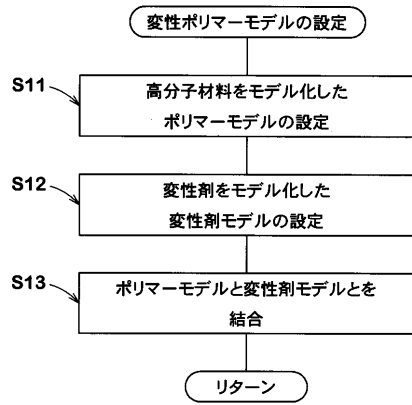
【図2】



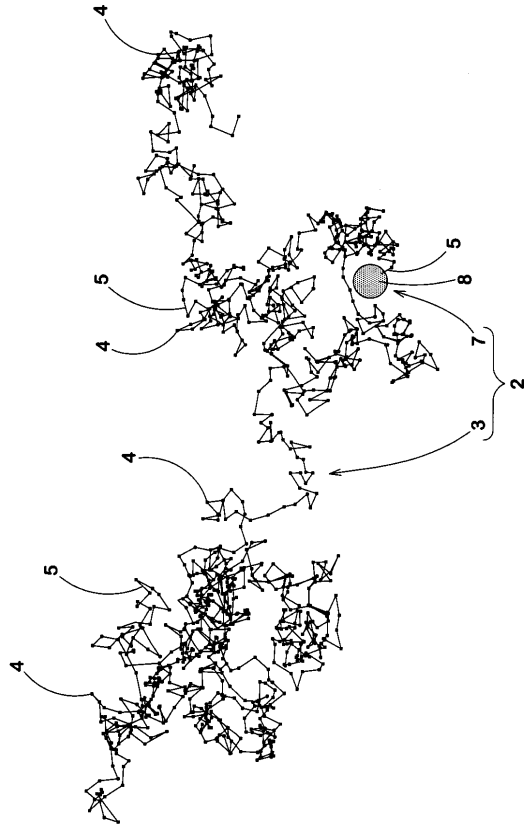
10

20

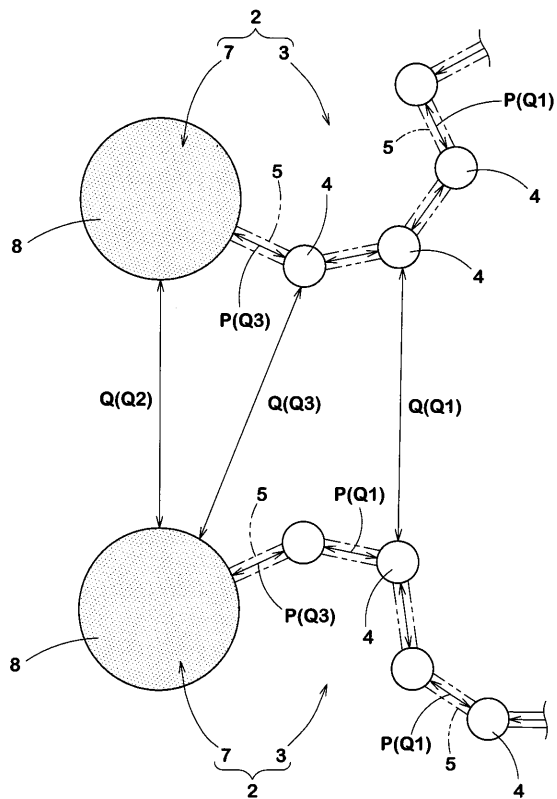
【図 3】



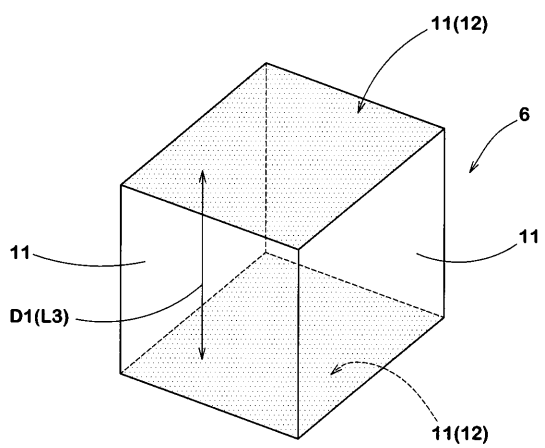
【図 4】



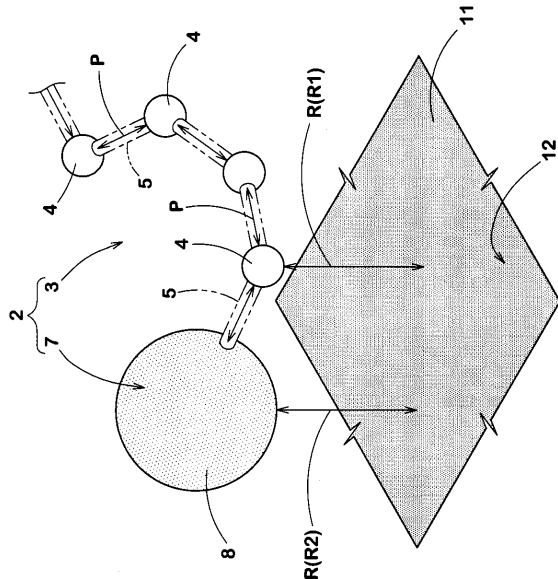
【図 5】



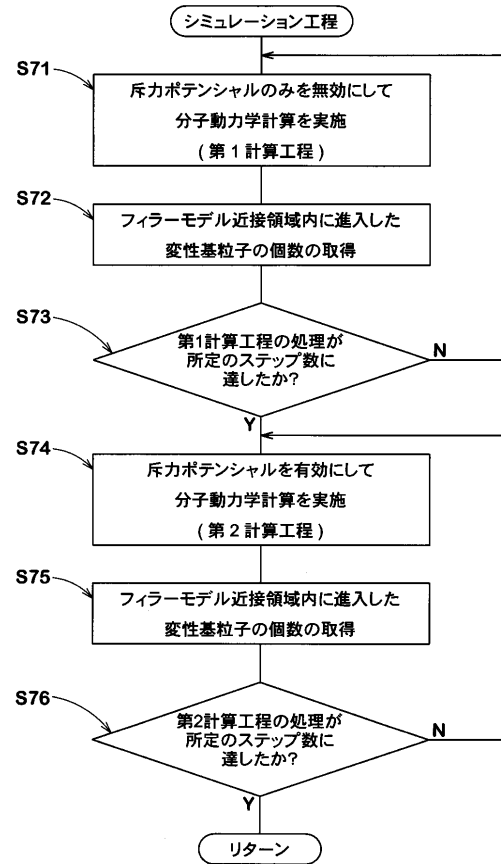
【図 6】



【図 7】

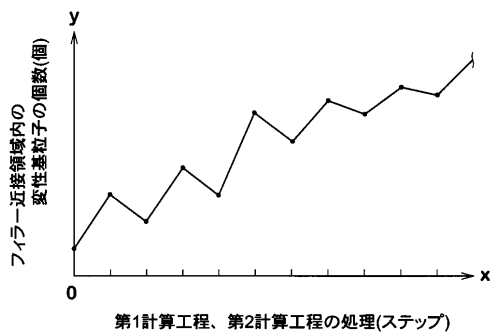


【図 10】

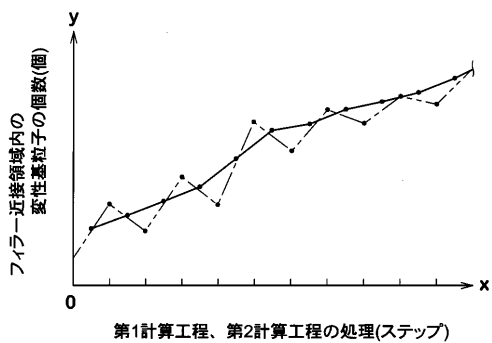


【図 11】

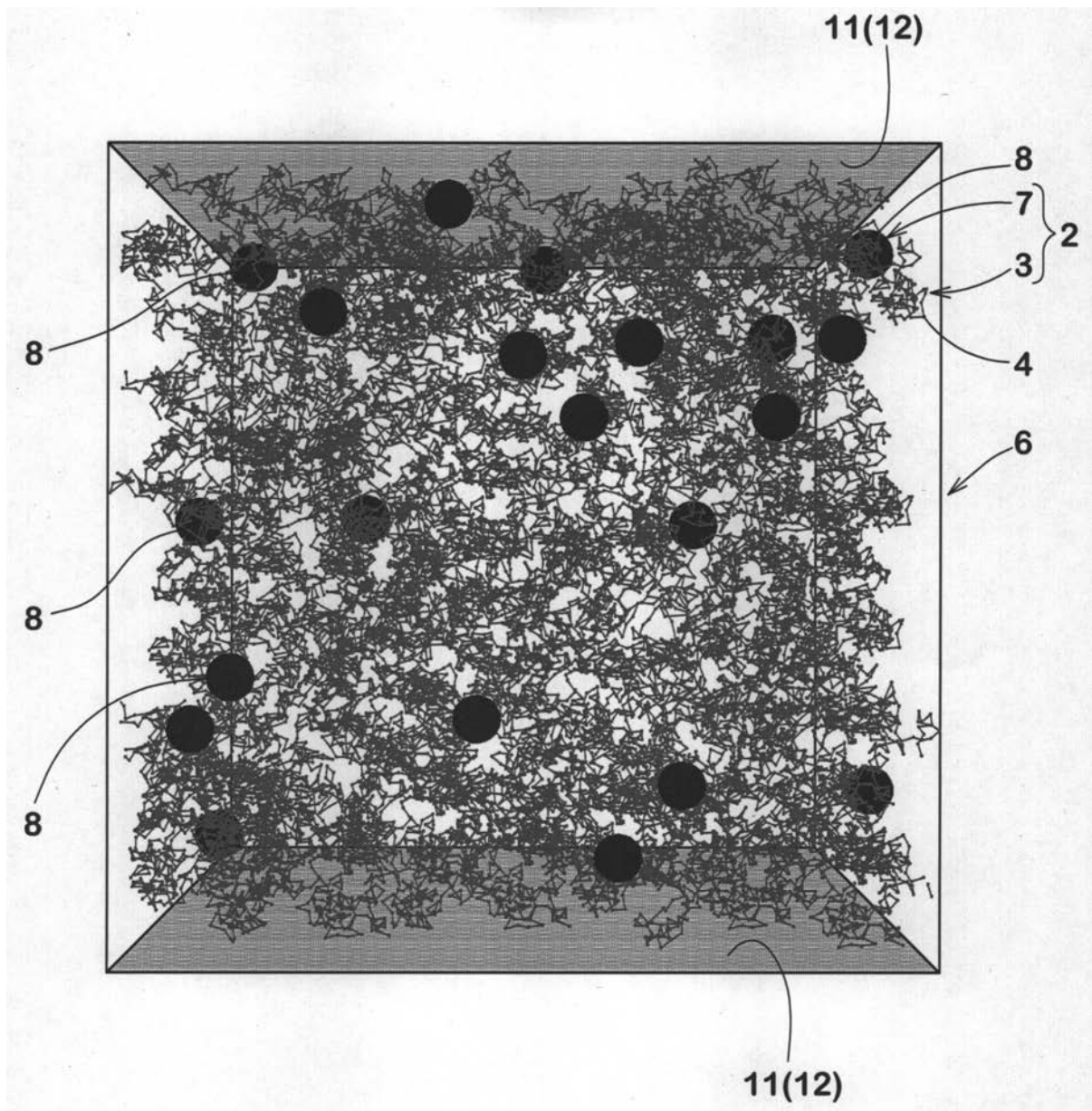
(a)



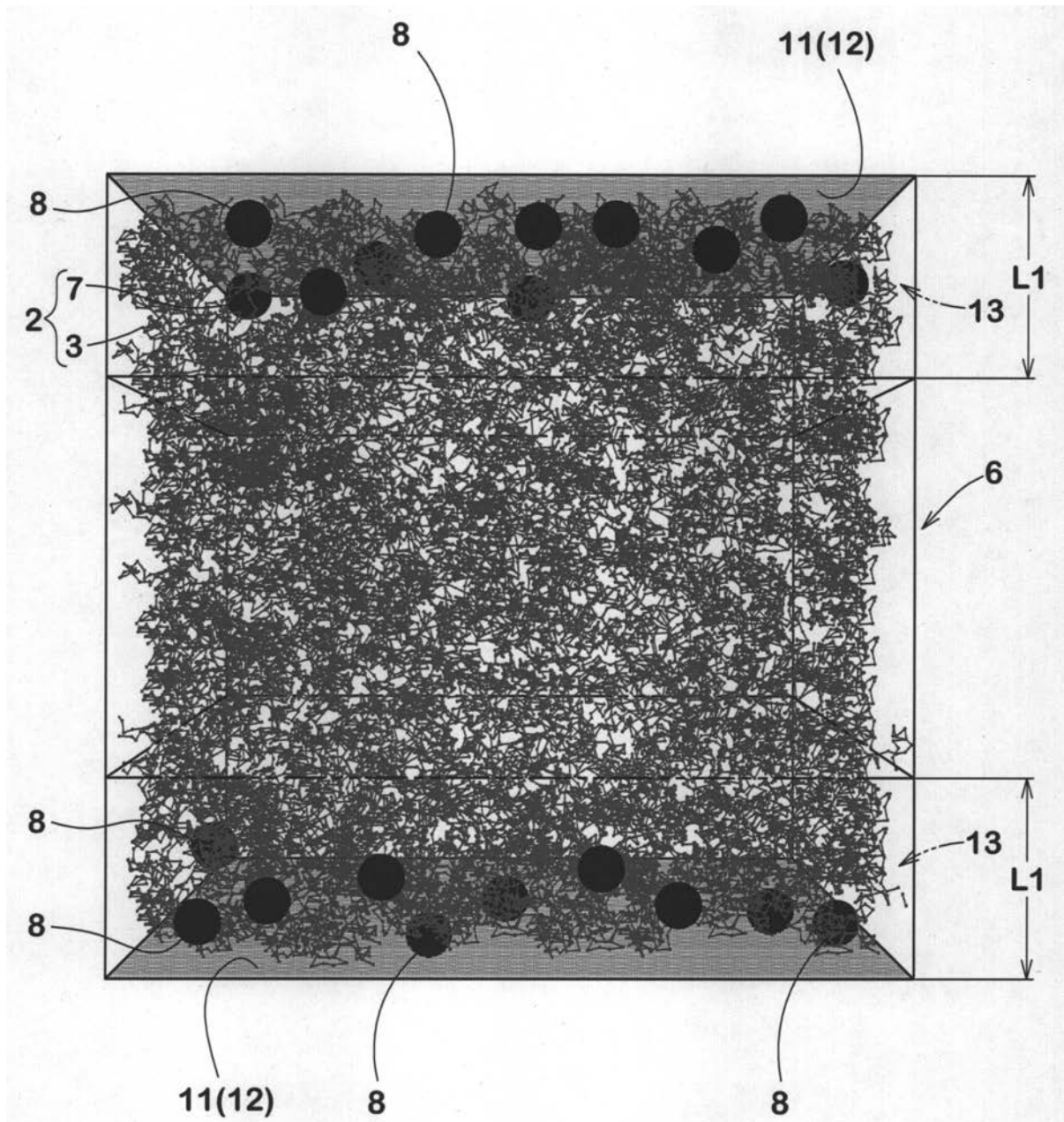
(b)



【図 8】



【図 9】



フロントページの続き

(56)参考文献 特開2005-208930 (JP, A)

特開2011-248541 (JP, A)

特開2005-146146 (JP, A)

特開2007-233859 (JP, A)

特開2012-177609 (JP, A)

岸本 浩通, ゴム中のナノ粒子ネットワーク構造のモデル構築による高性能タイヤの開発, 平成22年度先端研究施設共用促進事業「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」利用成果報告書, 2011年, pp.33-43

新材料開発技術「4D(フォーディー) NANO(ナノ) DESIGN(デザイン)」を確立, 住友ゴム工業株式会社, 2011年12月 1日, URL, http://www.srigroup.co.jp/newsrelease/2011/sri/2011_102.html

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01N 33/44

G06F 19/00

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamII)