

インターンシップ報告書

新領域創成科学研究科 伊藤・横山研究室

6期生 保田侑亮

インターン先企業名	(株) 日産アーク
研修部門・部署	デバイス解析部
実習期間	平成30年6月4日(月)～平成30年7月27日(金)
実施テーマ	「古典MD計算のプラスチック系への適用技術と実施例づくり」

背景

ポリアミドは合成が比較的容易かつ強靱であるために、ポリエステルやポリカーボネートと並んで五大エンジニアリングプラスチックの一角を成し、工業的に広く用いる材料である。例えばナイロン6や6,6-ナイロンは繊維として成形することで伸縮性が非常に高くなり、衣料品の材料として広く用いられる。特に、ポリアミド12は耐衝撃性、耐久性に優れ、樹脂として成形したポリアミド12は自動車や航空宇宙産業に使用されている。

ポリアミド12(以下、PA12)にはガス管としての応用例も存在する。ガス管は内部がガス圧で高圧になるために、破壊に耐える耐久性が要求される。しかしポリアミド系樹脂における分子レベルでの強靱化メカニズムは解明されてはならず、PA12ガス管においては分子設計、成型加工の段階で強靱化の余地がまだ残されている。

そこで本インターンシップでは、とある企業から受けたアルキル系ポリアミド(ポリアミド12)の強靱化メカニズムの解明を目的とし、私が普段研究で用いている古典分子動力学(MD)法を使って、材料の力学物性、破壊特性の計算を行うというものを行った。

研究内容と成果

事前の実験分析の結果から、結晶化度の高い試料ほど脆性的で硬く、また耐久性は高いということが分かっていた、そこでディスカッションを行った結果、結晶化度が材料の成型プロセスに起因するのではないかという仮説が立てられた。

そこで本インターンシップはこの仮説を検証するため、インターンシップの目標を二段階に分けた。最初に、プラスチックの物性を評価するうえで重要な指標である、ガラス転移点を再現するような全原子MDモデルを作成した。続いて、そのモデルを応用して結晶化度の異なるポリアミドのモデルを作成し、力学物性を評価した。

分子の初期構造作製においては日産アークで実際に使用されているソフトウェアの使い方を学んでこれを援用し、計算においては日産アーク様の社用計算機と普段私が使っているオープンソースの分子動力学シミュレーションソフトウェアを用いた。

まず一つ目のガラス転移点に関して、二つの力場を用いてポリアミド 12 のモデルを作成し、高温から系を徐々に冷却してガラス転移を観測し、その転移点を評価したところ、そのうち片方の力場で文献値と比較して妥当な値が観測された。同様の計算をポリアミド 6、66 ナイロン、ポリアミド 11 に関しても行ったところ、同様にガラス転移点をよく再現した。

続いて冷却速度を変えて同様の冷却を行い、結晶化度の異なる二つのポリアミド 12 バルクのモデルを作製した。今回作成したモデルを用いて一軸伸長シミュレーションを行ったところ、プラスチックに特有の応力降伏が計算により再現、結晶化度と硬さ、脆性・延性の相関は事前の実験分析の結果と一致した。また、冷却速度を遅くするほど結晶化度が高く、硬くて脆性的となり、逆に冷却速度を速くするほど結晶化度が低く、柔らかくて延性的となることが明らかになった。

また、このインターンシップを通して、日産アーク様では今まで扱うことができなかった高分子 MD の技術を導入することができた。

所感

今回のインターンシップで一番有意義だったと感じたのは、普段自分がやっている研究を使って、産業や人間社会に対してどのような貢献をすることができるかを学ぶことができたことだった。私が配属された部署は特に博士号を持った社員の方が多く、自分の専門を生かして活躍している姿を見ることができ、それが非常に良い刺激になったとともに、産業界における自分の専門の生かし方を見つけることができた。

また、クライアントの要求から始まり実験や計算を用いて解決策を構築する分析会社業務の一連の流れを体験することができた。加えて、一般企業における時間管理の仕方や、方向性に関するチーム内でのコンセンサスの取り方を見学でき、今後の研究生活にも生かせる知見を多く得ることができたと考えている。

謝辞

最後にこのインターンシップを快諾してくださった伊藤 耕三教授、横山 英明准教授、眞弓 皓一講師、インターン生として私を受け入れてくださった今井 英人様、インターン先にてインターンシップのスケジュールリングや物性評価に関する非常に実り多いディスカッションをしていただいた大脇 創様、伊藤 孝憲様、姫野 貴則様、並列計算について教えてくださったチュオン ドゥイ様、その他業務内外でいろいろとお世話になった日産アークの社員の方々に、この場を借りてお礼を申し上げます。最後になりましたが、インターン先の紹介や宿舍の手配に尽力してくださった計算物質科学人材養成コンソーシアム (PCoMS) 事務局、このインターン機会を与えていただき、大学院生活の支援を受けております統合物質科学リーダー養成プログラム (MERIT) に感謝いたします。本当にありがとうございました。