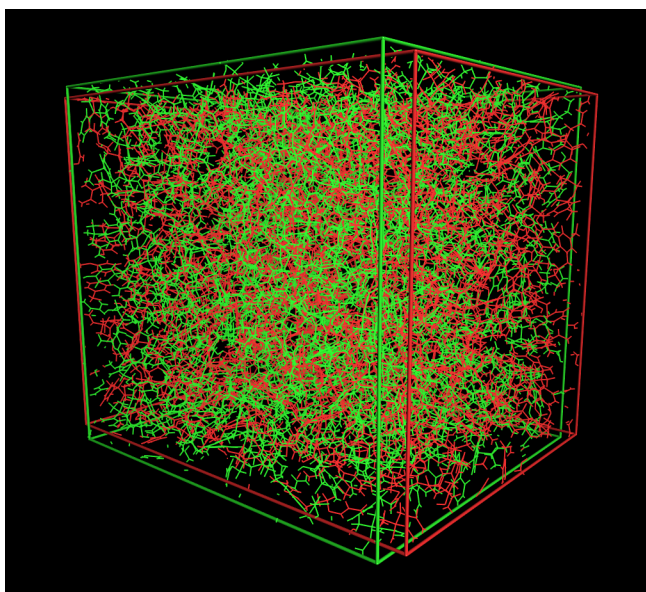


# ポリマーの物性計算: 応力歪み曲線の計算

データシート



## 背景

材料の強度は、荷重を加えた時の変形や破壊に対する指標となる、非常に重要な物性値の1つです。原子・分子レベルでのシミュレーションを行えば、強度の温度依存性を計算することや、ポリマーの混合比を変える、もしくはポリマーに官能基を導入するなどの、材料の内部構造に変化を与えた時の、強度の変化を対応付けることができます。

## 計算方法

ポリマーの強度をシミュレーションするためには、分子動力学法を用いて応力歪み曲線を計算することが一般的です。Materials Studioには、分子動力学計算を行うためのForciteモジュールと、高い精度で高分子の物性計算を行うための力場パラメータとして、COMPASSIIが搭載されています。また、ポリマーのガラス状態のような複雑な構造をモデリングするためのAmorphous Cellモジュールも搭載しています。Materials Studioではこれらの各モジュールを洗練されたインターフェースを備えた1つのアプリケーション上で実行し、結果の解析を行うことができます。

また、ポリマーの応力歪み曲線を計算するときには、構造に歪みを与えながら、その方向に対して発生する応力を計算する必要がありますので、複数回の計算が必要になります。またその応力を計算する際に、歪みとは垂直方向の応力は最適化しながら計算しなければなりません。さらに、歪みを与える方向に対する依存性を減らすためには、いくつかの方向に

対して平均をとる必要が生じます。また、応力歪み曲線からヤング率やポアソン比などの特性を求めるためには、低歪み領域のデータを線形回帰する必要もあります。そのような一連の計算を自動的に行うために、Materials Studioには、Perl言語を基にして、Materials Studio上で使える各ツールやモジュール群を呼び出すことができるMaterialsScriptという仕組みが備わっており、そのスクリプトの一例を弊社コミュニティサイト(<https://community.3dsbiovia.com>)にて配布しています。

さらに、ポリマーの混合比や種類を変えて応力歪み曲線の計算を複数回行う場合には、大量のデータを処理・解析し、指定したフォーマットで結果を出力するために用いられる

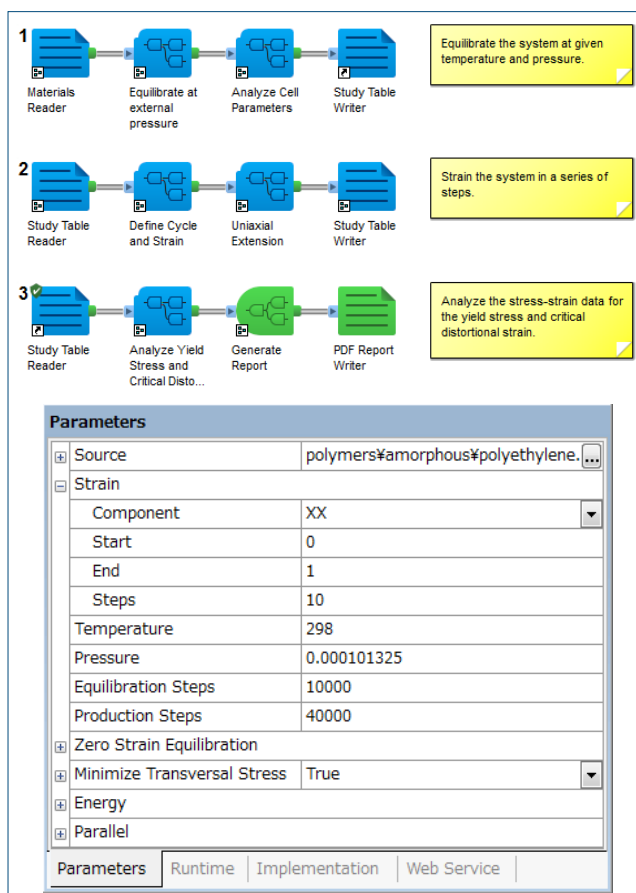


図1. Pipeline Pilotで利用可能な応力歪み曲線の計算のためのプロトコル。ポリマーのアモルファス構造を与えると自動的に応力歪み曲線を計算します。

Pipeline Pilotを使って、より効率のよい計算を行うことも可能です。Pipeline Pilotには、Materials Studioの各ツールやモジュール群から構成されるMaterials Studioコレクションが用意されています。また、応力歪み曲線を計算するための自動化されたワークフローのサンプルも提供されていますので、簡単に応力歪み曲線の計算が可能です。このサンプル・プロトコルでは、ポリマーのアモルファス構造を入力データとして与えると自動的に応力歪み曲線を計算します。

## 計算例

架橋ポリマーのガラス転移温度の計算を行った例をご紹介します。まず、DGEBAとDDSの分子構造からなるアモルファス構造を基に架橋構造を作成しました。架橋構造の作成についての詳細はデータシート“ポリマーの架橋構造の構築”をご覧ください。

作成された架橋構造を基にして、まず歪みを与えない状態で応力の各成分を計算しました。その構造に対して、XX, YY, ZZのそれぞれの方向に対して、歪みを段階的に与えながら、歪みと垂直方向の応力を平衡化しました。温度は300Kに設定しました。3つの方向の歪みに対する応力の値と、応力の値に対して線形回帰した結果を図2に示します。

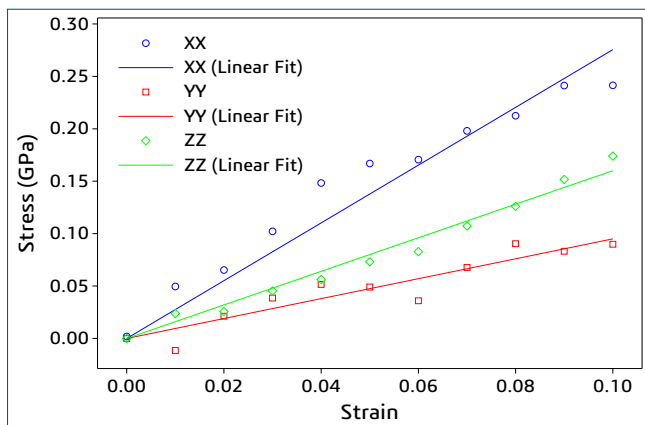


図2. 架橋率98%のアモルファスポリマーのXX、YY、ZZ方向に対する300Kでの応力歪み曲線。丸・四角・菱形は計算値、実線は線形回帰した結果を表します。

応力歪み曲線は、架橋ネットワークの形成のされ方に応じて方向の依存性をもつことが分かります。応力対歪みの回帰直線の傾きがヤング率に対応します。XX、YY、ZZのそれぞれの方向のヤング率はそれぞれ、2.76GPa、0.95GPa、1.60GPaとなります。同様の計算を架橋結合作成前の構造に対しても行い、作成後の結果と合わせて、各方向の応力の平均をとって線形回帰した結果を図3に示します。

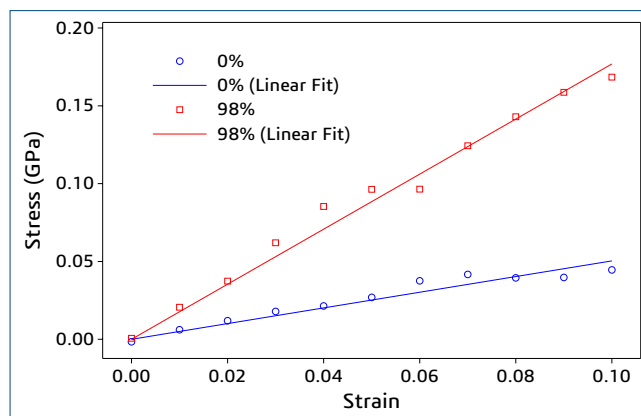


図3. 架橋率0%と98%のアモルファスポリマーの300Kでの応力歪み曲線。丸と四角は計算値、実線は線形回帰した結果を表します。

架橋結合作成前のヤング率は0.50GPaでしたが、作成後は1.77GPaとなり、架橋結合が形成されることで大幅にヤング率が上昇することが分かります。

また、架橋結合作成後の300Kと600Kでの応力歪み曲線を図4に示します。600Kでのヤング率は0.56GPaとなり、300Kと比べると大幅に低下することが分かります。この温度は、架橋率98%におけるガラス転移温度(387K)よりもかなり高い温度になります。この系のガラス転移温度の計算についての詳細はデータシート“ポリマーの物性計算: ガラス転移温度の計算”をご覧ください。

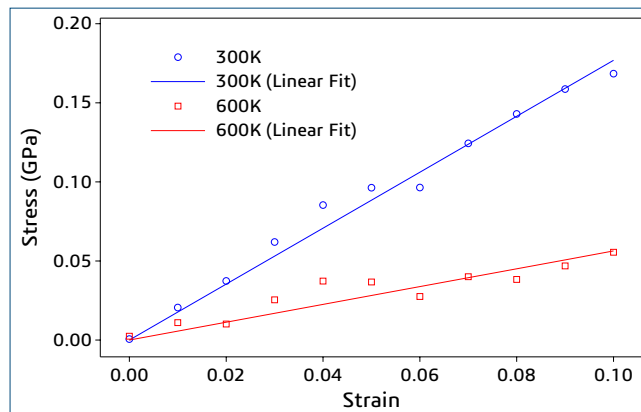


図4. 架橋率98%のアモルファスポリマーの300Kと600Kでの応力歪み直線

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com) (英語)、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja) (日本語) をご参照ください。



3DEXPERIENCE®