

京を利用した大規模分子シミュレーション によるタイヤ材料開発



中瀬古 広三郎（なかせこ こうざぶろう）

住友ゴム工業株式会社

常務執行役員

研究開発本部長 兼 材料開発本部長

【講演要旨】

近年、地球環境への配慮から、2008年 北海道 G8 サミットにおいて IEA（国際エネルギー機関）より低燃費タイヤの普及が提言されるなど、タイヤ性能の高機能化が強く求められています。そのため、タイヤには、「車重を支える」「発進・止まる（安全性）」「ショックを吸収（乗り心地）」「曲がる・まっすぐ進む（操縦性）」という基本性能に加え、転がり抵抗の小さな低燃費性タイヤが求められています。しかし、これら基本性能と低燃費性能は相反する関係にあり、実際のタイヤ製品を開発する上で大きな課題であると同時に、全ての性能を向上させる技術の開発が重要となります。

タイヤ性能に関係するのは、タイヤの構造と、基本となるゴム材料の性質（物性）です。タイヤに用いられるゴムは、骨格材料となるポリマー、ゴムの補強材であるフィラー（カーボンブラックやシリカなどのナノ粒子）、ポリマーを連結する架橋剤（硫黄）や結合剤が複雑な構造を形成することでタイヤ機能を生み出しています。そのため、材料の内部構造を理解しコントロールすることは、相反するタイヤ性能を高次元で両立し、タイヤゴムを高機能化させることに繋がります。

① ゴム内部におけるナノ構造の可視化とシミュレーション

従来の分析手法では分子・ナノレベルでの構造解析が困難でした。そこで、我々は大型放射光施設 SPring-8 を活用してゴム内部におけるナノ構造の可視化を行いました。そこから分子の結合状態やフィラーの分散、各材料のネットワークなど各々のスケールにおける機能を予測してシミュレーションを行い、材料開発を実施してきました。その結果、低燃費性能とグリップ性能を両立させる新素材「両末端マルチ変性ポリマー」を開発し製品化することができました。

② 京コンピュータを用いた大規模な分子レベルシミュレーションへ

①のシミュレーションでは、企業レベルにおけるスパコン性能の制限から、実際のゴム内部で複雑に関係しているナノ結合レベルからシリカ分散・ネットワークなどのマイクロレベルの現象を包括して解明することができませんでした。「京」の登場により大規模でありながら分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となった現在、当社では、「京」を用いてゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーションし、タイヤを高機能化させるための研究を開始しています。ここから知見を得て、新製品開発を通し社会貢献していきたいと考えています。