安全保障技術研究推進制度　令和５年度採択大規模研究課題　中間評価結果

1.　評価対象研究課題

（１）研究課題名：実験･計算科学の融合による革新的塗膜創製と機序解明の基礎研究

（２）研究代表者：株式会社 GSI クレオス　柳澤　隆

（３）研究期間　：令和５年度～令和９年度（予定）

2.　中間評価の実施概要

日時　　：令和７年１１月１４日

場所　　：ＴＫＰ新橋カンファレンスセンター

評価委員：未来工学研究所　理事長、上席研究員

東京大学　名誉教授

平澤　泠（委員長）

横浜国立大学　名誉教授

宇宙航空研究開発機構　航空技術部門

航空利用拡大イノベーションハブ　主幹研究開発員

上野　誠也

大阪大学　名誉教授

梅田　直哉

近畿大学　名誉教授

京極　秀樹

宇宙航空研究開発機構　航空技術部門

航空利用拡大イノベーションハブ　主幹研究開発員

嶋　英志

日本大学　理工学部　航空宇宙工学科　特任教授

宇宙航空研究開発機構　宇宙科学研究所　名誉教授

嶋田　徹

金沢工業大学　情報理工学部　教授

東京工業大学（現　東京科学大学）名誉教授

藤田　政之

公共投資ジャーナル社　論説主幹

吉葉　正行

（委員長以外は五十音順・敬称略）

3. 研究の進捗状況

研究の概要

本研究では、ナノ炭素の微量添加により初めて発現する低摩擦性を含む革新的多機能材料を、計算科学とミクロ・マクロ領域評価の融合による新規 FE-SEM[*1] 評価法の活用により創製し、その多機能性の原理を明らかにすると共に、深海のような高圧など過酷な環境での適用可能性を追求する。

進捗状況

主な実施項目に対する進捗は以下の通り。

①多機能塗膜、多機能バルク体の開発

・CSCNT[*2] 充填量、長さをパラメータとし、合計 20 条件分の塗膜を作製した。
・作製した塗膜は多機能性評価のため①摺動性評価、②耐衝撃性評価を実施、それぞれの物性傾向を把握したことにより期初に掲げた中間目標を達成した。

②新規 SEM 分析法の開発

・新規 FE-SEM を導入し、母材樹脂及び内部の CSCNT を観察した。
・7 種類の樹脂種と２種類の染色剤、合計 14 条件で染色を試み、ラメラ構造観察のために最適な染色条件を検討し具体的な染色剤を選定したことで期初に掲げた中間目標を達成した。

③分子・粒子シミュレーションによる nm スケール局所構造解析と物性評価

(1)母材樹脂に PTFE と微少量 CSCNT を添加したときの構造・力学特性予測

・CSCNT は他のナノ炭素材料と異なり豊富な炭素端によって周囲の高分子と化学的・物理的に相互作用することが容易であることについて量子化学計算を用いて明らかにした。
・CSCNT 炭素端は CSCNT 表面から規則的に露出しており、化学反応によって高分子が CSCNT と結合を形成した場合、その界面には非常に結晶度の高い領域ができることを原子レベルで示した。
・分子構造モデルから SEM 像を生成する手法について調査し、表面分子構造をプローブで探査し像を生成する簡便な方法により低計算コストで対応可能な像生成プログラムを作成した。本項目の作業は完了しており、論文化準備中である。

(2)結晶度の異なる PTFE 構造および CSCNT を用いた動摩擦係数計算

・PTFE および母材エポキシ樹脂のモデル構造に対し摺動計算を実施し、動摩擦係数の垂直抗力依存性を明らかにした。CSCNT の縮小モデルに対しても摺動計算および引張圧縮計算を行い、物性値を得た。
・網羅的な理想界面の理論限界算出までは至っておらず継続の余地はあるが、基本的な界面における物性は計算済みであり、最低限の目標は達成した。

(3) μm スケール粗視化シミュレーションによるナノインデンター引掻き試験の再現

・母材樹脂および CSCNT について全原子分子動力学計算(nm スケール)から粗視化粒子(μm スケール)を構成する相互作用ポテンシャルを作成した。

・ナノインデンターによる押し込みシミュレーションを実施し、硬度・弾性率の実験値と比較的良い一致を得た。引っ掻き用の半球圧子を用いたシミュレーションから、動摩擦係数を得た。

・既報実験結果と同様の摩擦・摩耗現象を捉えられていることがわかったので目標は達成した。今後さらに精度を高め、実験に忠実なシミュレーションにするためにモデルの再調整を実施中。

④実験・計算・データ科学の融合による新規解析手法の開発

・SEM 画像中から塗膜内部の CSCNT 及び樹脂緻密層を観察することができたため、期初に掲げた目標を達成した。

・緻密層の構造や力の起源を解明するため、様々な条件で作製した塗膜内部の SEM 観察を実施し、計算科学データ解析のための教師データを準備した。

⑤μm スケールと mm スケールの接続を目指した粒子描像に基づくマクロシミュレーション方法の開発

・nm スケールでは単結晶間の摺動、μm スケールではラメラ構造を単位構造とする粒界に存在するアモルファス構造間の摺動、mm スケールでは球晶のようなより高次構造を単位とした様々な局所構造が混ざりあった界面での摺動がおきている。目標は達成した上で、考察を検証中。

・粒子描像に基づく nm-μm-mm の各階層での摺動計算を実施することで、各スケール間をつなぐ現象の考察から、摺動基礎方程式の連続性を検討中。

⑥塗膜試作品への各種評価の実施

・業務計画書中に中間評価までに達成すべき目標の記載はないが、今後の軸シールの性能評価に必要な回転軸試験機を試作し、気中及び水中圧力下での試験を実施した。CSCNT 含有軸シールは水中圧力下で軸トルクについて約 40%の大幅な減少を確認した。

⑦プロジェクトの総合的推進

・定期的に情報共有会議、各年度初めには合同会議(キックオフミーティング)を実施している。

4. 中間評価の評点

A　進捗は順調であり、研究計画に沿って進めてよい。

5. 総合コメント

本研究で設定した目標は非常に重要であり、実験による成果は出てきている。また、マルチシミュレーションについても、ある程度の成果が得られており、進捗は概ね順調であることから、未開の分野における革新的な成果が期待される。

他方、目標が達成されていない項目もあるので、原因を分析したうえで、課題を整理するとともに解決法を選定し、目標を達成されることを期待する。

6. 主な個別コメント

- ミクロからマクロまでの制御に関し、要素物質（エポキシ樹脂と CSCNT）の構造に着目してミクロ物性の制御を行い、同じく要素物質の配合条件を詰めることによりマクロ物性解析につなげた点が高く評価できる。
- マクロ製品の製造時における要素物質の構造制御方法とそのシミュレーション方法に課題が残されている。
- 個々の成果は期待できるが、パラメータが多いことにどのように対応するか検討が必要である。実験と計算科学の融合については改善の余地がある。タイトルにある「融合」を目指して研究を進めていただきたい。
- AUV の航続距離の飛躍的向上については、軸トルクの実験結果に止まらず、プロペラトルク、高い水圧の影響なども含めて検討いただきたい。マクロ物性の成果にあたる取り組みが深海だけではなく、もう少し大きいことにも取り組んでいただきたい。
- 要素技術に関する成果は挙がっているものの、相当断片的である。今後、シミュレーションにおけるパラメータ設定の多様化やモノづくりプロセス技術の高度化・合理化に基づいて、マネジメントを含めて両者の統合化を図るとともに、塗膜材料システムの高度化に向けた研究展開と成果を期待する。
- 計算結果および実験結果について、データの統計的性質の評価を充実化させていただきたい。
- ドメインが異なる３つの組織の融合は難しいと思われる。研究マネジメントや研究者同士のさらなるコミュニケーションが必要である。現状では、塗料の開発側と使う側の意識が異なっているように思われる。成果のまとめに向けて、組織間の意識合わせが必要と思われる。
- 実用化に向けた課題を計算領域、実験領域の両者から見出して、解決の方向性を検討していただきたい。

---

*1 FE-SEM: Field Emission Scanning Electron Microscope（電界放出型走査電子顕微鏡）
*2 CSCNT： Cup Stacked Carbon Nanotube（カップ積層型カーボンナノチューブ）