

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出
2019年度採択研究代表者

2021年度 年次報告書

森川 淳子

東京工業大学 物質理工学院
教授

高分子の熱物性マテリアルズインフォマティクス

§ 1. 研究成果の概要

本研究は、データ駆動型高分子熱物性研究(高分子熱物性インフォマティクス)の学術基盤の整備を目的とし、「データを作る技術(計測、材料創生)」と「データを分析する技術(機械学習)」を主軸とし、プロジェクトから生み出される「データ(物性、プロセス)」から高分子インフォマティクスのデータプラットフォームの形成と構築を目指している。

「データを作る技術(計測)」では、高分子の階層構造に対応するマルチスケール熱輸送計測技術の開発とその高精度・高容量化を目指し、様々なセンサーデザインコンセプトを実現し、高精度大容量熱輸送計測の端緒を開いた。

「データを作る技術(材料創生・プロセス)」では、直接レーザー描画法 DLW を用いて、高分子の階層構造を模した構造体をマイクロセンサーアレイ上に作成することが可能となった。アゾベンゼンをメソゲンとする側鎖型液晶ポリメタクリレートのスメクチック(Sm)層構造が熱拡散率に影響を及ぼすことを見出した。エン・チオール結合を有する主鎖型液晶性高分子の酸化マグネシウムフィラーへのグラフトによるコンポジット材料中のポリマーマトリックスの高熱伝導化 $\lambda_m = 0.66 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ を達成した。液晶性エポキシモノマーの主鎖骨格の位置異性が、高次構造における分子配列性および熱拡散率に影響を与えることを明らかとした。

「データを分析する技術(機械学習)」では、全原子分子動力学(MD)シミュレーションによる高分子物性計算を全自動化する Python ライブラリ RadonPy を開発した。アモルファスポリマーの 15 物性の自動計算アルゴリズムの実装を推進、RadonPy のファーストリリースを行った。液晶構造を形成するポリマーを予測・設計する機械学習アルゴリズムを開発、77,024 種類の仮想ポリイミドを生成し、10 種類程度の構造タイプを見出すことで、30種の構造スクリーニングを行い、合成に着手した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 計測グループ

- ① 研究代表者: 森川 淳子 (東京工業大学 物質理工学院 教授)
- ② 研究項目
 - ・高分子ナノ・マイクロスケール熱伝導特性測定法の開発とインフォマティクス実装

(2) 機械学習・計算科学グループ

- ① 主たる共同研究者: 吉田 亮 (情報・システム研究機構 統計数理研究所 教授/ものづくりデータ科学研究センター センター長/総合研究大学院大学 複合科学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・機械学習と計算科学に基づく熱物性マテリアルズインフォマティクス

(3) 構造解析グループ

- ① 主たる共同研究者: 戸木田 雅利 (東京工業大学 物質理工学院 教授)
- ② 研究項目
 - ・液晶高分子の構造と熱伝導性との相関解明

(4) 指向性制御グループ

- ① 主たる共同研究者: ミゼイキス ビガンタス (静岡大学 学術院工学領域 教授)
- ② 研究項目
 - ・高分子ナノ・マイクロ3次元構造形成による熱的特性の制御

(5) 材料創製グループ

- ① 主たる共同研究者: 早川 晃鏡 (東京工業大学 物質理工学院 教授)
- ② 研究項目
 - ・高分子熱伝導性の理解に向けた体系的材料合成

(6) 計測 2 グループ

- ① 主たる共同研究者: 劉 芽久哉 (産業技術総合研究所 物質計測標準研究部門 研究員)
- ② 研究項目
 - ・高分子ナノ・マイクロスケール熱伝導特性精密測定

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Low-temperature graphitization of poly(acrylonitrile) densely grafted onto a silica core surface”, *Polymer*, vol. 225, 123768, 2021
- 2) “Attenuated Total Reflection at THz Wavelengths: Prospective Use of Total Internal Reflection and Polariscopy”, *Appl. Sci.* vol., 11, 7632, 2021
- 3) “Effect of Smectic Layers on Thermal Diffusivity of Side-Chain Polymer Liquid Crystals”, *Macromolecules*, vol., 55, No. 4, pp. 1178 – 1184, 2021
- 4) “RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics”, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2203.14090>
- 5) “Thermal diffusivity of organosuperelastic soft crystals during stress-induced phase transition”, *Appl. Phys. Lett.*, 119, 251902 (2021)