

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2019年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

内藤 昌信

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門
グループリーダー

データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発

主たる共同研究者:

佐藤 千明 (東京工業大学 科学技術創成研究院 教授)

袖山 慶太郎 (物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 グループリーダー)

研究成果の概要

(1) Polymer Sequencer の開発

近年、ランダム共重合中に確率的に生成される、数量体程度の短い特定配列が鍵となって発現する高分子機能が報告されている。しかし、実験的に合成高分子の多分散配列を解析する手法が確立されていないため、配列-機能の定量的な相関解析は困難であった。本研究では、配列集合体中に含まれる短配列組成を定量的に評価するシーケンサーを熱分解質量分析に基づき開発した。これにより、従来モノマー組成で記述されてきたランダム共重合体を、短配列組成で記述できるようになった。ランダム共重合体に配列制御という概念を導入し、表記方法を定義した世界初の成果である。

(2) 材料特性評価の自動データ収集システムの構築

本年度は、前年度引き続き、材料評価装置の改良を高分子材料の力学的評価装置(粘弾性特性ならびに強度特性)の開発を実施した。まず、前年度に完成したハイスループット粘弾性測定装置に関してその改良を行い、測定精度の向上を図った。また、同様にハイスループット引張試験装置に関しても、取得したデータをネットワーク経由で扱えるよう、ソフトウェアを改良した。さらに、既に開発済みのハイスループットせん断試験機に関して、今年度はその測定精度を検証すると共に、製品化を踏まえた試作品を製造した。加えて、多数の接着試験片を同時に作成する手法も開発した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Wei-Hsun Hu, Ming Ji, Ta-Te Chen, Siqian Wang, Mizuki Tenjimbayashi, Yu Sekiguchi, Ikumu Watanabe, Chiaki Sato, Masanobu Naito, “Light-Induced Topological Patterning toward 3D Shape-Reconfigurable Origami”, *Small* **18** [14], 2107078 (2022).
- 2) Wei Weng, Mizuki Tenjimbayashi, Wei Hsun Hu, Masanobu Naito, “Evolution of and Disparity among Biomimetic Superhydrophobic Surfaces with Gecko, Petal, and Lotus Effect.”, *Small* **18** [18], 2200349 (2022).
- 3) Yusuke Hibi, Shiho Uesaka, Masanobu Naito, “A data-driven sequencer that unveils latent “codons” in synthetic copolymers”, *Chemical Science* **14**, 5619-5626 (2023).