

2023 年度年次報告書

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

内藤 昌信

物質・材料研究機構 高分子・バイオ材料研究センター
分野長

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 マテリアル基盤研究センター 分野長）

研究成果の概要

【光でリサイクルできる接着剤の開発】

循環型社会への意識が高まる中、使い終わった構造部材は原材料ごとに分離・回収され、再生部材としてリユース・リサイクルされることが求められるようになってきた。そのような社会要請に応えるため、不要になった時には基板から完全に除去できる RORM (Reset-On demand, Reuse-Many) 型接着剤を開発した。RORM 型接着剤の特徴は、使用中は非常に高い接着強度を示すが、使用後には溶剤に溶解し、剥離・回収できることである。また、回収した RORM 型接着剤は、溶剤を除去すれば性能を落とさずに再利用される。高強度かつ易解体を兼ね備えた RORM 型接着剤を実現するため、著者らは「カフェ酸」に含まれるカテコール基が示す接着性と光2量化反応を利用することで、フッ素樹脂やポリオレフィンをはじめとする難被着体との接着や水中接着など、接着が難しい基材や環境下でも、強力な接着力とリサイクル性を発揮することが明らかになった。

【材料特性評価の自動データ収集システムの構築】

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ひずみ測定の精度向上、並びに環境温度制御などを主眼において改良を実施した。加えて、多数の接着試験片を同時に作成する手法を用い、本研究で開発したせん断強度測定装置を用いることにより、接着接合部の強度のばらつきを統計的に明らかにした。

【画像データを用いた複合材料の物性最適化】

材料特性を予測するための手法として、画像解析に関する取り組みを開始した。具体的には、接着剤の破断面の形状観察から、接着強度の学習モデルを構築したところ、高い精度で破断応力を予測することに成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Yasuyuki Nakamura, Alice Gros, Wenhao Zhang, Keitaro Sodeyama and Masanobu Naito, “Exception search in databases for polymers with practically contradictory properties of heat resistance and transparency”, *Polymer Chemistry*, **14**, 3881 (2023).
- 2) Siqian Wang, Wei Hsun Hu, Yasuyuki Nakamura, Nanami Fujisawa, Ane Eline Herlyng, Mitsuhiro Ebara, Masanobu Naito, “Bio-inspired Adhesive with Reset-On Demand, Reuse-Many (RORM) Modes”, *Adv. Funct. Mater.*, **33**, 2215064 (2023).
- 3) Weilin Yuan, Yusuke Hibi, Ryo Tamura, Masato Sumita, Yasuyuki Nakamura, Masanobu Naito, Koji Tsuda, “Revealing factors influencing polymer degradation with rank-based machine learning”, *Patterns*, **4**, 100846 (2023).
- 4) Sirshendu Misra, Mizuki Tenjimbayashi, Wei Weng, Sushanta K. Mitra, and Masanobu Naito, “Bioinspired Scalable Lubricated Bi-continuous-porous Composites with self-recoverability and exceptional outdoor durability”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **15**, 36839 (2023).