

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

2019年度 実績報告書

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、「高分子の熱伝導」をテーマとし、実験科学・データ科学を両輪とする高分子熱物性マテリアルズインフォマティクス(MI)の学術基盤を構築することを目標とする。MIにより創出される物質群の物性予測を、合成化学と新規計測法により実証し、MI 学術基盤として実用に資するレベルにまで到達することを目指す。データベース、ソフトウェアをコモンソースとして、社会に還元し、高分子材料設計の新たなシステム展開を提案する。

同時に、高分子の熱物性に関する基礎的学理の究明に注力し、これを基軸として開拓する実験科学(計測法・構造解析・合成化学・極限プロセス)を、機械学習と計算科学に基づく熱物性 MI の先進技術と連携し、従来のデータベースでは乗り越えられなかった高分子熱物性の予測の壁を越えることを目指す。高分子の熱伝導性は、どこまで向上し、どこに限界があるのか、その因子は何か、明確な指針を打ち出すことに挑戦する。図1は、本研究で構築する高分子熱物性 MI システムの概念図である。実験科学・計算科学・データ科学の相互関係、ならびに個々の要素技術の位置付けを示す。

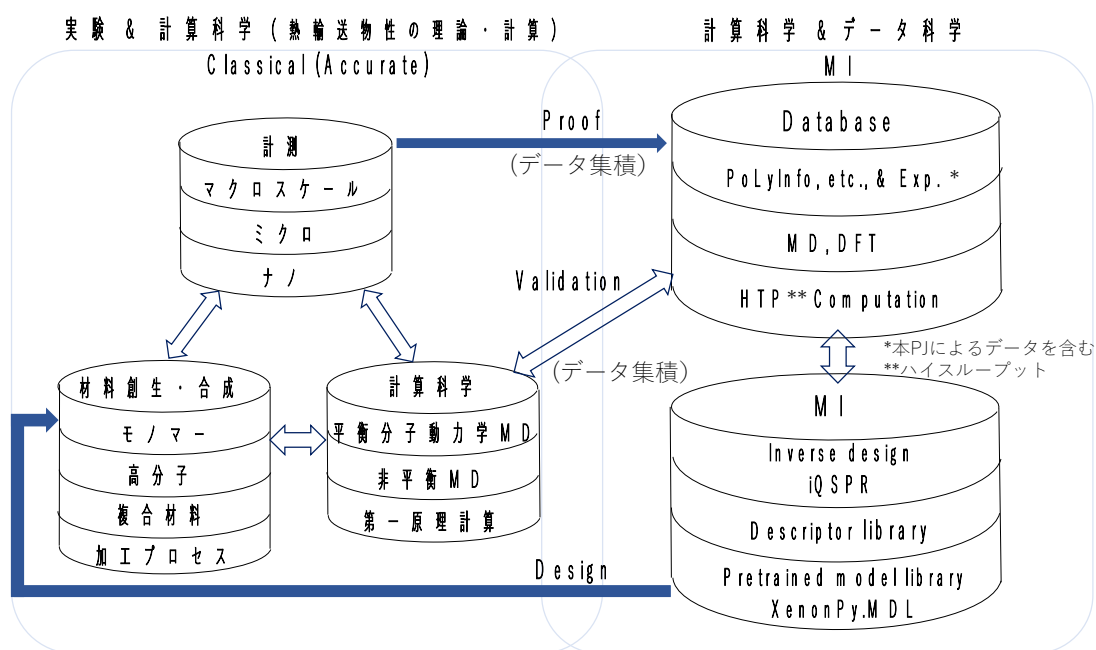


図1 高分子熱物性インフォマティクスの学術基盤システム

2019年度10月以降、高分子熱伝導データベース拡充のための基盤となる環境整備を以下の項目について実施した。

- ① 基盤となる高分子熱物性測定法の拡充と新規設計を行なった。ミクロスケール高分子熱拡散率測定法を、接触法、非接触法により、イメージング法も含めて設計し、実証試験を行なった。高速熱分析法のイメージング方法論の設計に着手した。
- ② プロジェクトの基盤技術であり且つ最も大きな壁であるMD自動計算システムのプロトタイプを

構築するための、力場構築、構造最適化、LAMMPS による MD 計算(モノマー・高分子)、機械学習アルゴリズムへの入力までのプロセスを全自動化し、試験運転を行った。

- ③ 高分子データベースの基礎データとなるモデル高分子の合成およびデータ採取を開始し、実験によるデータベース構築と、計算科学による予測データの融合モデルの構想を開始した。
- ④ 熱的特性を制御するための高分子ナノ・マイクロ3次元構造を作製し、熱的特性制御を実証するための設備の構築について検討した。熱異方性の発現が期待される高分子デバイスをレーザー直接描画法により作製し、高分子による熱異方性発現メカニズムに関する解析に取り組み始めた。

【代表的な原著論文】

• Hironao Yamada, Chang Liu, Stephen Wu, Yukinori Koyama, Shenghong Ju, Junichiro Shiomi, Junko Morikawa, Ryo Yoshida, “Predicting materials properties with little data using shotgun transfer learning”, *ACS Cent. Sci.* 2019, 5(10), 1717–1730.

• Tania Moein, Darius Gailevičius, Tomas Katkus, Soon Hock Ng, Stefan Lundgaard, David J. Moss, Hamza Kurt, Vygantas Mizeikis, Kęstutis Staliūnas, Mangirdas Malinauskas and Saulius Juodkazis, "Optically-thin broadband graphene-membrane photodetector", *Nanomaterials* 2020, 10(3), 407.

• Darius Gailevičius, Meguya Ryu, Reo Honda, Stephen Lundgaard, Tai Suzuki, Jovan Maksimovic, Jingwen Hu, Denver P. Linklater, Elena P. Ivanova, Tomas Katkus, Vijyaykumar Anand, Mangirdas Malinauskas, Yoshiaki Nishijima, Soon Hock Ng, Kęstutis Staliūnas, Junko Morikawa, Saulius Juodkazis, “Tilted black-Si: ~0.45 form-birefringence from sub-wavelength needles”, *Opt. Exp.* 2020, 28(11), 16012-16026.

§ 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データ科学研究系教授/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統計科学専攻 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 准教授)
- 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電子物質科学系列電子物質科学専攻 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