

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

2020 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

§ 1. 研究成果の概要

(1) 耐熱高分子材料に関する分子構造生成アルゴリズムの開発

昨年度構築した、高分子の物性予測をモノマー構造のみから実施する SMILES-X コードを利用し、新規高分子のガラス転移温度(Tg)の予測を行うと共に、物性を予測しながら新規高分子材料のモノマー構造を自動的に提案できる SMILES-NEO コードを開発した。本アルゴリズムを用いて、特定の Tg 領域を持つ分子構造を大量に自動生成することに成功した。

(2) 材料開発のためのポリマー・スマートラボの構築

従来の高分子・有機材料のスマートラボ(自動合成)では、化学合成から精製・化学分析・構造解析までを一貫してデータ収集することが行われてこなかった。これは、従来のポリマー・データベースの構築が材料開発に最終ターゲットに置いて設計されていないことに他ならない。本プロジェクトでは、高分子・複合材料の合成から化学分析・力学物性評価までを自動化し、得られた良質のメタデータをもとに材料開発で使えるデータベースを迅速に構築するシステムを目指している。今年度は昨年度設計したポリマー・スマートラボを実装し、さらに力学測定の実証例として、得られたデータセットを(1)の分子構造予測に反映させることで Tg の予測精度の向上を図ることに成功した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 超複合材料開発グループ

- ① 研究代表者: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)
- ② 研究項目
 - ・データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発

(2) 分子デザイングループ

- ① 主たる共同研究者: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)
- ② 研究項目
 - ・機械学習による分子設計・反応予測モデルの開発

(2) 材料特性評価グループ

- ① 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)
- ② 研究項目
 - ・材料特性評価の自動データ収集システムの構築