

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

2020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。

「データを分析する技術(機械学習)」においては、データ駆動型研究に資する世界最大の高分子材料のデータベース構築に向けて、分子動力学(MD)シミュレーションによる高分子物性自動計算システム RadonPy (LAMMPS による高分子物性計算の自動化を支援する Python ライブラリ)を開発し、プログラムを完成させ、データ生産を始動した。マテリアルズインフォマティクスのオープンソースソフトウェア XenonPy に実装された機械学習を用いた分子生成の技術を適用し、ポリイミドの仮想ライブラリを作製した。

「データを作る技術(計測)」では、マイクロおよびナノスケールでの新しい高分子材料の熱輸送の研究を可能にするために、マイクロファブリケーション技術を使用して製造されたマイクロサイズの温度センサーアレイを使用した新しい測定コンセプトを開発した。様々なチップデザインコンセプトを Si ウェハースで実現し、同時に SiN ナノ薄膜形成プロセスによる試作を開始した。

「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による、光学的・熱的異方性を示す幾何学的構造を有する、高分子ナノ・マイクロ3次元構造の作製法を開発した。主鎖型、側鎖型液晶高分子の高熱伝導化を、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、エン・チオール結合を有する主鎖型液晶性高分子について実施した。液晶性エポキシモノマーの主鎖骨格ベンゼン環のパラ置換体およびメタ置換体で構成された分子構造設計により、パラ置換体のみが液晶性を示すことを見出した。エポキシモノマー分子構造における僅かな位置異性が樹脂硬化物の高次構造の分子配列性に影響を与えることを明らかとした。

§ 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

(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熱物性標準研究グループ 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) "Direct Measurement of Temperature Diffusivity of Nanocellulose-Doped Biodegradable Composite Films", *Micromachines* 11, 8, 738- 2020.
- 2) "Variations of interfacial thermal conductance at melting and crystallization of an indium micro-particle in contact with a solid", *Mater. Des.* 201, 109475, 2020.
- 3) "Quadrupole modelling of dual lock-in method for the simultaneous measurements of thermal diffusivity and thermal effusivity", *Int. J. Heat Mass Transf.* 162, 120337, 2020.
- 4) "Bayesian algorithm for retrosynthesis", *J. Chem. Inf. Model* 60, 10, 4474- 4486, 2020.
- 5) "Acceleration of liquid-crystalline phase transition simulations using selectively scaled and returned molecular dynamics", *J. Chem. Inf. Model* 60, 7, 3499-3504, 2020.