

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

2021 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

本研究では化学構造により高分子材料の物性制御を行うことを目指し、その例として光および熱でネットワーク構造を可逆・非可逆に組み替えることができる傾斜材料を開発してきた。同一材料内に力学強度に傾斜がある「力学傾斜材料」は、応力負荷を効率的に緩和することができる構造部材として注目されている。同一材料内に力学的に大きな異方性を持つ材料の開発では、従来は3Dプリンタなどを利用した方法が主流であったが、均一な力学勾配をかけることが難しいという問題があった。

本年度は、Vitrimerと呼ばれる外部刺激により結合交換反応が起こる動的共有結合と、高い反応性・選択性を持った炭素-ヘテロ原子結合反応であるクリック反応を組み合わせることで、光や熱などの外部刺激により高分子鎖の架橋点密度を可逆的・不可逆的に制御し、同一材料内に約200倍の力学傾斜を自在に持たせることができる新規高分子材料の開発に成功した[2, 4]。

さらに領域内共同研究として、NIMSの田村らが開発した相図作成支援AIプログラムを開発した傾斜材料のクリープ特性予測に応用し、所望のクリープ特性を有する材料設計の最適化にかかる労力を大幅に低減することに成功した[3]。

また本研究では、データ駆動研究に必須のデータセットを効率的に得るため、ポリマー・スマートラボの構築を進めてきた。有機合成・構造解析(NMR、GPC)、熱分析(DSC)、力学特性評価(接着力)のハイスループット化とメタデータの自動収集のシステムが構築し、新規接着材料の開発の高速化につなげることができた。

§ 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

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Mechanochromism of dynamic disulfide bonds as a chromophoric indicator of adhesion strength for epoxy adhesive”, HY Tsai, Y Nakamura, WH Hu, T Fujita, M Naito, *Materials Advances*, 2, 5047–5051 (2021).
- 2) “Postprogrammable Network Topology with Broad Gradients of Mechanical Properties for Reliable Polymer Material Engineering”, WH Hu, M Tenjimbayashi, S Wang, Y Nakamura, I Watanabe, M Naito, *Chemistry of Materials*, 33, 6876–6884 (2021).
- 3) “Topological alternation from structurally adaptable to mechanically stable crosslinked polymer”, WH Hu, TT Chen, R Tamura, K Terayama, S Wang, I Watanabe, M Naito, *Science and Technology of Advanced Materials*, 2022 (accepted)
- 4) “Light-Induced Topological Patterning toward 3D Shape-Reconfigurable Origami”, WH Hu, M Ji, TT Chen, S Wang, M Tenjimbayashi, Y Sekiguchi, I Watanabe, C Sato, M Naito, *Small*, 2022 (accepted)
- 5) “Evolution of and Disparity among Biomimetic Superhydrophobic Surfaces with Gecko, Petal, and Lotus Effect”, W Weng, M Tenjimbayashi, WH Hu, M Naito, *Small*, 2022 (accepted)