

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

2022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

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 教授)

早川 晃鏡 (東京工業大学 物質理工学院 教授)

Mizeikis Vygantas (静岡大学 学術院工学領域 - 電子物質科学系列 教授)

吉田 亮 (情報・システム研究機構 統計数理研究所 教授)

劉 芽久哉 (産業技術総合研究所 物質計測標準研究部門 研究員)

研究成果の概要

全原子古典分子動力学シミュレーション(及び第一原理計算)による高分子物性計算を全自動化する世界初のオープンソースソフトウェア RadonPy を開発し、第 1 版を公開した。最新版の RadonPy には、熱物性、機械特性、光学特性を含む 17 種類の物性を自動計算するアルゴリズムが実装されている。高分子物性オープンデータベース共創プロジェクトを産学連携コンソーシアム形成により推進し、RadonPy を用いた計算により、2022 年 3 月時点で 5 万種類の分子骨格を包含する高分子物性オープンデータベースを達成した。

実証研究では、液晶構造を形成する高分子を予測・設計する機械学習アルゴリズムを用いて芳香族ポライミドの大規模仮想ライブラリから五つの候補を絞り込み、モノマー合成及びポリマー重合を実施した。合成されたポライミド樹脂はいずれもラメラ構造を自律的に形成し、高熱伝導率を有することが明らかになった。これらは機械学習により予測・発見された初めての高分子液晶である。

実験要素技術として、高分子の異方性熱物性精密測定に注力した周期加熱ナノプローブ法、THz ポラリスコピー(4 偏光法)、レーザー直接描画(DLW)法、ならびに新規高分子材料のマイクロ・ナノスケールの熱特性評価用の温度・熱拡散センシングデバイス(M/NTS デバイス)チップを開発し、実験データベース構築に向けた適用を開始した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics, Y. Hayashi, J. Shiomi, J. Morikawa, R. Yoshida, *npj Computational Materials* 8, 222 (2022) .
- 2) Probe-based microscale measurement setup for the thermal diffusivity of soft materials, M. Ryu, M. Akoshima, J. Morikawa, *Rev. Sci. Instrum.* 93, 044901 (2022).
- 3) On the origin of elasticity and heat conduction anisotropy of liquid crystal elastomers at gigahertz frequencies, Y. Cang, J. Liu, M. Ryu, B. Graczykowski, J. Morikawa, S. Yang, G. Fytas, 13, 5248 (2022).