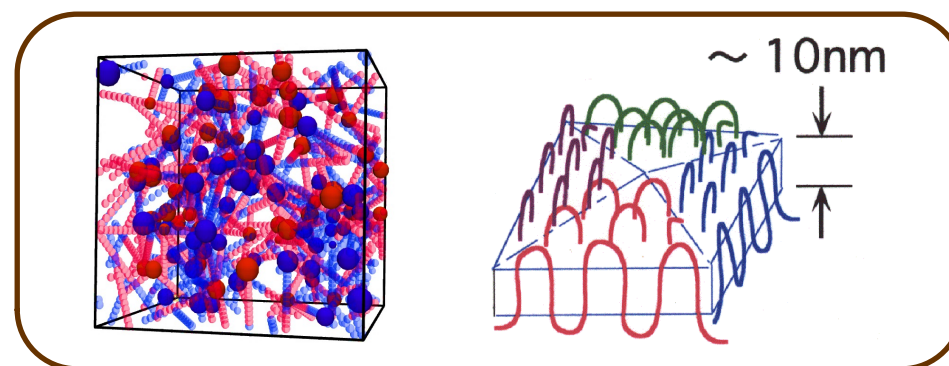


データサイエンスに基づく 高分子材料の構造物性相関

(課題ID: jh200016-NAH)

九州大学・先導物質化学研究所

天本 義史



特徴量抽出

化学構造

成形プロセス

メゾ構造

物性

マテリアルズインフォマティクス(MI)の発展

1/6

材料開発の効率化を目指し、無機や金属材料ではいくつかの成功例が見られる

マテリアルズゲノム イニシアティブ (2011年)



膨大な材料のデータを
情報科学の手法で解析する事で
新材料の開発を2倍に早める

① データから法則を見つける



② 望みの性質を持つ材料を提案する

✓ 人間では判断が難しい
非線形や多変量の相関もわかる

高分子はプラスチックやゴムなどの原料

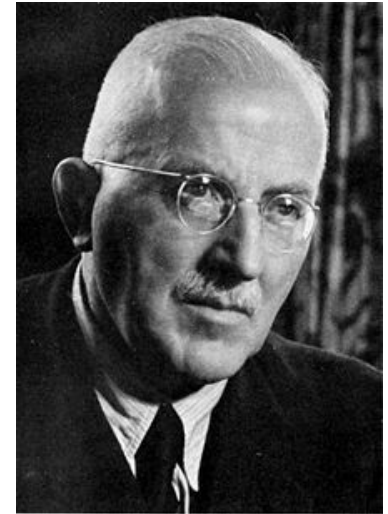
2/6

シュタウディングガーが高分子説を唱えて100年を迎える

ヘルマン・シュタウディングガー (Hermann Staudinger)

ドイツの有機化学者

ノーベル化学賞 (1953年)



✓ 1920年に高分子説を発表

当時は、セルロースやゴムは低分子の集合体とされたが、彼は、低分子を共有結合で繋いだ高分子鎖の存在を提唱した

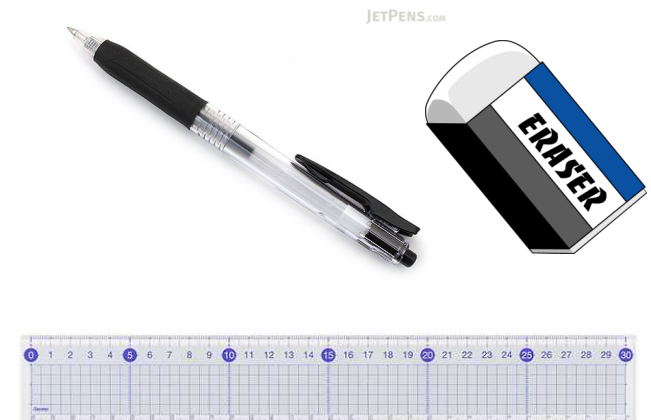
スポーツ用品



コンタクトレンズ・メガネ



文房具



高分子の”ひも”としての性質 (高次構造)

3/6

同じポリマーでも成型方法が異なるとメゾ構造が変わり、物性に強く影響する

化学構造

成形
プロセス

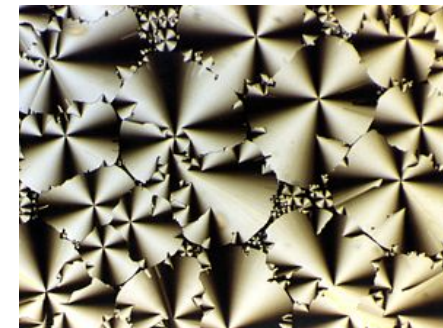
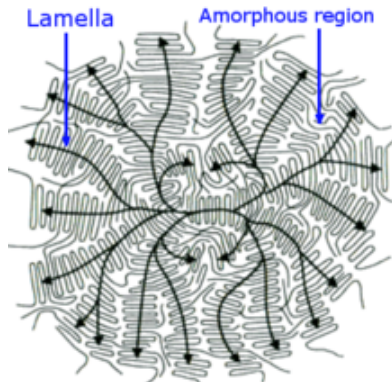
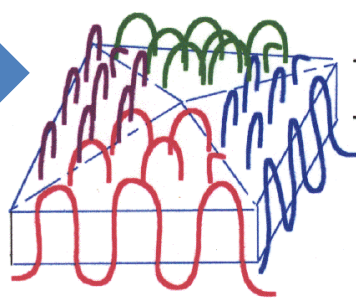
現在のインフォマティクス技術

物性

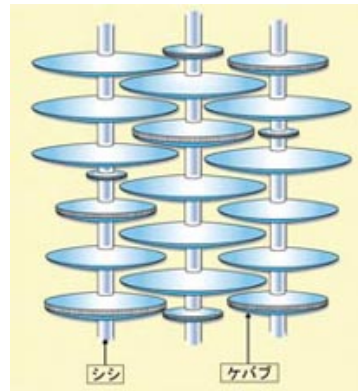
球晶構造(高分子溶融体から作られる)

ラメラ結晶

~ 10nm



シシケバブ構造 (流動下で作られる)

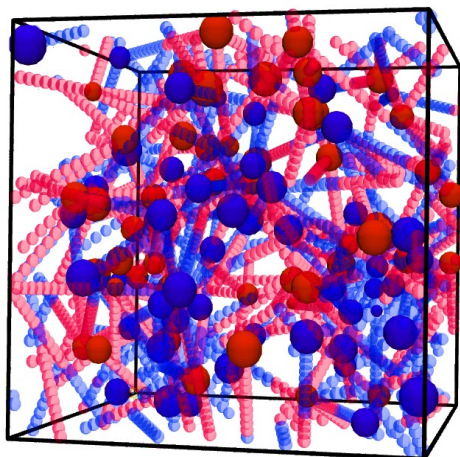


提案した研究内容

4/6

高分子材料の階層構造と物性を情報科学の手法を使って繋ぐ

① ネットワークポリマーの 不均一な繋がり

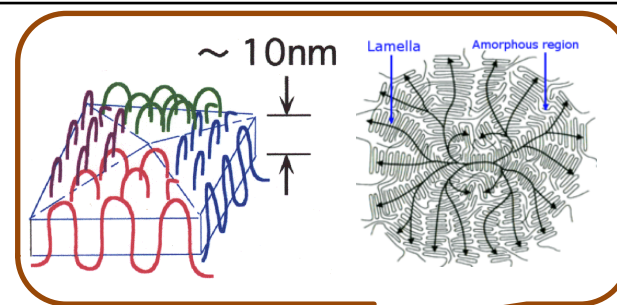


複雑ネットワーク科学

メゾ構造特徴量

物性

② 結晶性高分子の階層構造



化学構造

成形プロセス

メゾ構造
特徴量

物性

機械学習

放射光測定

逆空間の画像データ ($\text{\AA} \sim 100\text{nm}$)

顕微鏡測定

実空間の画像データ ($\sim 10\mu\text{m}$)

✓ メゾ構造を解釈できる階層的な構造物性相関

複雑ネットワークに基づくエラストマーの構造物性

5/6

近接中心性を用いる事で、応力を決めるパラメーターを線形的に記述できた

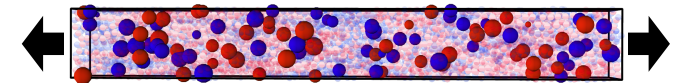
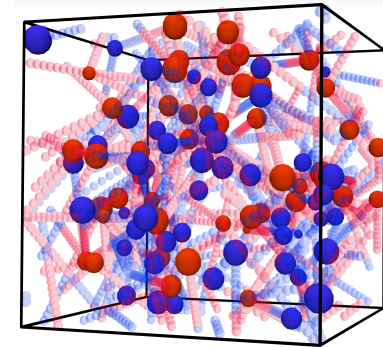
トポロジー

- 近接中心性

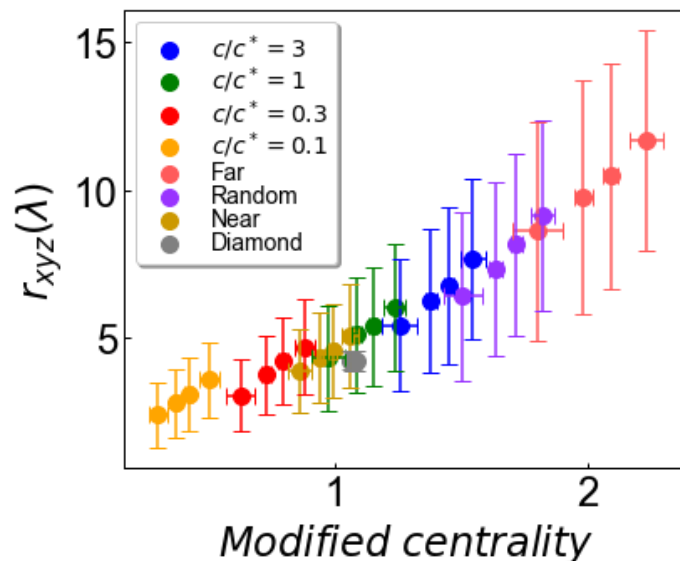
空間としての距離

- 初期の架橋点間距離

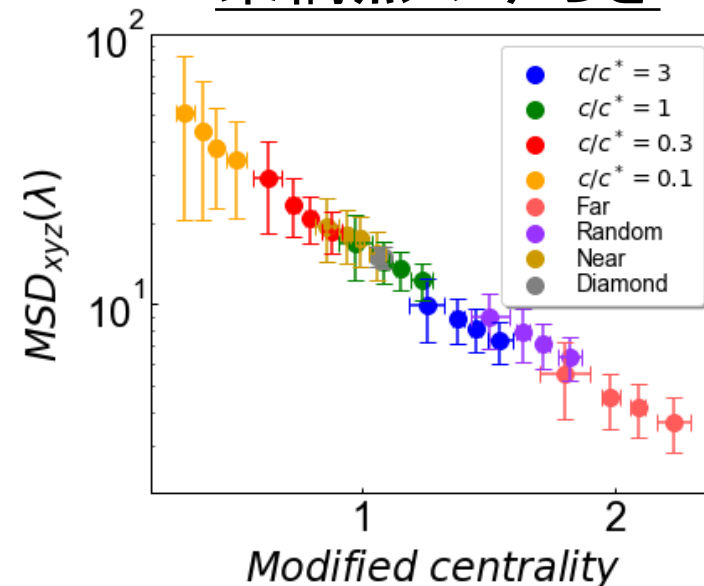
統一的なパラメーター



架橋点間距離



架橋点のゆらぎ

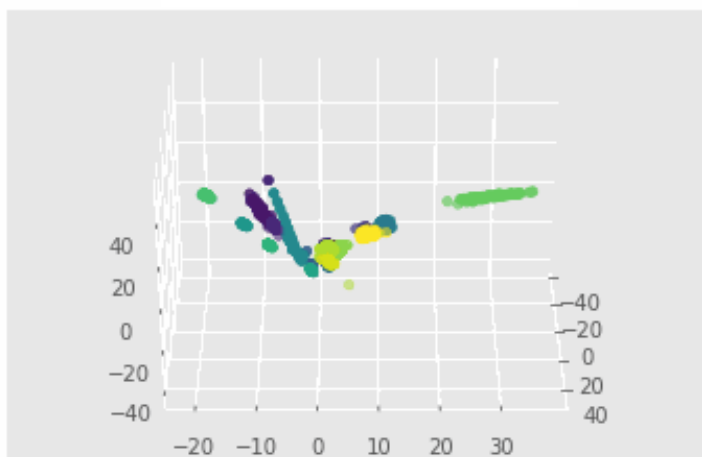


メゾ構造を反映した放射光測定データの次元圧縮

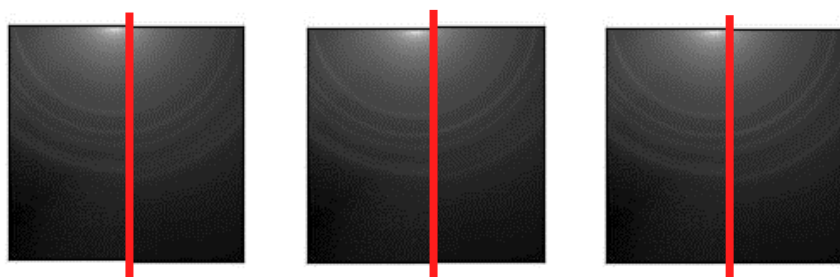
6/6

次元圧縮した後、元の画像を再現することから特徴を掴んでいると考えられる

主成分分析



・第一主成分 ・第二主成分 ・第三主成分



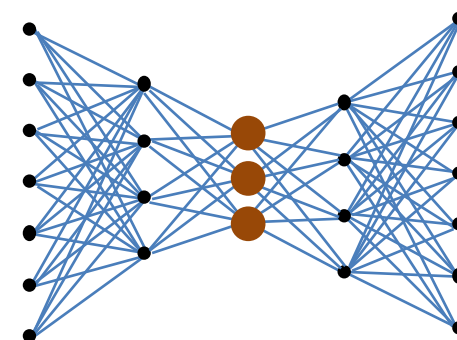
復元率 47.8%

75.1%

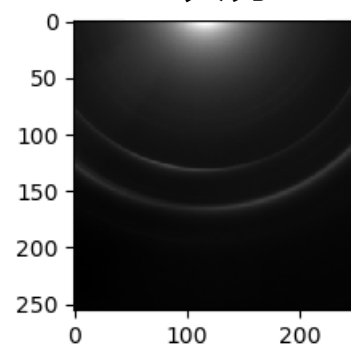
84.7%

← 元の画像 → 修復画像

オートエンコーダー



入力



出力

