

データ駆動型高分子材料研究のための産学連携コンソーシアムの形成

高橋 愛子 ものづくりデータ科学研究センター 特任研究員

背景と目的

- データ駆動型材料研究において、学術基盤となるのは体系的なデータベースである。
- 高分子材料分野において、現時点でデータ駆動型研究に資する高分子物性データベースは存在していない。

【原因】

- ①コモンデータ創出に対する意識の低さ
- ②コストの高さ
- ③産学の垣根が低いことによるインセンティブの低さ

データベース	概要
PolYInfo (polymer.nims.go.jp)	学術文献から抽出したデータをまとめたデータベース。18,015種類のモノマーから重合されたポリマー群の約100物性のデータを収録している。
Polymer Genome - Khazana (khazana.gatech.edu)	24の出版物から抽出した実験データと第一原理計算で算出した物性値を提供しているプラットフォーム。データベースには、1,412種類の結晶性ポリマーと2,657種類の無機材料の特性データが収録されている。
Polymer Property Predictor and Database (pppdb.uchicago.edu)	文献から抽出した263件のFlory-Huggins χ パラメータと212件のガラス転移温度のデータを含む。
NanoMine (materialsmine.org)	ポリマーコンポジットの微細組織構造の組成、プロセス、電子顕微鏡データ、物性を含む。
CROW (polymerdatabase.com)	ポリマーの熱物性データを含むデータベース。文献から抽出した実験データや定量的構造活性相関解析から算出した計算物性のデータを含む。
Polymers: A Property Database (poly.chemnetbase.com)	Wiley出版社の書籍“Polymers: A Property Database”の付録として提供されている高分子物性データ

図1. 現在存在する主な高分子データベース

コンソーシアムの構築

分子動力学(MD)シミュレーションによる高分子物性計算を全自動化するソフトウェアRadonPyを用いて、10万種類以上の分子骨格を包含する体系的なデータベースの構築を目指す。

- 現在、1国研・3大学・24企業が参加
 - ➡ 組織の垣根を越えてデータを共同生産・共有
- 2021年度のスパコン「富岳」成果創出加速プログラムに採択
 - ➡ 多数の参画機関で協力し、富岳上でデータを生産する環境を整備
- 各月で開催されるミーティングやSlackを活用したコミュニケーション
 - ➡ MDシミュレーションやスパコンの専門知識を持たないメンバーの人材育成

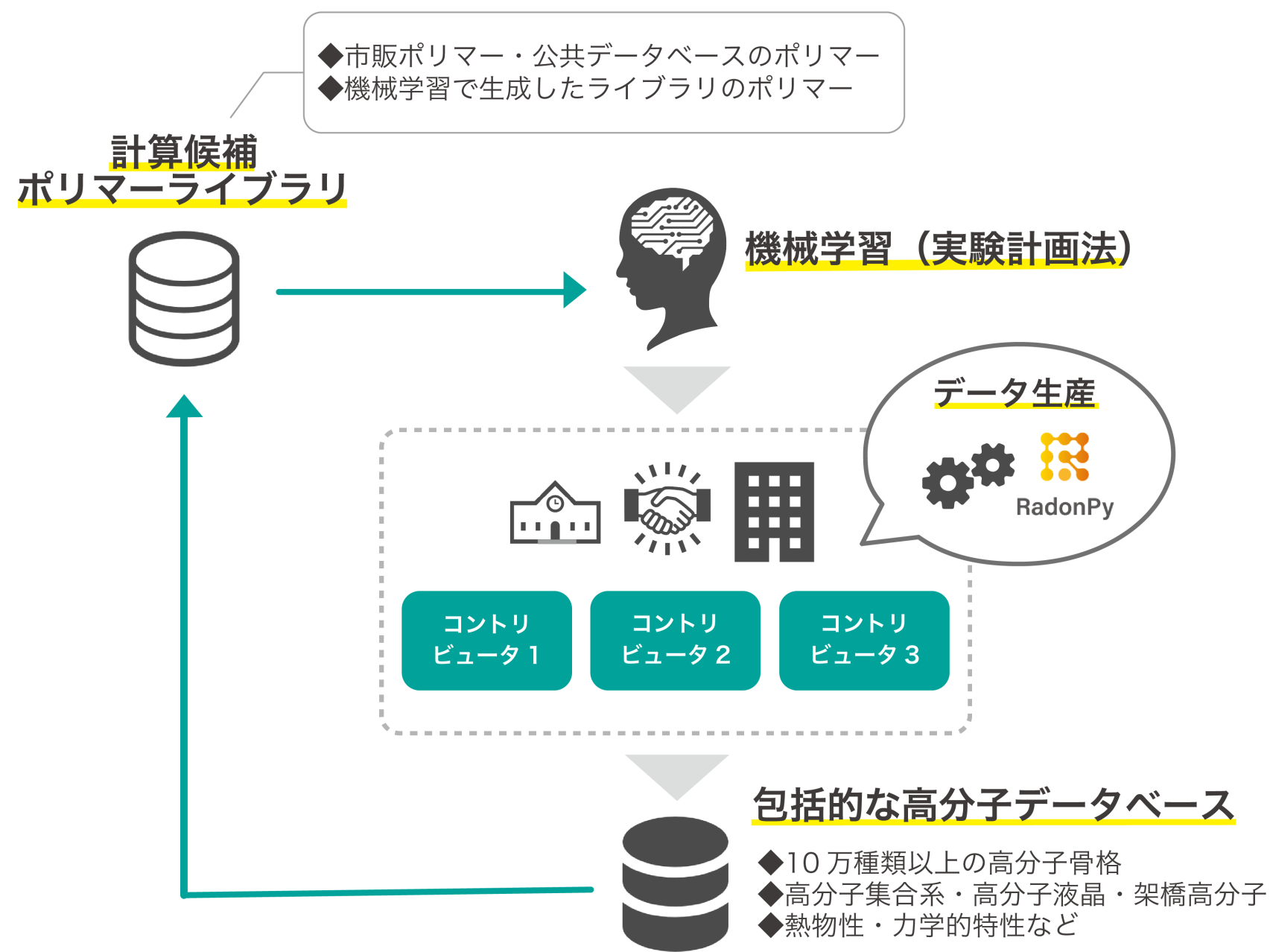


図2. コンソーシアムによるデータ生成の仕組み

結果

- 2021年度から2022年度にかけて、約4万骨格のアモルファスポリマーの15物性の計算を実施し、大量のポリマーの複数物性の同時分布を観測することに成功。
- 本コンソーシアムの参画者の一部はRadonPyの開発に加わり、ガラス転移温度、溶媒和自由エネルギー、レオロジー特性、熱硬化性樹脂の自動計算手法の開発に取り組んでいる。

展望

- 10万種類以上の分子骨格を包含するポリマーの物性の大地図の作成を目指す。
- 分野・組織・国境の垣根を超えたデータベースの共創、産学融合というモデルケースを社会に発信していく。

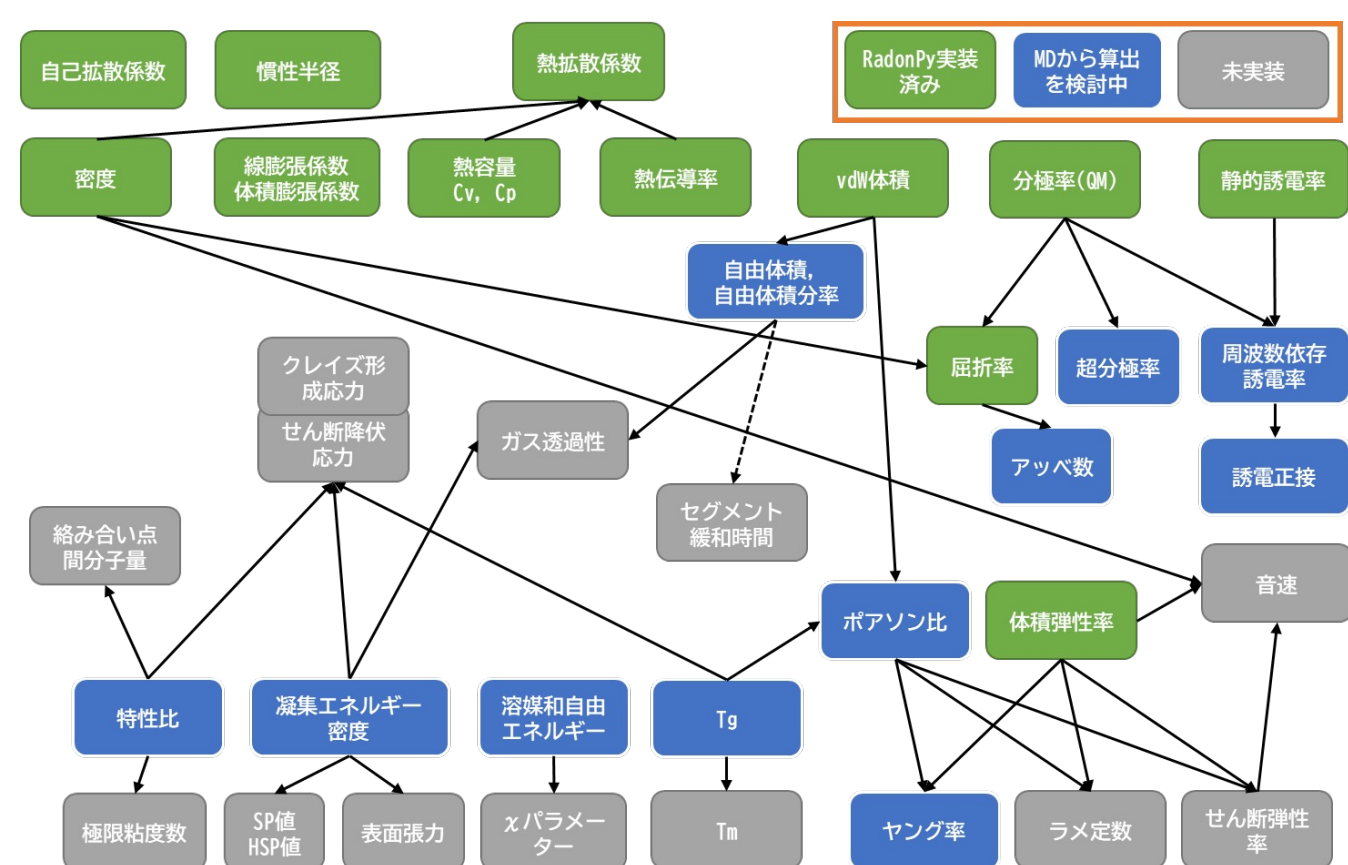


図3. 計算対象物性の拡張計画

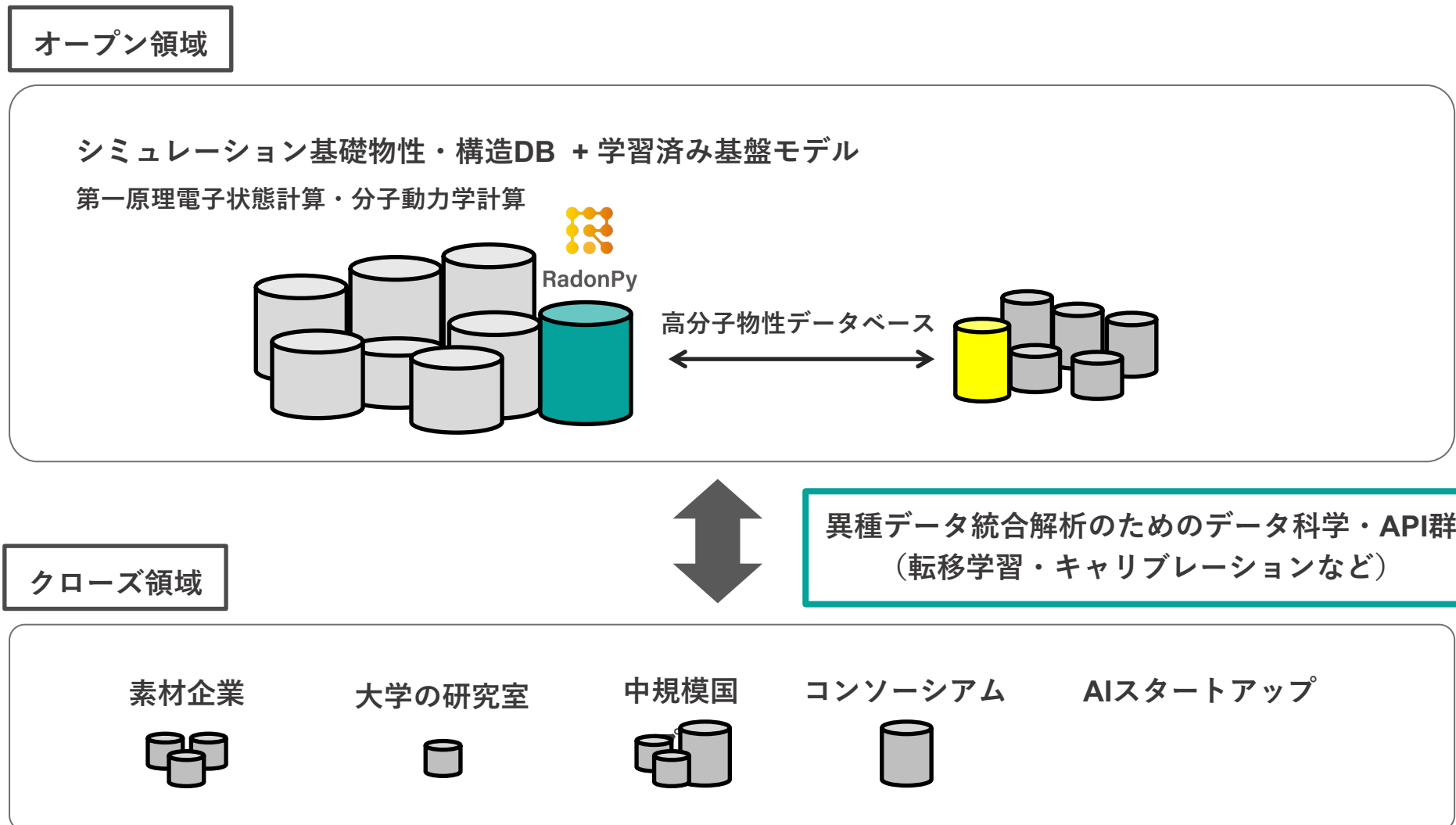


図4. データ駆動型高分子材料研究ロードマップ

参考文献

- Hayashi, Y., Shiomi, J., Morikawa, J., Yoshida, R., RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. npj Comput Mater 8, 222 (2022).
- <https://github.com/RadonPy/RadonPy>