

<記者用説明文>

公開データの AI 分析で強度と生分解性を両立させるバイオ由来樹脂用添加剤を探索し実証

株式会社日立製作所 研究開発グループ 坪内繁貴、岩崎富生 ☎070-4209-2476

学会発表番号 2PA27

<研究成果のポイント>

- 公開データの AI 分析により独自データ無しでバイオ由来樹脂用添加剤を抽出
- 抽出された添加剤が樹脂の機械強度と生分解性を向上させる効果を実験的に実証

<研究成果の概要>

カーボンニュートラルの実現に向けて、製造業などでバイオ由来樹脂の活用ニーズが高まっています。本研究では、バイオ由来樹脂の適用拡大に向けて、日立ハイテクソリューションズ の材料探索ツール **Chemicals Informatics** を活用する事で、独自データ無しに公開データからバイオ由来樹脂の強度と生分解性を向上する添加剤を探索し、抽出した有望添加剤を含む樹脂を製作することで実験的にそれらの向上効果を実証しました。本技術の適用によりバイオ由来樹脂の適用拡大が期待できるとともに、汎用性樹脂の易解体技術への応用展開によりサーキュラーエコノミー社会の実現にも貢献できます。



図1 有望添加剤のバイオ由来樹脂の生分解性の促進

<研究成果解説文>

公開データから探索したバイオ由来ポリ乳酸樹脂用添加剤の効果実証

PMF Polymer Preprints, Japan 2022, 31

著者名：坪内繁貴¹、岩崎富生^{1*}、浅利裕介¹、磯部隆史²、黒川麗³、青木大輔³

著者所属

1. 日立製作所 研究開発グループ
2. 日立ハイテク
3. 日立ハイテクソリューションズ

* E-mail: shigetaka.tsubouchi.xn@hitachi.com

公開済みの特許、論文、PubChem（アメリカ国立生物工学情報センターが維持管理する化学分子データベース）等の1億以上のデータを、独自の自然言語処理、新規化合物生成、化合物探索の三つの AI 技術で分析し、目的の特性をもつ既知・未知の化合物を抽出する **Chemicals Informatics (CI)** を開発した。本研究では、バイオ由来樹脂であるポリ乳酸の機械強度および生分解性を向上させる添加剤を CI の活用により抽出し、実験的にその効果を検証した。CI で抽出した有望添加剤 (c) アジピン酸と、(d) 3,3'-ジチオジプロピオン酸、比較添加剤として同じジカルボン酸の (a) イソフタル酸と、(b) テレフタル酸を、ポリ乳酸樹脂に各 10wt% を混合した試験片を製作した。製作した試験片により、引張試験による降伏強度と、60°C 環境下での 0.1N NaOH 水溶液浸漬における加速加水分解試験を行い、添加剤によるポリ乳酸樹脂の降伏強度と加水分解性への影響を評価した。

降伏強度において、比較添加剤の (a)、(b) を含む樹脂は、無添加より低下したのに対し、CI 抽出の有望添加剤 (c)、

(d) を含む樹脂は、無添加に比べ 10 MPa 以上の向上が見られた [図 1(i)]。また、加水分解性において、(c)、(d) を含む樹脂は、無添加、(a)、(b) を含む樹脂に比べ NaOH 水溶液浸漬による重量減少が大きく、(c) は全体が小片に分解し、(d) は表面層の剥離により全体的に脆くなることが確認された [図 1(ii)]。以上より、CI で抽出した有望添加剤の (c)、(d) を含むポリ乳酸樹脂が、降伏強度を向上し、加水分解を促進させる事を実証した。

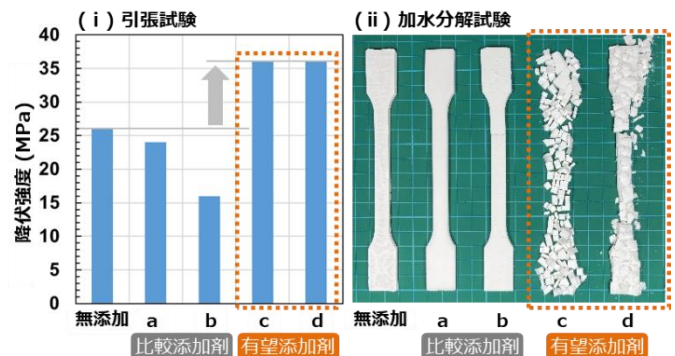


図1 ポリ乳酸樹脂の降伏強度と加水分解性