

<記者用説明文>

高分子材料開発のオープンイノベーションプラットフォーム構築に向けて

三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center 杉澤宏樹、樹神弘也 ☎070-4203-8466
学会発表番号 3H04

<研究成果のポイント>

高分子材料開発のオープンイノベーションプラットフォーム構築に向けた、高品質なガラス転移点データの計算スキームを確立！
～スーパーコンピュータ「富岳」を使った高分子材料が柔らかくなる温度(軟化温度)のデータベース構築を目指して～

<研究成果の概要>

計算データによるオープンイノベーションプラットフォームの構築を目的として、「富岳」成果創出プログラム「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」に参画している。これまでの分子動力学計算により、約 300 種におよぶガラス転移点(高分子の軟化温度)のデータを自社のスパコンにて生成した。その結果は特にガラス転移点の高い高分子のデータが実験値と大きく乖離していた。そこで原因を究明し問題点を改良することにより、高品質なガラス転移点データを生成するための新たなハイスループット計算スキームを見出すことに成功した。

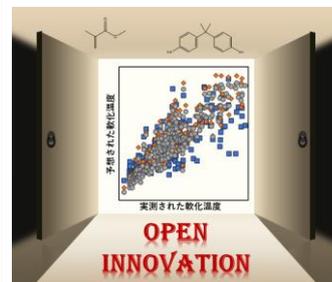


図1 自社スパコンを活用して生成した約 300 種の高分子材料のガラス転移点

<研究成果解説文>

データ駆動型高分子材料開発を見据えたガラス転移点に関するハイスループット分子動力学計算

Polymer Preprints, Japan 2022, 71

著者名: 杉澤宏樹^{1*}、遠藤 潤¹、白鳥和矢¹、樹神弘也¹

著者所属

1. 三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center, Materials Design Laboratory

* E-mail: sugisawa.hiroki.ma@m-chemical.co.jp

2011 年以降、マテリアルゲノム計画を皮切りにマテリアルズ・インフォマティクスへの注目が急速に高まってきた。その背景には、これまでに蓄積してきたデータを有効活用することでより高速に新規材料を開発したいという期待がある。一方、近年では「Garbage-in, Garbage-out」と言われるようにデータをただ収集すれば利用できるわけではなく、その質と量にこだわる必要性が指摘されている。そこで本研究では重要な高分子特性の一つである「ガラス転移点」に注目し、高品質なデータを蓄積するためのハイスループット分子動力学計算技術を検討した。

自社で保有するスパコンを用いた分子動力学計算により約 300 種におよぶ高分子のガラス転移点を計算した結果、特に高いガラス転移点のデータが実験結果と乖離することがわかった。この結果を受け、既存手法の問題点の改良を行い、高品質なガラス転移点データを生成するためのハイスループット分子動力学計算スキームを新た

に見出した。本研究は「富岳」成果創出プログラム「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」の一環であり、「富岳」による大規模データ生成での活用を目指している。

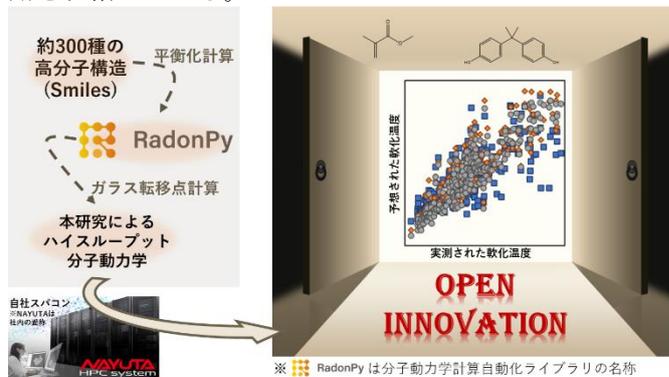


図1 Smiles からガラス転移点を計算するスキーム