

ソフトアクチュエーターに必要な大変形材料の開発を加速 —ターゲットとする特性を発揮する分子構造を機械学習から特定—

NEDOは超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトに取り組んでおり、今般、産業技術総合研究所、先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)と共同で、ソフトアクチュエーターなどに必須の抵抗なく大変形する材料の開発を加速する手法を開発しました。

本手法は、ソフトアクチュエーター材料として研究開発競争が活発な液晶エラストマーに適用されました。分子構造を表す多数のパラメーターとその材料変形のシミュレーション結果をデータベース化し、機械学習を用いて解析することで、大変形の特性を決定する分子構造パラメーターを特定し、約1/10に絞り込むことに成功しました。これにより、ソフトアクチュエーター材料の大きな特徴である、抵抗(出力のロス)のない大変形“Soft-Elasticity”が発現する分子構造の有力候補をごく短時間で提案可能になり、革新的なソフトアクチュエーター材料の開発期間の大幅な短縮が期待できます。さらに、本手法はエラストマー、ゲルなどの大変形を特徴とするさまざまな材料開発への応用が期待できます。

なお、本手法の詳細を2020年9月16日から18日まで公益社団法人高分子学会がオンラインで開催する「第69回高分子討論会」で発表する予定です。

1. 概要

高分子などの柔らかい材料を用いたアクチュエーター^{※1}(ソフトアクチュエーター)は小型・軽量・静音・耐水などさまざまな利点があり、動力源も熱・電気・光などと豊富です。その上、筋肉のように曲線的で繊細な動きに対応できるため、より生活に近い場所での活躍が見込まれており、特にリハビリ・介護のための作業補助・パワーアシスト用ウェアラブルマシンや医療手術支援のための遠隔操作マシンなどへの応用が期待されています。しかし、これまでの材料開発工程では技術者の「勘と経験」による試行錯誤が繰り返し行われ、多大なコストや時間を要することが課題となっていました。その解決手段の一つとして、計算科学に基づく各種シミュレーション技術の開発が行われてきました。近年の計算機性能の向上や各種ソフトウェアの開発に伴い、実用的な材料設計・探索の手段として期待されるほどの発展を見せています。

このような背景のもと、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)は「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(2016～2021年度)において計算・プロセス・計測の三位一体による有機・高分子系機能性材料開発の高速化に取り組んでいます。その一環として、国立研究開発法人産業技術総合研究所(産総研)、先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)と共同で、ソフトアクチュエーターの有力な材料候補である液晶エラストマー^{※2}を主なターゲットとし、分子から目視レベルまでの材料変形を観察できるマルチスケールシミュレーションの実現を目標とする基盤技術の研究開発を行い、革新的なソフトアクチュエーター材料の開発につながる計算技術の構築を目指しています。

今般、本プロジェクトでNEDOと産総研、ADMATは共同で、ソフトアクチュエーターなどに必須の抵抗なく大変形する材料の開発を加速する手法を開発しました。

この手法は、ソフトアクチュエーターの材料として研究ベースで開発競争が活発に行われている液晶エラ

ストマーに適用されました。分子構造を表す多数のパラメーターとその材料変形のシミュレーション結果をデータベース化し、機械学習を用いて解析することにより、大変形の特徴を決定する分子構造パラメーターを特定し、約1/10に絞り込むことに成功しました。これにより、ソフトアクチュエーターの材料の大きな特徴である抵抗(出力のロス)のない大変形“Soft-Elasticity^{※2)}”が発現する分子構造の有力候補をごく短時間で提案することが可能であり、革新的なソフトアクチュエーター材料のための開発期間の大幅な短縮が期待できます。

なお、この手法の詳細を2020年9月16日から18日まで公益社団法人高分子学会がオンラインで開催する「第69回高分子討論会」で発表する予定です。

第69回高分子討論会 <https://main.spsj.or.jp/tohron/69tohron/index.html>

2. 今回の成果

(1)ソフトアクチュエーターの材料の大変形を左右する分子構造を特定する手法を開発

今回の手法は、分子構造とシミュレーションにより得られる材料変形との関係に焦点を当て開発しました。本プロジェクトで開発した要素技術の一つである液晶エラストマー粗視化分子動力学シミュレーター^{※3)}では、高分子を一次構造^{※4)}のレベルからデザイン可能であり、さまざまなパターンの液晶エラストマー分子構造を表現できます。例えばこれら一つ一つに対して一軸伸長シミュレーションを行うことで、ミクロな材料変形を反映した応力-ひずみ曲線が得られます。同じ液晶エラストマーであっても、その分子構造が変化すれば材料変形の様態は大きく異なります。特に、液晶エラストマーの特質ともいえる抵抗(出力のロス)のない大変形“Soft-Elasticity”発現の有無も分子構造の変化に左右されることがこれまでの産総研と ADMAT の研究から明らかになっています(図1)。

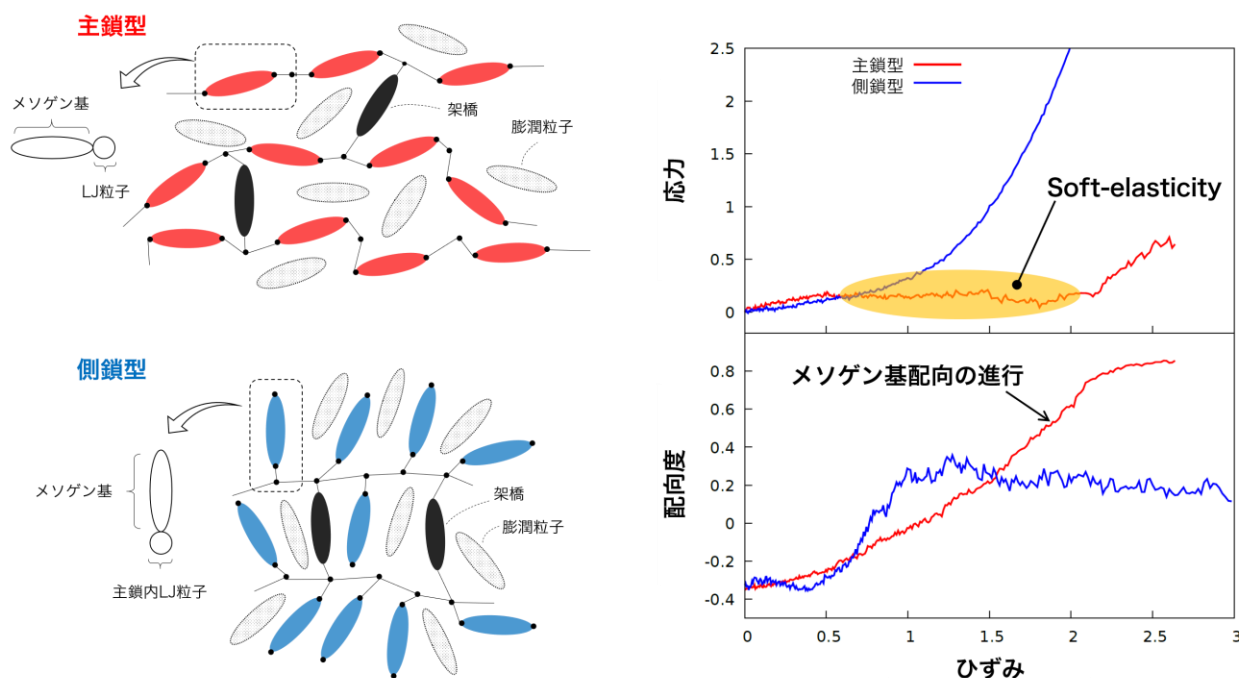


図1 主鎖型(左上)・側鎖型(左下)液晶エラストマー(LCE)の分子構造、および一軸伸長シミュレーションから得られた応力-ひずみ曲線(右上)と配向度-ひずみ曲線^{※5)}(右下)

※主鎖型 LCE では十分なメソゲン基^{※6)}配向と Soft-Elasticity の発現が確認される一方(右上図着色部分)、側鎖型ではメソゲン基が十分に配向せず、Soft-Elasticity が発現していません。

(2) 材料変形のデータと分子構造を決める多数のパラメーターをデータベース化し、機械学習で解析

しかし、分子構造の違いを生み出す設計パラメーターの組み合わせは数百種以上となり、加えてシミュレーション条件の違いも関与するため、これら多数の要素のうちどれが実際の違いに結びついているかを洞察することは困難です。そこで NEDO と産総研、ADMAT は、数値化可能なすべての設計パラメーターおよびシミュレーション条件をデータ記述子^{※7}として扱い、これらがメソゲン基配向の温度依存性や応力-ひずみ曲線などの材料変形の結果を応答変数^{※8}として予測しようという仮定のもとで機械学習を実行しました。その結果、変形前の材料の特徴を示すメソゲン基配向の温度依存性は非常に高い精度で回帰分析が可能であることが示されました(図 2)。

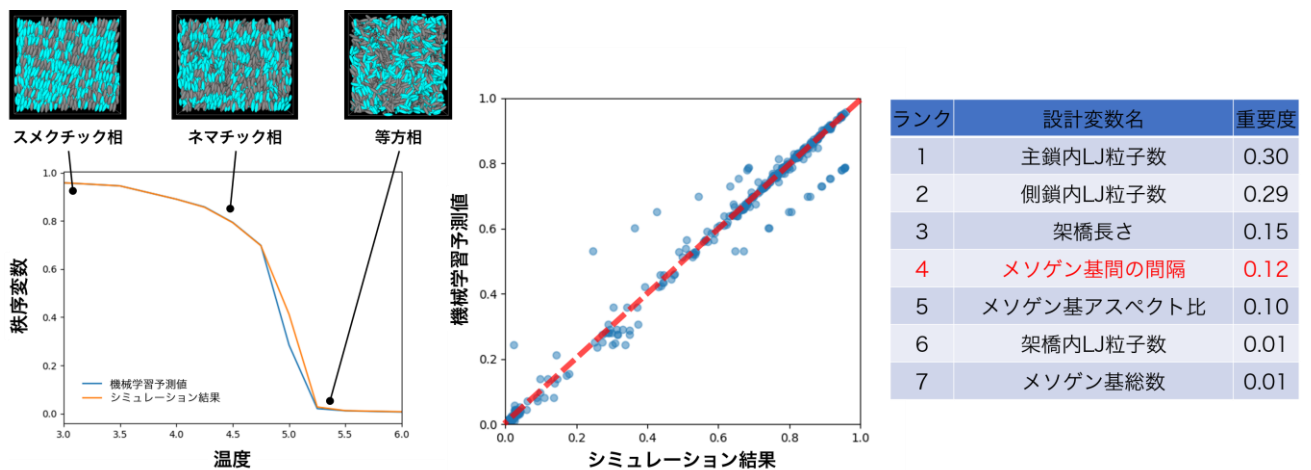


図2 メソゲン基配向の温度依存性を示す曲線(左)、各曲線のデータベース登録値と機械学習予測値との相関関係(中)、および予測値算出における設計パラメーターの重要度ランキング(右)

※各曲線は機械学習を用いて高い精度で予測(回帰分析)可能であること、予測の際に重要な役割を果たした設計パラメーター(右表ランクの順位)を特定できることがわかります。

特に、主鎖に含まれる Lennard-Jones (LJ) 粒子(配向に関与しない球形粒子)の数・側鎖に含まれる LJ 粒子の数・架橋の長さ・メソゲン基間の間隔の四つの記述子がそれぞれ 30%・29%・15%・12%の寄与率で、この物性の大半を決定づけていることが示されました。また、応力-ひずみ曲線についても高い精度で回帰分析が可能であることが示され、伸長前のメソゲン基の配向方向・高分子鎖密度・架橋密度・メソゲン基間の間隔の四つの記述子がそれぞれ 26%・18%・17%・9%の寄与率で物性を決定づけることが判明しました(図 3)。

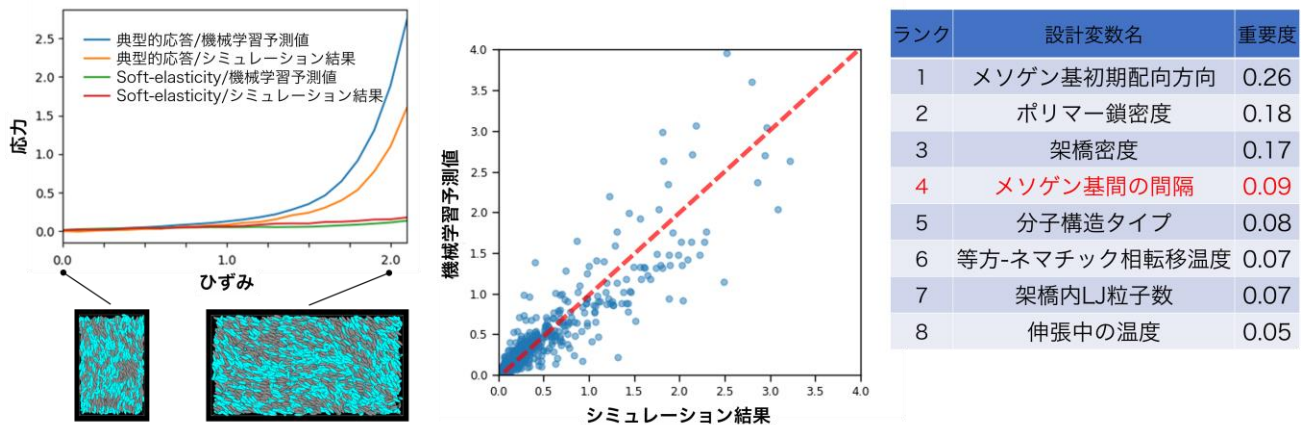


図3 応力-ひずみ曲線(左)、各曲線のデータベース登録値と機械学習予測値との相関関係(中)、および予測値算出における設計パラメーターの重要度ランキング(右)

※メソゲン基配向の温度依存性と同様、各曲線は機械学習を用いて高い精度で予測可能です。また予測の際に重要な役割を果たした設計パラメーター(右表ランクの順位)が特定できます。

これら二つの独立した機械学習において共通して重要視された設計変数パラメーター「メソゲン基間の間隔」は、少なくとも温度変化によるメソゲン基配向と一軸伸長シミュレーションによる応力とひずみの変化の双方に影響を与えます。これはメソゲン基間の間隔が液晶エラストマーの大変形を大きく左右する設計パラメーターであることを意味しています。実際のアクチュエーター材料開発にとっても、分子設計において、まずメソゲン基間の間隔に着目するという分かりやすい指針を立てることが可能であり、重要な手掛かりとなります。

3. 今後の予定

本プロジェクトでは、実在する材料の分子構造に対し、より高度な設計指針を打ち出すためのデータベース拡充および技術開発を行っていくことで、革新的なソフトアクチュエーター開発のための高速な材料選定技術を構築し、また、今回開発した手法を幅広く適用し、国内産業の材料開発への貢献を目指します。

【注釈】

※1 アクチュエーター

外場や電気信号などの外部からの入力を物理的な運動に変換する機械要素のことです。モーターやエンジン、油圧シリンダーなどが一例として挙げられるほか、筋肉も化学エネルギーを運動に変換するアクチュエーターとみなされる場合があります。

※2 液晶エラストマー、Soft-Elasticity

高分子の柔らかな主鎖または側鎖に液晶分子に類似した剛直な分子単位を含む架橋高分子のことです。比較的弱い外場に対して素早く応答し大変形する特徴的な物性“Soft-Elasticity”をもつことから、新規ソフトアクチュエーター材料として開発競争が行われています。

※3 液晶エラストマー粗視化分子動力学シミュレーター

主鎖型、側鎖型に大別される液晶エラストマーの様々な分子構造を粗視化分子モデル(官能基や残基などの原子集団をひとつの粒子に見立てたモデル)の範囲内で再現し、分子動力学シミュレーションを実行可能なシミュレーターです。

革新的機能性材料開発のためのシミュレーターを公開(2019年4月1日ニュースリリース)

https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101089.html

※4 一次構造

高分子鎖の構造です。高分子を構成するユニット(モノマー)の数、分岐の有無、複数のモノマーからなる場合の並び方などを示します。

※5 配向度一ひずみ曲線

メソゲン基の配向状態(オーダーパラメーター)が、変形に従いどのように変化するかをプロットした曲線です。

※6 メソゲン基

ここでは特に、液晶エラストマー分子内に組み込まれた液晶分子に類似した剛直な分子単位のことを指します。

※7 データ記述子

データの特徴を端的に表現する値です。データの性質の一部が何らかの数値に変換されると、データ記述子として利用可能になります。機械学習はこのデータ記述子同士の相関関係を明らかにする手法です。

※8 応答変数

目的変数とも呼ばれます。データ記述子の中で特別に注目したい(=回帰分析や予測、分類の主体となる)記述子を指します。

4. 問い合わせ先

(本ニュースリリースの内容についての問い合わせ先)

NEDO 材料・ナノテクノロジー部 担当:三宅、吉岡、原 TEL:044-520-5223

産総研 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 担当:青柳 TEL:029-861-0419

E-mail: aoyagi.t@aist.go.jp

ADMAT 技術部 担当:松田 TEL:029-856-3580 E-mail: y-matsuda@admat.or.jp

(その他NEDO事業についての一般的な問い合わせ先)

NEDO 広報部 担当:坂本、佐藤、鈴木(美) TEL:044-520-5151 E-mail: nedo_press@ml.nedo.go.jp