

機械学習を用いた π 共役系ポリマーの色予測モデルの開発

SATテクノロジー・ショーケース2021

■ はじめに

電氣的に物体の色を調整することができるエレクトロクロミズムは、調光窓や防眩ミラー、表示素子等に 응용されている。エレクトロクロミズムを示す材料は有機系、無機系など様々なものが知られているが、特に π 共役系ポリマーは、分子構造の精密設計による色の調整が容易かつ柔軟性を有しているため、次世代のフレキシブルなエレクトロクロミック材料として注目されている。

機能性材料の開発においては、これまで蓄積されてきた知識や研究者の経験・勘に基づいて化学構造や合成条件等を変えることで性能の向上を目指している。こうした手法は設計・合成・評価といったサイクルを繰り返す必要があり、一般的に多くの時間と費用を要する。 π 共役系ポリマーの場合でも、エレクトロクロミック材料の特徴として最も重要な材料自身の「色」は、実際に合成して測定するまで分からない。また、 π 共役系ポリマーの色を計算科学によってシミュレーションすることも困難である。したがって、所望の色を示す π 共役系ポリマーの開発には多くの時間と労力を伴う。

近年、機械学習やデータ解析の手法を用いることで、実験データや化学構造、合成条件のみから、未知の化合物の特性を予測することが可能となってきている。データ科学的に予測された結果をもとに実際に合成した材料が、従来の材料よりも高い性能を示す例も多数報告されている。本研究では、実用的なエレクトロクロミック材料用 π 共役系ポリマーの開発を目指して、モノマーの化学構造式およびモノマーの量子化学計算から得られるパラメーターのみから、 π 共役系ポリマーの色を予測する機械学習モデルを構築した。これにより、実際に合成する前に、モノマーの化学構造から得られるデータからポリマーの色を事前に予測することができ、エレクトロクロミック材料の開発に要する時間を大幅に短縮できると期待される。

■ 活動内容

1. 機械学習を用いた色予測モデルの構築

機械学習を用いて π 共役系ポリマーの色を予測するために、まず π 共役系ポリマーの色を数値化したデータを論文から収集した。色の数値化には、現在一般的に使用されている $L^*a^*b^*$ 色座標を用いた。次に、データを収集したポリマーのモノマーの化学構造および量子化学計算から得られるパラメーターを収集した。それらと π 共役系ポリマーの $L^*a^*b^*$ 色座標とを相関付けて機械学習させることで、

色予測を行う機械学習モデルを構築した。

2. 未知の π 共役系ポリマーの色予測と実際の色の評価

1.で構築した色予測モデルに、色が未知の π 共役系ポリマーのモノマーの化学構造および量子化学計算から得られるパラメーターを入力することで、 π 共役系ポリマーの色の予測を行った。予測に用いた π 共役系ポリマーのモノマーを実際に合成・重合し、 π 共役系ポリマーを合成した。合成した π 共役系ポリマーのスペクトル測定から $L^*a^*b^*$ 色座標を算出し、予測された $L^*a^*b^*$ 色座標と比較することで、予測性能の評価を行った。具体的な結果については、当日のポスター発表で議論を行う。

今後は、 π 共役系ポリマーの耐久性や溶解性、応答速度なども同時に予測可能なモデルを構築し、これを活用して実用的なエレクトロクロミック材料を迅速に開発することを目指した研究を推進する予定である。

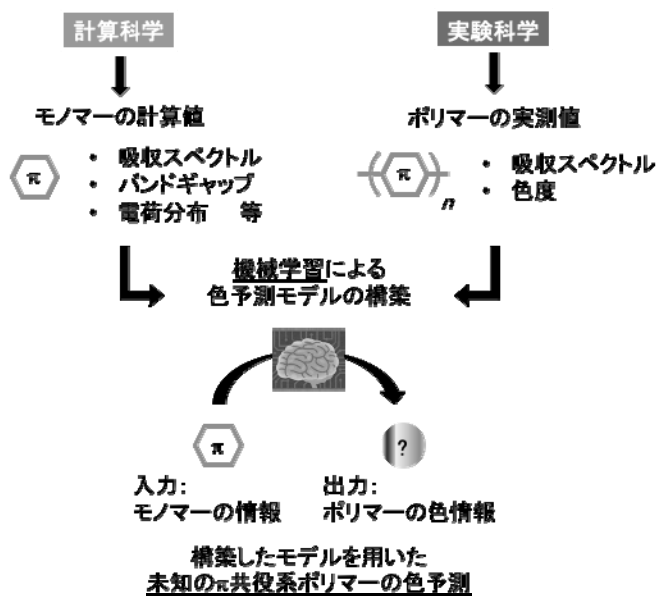


図1. 機械学習を用いた未知の π 共役系ポリマーの色予測の概要

代表発表者 江口 直人(えぐち なおと)
所属 産業技術総合研究所
触媒化学融合研究センター
問合せ先 〒305-8565 茨城県つくば市東 1-1-1
TEL: 029-861-4403
n-eguchi@aist.go.jp

■キーワード: (1)機械学習
(2) π 共役系ポリマー
(3)エレクトロクロミズム

■共同研究者: 甲村 長利 (産業技術総合研究所)
矢田 陽 (産業技術総合研究所)
家 裕隆 (大阪大学産業科学研究所)
陣内 青萌 (大阪大学産業科学研究所)