

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ)
最終成果報告会

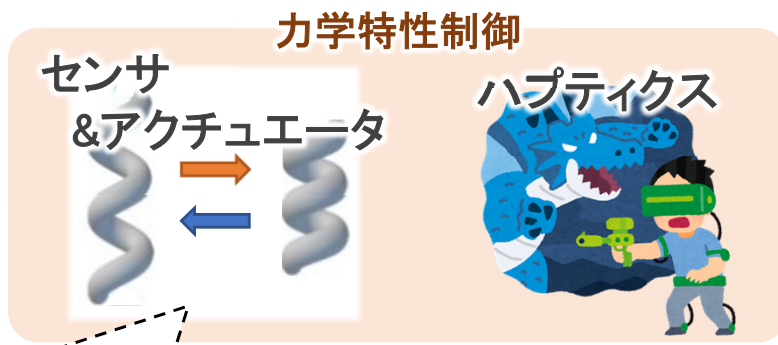
電場応答型高分子
アクチュエータ材料の開発

2022年1月18日(火)

パナソニック株式会社
田頭 健司

外場応答型高分子

既存商材の価値向上・新奇デバイス開発



高分子アクチュエータへの期待

市場背景: 高齢者の生活・健康づくり・社会参画支援が必要

➡ 行動支援デバイス(ロボット)が着目されている

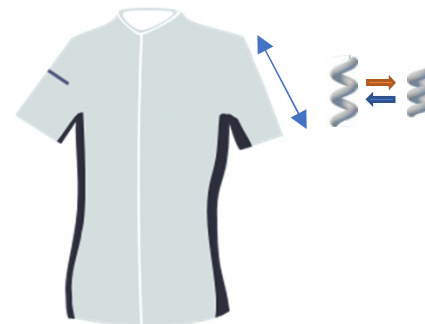
ロボット市場
9.7 兆円(2035年)

NEDO「2035年に向けたロボット産業の将来市場予測(2010)」より



アトウン(株)HPより

- ・重い
- ・複雑

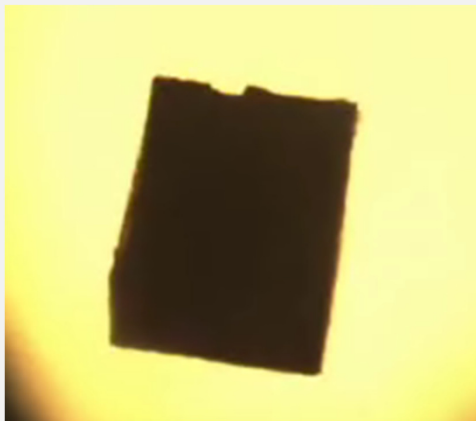
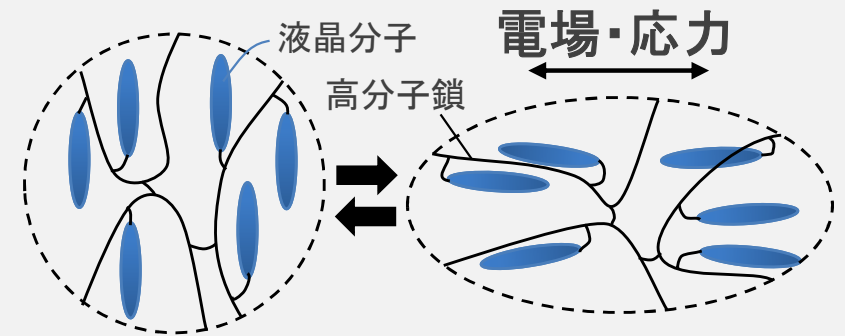


- ・柔軟
- ・軽量
- ・小型(薄型)

ウェアラブルデバイス向け柔軟軽量アクチュエータ材料が必要

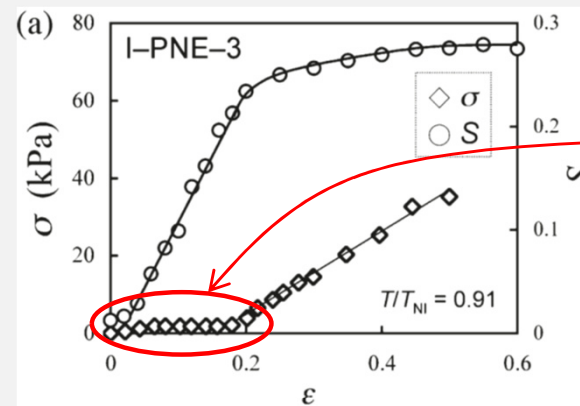
モデル材料：液晶エラストマー (LCE)

液晶 + エラストマー の複合材料
外場に応答し、マクロな変形が誘起される



T. Okamoto et al., *Soft Matter* (2011)

応力-歪み特性(実測)



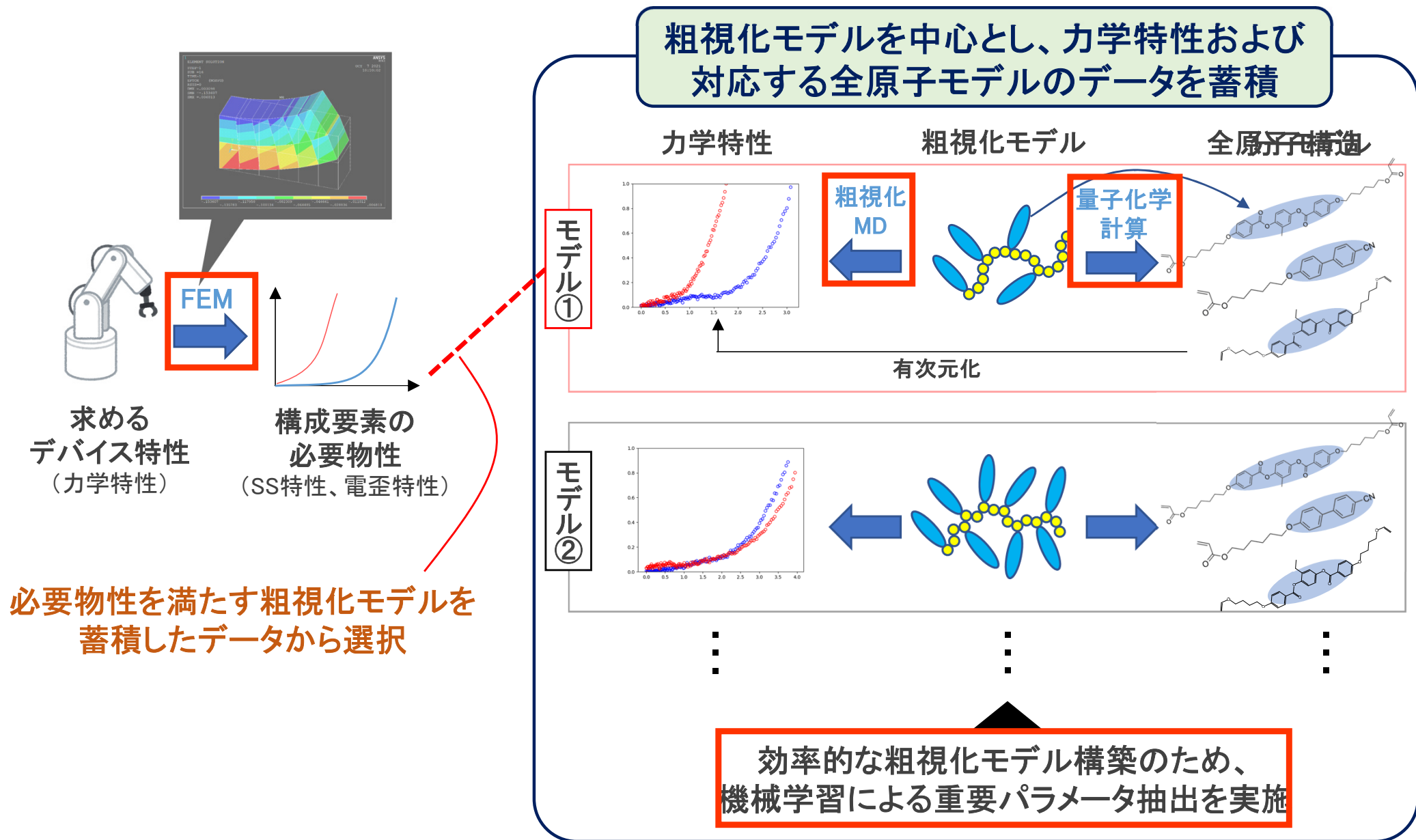
K. Urayama et al., *Macromolecules* **42**, 4084 (2009).

特徴 大変形を担うソフト弾性

LCEの開発加速に向けた力学特性設計シミュレータ・スキームを本プロジェクトで構築し
外場応答型高分子の開発加速ツールとして社内にて拡張・展開していく

超超PJにおける開発の方向性

粗視化を中心とするデバイス力学特性と全原子構造を結ぶシミュレータ



各階層ごとの要素技術開発を完了し、全体検証を実施中

○ 完了、△ 実施中

デバイス力学特性 - 材料力学特性 の紐づけ

- ソフト弾性、電歪特性を再現する構成式の開発

材料力学特性 - 粗視化パラメータ の紐づけ

- LCEの変形挙動を安定的に計算する粗視化モデルの構築
- 蓄積したデータを活用した重要パラメータ抽出環境の構築

粗視化パラメータ - 全原子構造 の紐づけ

- 量子化学計算による紐づけに必要な液晶データベースの構築
- 粗視化パラメータの有次元化手法の構築



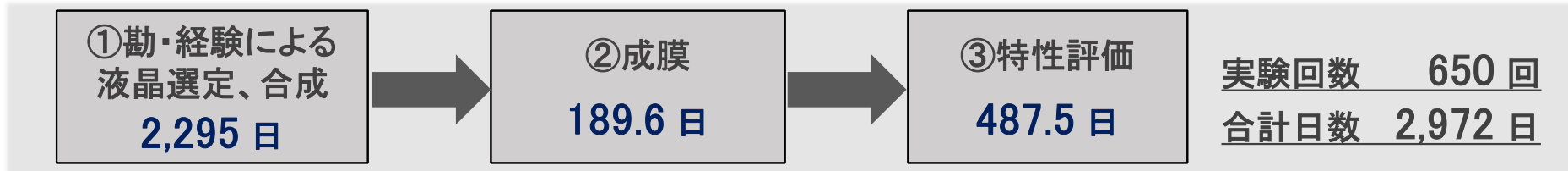
シミュレータ全体 △ 本シミュレータの適用範囲検証

成果概要	<ul style="list-style-type: none">➤ LCEのデバイス特性と分子構造を紐づけるスキーム構築完了➤ 粗視化MDシミュレータ(COGNAC/OCTA)を公開済➤ 期待される材料開発期間短縮効果:1/19
DPFへの登録状況	<ul style="list-style-type: none">➤ 応力-ひずみ特性データ 1300件登録済(100件追加予定)➤ 応力-電場特性データ 150件追加予定
プレスリリース	<ul style="list-style-type: none">➤ 2020年9月16日 NEDO, AIST, ADMAT “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—”
対外発表	<ul style="list-style-type: none">➤ 学術論文 4件➤ 国際学会・講演 4件➤ 国内学会・講演 15件 (内、依頼講演4件)

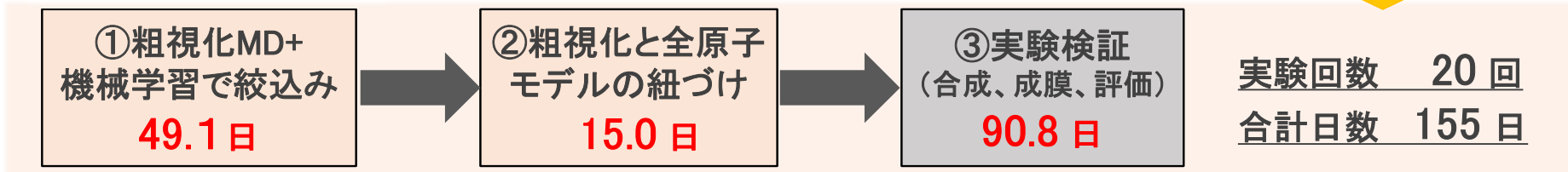
開発の流れ



従来型



プロジェクト型



開発期間短縮率
1/19

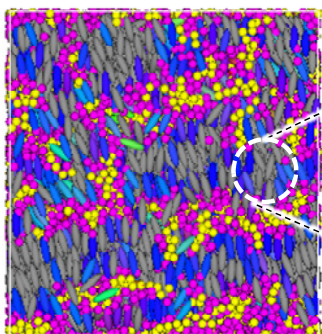
LCEを安定に計算できる粗視化シミュレータを構築

粗視化MD計算
+機械学習

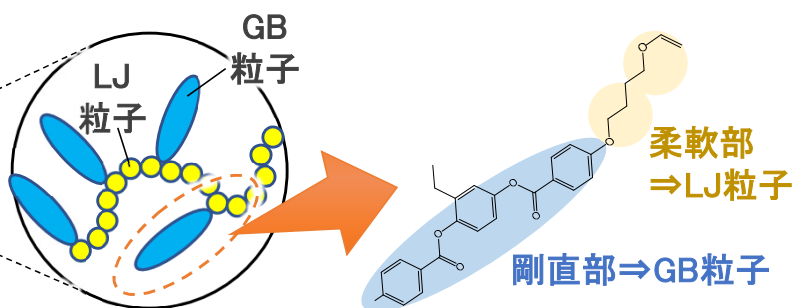
材料力学特性 - 粗視化パラメータの紐づけ

○ LCEの変形挙動を安定的に計算する粗視化モデルの構築

LCEの粗視化モデル GB粒子とLJ粒子でLCEを粗視化

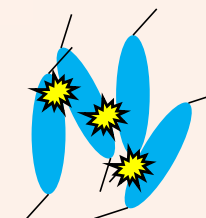


スナップショット



課題

排除体積による
計算の不安定化



相互作用ポテンシャルのソフトコア化により計算安定化

COGNAC/OCTAに以下を実装

非結合相互作用

$$U_j^B = (1 - f_j) U_j^B + f_j U_j^S$$

シグモイド関数 従来のGBポテンシャル ソフトコアポテンシャル

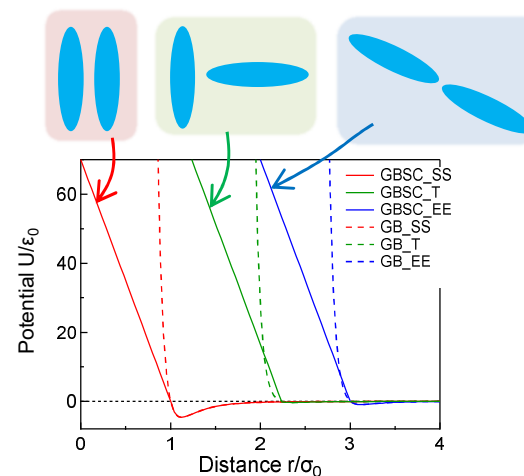
$$U_j^S = m(r_j - \sigma_j)$$

グラフ化

静電相互作用

$$F_e = -\nabla U_e = k \frac{Q}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \text{erf}(\alpha)$$

誤差関数

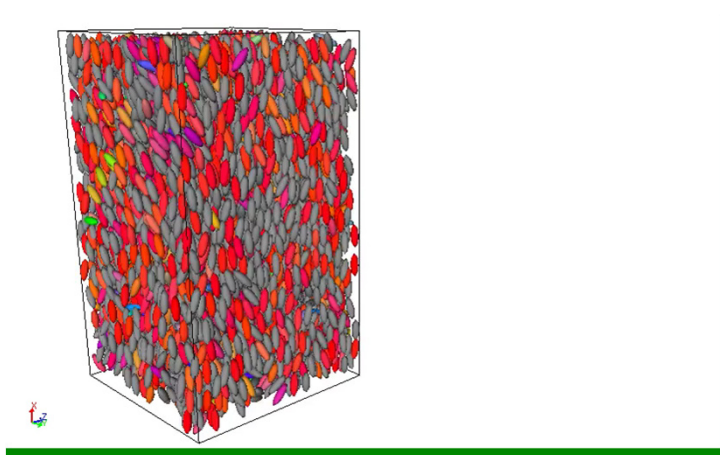


OCTA BBSにて公開 (<https://octa.jp/jp/>)
K. Tagashira et al., Materials 11, 83 (2018).

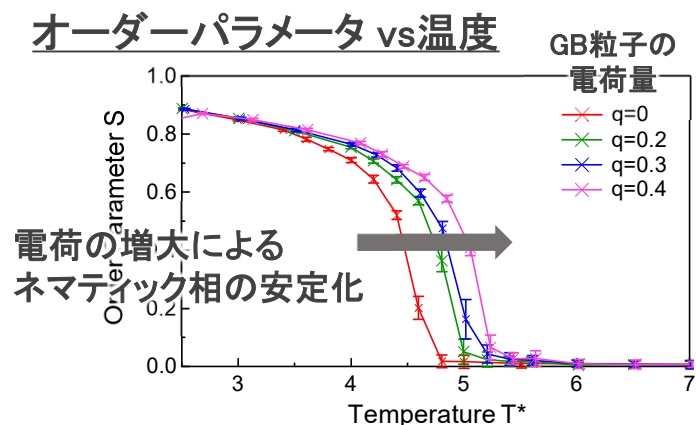
LCEの力学特性解析に成功し、種々の原理解明を実施

引張試験のシミュレーション

計算時間: 約1週間
(全原子計算: 数カ月)

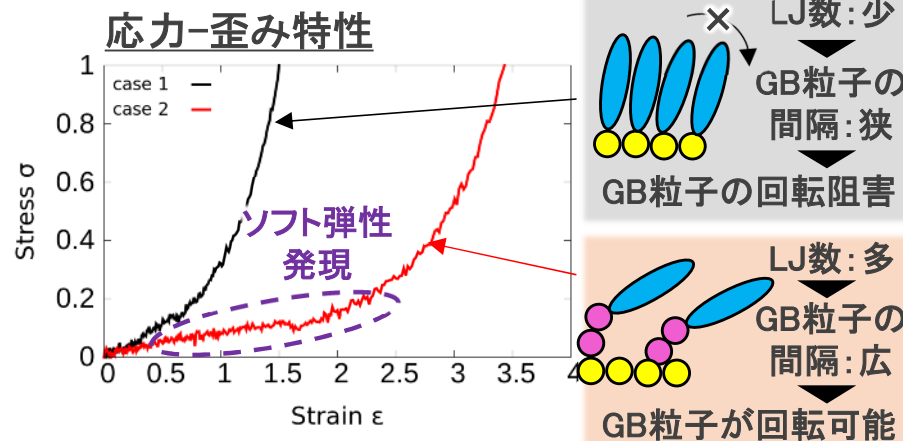


種々の原理解明を実施



双極子モーメントと相転移挙動の相関を解明

K. Tagashira, et al., CECAM Workshop Lincoln, UK, 2018
K. Tagashira et al., Materials 11, 83 (2018).



ミクロな構造と力学特性の相関を解明

保岡悠 ほか、第33回分子シミュレーション討論会(2019)
H. Yasuoka et al., polymer 229, 123970 (2021)

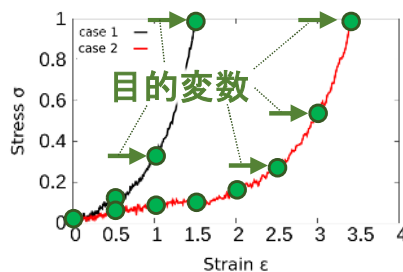
応力-歪み特性を学習し、パラメータの重要度を算出

粗視化MD計算
+機械学習

材料力学特性 - 粗視化パラメータの紐づけ

○ 蓄積したデータを活用した重要パラメータ抽出環境の構築

応力-歪み特性(粗視化MD) ➡ 約1300件蓄積(DPF登録済み)



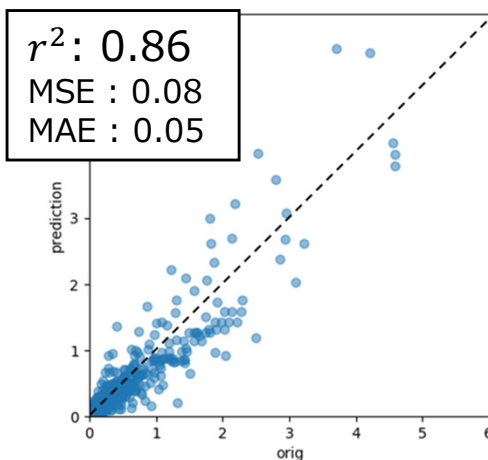
目的変数 : サンプルした各ひずみでの応力値

説明変数 : 粗視化構造パラメータ・計算条件など

回帰モデル : ランダムフォレスト

結果

予測データ vs Simデータ



高い精度($r^2=0.86$)で
応力-歪み曲線の予測可能

重要度解析結果

順位	パラメータ名	重要度
1	初期配向方向	0.264
2	ポリマー鎖密度	0.184
3	架橋密度	0.174
4	GB粒子間の間隔	0.089
5	相転移温度	0.073
9	膨潤分子数	0.009
10	架橋分子長さ	0.008

先述した
重要パラメータ

✓ Simの解析結果(前項)と同様の結論を導き、
機械学習の有効性を実証

2020年9月16日 プレスリリース (NEDO, AIST, ADMAT)

GB粒子の粗視化パラメータの有次元化手法を確立

量子化学計算
+データベース

- 量子化学計算による紐づけに必要な 液晶データベースの構築
- 粗視化パラメータの有次元化手法の構築

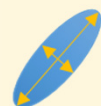
ポイント: GB粒子と液晶分子の紐づけ(絞込み)

手順

粗視化MD

所望のGB粒子を抽出

- ① アスペクト比
- ② 双極子モーメント



全原子(液晶)データベース

(①②を量子化学計算で追加)

所望の①②を満たす
液晶分子候補群を抽出

有次元化による
候補群内での比較

GB粒子の質量、長さ、エネルギーの決定手法が必要

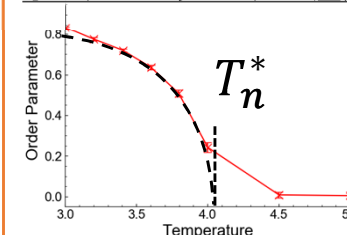
	粗視化空間	全原子空間
短軸長さ	1	σ [m]
質量	1	m [g]
相互作用エネルギー (短軸方向)	1	ϵ [N]

データベースから
決定可能

決定困難
汎用手法なし

相転移温度から ϵ を決定

オーダーパラメータ vs 温度



$$T_n^* = \frac{T_n k_b}{\epsilon}$$

各物性値の有次元化が可能に

(例) 応力 $\tau = \tau^* \frac{\epsilon}{\sigma^3} = \tau^* \frac{\epsilon}{\sigma^3} = \frac{\tau^* T_n}{T_n^*} \frac{k_b}{\sigma^3}$

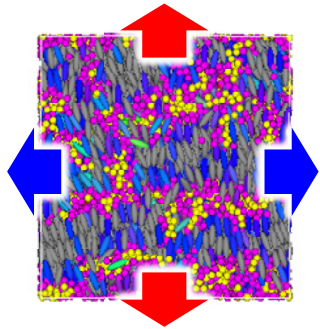
τ : 応力 σ : 液晶分子の単軸径 T_n : 相転移温度

LCEの力学特性を表現する構成式構築に成功

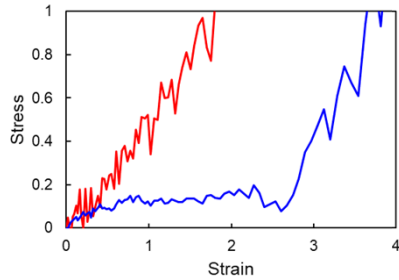
有限要素法

デバイス力学特性 - 材料力学特性 の紐づけ

○ ソフト弾性、電歪特性を再現する構成式の開発



LCEの力学特性の特徴



- 異方性
- 超弾性
- 電場応答性
- 配向変化



これらすべてを扱える
新たな構成式が必要

圧電構成式を改良(ソフト:ANSYS)
配向、ひずみを表す八面体を
各要素に導入

八面体の導入

<p>八面体 液晶</p>	
ランダム配向	一様配向

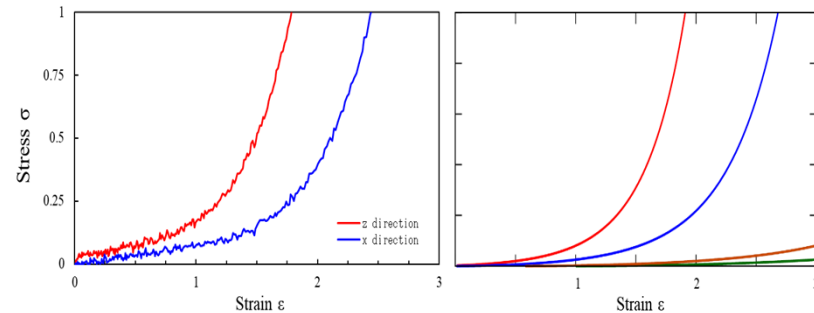
八面体形状よりひずみエネルギーを算出

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{1}{2}(\lambda^2 - 1)$$

フィッティングパラメータ
(粗視化計算結果から算出)

$$u(\lambda) = A \left[\exp(\varepsilon(\lambda)) + \left(\frac{1}{\lambda} - 2 \right) \right] + B(\lambda - 1)^2$$

応力-歪み特性の比較



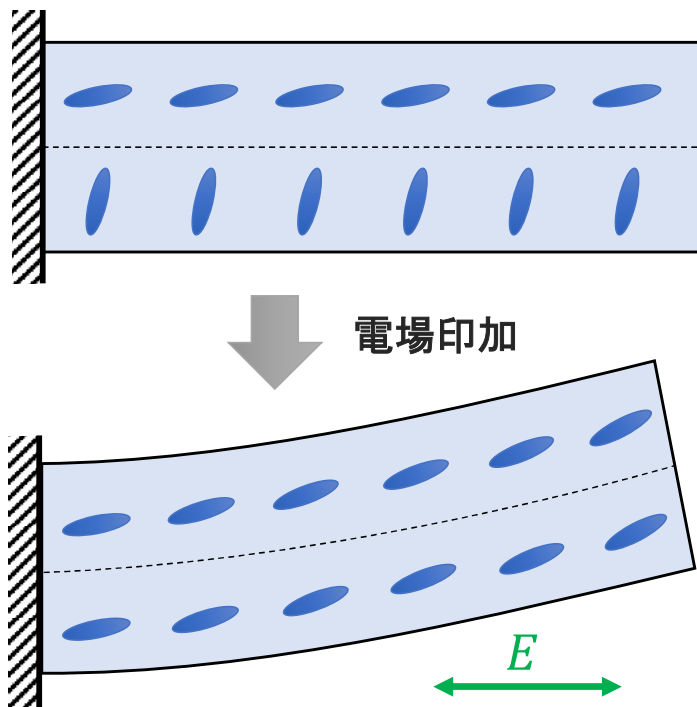
粗視化MD

有限要素法

粗視化MDの結果を良く再現

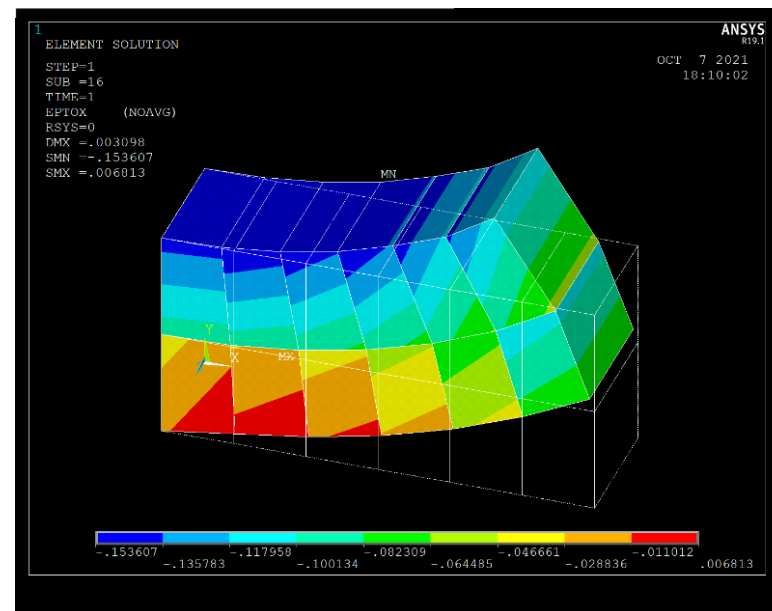
配向分布を有するLCEの変形挙動解析に成功

ハイブリッド配向LCEの電歪解析



有限要素法での解析結果(電場印加時)

水平方向のひずみ量で色付け



実験での駆動例

(光照射による駆動)



A.H. Gelebart et al., Adv. Matter (2017)

想定の変形が得られることを確認

本プロジェクト成果を複数の商材開発へ展開

本テーマ成果

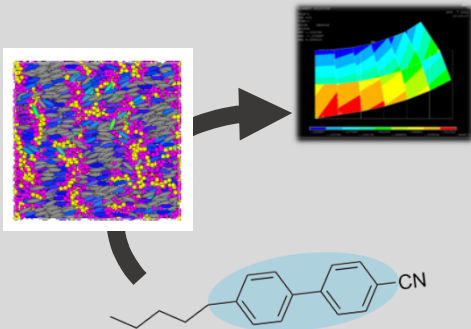
ターゲット

外場応答型高分子

成果

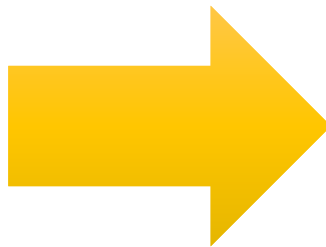
デバイス設計-分子設計
連成スキーム構築

(モデル材料:LGE)

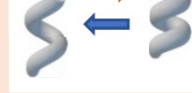


+

超超プロ成果
(他テーマ)



センサ&
アクチュエータ



マクロな力学挙動と
分子構造の紐づけ

ハプティクス



マクロな表面形状と
分子構造の紐づけ

光通信
デバイス



NEDO HPより

複合材料の光学特性と
分子設計の紐づけ

スマート
グラス



電子材料



複合材料の誘電特性
と分子設計の紐づけ

＜産総研＞

高橋 和義

土居 英男

青柳 岳司

福田 順一（～2017.3 現・九州大学）

＜阪大基礎工＞

新里 秀平

尾方 成信

＜パナソニック株式会社・ADMAT研究員＞

保岡 悠（2018.4～）

田頭 健司（～2018.3）

以上