



第2回 技術開発・共用部門オープンセミナー ～MDPF利活用事例の紹介 [PoLyInfo]～

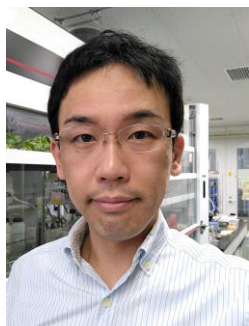
MDPF利活用事例紹介のシリーズでは、NIMSデータ中核拠点（MDPF）が提供するDICEサービスのユーザを講師にお招きし、各サービスをどのように利用し、新しい材料の発見や研究の効率化につながったかについてご紹介いただきます。

PoLyInfoをはじめとしたデータサービス、材料データの利活用に関心のある方々を広く対象にしたオンラインセミナーです。

データベースでの例外的探索を利用した高分子材料開発： 耐熱性かつ透明な高分子材料の探索実践

【講師】 中村 泰之

国立研究開発法人物質・材料研究機構
高分子・バイオ材料研究センター
高分子材料分野
データ駆動高分子設計グループ
主任研究員



【講演内容】

高分子材料の開発において、ビックデータ活用を活用した効率的な探索手法が求められている。一般的にデータベースを活用するときには、高分子の構造情報と関連付けられた物性値をセットで用いる。一方で、目的とする物性値を持たない構造情報に注目することも材料探索法として有用であり、このアプローチではデータベースにおける物性値の欠損領域を積極的に探索する。既知の高分子構造と物性値の組みを除外した探索であるため「例外的探索」と呼ぶことができ、既知材料の未発見機能の探索や、物性値が期待されるがデータの少ない構造的特徴を見いだすことに有効性がある。本研究では包括的な高分子材料データベースである**PoLyInfo**を用いて、この例外的探索を行う手法を開発した。応用例として、実用的に両立の難しい性質である高い耐熱性と無色透明性を併せ持つ高分子材料の開発に取り組んだ。**PoLyInfo**からの耐熱性データと高分子構造データの取得と分析、候補高分子構造の絞り込み、そして実験的検証について紹介する。

【日時】 2024年8月22日（木） 15:00 - 16:00

【開催方法】 オンライン（Microsoft Teams）

【関連するDICEサービス】



<https://polymer.nims.go.jp/>

【参加方法】 事前に参加登録が必要、参加費無料

<https://events.teams.microsoft.com/event/1b97e939-39a8-4e98-9252-6541db2fe91f@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75>



【お問合せ】 国立研究開発法人物質・材料研究機構
技術開発・共用部門 材料データプラットフォーム（MDPF）運営室
mdpf-pr@ml.nims.go.jp

