

馬詰研究奨励賞海外研修等実施報告書

令和 6 年 8 月 29 日

工 学 研 究 科 長 殿

所 属： 化学工学 専攻
課 程： 博士後期課程 2 回生
氏 名： 吉川樹

研修の目的	高分子多孔体の創成及び機械学習の応用に関して最先端の研究室である Toronto Smart Materials & Structures Laboratory において、有機高分子エアロゲルのマテリアルズインフォマティクス手法を開発する。		
研修の期間	2 か月間 (2024/6/24~2024/8/23)		
研修の実施先	日程	滞在地	研修実施機関名等 (指導教員名)
	2024/6/24~2024/8/23	Canada	University of Toronto, (Prof. Hani Naguib)
研修の概要	有機高分子エアロゲルは nm オーダーの孔構造を持つナノマテリアルで、超低密度・超断熱性と剛性を両立することから、航空宇宙産業をはじめ幅広い分野で利用される。一方で、一つのサンプルの作成には数週間を要する場合もあり、試行錯誤的な実験では高い物性が得られる作成条件の広範囲な探索は現実的ではない。そこで、近年発展の目覚ましい機械学習を利用し、過去の実験データから作成条件と物性間の関係を学習したモデルを構築し、新規の作成条件を探索する手法を新たに開発した。		
研修の成果等	過去の論文から、モノマー種をはじめとする作成条件と材料物性のデータセットを収集した。作成条件から物性を高精度に推定する機械学習モデルを作成することに成功した。過去の論文で探索されていない、1,600,000 通り以上の新たな作成条件を生成し、それら条件で材料を作成したときの物性を予測することに成功した。高い物性が予測された条件の中には過去の論文で報告のない化学構造が提案され、それらは高分子骨格化学の観点から妥当な構造であることが確認された。本研修の成果は学術論文としてまとめており、近日中に国際学術雑誌に投稿予定である。		
そ の 他 ※本海外研修経験による将来の抱負等	本研修を通して国際共同研究の経験を獲得したことは、今後研究者としてのキャリアを積むうえで、非常に価値のある経験であったと考えている。新たな研究成果の獲得や語学力の向上はもちろん、多様なバックボーンを持つ研究室メンバーを尊重し合う姿勢や新たな環境に適応する能力を獲得できた。このような貴重な研修をご支援いただいた故馬詰彰様およびその御遺族、運営委員会の皆様に深く感謝申し上げます。		