

令和 4 年 6 月 17 日現在

機関番号：82502

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18H03850

研究課題名（和文）インフォマティクスと構造データを活用した高分子材料の機能予測研究

研究課題名（英文）Investigation of the functional prediction of polymer materials base on informatics and structural data

研究代表者

前川 康成 (Maekawa, Yasunari)

国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・高崎量子応用研究所・副所長

研究者番号：30354939

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 33,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、放射線グラフト重合で作製した高分子機能性材料の導電性などの機能予測に、ランダムフォレスト法が適していることを見出した。機能性に影響を及ぼす重要なパラメータを解明することで、機能向上のための材料設計指針を得ることができた。また、量子ビームを用いた高分子機能性材料の構造解析により、機能性発現の構造的要因を明らかにするとともに、機能予測のための構造データを取得することができた。更に、粗視化分子動力学シミュレーションにより構造の可視化、及び数値化に成功し、本シミュレーションが構造データの拡充に有用であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高分子機能材料は、無機材料に比べ、機能性を支配する組成、化学構造や階層構造など特徴パラメータが多いため、機械学習の適用が困難とされてきたが、本研究において、高分子機能性材料の機能予測手法の構築、機能発現の構造因子解明などの成果を上げたことは、学術的に意義がある。また、高分子機能性材料にインフォマティクスを活用できることを示したことで、日本が得意とする機能性材料の研究開発の更なる国際競争力強化をもたらすと期待される。

研究成果の概要（英文）：In this study, we found that the random forest method is suitable for predicting the properties such as conductivity of polyelectrolyte membranes produced by the radiation grafting technique. We elucidated the important parameters that affect functionality to obtain the material design points for improving functionality. In addition, by structural analysis of polymer functional materials using X-ray and neutron beam, we also clarified the structural factors and obtain the structural data for functional prediction. Furthermore, we succeeded in visualization and digitization of the structure of polyelectrolyte membranes by coarse-grained molecular dynamics simulation, and proved that the simulation is useful for expanding structural data.

研究分野：高分子機能性材料

キーワード：高分子電解質膜 燃料電池 放射線グラフト重合 マテリアルズ・インフォマティクス 機械学習 中性子小角散乱 粗視化分子動力学シミュレーション

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

これまで人類が蓄積してきた膨大な材料情報を集めたビッグデータを解析資源とし人工知能を活用することで、従来とは全く異なるインフォマティクスによる機能予測を基にした機能性材料の設計・開発が行われる道が拓かれつつある。そのような環境から、多くの機能性材料の創出において、インフォマティクス活用による激変が予想されている。機械学習などを含む統計解析手法による機能性材料の研究・開発のプロジェクトも複数開始され、2元系、3元系合金系について第一原理計算などを利用した超低熱伝導物質（京都大学）、次世代蓄電池への適用が期待されているイオン伝導体(MIT)、シミュレーション技術を活用したはんだ材料設計(日立製作所)など、構成元素・組成から機能性予測可能なアルゴリズム創出とその逆問題解析による最適組成の提案などの成功例が報告されている。

一方、高分子材料の機能性予測については、2000年頃から、マルチスケール解析という概念をもとに、原子・分子レベルの1次元構造については量子化学計算法で、その分子コンフォメーションや局所的会合状態については分子動力学法で、更に、マイクロメートル以上の機能性発現に不可欠な高次構造については散逸粒子動力学法によるシミュレーション手法によってそれぞれの構造が決定されている。しかし、シンプルな高分子やそのブレンド材料の機械特性やガス拡散係数などが評価されるにとどまっており、有機・高分子機能材料については、無機材料と比較してその機能性を支配する組成、化学構造や階層構造など特徴パラメータが多いにもかかわらず、まだそのデータ量が少ないことから、既存のデータベースや文献データを用いて機械学習などの解析を適用するのが難しい状況である。

2. 研究の目的

本研究では、燃料電池用高分子電解質膜を対象として、諸物性、構造などの説明変数と機能性などの目的変数との相関から重要なパラメータを抽出するための最適な統計解析手法の解明を目指す。放射線グラフト重合技術による高分子機能性材料の機能予測に必要なパラメータを明らかにすることで、放射線グラフト法における重合性の支配因子やグラフト膜の機能性発現の構造因子などを解明する。逆問題解析により、要求される機能性発現のための材料設計指針、重合反応指針を得る。また、X線や中性子による量子ビーム解析技術をフルに活用し、燃料電池用高分子電解質膜の構造解析を行い、得られた知見を構造と機能に関する予測法の確立に資する。さらに、高分子階層構造を再現するマルチスケールシミュレーションを検討し、構造の可視化や構造データの数値化を行うことで、X線小角散乱(SAXS)や中性子小角散乱(SANS)による構造データを補完する。

3. 研究の方法

(1) ランダムフォレスト法による機能性予測

10種類の基材高分子：ポリテトラフルオロエチレン (PTFE)、テトラフルオロエチレン・ヘキサフルオロプロピレン共重合体 (FEP)、テトラフルオロエチレン・パーフルオロアルキルビニルエーテル共重合体 (PFA)、エチレン・テトラフルオロエチレン共重合体 (ETFE)、ポリフッ化ビニリデン (PVDF)、ポリエーテルエーテルケトン (PEEK)、Nylon-MXD6 (Nylon)、ポリエチレン (PE)、ポリエチレンテレフタレート (PET)、ポリエチレンナフタレート (PEN) から作製したグラフト型プロトン伝導高分子電解質膜 (PEM) のプロトン導電率、水和数、導電率/水和数を目的特性として、ランダムフォレスト (RF) 回帰法により解析した。説明変数には、以下の21個を用いた：①イオン交換基密度、②密度、③比誘電率、④引張破断強度、⑤引張破断伸度、⑥引張弾性率、⑦ガラス転移点、⑧融点、⑨結晶化度、⑩双極子モーメント、⑪生成エネルギー、⑫HOMOのエネルギー、⑬LUMOのエネルギー、⑭バンドギャップ、⑮質量、⑯ファンデルワールス体積、⑰電気陰性度、⑱分極率、⑲イオン化エネルギー、⑳電子親和力、㉑溶解度パラメータ (②～㉑は基材高分子の物性値)。データ解析の前処理として、目的特性と説明変数のデータについて、平均値が0、分散が1になるように規格化した。次いで93点の全データを65点の訓練データと28点のテストデータにランダムに分割した。ここで、RF回帰法は、pythonのオープンソース機械学習ライブラリであるscikit-learnを用いて実行した。訓練データを用いてRF回帰モデルを作成した後、テストデータの説明変数の数値を予測モデルに入力して目的特性の予測値を求めた。予測精度の指標として、目的特性の実測値と予測値から二乗平均平方根誤差 (RMSE: Root Mean Squared Error) を算出した。RF法のハイパーパラメータである回帰木の数と葉ノ

ドの数については、最適値の検討結果に基づき、それぞれ 200 と 20 とした。

(2) 高分子機能性材料の階層構造解析

X線や中性子による小角散乱測定により、機能性に大きな影響を及ぼす高分子材料の階層構造を解析した。X線小角散乱 (SAXS) 測定は、量研高崎研のラボ SAXS と大型放射光施設 (Spring-8) で、中性子小角散乱 (SANS) 測定は、J-PARC (iMATERIA) とドイツ FRM-II で実施した。特に、イオン伝導性に大きく寄与するイオンチャンネル構造 (グラフト鎖と水からなる構造体) については、軽水と重水の散乱長の違いを利用して、被測定物の構成単位を選択的に抽出できるコントラスト変調 SANS (CV-SANS) 法を活用した。さらに、CV-SANS データをもとに、グラフト型高分子電解質膜の構成成分 (基材高分子、グラフト鎖、水など) に対応する部分散乱関数を導出し、イオンチャンネル内のナノ構造を解析した。

(3) 高分子機能性材料の構造シミュレーション

ETFE にポリスチレンスルホン酸をグラフトした高分子電解質膜 (ETFE-g-PSSA) について、ETFE のエチレン部分 (Bet)、テトラフルオロエチレン部分 (Btfe)、PSSA のエチレン部分 (Get)、ベンゼン部分 (Gbz)、スルホン酸基部分 (Gsa)、4つの水分子を一まとめにした粒子 (W) から成る粗視化分子モデルを作成し、J-OCTA で分子動力学シミュレーションを行った。ここで、静電遮蔽を考慮したモデルを構築することを目的として、スルホン酸基は非解離として扱い、また、高分子はホモポリマーとしてモデル化した。粗視化粒子間の相互作用ポテンシャルは、2粒子間のバネポテンシャル、結合3粒子間の偏角ポテンシャル、そして分子間力としてレナード・ジョーンズ (LJ) ポテンシャルを与えた。スルホン酸基と水粒子の間の LJ ポテンシャルのパラメータ ϵ は、静電遮蔽によってスルホン酸基の近距離でのみ強い相互作用があることを考慮して、水粒子間の ϵ の2倍とした。本研究における PEM のイオン強度は、1.54 M であるため、デバイ遮蔽長を 0.26 nm と見積もった。スルホン酸基の相互作用は、静電遮蔽により近距離で強く作用すると考え、静電相互作用を含めないこととした。得られたパラメータを調整し、現実の ETFE-g-PSSA 膜の構造再現を行った。

4. 研究成果

(1) ランダムフォレスト法による機能性予測

グラフト型 PEM の目的特性 (a; プロトン導電率、b; 水和数、c; 導電率/水和数) に関する RF 回帰分析の結果を図 1 に示す。RMSE は、全ての目的特性の場合で十分に低く、良好な予測精度が得られた。また RF モデルで得られた各説明変数の重要度については、プロトン導電率の予測では、イオン交換基密度の重要度が圧倒的に高く、それ以外に重要な説明変数は見られなかった。水和数の予測では、イオン交換基密度以外に、引張弾性率、LUMO のエネルギー、電子親和力などの重要度が高かった。導電率/水和数の予測では、イオン交換基密度以外に、融点、結晶化度、ファンデルワールス体積などの重要度が高かった。高導電性、且つ低含水性の指標である導電率/水和数の RF 回帰分析により、基材高分子が低結晶性のため連結性の良いイオンチャンネルを形成し導電率が向上すること、基材高分子の分子間力が高いほど含水率を抑制できることが示唆された。従って、PEEK 基材から作製したグラフト型高分子電解質膜がプロトン型燃料電池としての出力特性、耐久性で最も優れていた理由は、PEEK 基材のもつ低結晶性と高分子間力 (高融点) に起因していることを明らかにできた。

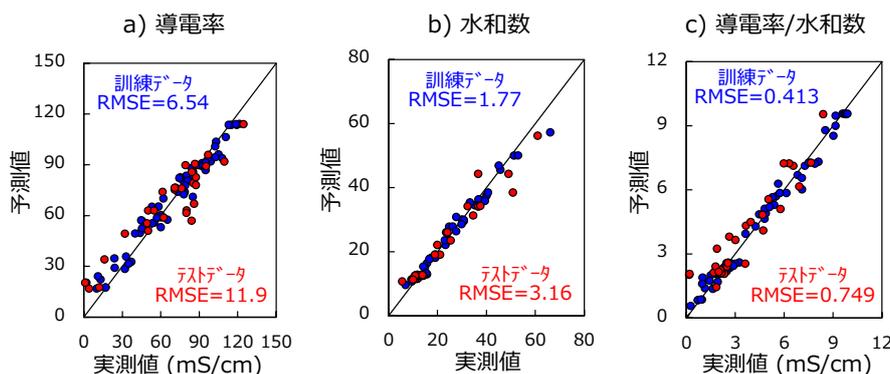


図 1 プロトン型 PEM の目的特性の RF 回帰分析結果

(2) 高分子機能性材料の構造解析

ETFE にスチリルイミダゾールをグラフトしたアニオン伝導高分子電解質膜 (AEM) は、グラフト率 14% で、導電率 (50 mS/cm)、低含水率 (10%) を示し、且つアルカリ環境下 600 時間まで導電率を維持できる高耐久性を示した。コントラスト変調中性子小角散乱 (CV-SANS) 法により構造解析を行った結果、これまでの全てのグラフト型 AEM とは異なり、水のみの親水相がグラフト鎖から成る疎水相と完全に相分離した、親水性チャンネル/疎水性マトリックス (Reverse Sea-Island) 構造を示し、グラフト型 AEM で初めて、Nafion と類似のイオンチャンネル構造を形成していることが分かった (図 2)。このナフィオンと類似構造が、低い含水率で高い導電率を示し、かつ、高いアルカリ耐性に重要な構造であることが示唆された [1]。

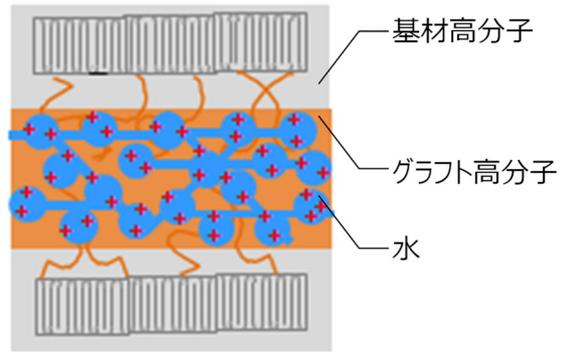


図 2 グラフト型 AEM の構造モデル (Reverse Sea-Island 構造)

燃料電池用電解質膜として知られている Nafion 膜に対する原子間力顕微鏡 (AFM) 観察の結果、8 nm 程度の主鎖周期構造、および 60 nm 程度の高分子凝集構造が存在することが分かった。また、CV-SANS 法を用いて得られた散乱強度プロファイルを Nafion の各成分 (テトラフルオロエチレン主鎖、スルホン酸基末端のフッ素化側鎖、および水相の 3 成分) に由来する部分散乱関数 (PSF) へと分解し、解析した結果、30 nm 以上のサイズ領域では、主鎖と側鎖で構造の不均一性が観察されたが、水相は均一な構造を形成することがわかった (図 3 (a))。10 nm 以上の中程度の領域では、平均間隔が 11 nm の結晶相とアモルファス相の両連続相構造が観察された。これは、主鎖の結晶相と、主鎖非結晶相・側鎖・水からなるアモルファス相がプレート様の構造を形成することに由来する (図 3 (b))。5 nm 以下の小さな領域では、平均間隔が約 4 nm の別の両連続相構造がアモルファス相に存在しており、良好な膜伝導性に寄与する連結度の高い水ネットワークが形成していることが分かった (図 3 (c))。さらに、3 つの構成成分のうち 2 つの PSF を対象にしたクロスチーム解析から、各成分の相対的な位置関係を評価した。主鎖は側鎖または水のいずれかから相分離する傾向があるのに対して、側鎖と水はスルホン酸基を介して密に接することが分かった。本成果から、PSF に基づいた解析を行うことで、電解質膜を構成する各成分の役割を定量的に理解することができた [2]。

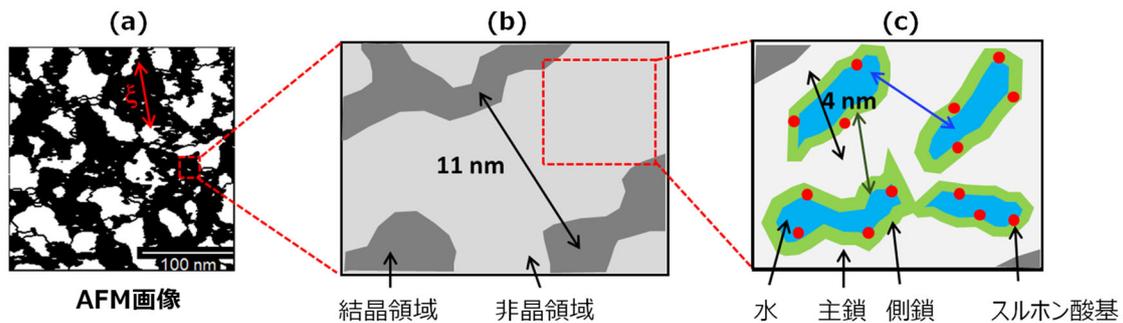


図 3 Nafion 膜の階層構造の概略図

(3) 高分子機能性材料の構造シミュレーション

ETFE-g-PSSA 膜 (グラフト率 35%, 含水率 41%) のシミュレーション結果のスナップショットを図 4 に示す。ここで、ETFE の重合度は 500、PSSA の重合度は 400 で固定し、ETFE 鎖は 48 本、PSSA 鎖は 46 本含まれ、水粒子数は、50600 個である。灰色が ETFE、白がポリスチレン、紫がスルホン酸基、青が水に対応する。シミュレーション結果から見積もられた密度は 1.52 g/cm^3 であり、理論値 1.2 g/cm^3 からずれていたが、疎水性成分 (ETFE) と親水性成分 (PSSA+水) の相分離構造が確認できた。このようなメソスケールの相分離構造は、実験から示唆されているものと一致しており、本シミュレーションが妥当であることが分かった [3]。

ETFE-g-PSSA 膜 (GD=35%、WU=41%) のシミュレーション結果から計算された X 線散乱プロファイルと GD=38%、WU=44% の ETFE-g-PSSA 膜を T=350 K、RH=85% の条件下で実測定した X 線散乱プロファイルを図 5 に示す。両スペクトルを比較すると、両者共に、低波数側 (実験: $q < 1 \text{ nm}^{-1}$ 、シミュレーション: $q < 2 \text{ nm}^{-1}$) で傾き「-4」の Porod 則が現れ、高波数側 (実験: $q = 4.8 \text{ nm}^{-1}$ 、シミュレーション: $q = 7 \text{ nm}^{-1}$) にスルホン酸基の形成する構造に由来する弱いピークが存在する。従って、本粗視化モデルを用いることで、メソ構造を十分に再現できることが分かった。

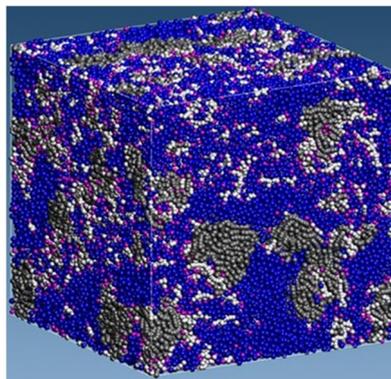


図 4 ETFE-g-PSSA のシミュレーション結果のスナップショット

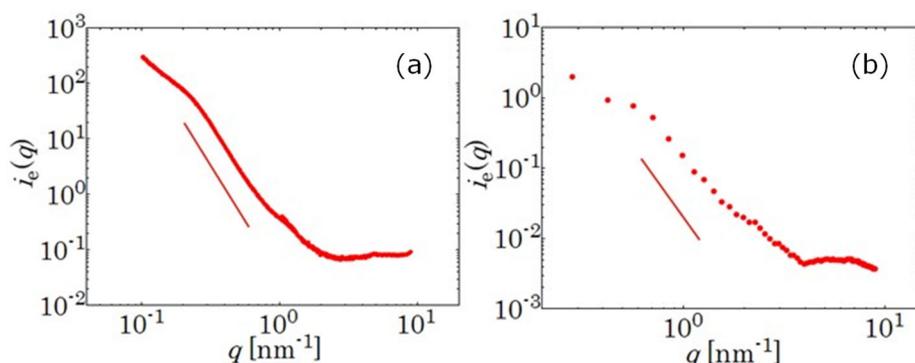


図 5 X 線散乱強度プロファイル (a: 実験値、b: シミュレーション結果)

図 5 (b) には、 $q = 0.6 \text{ nm}^{-1}$ 、 3 nm^{-1} にもピークが見られるが、X 線散乱強度による解析では、電子密度の違いのために、ピークの由来が分かりにくい。そこで、構造因子による解析を行い、それらのピークに対応する構造を解析した。図 6 に構造因子の計算結果を示す。各波数でのピーク強度の比較から、 $q = 0.6 \text{ nm}^{-1}$ 、 3 nm^{-1} に対応する構造は、それぞれ ETFE と水の相分離構造と水とポリスチレン部分によって形成される構造であることが分かった。波数を長さに換算すると、それぞれの構造は、10 nm、2.1 nm 程度のスケールである。このような構造はプロトン伝導に影響を及ぼすと考えられるため、構造データとして機械学習に用いることで、より精度の高い機能予測が可能になることが期待される。

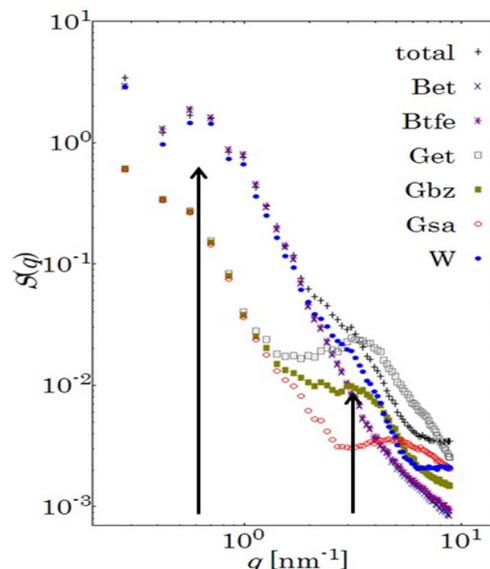


図 6 シミュレーション結果から算出した構造因子

参考文献

- [1] “A long side chain imidazolium-based graft-type anion-exchange membrane: novel electrolyte and alkaline-durable properties and structural elucidation using SANS contrast variation”, Y. Zhao, K. Yoshimura, A. M. S. Mahmoud, H. C. Yu, S. Okushima, A. Hiroki, Y. Kishiyama, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, Y. Noda, S. Koizumi, A. Radulescu, and Y. Maekawa, *Soft Matter*, **16**, 8128–8143 (2020).
- [2] “Three-Component Domains in the Fully Hydrated Nafion Membrane Characterized by Partial Scattering Function Analysis”, Y. Zhao, K. Yoshimura, T. Motegi, A. Hiroki, and Y. Maekawa, *Macromolecules*, **54**, 4128–4135 (2021).
- [3] “Coarse-grained molecular dynamics simulation to reproduce phase-separated structures in graft-type polymer electrolyte membranes”, S. Okushima, S. Hasegawa, T. Kawakatsu, and Y. Maekawa, *Polymer*, **230**, 124036 (2021).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 4件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Zhao Yue, Yoshimura Kimio, Mahmoud Ahmed Mohamed Ahmed, Yu Hwan-Chul, Okushima Shun, Hiroki Akihiro, Kishiyama Yoshihiro, Shishitani Hideyuki, Yamaguchi Susumu, Tanaka Hirohisa, Noda Yohei, Koizumi Satoshi, Radulescu Aurel, Maekawa Yasunari	4. 巻 16
2. 論文標題 A long side chain imidazolium-based graft-type anion-exchange membrane: novel electrolyte and alkaline-durable properties and structural elucidation using SANS contrast variation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 8128 ~ 8143
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0sm00947d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Mahmoud Ahmed Mohamed Ahmed, Yoshimura Kimio, Maekawa Yasunari	4. 巻 620
2. 論文標題 Alkaline fuel cells consisting of imidazolium-based graft-type anion exchange membranes: Optimization of fuel cell conditions to achieve high performance and durability	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Membrane Science	6. 最初と最後の頁 118844 ~ 118844
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.memsci.2020.118844	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Zhao Yue, Yoshimura Kimio, Takamatsu Harufumi, Hiroki Akihiro, Kishiyama Yoshihiro, Shishitani Hideyuki, Yamaguchi Susumu, Tanaka Hirohisa, Koizumi Satoshi, Radulescu Aurel, Appavou Marie-Sousai, Maekawa Yasunari	4. 巻 166
2. 論文標題 Imidazolium-Based Anion Exchange Membranes for Alkaline Anion Fuel Cells: Interplay between Morphology and Anion Transport Behavior	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of The Electrochemical Society	6. 最初と最後の頁 F472 ~ F478
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/2.0431908jes	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 K. Yoshimura, Y. Zhao, A. Hiroki, Y. Kishiyama, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, S. Koizumi, J. Houston, A. Radulescu, M.-S.Appavou, D. Richter, Y. Maekawa	4. 巻 14
2. 論文標題 Reverse relationships of water uptake and alkaline durability with hydrophilicity of imidazolium-based grafted anion-exchange membranes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 9118-9831
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8sm01650j	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Y. Zhao, K. Yoshimura, H. C. Yu, Y. Maekawa, A. Hiroki, Y. Kishiyama, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, S. Koizumi, M. Appavou, J. Houston, A. Radulescu, and D. Richter	4. 巻 551C
2. 論文標題 Small angle neutron scattering study on the morphology of imidazolium-based grafted anion-conducting fuel cell membranes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physica B	6. 最初と最後の頁 203-207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physb.2018.01.064	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 K. Yoshimura, A. Hiroki, H. C. Yu, Y. Zhao, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, and Y. Maekawa	4. 巻 573
2. 論文標題 Alkaline durable 2-methylimidazolium containing anion-conducting electrolyte membranes synthesized by radiation-induced grafting for direct hydrazine hydrate fuel cells	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Membr. Sci.	6. 最初と最後の頁 403-410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.memsci.2018.12.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計28件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 澤田真一、田中健一、船津公人、前川康成
2. 発表標題 機械学習に基づくグラフト型電解質膜の電気化学特性評価
3. 学会等名 第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 長谷川 伸、廣木章博、吉村公男、ザオユエ、町田晃彦、大和田謙二、前川康成
2. 発表標題 溶媒アニールによるポリエーテルエーテルケトン膜のモルフォロジー制御と放射線グラフト重合反応加速機構
3. 学会等名 第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂本有希子、澤田真一、廣木章博、前川康成
2. 発表標題 機械学習に基づくグラフト型電解質膜の機能性評価
3. 学会等名 第10回CSJ化学フェスタ2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高松治文、吉村公男、廣木章博、前川康成
2. 発表標題 アルカリ耐性アニオン伝導電解質膜の創製
3. 学会等名 令和2年度日本化学会関東支部群馬地区研究交流発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂本有希子、澤田真一、廣木章博、前川康成
2. 発表標題 機械学習に基づくグラフト型電解質膜の機能性評価
3. 学会等名 令和2年度日本化学会関東支部群馬地区研究交流発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿部聖賢、廣木章博、前川康成
2. 発表標題 フッ素系高分子基材へのビニルモノマーの放射線グラフト重合：機械学習に基づく重合予測
3. 学会等名 令和2年度日本化学会関東支部群馬地区研究交流発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高松治文、吉村公男、廣木章博、前川康成
2. 発表標題 アルカリ耐性アニオン伝導電解質膜の創製研究
3. 学会等名 第63回放射線化学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Zhao
2. 発表標題 Small-angle Scattering Study for Developing Alkaline Durable Imidazolium-Based Grafted Anion Exchange Membranes for Pt-Free Fuel Cells
3. 学会等名 32nd European Crystallographic Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. M. A. Mohamed, K. Yoshimura, A. Hiroki, Y. Maekawa
2. 発表標題 The First Durable Imidazolium-based Radiation Grafted Anion Exchange Membranes for Alkaline Fuel cells: The Impact of Water Management
3. 学会等名 236th ESC Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Yoshimura, Y. Zhao, A. Mahmoud, A. Hiroki, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, and Y. Maekawa
2. 発表標題 Structural Designs of Alkaline Durable Imidazolium-Containing Anion Conducting Membranes Prepared by Radiation-Induced Grafting for Pt-Free Fuel Cells
3. 学会等名 2019 MRS Fall Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Hiroki, S. Okushima, K. Yoshimura, Y. Zhao, H. Shishitani, S. Yamaguchi, Y. Maekawa
2. 発表標題 Crosslinking Effects of Anion-conducting Polymer Electrolyte Membranes on their Properties
3. 学会等名 IMSTEC2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 奥島駿、前川康成、川勝年洋
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた高分子電解質膜のイオンチャネル構造の解析
3. 学会等名 第68回高分子学会年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉村公男、Hwan-Chul Yu, Yue Zhao、廣木章博、猪谷秀幸、岸山佳央、山口進、田中裕久、前川康成
2. 発表標題 イミダゾリウム基を有する放射線グラフト型アニオン伝導膜の電解質膜特性と階層構造の関係
3. 学会等名 第62回放射線化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 長谷川伸、廣木章博、吉村公男、ザオユエ、町田 晃彦、大和田 謙二、綿貫 徹、前川 康成
2. 発表標題 ポリエーテルエーテルケトン膜の放射線グラフト重合を促進させるモルホロジー制御
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 澤田真一、田中健一、船津公人、前川康成
2. 発表標題 機械学習に基づくグラフト型電解質膜の電気化学特性評価
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 奥島駿、前川康成、川勝年洋
2. 発表標題 粗視化分子動力学法とクラスター解析を組み合わせた電解質膜イオンチャンネル構造の解析
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 前川康成
2. 発表標題 量研 (QST) におけるマテリアルズ・インフォマティクス研究
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大道正明
2. 発表標題 機械学習で放射線グラフト重合は予測できるのか？
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 澤田真一
2. 発表標題 高分子電解質膜のイオン伝導性を機械学習で予測する
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Hiroki, K. Yoshimura, Y. Zhao, H. Shishitani, S. Yamaguchi, and Y. Maekawa
2. 発表標題 Properties of anion-conducting electrolyte membranes based on ETFE membrane and crosslinked graft polymers for fuel cells
3. 学会等名 Advanced Energy Materials 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Yoshimura, Y. Zhao, A. Hiroki, H. Shishitani, S. Yamaguchi and Y. Maekawa
2. 発表標題 The Relationship between Membrane Properties and Hierarchical Structure of Radiation Grafted Anion Conducting Membranes
3. 学会等名 Advanced Energy Materials 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Zhao, K. Yoshimura, A. Hiroki, Y. Kishiyama, H. Shishitani, S. Yamaguchi, H. Tanaka, Y. Maekawa
2. 発表標題 Imidazolium-Based Grafted Anion Exchange Membranes: (3) Interplay between the Morphology and Anion Transport Behavior
3. 学会等名 AIMES 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Zhao, K. Yoshimura, A. Hiroki, Y. Maekawa
2. 発表標題 Scattering study of structure-property relationships of grafted anion exchange membranes
3. 学会等名 SAS2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 奥島駿、前川康成、川勝年洋
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた固体高分子電解質膜のアモルファス領域における界面の構造解析
3. 学会等名 物理学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉村公男、ザオユエ、廣木章博、猪谷秀幸、山口進、前川康成
2. 発表標題 グラフト型アニオン伝導電解質膜のアルカリ耐性と階層構造の関係
3. 学会等名 第28回MRS-J年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 廣木章博、吉村公男、ザオユエ、猪谷秀幸、山口進、前川康成
2. 発表標題 架橋構造導入により改質したアニオン伝導性高分子電解質膜の化学的安定性
3. 学会等名 第28回MRS-J年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 澤田真一、田中健一、船津公人、前川康成
2. 発表標題 機械学習による放射線グラフト電解質膜の導電率予測
3. 学会等名 Future Trend in Polymer Science 2018
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 奥島駿、前川康成、川勝年洋
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた固体高分子電解質膜のアモルファス領域の構造解析
3. 学会等名 Future Trend in Polymer Science 2018
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	川勝 年洋 (Kawakatsu Toshihiro) (20214596)	東北大学・理学研究科・教授 (11301)	
研究分担者	小泉 智 (Koizumi Satoshi) (00343898)	茨城大学・理工学研究科(工学野)・教授 (12101)	
研究分担者	大和田 謙二 (Ohwada Kenji) (60343935)	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・関西光科学研究 所 放射光科学研究センター・グループリーダー (82502)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	趙 躍 (Zhao Yue) (30450307)	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・高崎量子応用研究所 先端機能材料研究部・上席研究員 (82502)	
研究分担者	大道 正明 (Omichi Masaaki) (10625453)	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・高崎量子応用研究所 先端機能材料研究部・主幹研究員 (82502)	
研究分担者	廣木 章博 (Hiroki Akihiro) (10370462)	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・高崎量子応用研究所 先端機能材料研究部・主幹研究員 (82502)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関