

【バイオテクノロジー分野】

仮訳

目的のポリマー特性をバイオマスで実現する方法を予測する NREL のツール(米国)

2023年11月2日

より持続可能で高性能なポリマーの発見を人工知能(AI)が加速させる



NREL の科学者らは、機械学習ツールを使ってバイオマス製の新しい弾性ポリマーのような革新的なポリマー設計を発掘する。写真: Dennis Schroeder, NREL

優秀な化学者らは、炭素、水素、酸素、窒素を結合させて、密封型の食品パッケージング、耐熱性の自動車部品、耐久性のある個人用保護具等の様々な種類のプラスチックを作る方法を発見してきた。

材料科学者の 21 世紀における真の課題は、特に手元にあるのが石油化学製品のみである場合に、持続可能性と優れた性能の両特性を備えたポリマーの完璧な製造方法を発見することである。

「石油は主に炭化水素で構成されています。炭化水素は基本的に炭素と水素が化学的に結びついたもので、素晴らしくて有益な特性を備えています」と米国立再生可能エネルギー研究所 (NREL) の科学者である Brandon Knott 氏は言う。「しかし、炭化水

素は酸素や窒素のようなヘテロ原子をもたず、炭化水素が提供する以上の機能を必要とするポリマーを製造する場合には、それらを加えるのに大量のエネルギーを消費します」。

その解決策の一つは、酸素や窒素を豊富に含むバイオマスや廃棄物をポリマー成分に加えることだと Knott 氏は説明する。トウモロコシの茎や藻類、さらには生ゴミには、特定の特性を化学者らが実現できるようにする、特別な化学結合が含まれている。

しかし、持続可能性と機能性というこれらの特性を同時に実現する完璧な製造方法を見つけることはできるのだろうか？

NREL の機械学習ツールの PolyID:Polymer Inverse Design™ は、その実現を助けるものである。このツールは、AI を使用して分子構造に基づいた材料特性を予測する。何百万種類ものポリマー設計のスクリーニングを可能にし、特定のアプリケーションに向けた材料の候補を提供する。

米国エネルギー省 (DOE) バイオエネルギー技術局 (BETO) の支援を受けて開発されたこの AI ツールは、[Macromolecules](#) に掲載された論文に詳しく説明されている。

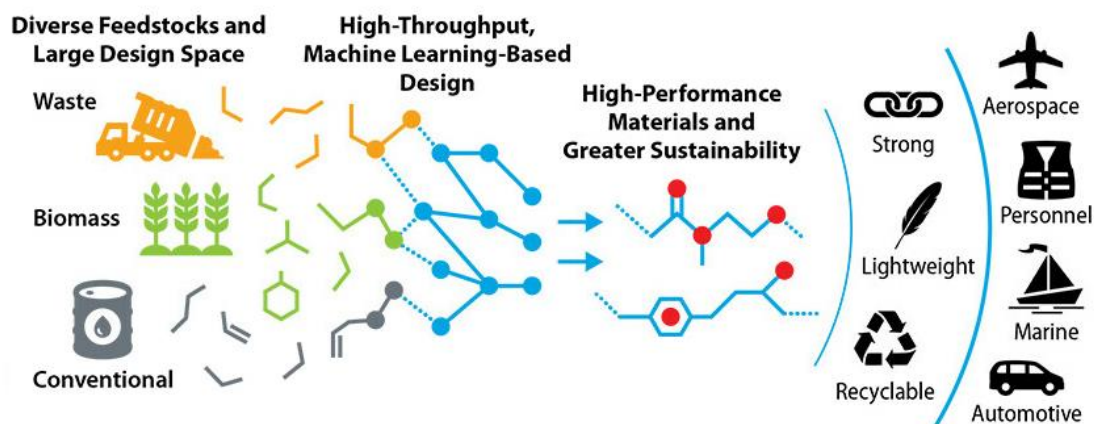


材料特性と分子構造を関連付けるスマートなアルゴリズム

PolyID を支えるアルゴリズムは、「原子団寄与法」として知られる基礎的なアプローチの進展版である。このツールは、酸素、水素、炭素やその他の元素の配合と材料特性の関連性を構築し、弾性、耐熱性、シーラント性能などの属性を予測する。

ポリマーの分子構造とそれらの既知の特性を関連付けるライブラリーの増大に伴い、新しいポリマーに特定の物理的特性を持たせる設計を予測することを「学習」する。

論文の筆頭著者である Nolan Wilson 氏は、「数千種類のポリマーを使用してアルゴリズムを訓練すると、これまでに見たことのない、また、おそらくこれまでで作られたことのない構造について、アルゴリズムによる極めて正確な予測を得られるようになります」と説明する。



PolyID は、これまで以上に速く、容易に特定のアプリケーションに向けた持続可能で高性能ポリマー設計を可能にし、材料の発見に革新をもたらす。画像：. Elizabeth Stone, NREL

リファレンスライブラリーには何千種類ものポリマー設計が含まれているため、目的の特性を決定してからポリマー設計を選択するといった、逆方向での新しいポリマー設計の調査もできる。

ケーススタディ: 生分解性の食品パッケージングフィルムの発見

例えば、NRELの科学者たちは、PolyIDを使用により、15,000種類以上の植物由来のポリマーの迅速なスクリーニングを通じて現行の食品パッケージングフィルムの生分解性代替品を調査した。主に石油ベースの材料である高密度ポリエチレンから作られるパッケージングフィルムは、多くの場合高温耐性で食品鮮度を保持する強力な防湿状態が作られるように設計されている。

NREL チームは PolyID でこれらの特性を優先させながら、生分解性や温室効果ガスのフットプリントの低減等の望ましい特性も追加した。PolyID は、バイオマスから製造できる 7 種類のポリマー設計を生成した。

研究室でさらに試験を重ね、PolyID による予測を確認した。これらの 7 種類のポリマーすべてが高温に耐えるだけでなく、温室効果ガスの排出量を低減し、食品をより長時間新鮮に保つことが可能である。

ポリマーを産業界のニーズに合わせるツール

バイオマス、廃棄物、従来の原料による何百万種類ものユニークな材料の創出が可能であるため、新しいポリマーの設計で持続可能性を優先することは、最も優秀な化学者にとっても困難な作業であった。

これは、消費者が自分たちの使用する製品に対してより多くのものを求めるようになってきたことに起因している。多くの企業では、廃棄物の削減、リサイクルの促進やCO2 排出量の低減による製品のイノベーションを通じてそれらに対応しているが、製品の性能を犠牲にせずにそれらの要求に応じるには、一筋縄ではいかない両立策が必要となるだろう。

Wilson 氏によれば、ポリマーの性能を持続可能性に関連する複数の要素と共に位置づける能力が PolyID の最も優れた点であるという。

「その中には、石油製ポリマーを直接代替して機能できるものもあります」と同氏は説明する。「しかし、多くの場合、それらは性能と持続可能性の点でさらに優れているのです」。

そうなると、食品パッケージングフィルムは食品を長持ちさせる以上のことができるようになる。スキー板のコーティングは寒さや雪を防ぐだけでなく、自転車のヘルメットに入っている熱可塑性プラスチックシェルは、脳だけでなく他の多くのものを守れるようになるかもしれない。しかも、健全な環境の維持を支援しながらである。

訳：NEDO（担当 技術戦略研究センター）

出典：本資料は、米国立再生可能エネルギー研究所(NREL)の記事“Pick Your Polymer Properties and This NREL Tool Predicts How To Achieve Them With Biomass”（<https://www.nrel.gov/news/program/2023/pick-your-polymer-properties-and-this-nrel-tool-predicts-how-to-achieve-them-with-biomass.html>）を翻訳したものである。