

統計的手法を用いた物性推算 および材料設計・試作

- 物性や性能に寄与する要因の解明、効率的な材料設計
- 特に屈折率、SP値に基づく材料設計
- 設計指針に基づく試料の試作・評価、および新機能性材料の創出

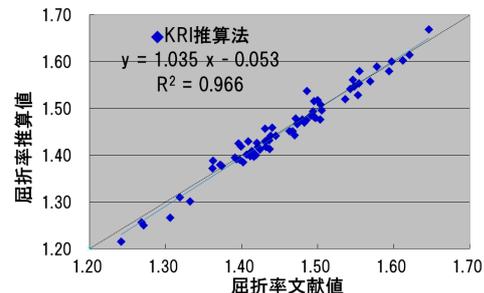
背景・目的・手法

- 材料の物性や性能などの事象には要因がある。事象と要因との相関関係は材料設計に非常に有用である。
- 事象と複数の要因とが複雑に入り組んでいることが多く、通常は事象にどの要因がどの程度寄与しているかを解明することは困難である。
- 重回帰分析などの統計的手法を用いて、事象と複数の要因との相関関係を解明する。
 要因例：原料の構造、原料の組成比、添加剤の種類・量、製造プロセス条件(温度、圧力、時間など)など
- 材料設計指針を構築し、指針に基づきサンプルを合成や調製して試作し、物性・性能評価する。
- 効率的な材料設計により高機能性材料を創出する。

解析実績

KRIでは化合物の構造と屈折率との相関式、および構造とSP値との相関式を構築済みである。

- ・未知化合物の屈折率やSP値の高精度推算が可能(右図)である。
- ・屈折率やSP値を大きく(または小さく)したり、所望の値にする分子設計が可能である。



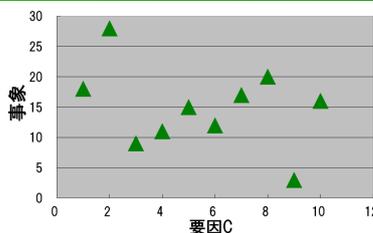
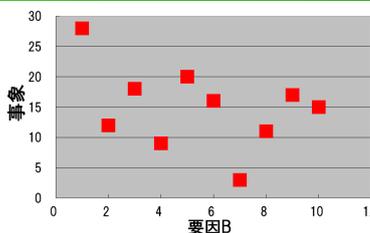
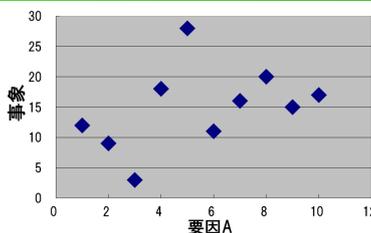
KRI開発屈折率推算式の推算精度

※屈折率は光学材料の設計に非常に重要な物性

※SP値は材料の溶解、相溶、膨潤・耐溶剤、密着・接着、透過など

に関わる物性で、エラストマー、コンポジット、塗料、接着剤、医薬、製剤材料、化粧品、などの設計に利用

モデルケースの解析例



要因A	要因B	要因C	事象
1	2	6	12
2	4	3	9
3	7	9	3
4	3	1	18
5	1	2	28
6	8	4	11
7	6	10	16
8	5	8	20
9	10	5	15
10	9	7	17

要因A,B,Cの単独で解析では、事象との関係は不明確

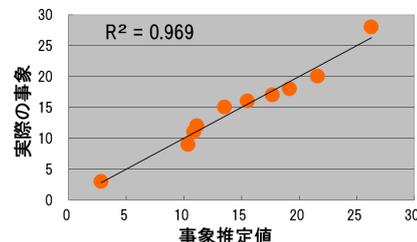
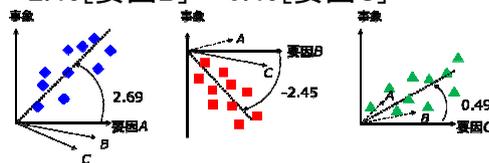
重回帰分析

$$\text{回帰式 [事象]} = 10.89 + 2.69[\text{要因A}] - 2.45[\text{要因B}] + 0.49[\text{要因C}]$$

要因A 大きいほど有利、寄与大

要因B 小さいほど有利、寄与Aより小

要因C 大きいほど有利、寄与小



例えば…事象:製品の性能、A:原料Aの分子量、B:原料Bの比率、C:製造温度