

AI 活用で挑む学問の革新と創成  
2021 年度採択研究者

|                  |
|------------------|
| 2021 年度<br>年次報告書 |
|------------------|

安倍 悠朔

早稲田大学 大学院創造理工学研究科  
大学院生(修士課程)

分子パターンの自在制御に向けた自己組織化のスパースモデリング

## § 1. 研究成果の概要

本研究は、自己組織化を用いた分子パターンニングとデータ駆動科学を組み合わせることで、自己組織化による機能性分子のパターン形成を自在に制御する方法論を構築するものである。自己組織化を用いた分子パターンニングは簡便にナノレベルで分子を配列化することができるが、わずかな実験条件の違いによってパターンの形状が変化する。そのため、実験・計測による最適条件の検討に加えてデータ駆動科学を用いた最適化を行うことで、効率的に所望のパターンを実現する実験条件を見出すことができると考えられる。そのため、本研究は実験・計測とデータ駆動科学アルゴリズム開発を両輪として研究を推進する。特に、2021年度は実験・計測環境の構築および、スパースモデリングを用いた実験パラメータのモデリングに取り組んだ。実験・計測環境の構築では、温度・湿度パラメータを制御することが可能な装置を新たに開発した。この装置の開発により、分子パターン構造に大きな影響を与えていると考えられる温度・湿度条件を変化させた際のパターン構造の違いを詳細に検討することが可能となった。また、電子顕微鏡観察をはじめとした各種計測装置による作製サンプルの計測・評価も実現した。これらの実験・計測環境の構築により、自己組織化を用いて機能性分子を配列化することが可能であることが、確認された。スパースモデリングを用いた実験パラメータのモデリングでは、実際に電子顕微鏡写真に対して画像処理と機械学習を用いたモデリングを実施した。結果として、電子顕微鏡写真データを分類することで実験条件とパターン構造間の大まかな相関を見出すことに成功した。