

# 研究終了報告書

## 「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」

研究期間: 2021年10月~2024年3月

研究者: 安倍 悠朔

### 1. 研究のねらい

本研究では、自己組織化とデータ駆動科学を組み合わせることで、機能性分子から秩序構造を簡便に構築する手法の実現を目指す。自己組織化現象は多くの実験パラメータが存在し、パラメータ間の相互関係がある条件を満たした際に秩序構造を発現する現象である。しかし、従来の実験科学的アプローチだけでは自己組織化現象が発現する条件を見出すことは容易ではない。そこで本研究では現象を支配するパラメータを AI によってモデリングし、モデリングの結果を実験と融合することで所望の秩序構造を有する機能性分子薄膜を作製する手法を開発する。

物質の合成・制御により秩序構造をつくる技術は、情報通信技術を支える半導体の開発において重要である。半導体の性能を向上するには回路パターン材料の高機能化と高集積化が必要であり、理想的には高機能分子を単分子スケールで配列化した回路パターンが望まれる。実際、優れた電気的特性を有する次世代材料であるカーボンナノチューブ(CNT)を用いたトランジスタは従来の半導体と比べて省エネかつ高処理速度であることが明らかになっている。しかし、現在広く使われている手法では個々の分子の制御はできないため、理論上集積率が最も高いトランジスタである単分子 CNT トランジスタを作製する手法はいまだに確立していない。そこで本研究では自己組織化を用いて CNT を数 100 nm スケールで配列化する手法にデータ駆動科学を適用することで迅速に CNT を配列化させる手法を開発する。本研究により秩序構造を有する機能性分子薄膜を迅速に作製できるようになることから、機能性分子を用いたトランジスタや光検出器を簡便に開発できるようになることが期待される。そして、本研究により構築する材料組織制御手法は、機能性分子薄膜をはじめとした物質合成や材料開発において所望の構造を有する材料を迅速に作り出すことへの貢献が期待される。

## 2. 研究成果

### (1) 概要

本研究は機能性分子のひとつであるカーボンナノチューブ(CNT)から秩序構造を作製するため、実験科学的アプローチとデータ駆動科学的アプローチを融合した新しい材料組織制御手法を目指す研究である。この目的を達成するため、以下に示す 4 つの研究テーマを推進した。研究テーマ 1「実験と AI の融合による機能性分子の配列化」、研究テーマ 2「AI による材料組織顕微鏡像の分類による実験条件と分子パターンのモデリング」、研究テーマ 3「深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションによる分子間相互作用の解明」、研究テーマ 4「機能性分子パターンを活用した光デバイスの開発」。

研究テーマ 1 では、自己組織化現象を用いて CNT の平行パターンやハニカムパターンを作製した。また、電子顕微鏡によって表面の微細構造像を取得した。そして、得られた画像をフーリエ解析することで画像を特徴づけすることで研究テーマ 2 へとつなげた。研究テーマ 1 では、従来作製することが難しかった CNT の平行パターンやハニカムパターンを実現できたことが大きな成果である。

研究テーマ 2 では、ニューラルネットワークを用いて分子パターン画像を分類し、実験条件と作製される分子パターン間のモデルを構築した。当初は電子顕微鏡画像の分類を検討していたが、作製できる実験サンプル数に限界があることから実験だけでは十分な教師データが用意できないことが、実際に研究を遂行するなかで明らかになった。そこで、教師データとして高分子のマイクロ相分離シミュレーション画像を利用することで課題を解決した。研究テーマ 2 では、実験データだけでは材料組織制御に求められる機械学習モデルを構築することが難しい際に、シミュレーションをどのように取り入れると良いかを明らかにしたことが主な成果である。

研究テーマ 3 では、研究テーマ 2 で十分に解明することができなかった CNT の自己組織化メカニズムを解明するため、深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを行った。研究テーマ 3 では、深層学習ポテンシャルを用いることで本研究が対象とするような原子数の多い系であってもシミュレーションが可能であり、シミュレーション結果をもとに適した実験条件の絞り込みが行えることを示したことが主な成果である。

研究テーマ 4 では、本研究によって開発した機能性分子パターンを機能性分子の応用へと生かすため、光デバイスの作製に取り組んだ。研究テーマ 4 では、AI によって所望の構造や機能を有する材料を迅速に開発することで、デバイス等の応用開発の高速化もできることを示したことが主な成果である。

### (2) 詳細

#### **研究テーマ 1: 実験と AI の融合による機能性分子の配列化**

[目的]本研究テーマでは従来の実験科学的アプローチの確立と AI による分子パターンの分類への準備を行うことを目的とした。

[成果]本研究テーマでは、実験科学的アプローチ主導で CNT の秩序構造を作製に取り組み、平行パターンやハニカムパターンを作製することに成功した。また、本研究テーマで分子パターンを作製するうえで重要なパラメータの候補を見つけるなど、研究テーマ 2 以降の準備を行った。

### **研究テーマ 2:ニューラルネットワークを用いた分子パターン画像の分類**

[目的]本研究テーマではニューラルネットワークを用いて分子パターンを分類と、実験条件とパターン構造を紐づけるモデルの構築を行うことを目的とした。

[成果]本研究テーマでは、当初スパースモデリングを用いて分子パターンと実験条件のモデルを構築する計画であったが、分子パターンの電子顕微鏡画像の特性を踏まえると、スパースモデリングの適用は適していないことが分かった。また、電子顕微鏡画像だけでは網羅性のある教師データを用意することが現実的に難しいことも明らかになった。そこで、教師データとして高分子のマイクロ相分離シミュレーション画像を使用することで、教師データ取得にかかる時間の短縮と教師データの網羅性向上を実現した。そして、実際にニューラルネットワークを用いてマイクロ相分離シミュレーション画像を分類し、実験条件と紐づけるモデルを構築した。モデルの有効性の確認として、実際に平行パターンが得られる実験条件で実験を行ったところ、平行パターンの作製に成功したことから、本モデルは所望のパターンを作製するうえで有効であるといえる。

### **研究テーマ 3:深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションによる分子間相互作用の解明**

[目的]研究テーマ 2 では、分子パターンと実験条件間のモデリングには成功したものの、どのようなメカニズムで分子パターンができるのかは明らかにできなかった。そこで本研究テーマでは深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを行うことで、自己組織化過程における CNT の運動を解明することを目的とした。

[成果]本研究テーマでは、深層学習ポテンシャルと呼ばれるポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを行った。ここで、深層学習ポテンシャルとはあらかじめ量子化学計算等によって求めたポテンシャルを学習させたポテンシャルであり、従来よりも高速でありながら古典ポテンシャルと比べて精度が高いことが特徴である。本研究テーマでは、実際に深層学習ポテンシャルを用いて自己組織化過程における CNT 間に働く相互作用を計算した。その結果、自己組織化によって分子パターンが発現するのは、CNT と CNT の凝集を抑える分散剤の分量比及び濃度が特定の値の時だけであることが明らかとなった。今回の研究対象は原子数が多い系であったが、深層学習ポテンシャルを用いることで高速な計算が可能であり、材料組織制御において深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションが有用であることが明らかに鳴った。

### **研究テーマ 4: CNT 分子パターンの光デバイスへの応用**

[目的]本研究テーマは研究計画時には予定されていなかったが、機能性分子のパターニングはデバイスへの応用が期待されている技術であることを踏まえ、行うこととした。本研究テーマでは、秩序構造を有する CNT 分子パターンを本研究課題にて開発した手法にて作製し、デバイスの作製および評価を行うことを目的とした。

[成果]

本研究テーマでは、平行な CNT パターンを光デバイス用に加工した基板上に描画した。そして、電極を取り付けることで光検出器の作製を実現した。なお、光検出器としての性能は今後詳細に調査する。

### 3. 今後の展開

本研究によって、所望の構造を有する CNT 薄膜を迅速に作製する手法の礎が築かれた。そして、この成果は、私が掲げる大きな目標である「所望の構造や機能を有する材料を迅速に開発し、社会実装する」を達成するための第一歩でもある。そこで、今後は、本成果の展開として、所望の機能を有する CNT 薄膜を作製してデバイス化することで学問の革新と成果の社会実装を行う。そのために、まず、本手法を用いた光デバイスを完成させる。(1年後)その後、本研究で開発した実験と AI を融合する枠組みを用いて、デバイスの性能を向上させるためにより適した CNT パターンの探索とデバイスの高度化を行う。(2年後)さらに、将来は機能性分子にとどまらず液晶材料や高分子流体等へも実験と AI の融合によるアプローチの適用を進める。(5-10年後)

### 4. 自己評価

#### [研究目的の達成状況]

自己組織化現象と AI の融合による材料組織制御の革新を目指して本研究を遂行してきた。当初のアプローチでは解決できない問題があったが、適切に研究手法を変更することで問題を解決し、研究目的を達成できた。また、分子パターンを活用して光デバイスの作製を行ったことは、当初の研究計画を超えて得られた成果である。

#### [研究の進め方]

当初の研究計画から変更があったものの、研究目的を実現するために機能性分子の分析に用いる分光光度計等の導入を行い、研究を加速することができたことから適切な予算執行ができたと考えられる。なお、本研究は研究者本人が主体となって行われた。そして、研究者本人が主体の共同研究も複数推進中である。したがって、研究成果をもとに研究領域を革新するための下地作りとなるような研究の進め方ができたといえる。

#### [研究成果の科学技術および社会・経済への波及効果]

本研究での成果は、所望の構造や機能を有する機能性薄膜の探索に貢献することが期待される。特に、機能性分子を用いた光デバイスや半導体デバイスは高度化する情報化社会において必要不可欠であることから、CNT 光デバイスの開発にも焦点を当てた本研究成果のインパクトは大きいと考えられる。また、JST の推薦で参加させていただいた Global Young Scientists Summit(シンガポール)や日独若手専門家交流への参加、そして本領域での領域会議を通して国内外の研究者とのネットワークを構築したことから、今後はこのネットワークを活かして研究成果を積極的に波及させていくことができるものと期待できる。

### 5. 主な研究成果リスト

#### (1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数:0件

#### (2) 特許出願

研究期間全出願件数:0件(特許公開前のもも含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- 1) Yusaku Abe, Emi Cho, Yu Matsuda, “Evaporation induced self-assembled structures of carbon nanotubes”, 76<sup>th</sup> Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2023.
- 2) 安倍悠朔, “AI を活用し薄膜の構造を制御する”, ACT-X「生命と化学」主催 第一回 研究者交流会議「生命と化学と情報科学」
- 3) Yusaku Abe, Fumiyuki Toshimitsu, Yu Matsuda, “Fabrication and control of carbon nanotube films”, MiPE2022, 2022.

他 3 件