

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

緒明 佑哉

慶應義塾大学工学部

准教授

はく離挙動を制御する指針の確立によるナノシート材料の機能設計

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題は、グラファイトに代表されるような層状に積層した構造をバラバラにはがす(はく離する)ことでナノシートを得るプロセスで、その収率向上、横幅や厚さなどのサイズ制御、表面修飾を自在に制御することを目的としている。このナノシートを作るための「はがす」プロセスは、層状物質を「こわす」ことでもあり、量産のための収率向上、特性にも関連したサイズや表面の状態の制御を行うことは容易ではなく、ブラックボックスであった。本研究では、マテリアルズインフォマティクス(MI)を活用することで、このブラックボックスの部分の制御指針を確立しようとするものである。本研究グループでは、無機層状物質の層の間(層間)にあらかじめ有機分子を導入した層状の有機無機複合体を作製し、これをさまざまな有機溶剤へ投入することで、層間の分子と有機溶剤の親和性によって層状物質をバラバラにしてナノシートが得る手法を開拓してきた。2018年度は、層状構造を持つ酸化チタンに対し、層間有機分子と有機溶剤の組み合わせを約100通りに変化させた実験を行い、ナノシートの収率を決定付けている要因をデータ科学的手法の1つであるスパースモデリングにより抽出することができた。この学習結果に基づき、層間有機分子と有機溶剤の81通りの未知な組み合わせで、最少実験数で高収率にナノシートを得ることができた。本知見を応用し、いくつかの層状物質の系で高収率なはく離を最少実験数で実現することができた。これらの成果は、いくつかの公刊論文にて成果発表されている。本成果は、他のナノシート材料への適用のみならず、実験科学者も従来からの「自らの経験と勘」および「自らのデータ」に加え、MIを活用することによって、新しい物質・機能の設計や探索を加速させることができることを示している。



図1. MIを活用した高収率なナノシート合成の概略図.

§ 2. 研究実施体制

- ①研究者: 緒明 佑哉 (慶應義塾大学工学部 准教授)
- ②研究項目
 - ・研究全体の統括