

「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」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

加藤 俊顕

東北大学大学院工学研究科  
准教授

機械学習を活用したナノカーボンアトミックエンジニアリング

## § 1. 研究成果の概要

本研究は、機械学習を活用したナノカーボン材料の原子レベルでの構造制御手法の確立を最終目的として展開している。研究三ヶ年計画の二年目にあたる今年度は、ナノカーボン材料の一種であるカーボンナノチューブを対象とし、物性を規定している根幹の構造パラメータである“カイラリティ”を原子レベルで制御することを目的に研究を行った。カイラリティ制御を実現するためのアプローチとして(1)最適触媒材料の探索と(2)合成条件の最適化をそれぞれ機械学習を活用して行った。最適触媒材料の探索に関しては、第一原理計算と機械学習を組み合わせることで、カイラリティ選択性発現への寄与が期待される触媒構造因子が存在する可能性を示した。また合成条件の最適化に関しては、合成時のガス雰囲気を質量分析器により“その場観測”し、気相の質量スペクトルと各条件で合成されたカイラリティ分布をデータセットとした機械学習を行った。その結果、気相内に存在する特定のガス種がカイラリティ選択性に大きく影響を与えている可能性が示唆された。

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者:加藤 俊顕 (東北大学大学院工学研究科 准教授)
- ② 研究項目
  - ・ナノカーボンの構造制御合成と機械学習応用