

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

2019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3年計画の2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、高効率データ取得、及びそのデータを活用した機械学習による、最適触媒材料の探索を行った。その結果、ナノチューブ成長状態と触媒組成に密接な相関が存在することが明らかとなった。本情報をフィードバックすることで、ナノチューブの構造制御合成に向けさらなる最適な触媒設計が可能であると期待できる。