

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

加藤 俊顕（東北大学大学院工学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

カーボンナノチューブの電子物性を左右するカイラリティ制御に向け、ハイスループット振動分光実験と機械学習によるスクリーニングを活用し、特定のカイラリティ純度を向上させる多元触媒探索を実現した。最適条件下における合成結果では、たとえば(6,5)カイラリティについて、90%を超える世界最高純度での合成に成功した。また、類似の原子層物質である遷移金属ダイカルコゲナイドやグラフェンナノリボンに関しても、機械学習による合成条件最適化が有効であることを実証した。

本研究では、カーボンナノチューブの特殊な振動モードに着目し、独自のハイスループットスクリーニング手法を確立したことで、化学組成の自由度が高い多元触媒の探索が可能になった。これは触媒探索のような難しい問題に、マテリアルズインフォマティクスをどのように利用できるかを示す手本となる、波及効果の大きな成果である。また実際に極めて均質性の高いカーボンナノチューブが大量合成可能になったので、たとえば合成した試料を他の実験研究者に提供することにより、カーボンナノチューブの研究にも今後大きく貢献できると思われ、その意味でも波及効果が期待される。