

(H29-H32年度)

研究領域「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」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)

Figure 1 shows the reversible photochromic transition of the polyimide. The top part displays the chemical structure of the polyimide, which features a central photochromic unit. Below the structure, a red arrow points right, indicating the isomerization process, and a blue arrow points left, indicating the reversion process. The bottom part is a graph of Absorption versus Temperature (°C). The absorption is low at low temperatures and increases sharply around 40-50°C, reaching a plateau of approximately 0.8 at 60°C. The graph is flanked by two vials: the left one is colorless (isomerized form) and the right one is yellow (reverted form).

図4 温度応答発光制御

MIと実験的超高速スクリーニング法(時間分解マイクロ波伝導度:TRMC)を融合した研究手法を確立し、OPVやPSCといった次世代エネルギー変換材料の探索と新規機能材料の開発を行った。ランダムフォレスト機械学習と実験スクリーニングを融合させ、新たな分子設計アプローチを確立した(図1)。TRMC法でPSCのホール輸送層へのホール移動過程を直接観察し、データ科学的統計手法を用いて性能支配因子を解明した(図2)。また、超高速実験スクリーニングによる非鉛半導体の探索と高品質成膜プロセスの確立に成功した(図3)。さらに、PSCプロセス検討過程で見出した特異な現象を掘り下げ、任意の温度で温度応答発光変化を示す機能材料を創出した(図4)。

研究室ホームページ <http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~cmprc-lab/>

Researcher ID <http://www.researcherid.com/rid/B-7756-2011>

プレスリリース(JST/大阪大学) ① 2016年8月4日 ② 2017年4月18日

③2018年5月8日

④2018年9月5日

(注1)募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。