

トピックス

欲しい物質を自動的・自律的に合成する —デジタル技術と自動化・自律化で切り拓く 化学・材料研究の新時代—

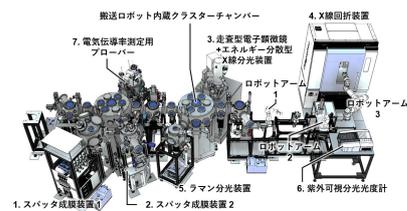
近年、マテリアル（材料）研究の分野では、機械学習とロボットを組み合わせた研究手法が急速に発展している。これらの技術により、大量の実験データを効率的に収集・解析することが可能となり、新たな物質の発見速度が大幅に向上することが期待されている。

本研究では、複数の実験装置を相互接続し、物質の合成から特性評価までを全自動で実行する「デジタルラボラトリー」を開発した（図参照：Nishio, Hitosugi *et al.*, Digital Discovery, 2025, プレスリリース <https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/10741/>）。各種装置は共通のフォーマット（MaiML形式）でデータを出力し、クラウド上のストレージに保存される設計となっている。

さらに、X線回折測定の結果を自動解析するプログラムを開発し、研究者が目指す物質を自律的に合成するための基礎技術を確立した。具体的には、電池材料として広く用いられるLiCoO₂について、成膜後に自動でX線回折測定を行い、その回折パターンを自動的に解析する。得られた結果をベイズ最適化に活用し、高品質なLiCoO₂薄膜を自律的に合成することに成功した。この技術により、研究者は目的とする物質を迅速に合成できるようになる。

加えて、本研究を基盤として、日本ファインセラミックス協会、および材料、自動車、分析機器、情報産業などに関わる8社（社名）と協働ラボを東京大学本郷キャンパス内に設置した。現在、セラミックスのバルク体を自動・自律的に合成する技術開発を進めている（<https://digital-laboratory.jp/>）。本取り組みにより産学連携を強化し、新発想の材料を開発するスピードを飛躍的に高めることを目指している。

東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻
教授 一杉太郎
連絡先：〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1



図

東京科学大学 物質理工学院 応用化学系
特任教授
E-mail: hitosugi@gcc.u-tokyo.ac.jp
<https://solid-state-chemistry.jp/>
東京科学大学 物質理工学院
特任准教授 西尾和記
連絡先：〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1
E-mail: nishio.k.f0ca@m.isict.ac.jp

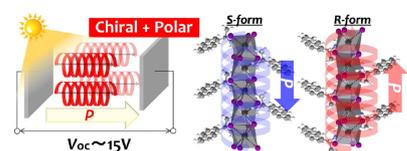
[2025年6月20日]

一次元らせん構造のペロブスカイト結晶で 巨大な光起電力を実証

空間反転対称性の破れと異方性を有する低次元構造の無機結晶において、Siなどの三次元半導体では観測されない特異的な物理現象が報告され、近年高い注目を集めている。特に、強いスピン軌道相互作用を持つ重原子系では、スピン偏極や電流誘起磁性、バルク光起電力効果など特異的な物理現象を示すことから、次世代半導体材料としてその応用が期待されている。一方、空間反転対称性の破れた無機結晶の例は少なく、物質設計の自由度と制御性も有機物質に比べ著しく低いことから、特異的な電子・スピン物性を操作するための明確な材料設計指針は確立されていない。

本研究では、ハロゲン化鉛ペロブスカイトのような重原子を含むアキラルな無機物質に対し、有機分子のキラル構造を利用することで、一次元らせん構造の形成を促すことに成功した。た

とえば、PbI₂にR(S)-ナフチルエチルアミン(R(S)-NEA⁺)を作用させることで、[PbI₆]⁴⁻からなる八面体構造が面を共有し連結した一次元らせん構造((R(S)-NEA)PbI₃)が形成する。この結晶の空間群は、反転対称性の破れたキラルなP2₁2₁2₁であり、RとSでらせん軸の回転方向が異なることから、左右円偏光を選択的に検出可能である(Science Adv., 2020, 6, eabd3274)。一方で、P2₁2₁2₁結晶構造のらせん鎖は反平行に配列しているため、らせん鎖に沿った電気分極は相殺される。ここで、一次元らせんペロブスカイトの結晶学的対称性をP2₁またはC2に下げると、バルク光起電力などの極性に由来する物性の発現が期待できる。本研究では、結晶対称性の制御に焦点をあて、熱的制御を用いた結晶化法により、極性キラル空間群C2に属する一次元らせん構造の結晶の作製に成功した。一次元らせん方向に大きな極性を有するペロブスカイト結晶の形成により、15Vを超えるバルク光起電力を示すことが明らか



となった。本研究の成果は、Angew. Chem. Int. Ed. 誌に掲載された (doi/10.1002/anie.202424391)。

石井あゆみ
早稲田大学先進理工学部化学・生命科学科 准教授
E-mail: ayumi.i@waseda.jp
HP: <http://www.chem.waseda.ac.jp/ishii/>

[2025年6月26日]