

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： スパース解析と遺伝的アルゴリズムの融合による新奇スペクトル分離手法の開発

2. 個人研究者名

玉井 康成（京都大学大学院工学研究科 助教）

3. 事後評価結果

本研究は、複雑にオーバーラップした観測データを個々の過渡成分に関する情報（スペクトル、キネティクス）に分離する手法として、特に有機物のようなディスオーダー材料において頻繁に観測されるスペクトルシフトまで含めたスペクトル分離手法を開発することを目的として行われた。通常の過渡吸収分光装置の性能および従来の解析手法では有機薄膜太陽電池の内部動作メカニズムを解明するには不十分な課題に対し、種々の正則化を過渡吸収データの解析に用いることでその克服を目指したものである。

超微量シグナル計測の実現については、Total Variation 正則化により過渡吸収データのノイズが効果的に除去できることを示し、ハード面の改良と併せて $OD < 10^{-5}$ の検出感度を達成した。コヒーレントアーティファクトの除去については、Robust Principal Component Analysis (RPCA) 法によりシグナルとコヒーレントアーティファクトを分離できることを示した。スペクトル分解アルゴリズムの開発においては、スペクトル辞書を用いて過渡吸収データを Fused LASSO 法で解析することでスペクトルシフトまで含めてスペクトル分割可能であることが確認された。オフセットレス電荷分離メカニズムの解明及びその他材料研究への応用においては、上記の手法が材料研究に有効であることを種々の実例を用いて示した。有機薄膜太陽電池に対する過渡吸収分光 (TAS) データの解析では、全ての登場過渡種の大まかなスペクトル形状の事前知識が必要となるものの、Fused LASSO によるスペクトル分離法、TV 正則化によるノイズ除去法や、RPCA によるコヒーレントアーティファクト除去法も開発された。有機薄膜太陽電池におけるオフセットレス電荷分離メカニズムなどに関する論文が発表されるなどの成果が得られた。

本研究によって過渡吸収分光法の精度や解析手法が格段に向上し、これまで見えなかった微弱な過渡種の時間発展が追えるようになった点は大きな進歩である。また、既に様々な太陽電池材料への応用が進んでおり、オフセットレス電荷分離に関する新しい知見など、重要な成果が得られていることも特筆に値する。既存の情報技術を課題に応じて適切に選択しながら、所望のノイズ除去や成分分離を達成しており、材料研究の基礎研究の効率化に資するモデルケースになるような研究成果であると評価する。

ただし、スペクトル分解は広範な応用が期待されるテーマであるが、開発された手法は TAS に特化したものとなった。このため、連携研究や融合研究は限定的であった。今後は、有機材料以外にも、酸化物誘電体など最近注目を集めている材料への応用が進展することを期待する。