

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

|        |                                |
|--------|--------------------------------|
| 研究担当者  | 畠山 欽                           |
| 研究機関名  | 東京工業大学                         |
| 所属部署名  | 物質理工学院                         |
| 役職名    | 助教                             |
| 研究課題名  | プロセスに強い MI の創出と複合機能材料での実践      |
| 研究実施期間 | 2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日 |

### 研究成果の概要

高分子固体電解質の研究を進め、電荷移動錯体だけでなく脂肪族ポリマーでも優れた電気化学特性を発現できることを見出した。特定のポリマーとリチウム塩系を複合することで、高いイオン伝導度と化学的安定性を示すことが可能になりつつある。この複合体は、シンプルな構造でありながら、高分子鎖の運動とイオン輸送の過程がデカップリングする挙動に基づく高伝導度の兆候が得られている。さらに、当初の計画を超え、デバイス評価にも一部着手でき、全固体リチウムイオン電池の作製も試みる段階に至った。

また、深層学習の延長として新たに登場した大規模言語モデル (LLM) の潜在力について解明する研究を進めた。LLM が実験計画の解析や提案タスクにおいて従来手法より優れた性能を示す手応えが得られ、原著論文 2 報がアクセプトされた。LLM は材料科学分野におけるプロセス・インフォマティクスの刷新に大きく貢献する可能性があり、基盤手法としての提案と確立に取り組んでいく。

加えて、ロボットアームを使った自動実験システムの立ち上げが進み、簡単なポリマー合成実験などを行えるようになった。LLM とロボット技術を統合した化学実験システムは、複合材料のプロセスを体系的に記述・解析する上で有力なツールになる見込みである。構築中のシステムは実験の再現性、記録の正確性、操作の精密性においても優れており、今後の発展が期待できる。