

「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」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

田中 大輔

関西学院大学工学部
准教授

ハイスループット合成・評価システムと機械学習の統合による革新的太陽電池材料の
探索

§ 1. 研究成果の概要

金属イオンと架橋配位子から自己集合的に形成される金属-有機構造体(Metal-Organic Frameworks : MOF)は、ガス貯蔵や分離・触媒等への応用が期待されている多孔性材料であり、様々な分野への応用が期待されている。一般に MOF 中の金属クラスターからなるノード部位は SBU と呼ばれ、無機クラスター由来の特異な光物性の発現が期待される。本研究では、これまで合成が困難だと考えられてきた、硫黄からなる SBU を有する MOF に注目し、その半導体特性、特に光物性に着目した研究を進めた。一般に、硫黄元素を SBU とした MOF は結晶性が低く、合成は困難であるといわれていた。本研究では、鉛イオンとトリチオシアヌル酸を用いることで、新規 MOF の合成に成功し、その構造中に PbS の一次元構造を有することを明らかとした。合成した結晶は単結晶 X 線構造解析により決定し、その細孔特性および光物性の評価を行った。特に、得られた MOF の光物性を評価したところ、光照射による水の水素発生触媒に利用可能であることを明らかとした。さらに、決定木学習と呼ばれる機械学習の手法を活用することで、銀イオンとトリチオシアヌル酸の結晶化条件の探索を行い、合成条件の最適化に成功した。今後は、これまでに確立した機械学習の手法とハイスループット合成技術を活用し、種々の含硫黄 SBU を有する新規 MOF の開発とその光物性評価に取り組んでいく。

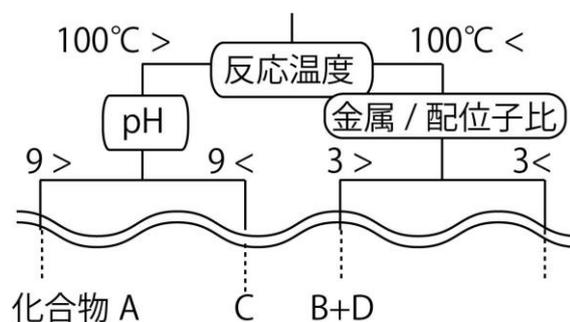


図 1. 本研究で用いた決定木学習の例。大量の合成実験データから、自動的に目的化合物の最適な合成条件を提示することが可能である。

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 田中 大輔 (関西学院大学理工学部 准教授)
- ② 研究項目
 - ・ハイスループット合成実験法の確立
 - ・機械学習を活用した実験条件探索
 - ・新規 MOF 材料の開発
 - ・MOF の発光物性評価