

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

2019年度 実績報告書

田中 大輔

関西学院大学 理工学部
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

本研究では、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) の開発を行っている。一般に、MOF の節は複核金属クラスターやその連結構造から構成されており、その構造はドット (0D)、ナノワイヤー (1D)、ナノレイヤー (2D) など多岐にわたっているが、多くは絶縁体で無機構造体由来の機能発現は限定的であった。本研究では、硫化鉛 (PbS) ナノワイヤーが鉛元素で連結された、新規 MOF (KGF-1) の単結晶合成に成功した (図)。KGF-1 の結晶構造中には微小な細孔が存在しており、窒素とメタノールは吸着せず水のみを選択的に吸着する分子ふるい効果の発現が確認された。さらに、時間分解マイクロ波分光測定より、KGF-1 が電気伝導性を有することが確認され、第一原理計算より、PbS ワイヤ構造が電気伝導に寄与していることが示唆された。この MOF に白金を担持し水素発生光触媒としての特性を評価したところ、可視光吸収による水素の発生が確認された。現在、類似組成を持つ MOF の合成条件を、機械学習の手法を活用して最適化している。

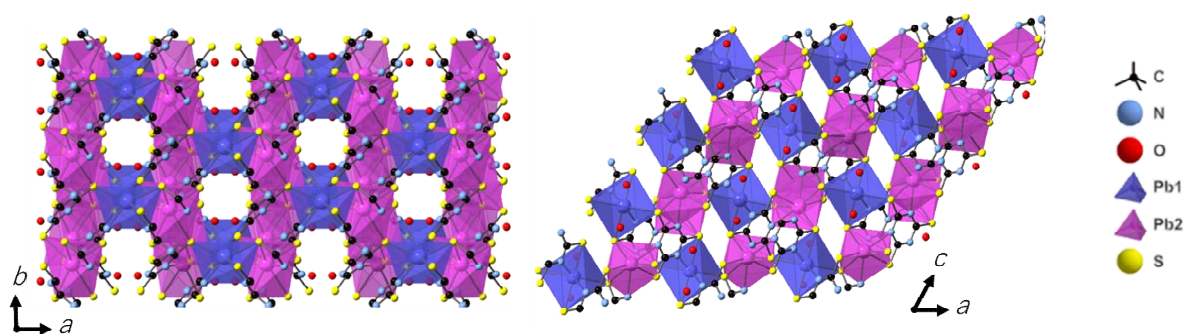


図. 本研究で合成に成功した新規 MOF (KGF-1) の結晶構造