

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

田中 大輔（関西学院大学理工学部 准教授）

3. 事後評価結果

難結晶性の金属-有機構造体（MOF）の合成条件探索を、機械学習によって効率化する手法を開発し、従来合成が困難であった低次元無機半導体構造を骨格中に持つ 10 種類以上の MOF の合成と、その電子物性の解明に成功した。合成のハイスループット化を行うために、マイクロ流路による MOF 合成の環境を整え、また XAFS によりその場観察するシステムも併せて開発した。初めて合成に成功した含硫黄 MOF の一部では、結晶構造中で金属-硫黄ネットワークが 3 次元的に広がっており、電気伝導特性を示すことが実証された。さらに、開発した新材料の光触媒特性についても評価を行い、水の水素発生触媒特性が発現することを見出している。

MOF の構造中には細孔が存在するため、フレームワーク中の活性部位に分子やイオンが自由にアクセス可能である。そのため、MOF は太陽電池、二次電池、触媒など、様々な分野への応用が期待できる。本研究は、そのような未開拓の物質群の合成と物性解明を可能とする足掛かりを築いた研究として評価できる。