

第26回錯体物性化学講演会

田中 大輔 准教授

関西学院大学
理工学部化学科



機械学習を活用した新規ナノ材料の開発研究を精力的に展開されている田中大輔先生（関西学院大学理工学部化学科 准教授）をお招きして、講演会を開催いたします。皆さまのご来聴をお待ち申し上げます。

日時：2019年9月5日（木）16:00～17:30

場所：ウエスト1号館 講義棟 301号室

タイトル：機械学習を活用したクラスター集積 MOF の合成条件探索

要旨：一般に、金属-有機構造体（MOF）の節は複核金属クラスター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。MOF 結晶を無機ナノクラスター集積構造と見做せば、単なる無機構造の凝集では実現困難な高度な自己組織化構造が達成可能であるため、優れた光物性やキャリア移動度の実現が期待できる。本発表では、我々のグループが合成に成功した高次元クラスター構造を骨格中に持つ MOF の電子物性を報告し、従来合成が困難であった高次元クラスターを節に持つ難結晶性 MOF の合成条件探索を、機械学習によって効率化する手法について提案する。

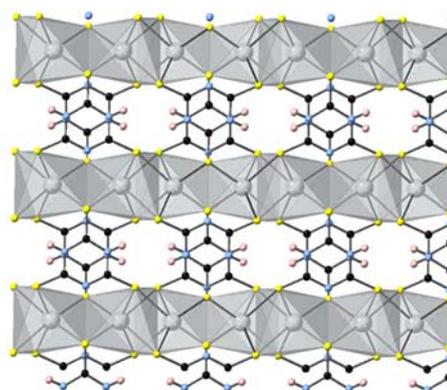


図. 本研究で開発した AgS クラスター集積型 MOF の結晶構造

連絡先：理学研究院化学部門 大場正昭
E-mail: ohba@chem.kyushu-univ.jp, Tel: 092-802-4152