

有機－無機ハイブリッド材料におけるデータ駆動型探索技術の確立

(パナソニック ホールディングス株式会社¹⁾) ○横山智康¹

Data-Driven Discovery for Organic-Inorganic Hybrid Materials (¹ *Technology Division, Panasonic Holdings Corporation*) ○Tomoyasu Yokoyama¹

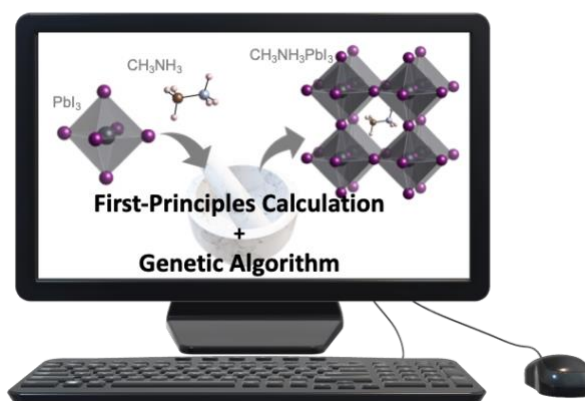
Organic-inorganic hybrid materials (OIHMs) have been attracting attention, especially for perovskite solar cells. Because of the huge number of combinations of organic molecules and inorganic elements, a data-driven approach is expected to greatly improve the efficiency of material exploration for OIHMs. However, when searching for unknown OIHMs without experimental data, there are two challenges: predicting crystal structure and predicting material properties for OIHMs.

We have solved the former challenge by combining genetic algorithms and DFT calculations¹⁾ and the latter by applying the DFT/3D-RISM method²⁾, which is used for solid-liquid interface simulations. The two new schemes make it possible to predict realistic structures and properties of OIHMs without experimental data with significantly reduced computational costs.

Keywords : *materials informatics; first-principles calculations; data-driven science; organic-inorganic hybrid materials; perovskite solar cells*

近年、有機材料と無機材料を融合した「有機－無機ハイブリッド材料」が、これまでにない高機能な物性を発現するとして、ペロブスカイト太陽電池を中心に注目を集めている。このような有機－無機ハイブリッド材料は有機分子と無機元素の膨大な組み合わせが存在し、従来の材料開発では最適材料を見出すのが困難であるため、データ駆動型探索による効率化が大いに期待されている。しかし、実験データなしに未知の有機－無機ハイブリッド材料を探索する場合、「構造予測」と「物性予測」という二つの課題があった。

我々は一つ目の「構造予測」の課題に対し、遺伝的アルゴリズムと DFT 計算を組み合わせた手法¹⁾を、二つ目の「物性予測」の課題に対し、固液界面の計算で使用する DFT/3D-RISM 法²⁾を、それぞれ適用することでこれらの課題を解決した。本講演では、その詳細を紹介するとともに、今後の展望について述べる。



1) T. Yokoyama, *et al. J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, 12, 2023.

2) T. Yokoyama, *et al. J. Phys. Chem. C* **2021**, 45, 31.