

未合成領域における機械学習を用いた新規可視光応答性金属硫化物光触媒の開発

(東理大理¹・奈良先端大物質²・奈良先端大 DSC³・東理大総研カーボンバリュー⁴)
各務 風雅¹・高原 渉²・原嶋 庸介^{2,3}・高山 大鑑^{2,3}・山口 友一^{1,4}・藤井 幹也^{2,3}・
工藤 昭彦^{1,4}

Development of New Visible-Light-Driven Metal Sulfide Photocatalysts using Machine Learning in an Unexplored Region (¹ Faculty of Science, Tokyo University of Science, ² NAIST, Material Science, ³ NAIST, DSC, ⁴ Carbon Value Research Center, Research Institute for Science and Technology, Tokyo University of Science) ○Fuga Kakami,¹ Wataru Takahara,² Yosuke Harashima,^{2,3} Tomoaki Takayama,^{2,3} Yuichi Yamaguchi,^{1,4} Mikiya Fujii,^{2,3} Akihiko Kudo^{1,4}

We have reported various visible-light-driven metal sulfide photocatalysts such as $(\text{CuGa})_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}_2$ and Cu_3VS_4 .¹⁻³⁾ However, further development of novel photocatalyst materials is important. We have developed various photocatalysts by experimental approaches so far. In recent years, the development of materials using machine learning has been paid much attention.⁴⁾ In the present study, we developed new visible-light-driven metal sulfide photocatalysts from unknown materials suggested by machine learning using the data of metal sulfide photocatalysts developed in our group.

$\text{Ag}_2\text{CoGeS}_4$ suggested by machine learning as a new photocatalyst was successfully synthesized in an almost single phase and possessed 1.9 eV of the band gap. The photocatalyst showed the sacrificial H_2 evolution activity under visible light irradiation. In conclusion, we successfully developed a new visible-light-driven metal sulfide photocatalyst from unknown materials using machine learning.

Keywords : machine learning, extrapolative search, metal sulfide, new material, visible light

当研究室では、これまでに $(\text{CuGa})_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}_2$ 、 Cu_3VS_4 などの種々の可視光応答性金属硫化物光触媒を開発してきた¹⁻³⁾。しかし、さらなる新規光触媒材料の開発が重要である。当研究室ではこれまで実験的アプローチにより光触媒開発を行ってきた。近年では機械学習を活用した材料開発が大きな注目を集めており、光触媒分野においてもその応用が期待される⁴⁾。そこで本研究では、当研究室の金属硫化物光触媒データを基に機械学習を行い、報告例のない未知の物質から有望な光触媒の候補を選び出すことで、新規可視光応答性金属硫化物光触媒の開発を目指した。

機械学習により新たな光触媒として提案された $\text{Ag}_2\text{CoGeS}_4$ 新物質を合成したところ、ほぼ単一相と考えられる目的物を得ることに成功した。本材料は 1.9 eV のバンドギャップを有していた。また、本材料は可視光照射下での犠牲試薬を含む水溶液からの水素生成に活性を示した。以上のことから、未合成領域における機械学習を用いた新規可視光応答性金属硫化物光触媒の開発に成功した。

1) T. Kato, Y. Hakari, S. Ikeda, Q. Jia, A. Iwase, and A. Kudo, *J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, 6, 1042.

2) S. Ikeda, N. Aono, A. Iwase, H. Kobayashi, and A. Kudo, *ChemSusChem*. **2019**, 12, 1977.

3) T. Takayama, I. Tsuji, N. Aono, M. Harada, T. Okuda, A. Iwase, H. Kato, A. Kudo, *Chem. Lett.* **2017**, 46, 616.

4) M. Fujii, *JSAP Review*. **2022**, 2022, 220416.