



2023年度助成

研究経過・**終了**報告書

※ゴシック文字で記入下さい。

研究テーマ	固体材料の同定をキーとした機械学習にもとづく高活性光触媒材料の開発
研究の結果	<p>RDB-PAS 装置の構築 まずは RDB-PAS 測定の実験構築として touche NPO からの装置一式の移設および標準前処理として凍結乾燥機を導入した。</p> <p>酸化チタン光触媒 ERDT/CBB パターンの測定ならびに種々の物性および光触媒活性評価 代表的な光触媒である酸化チタンを対象に今回は研究をすすめた。49 種類の市販酸化チタンを準備し、上記で環境構築した RDB-PAS 法により ERDT/CBB パターンを取得した。また、3 種類の代表的な光触媒反応(水溶液中酢酸の酸化分解反応(CO₂系)、メタノールの脱水素反応(H₂系)、銀イオンを電子受容体とする酸素生成反応(O₂系))の活性を調べた。さらに、X 線回折法による結晶構造や結晶性、窒素吸着法による比表面積算出などにより物性評価を行った。</p> <p>光触媒構造-活性相関の機械学習による予測 機械学習には、前述の今回新たに測定した物性にくわえ、<i>J. Adv. Oxid. Technol.</i>, 13, 247-261 (2010) で報告されている物性値も用いた。機械学習にはランダムフォレスト回帰を用い、訓練データから学習モデルを構築を試みた。ERDT パターンに対しては、ガウス関数フィッティングを施し、ピークの中心波長(ERDT_{mean})、ピーク高さ(ERDT_{peak})およびピーク分散(ERDT_{sig})を特徴量として用いた。各特徴量と光触媒活性の相関係数を調べたところ、O₂系では結晶相や比表面積に加えて ERDT_{mean} の相関が高く、CO₂系では結晶相の相関が高かった。一方、H₂系では今回用いた特徴量に高い相関は見られなかった。機械学習の結果、O₂系において光触媒活性の回帰精度が最も高かった(R²=0.958)一方、各特徴量と活性に顕著な相関関係が得られなかった H₂系においても決定係数は 0.9 程度であった。O₂系について、各特徴量の光触媒活性に対する重要度を求めたところ、ERDT_{mean} が最も高く、ついで結晶相に関するものが上位であった。さらに、O₂系について ERDT から得た 3 つのパラメータのみを特徴量に用いて機械学習を行ったところ、全ての特徴量を用いて学習した場合とほぼ同等の回帰(R²=0.950)ができることがわかった。このことは、ERDT には他の構造パラメータの情報も含まれており、ERDT のみを測定することによって活性予測が可能であることを示している。一方、構築したモデルを用いて 7-fold CV 評価を行ったところ、最も精度が高い O₂系でも予測精度は R²=0.734 にとどまり、H₂系にいたっては R²=0.236 であった。高活性光触媒の開発には更なるモデルの改良が必要である。</p>
研究発表 (実績)	<p>(1)光触媒構造-活性相関の機械学習による予測, 高島舞・新田明央・大谷文章・旭良司, 第 133 回触媒討論会, ポスター発表(2P23), 横浜, 2024 年 3 月 19 日</p> <p>(2)How Can We Know True Particle Shape? Macroscopic Morphology Analysis of Ceria Particles Based on Their Electron Trap-distribution Patterns, Bunsho Ohtani, <u>Mai Takashima</u>, 27th International Conference on Semiconductor Photocatalysis and Solar Energy Conversion (SPASEC-27), Plenary Lecture, online, 2024 年 6 月 11 日(予定)</p> <p>(3)DNA beyond fingerprint: Whole structural characterization of titania powders only using their electron trap-distribution patterns, <u>Mai Takashima</u>, Bunsho Ohtani, 24th International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-24) and International Conference on Artificial Photosynthesis-2024 (ICARP2024), oral, Hiroshima, 2024 年 7 月(予定)</p> <p>(4)Prediction of photocatalytic activity by energy-resolved distribution of electron traps, <u>Mai Takashima</u>, Bunsho Ohtani, Ryoji Asahi, 24th International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-24) and International Conference on Artificial Photosynthesis-2024 (ICARP2024), poster, Hiroshima, 2024 年 7 月(予定)</p>

提出期限: 研究期間終了後、すみやかに助成金の「必要経費使途明細書」「領収書」と合わせて提出下さい。
年度をまたぐ場合は毎年3月末日までに、途中経過をご記入の上、報告願います。