



## 機械学習と光電極

神戸大学 隈部佳孝

神戸大学の隈部と申します。この度は、ニュースレターへの寄贈の機会をいただき、誠にありがとうございます。本稿では、機械学習を用いたヘマタイト光電極の性能予測に関する研究を紹介いたします [1]。

赤錆として知られるヘマタイト ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) は、安全性・低コスト・高安定性を兼ね備えた光触媒として、古くから太陽光水分解システムへの応用が期待されてきました。一方、光照射によって生成した電子と正孔がすぐに再結合してしまうため、光エネルギー変換効率が著しく低いという課題があります。私たちの研究グループでは、ヘマタイトナノ粒子の結晶配向・配列を制御したメソ結晶化や、粒子表面へのドーパント偏析を利用した複数元素の共ドーピングによる表面構造の改質により、ヘマタイト光電極の性能向上を実現してきました [2,3]。複数の元素をドーピングすることで、単一ドーピングでは得られない特性を付与することは可能ですが、どの元素をどの程度、またどのような組み合わせでドーピングすべきかについては、いまだ十分な指針が確立されていません。これは、ヘマタイト光電極の作製方法の違いによって、同じドーパントでも性能が大きく変化する場合があります。さらに、ドーパントの種類が2種類、3種類と増えるにつれて探索空間を急速に拡大し、その最適条件を見出すには膨大な実験が必要となります。そこで私たちは、効率的なドーパント探索を可能にする機械学習モデルの構築に取り組んできました (図1)。

実験データを活用した機械学習では、データの質が予測精度を大きく左右するため、再現性の高い光電極の作製工程が重要になります。本研究で用いた光電極の作製プロセスは、ソルボサーマル法による複数ドーパントを含むヘマタイト粒子の合成、洗浄と分散液化、導電性ガラス基板上へのマルチスピンコート、焼成とアニールから構成

されます。スピンコートによる電極作製では、分散液の分散性が電極上の触媒量に影響するため、洗浄工程を見直して分散性の向上を図りました。また焼成工程では、冷却過程や炉内での電極の設置位置まで配慮し、再現性の高いプロトコルを確立しました。このようにして得られた光電極を用いて、光電流密度を目的変数に、サンプルの組成情報から作成した元素特徴量や各種分析データを説明変数として、二段階のLASSO回帰による光電流密度の予測を行いました。LASSO回帰を二段階にすることで、モデルの予測精度を最大化する説明変数を選択でき、過学習や学習不足による予測精度の低下を抑えることができます。本研究で使用したサンプル数は97種と少数でしたが、二段階LASSO回帰を適用することで、良好な予測精度が得られました。また、最終的に選択された特徴量は、化学的観点からの考察が十分に可能なレベルまであり、光電流密度予測において重要な特徴量を見出すことができました。今後は、外挿的予測と実証を繰り返しながら、最適なドーパント量や組み合わせの探索を進めるとともに、助触媒などへの応用展開にも取り組んでいきたいと考えています。

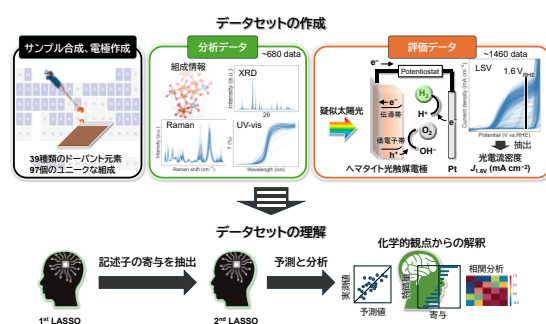


図1. 機械学習モデルの概略図

- [1] Nishimura, T.; Kumabe, Y.; Harashima, Y.; Fujii, M.; Tachikawa, T. *ACS Catal.* **2025**, *15*, 11993–12004.
- [2] Zhang, Z.; Karimata, I.; Nagashima, H.; Muto, S.; Ohara, K.; Sugimoto, K.; Tachikawa, T. *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 4832.
- [3] Zhang, Z.; Tsuchimochi, T.; Ina, T.; Kumabe, Y.; Muto, S.; Ohara, K.; Yamada, H.; Ten-no, S. L.; Tachikawa, T. *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 1499.