

機械学習と光電極

赤錆として知られるヘマタイトは、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。この効率を向上させる有効な手法の一つとして、他元素のドーピングが挙げられますが、どの元素をどの程度、どのような組み合わせでドープすべきかについては、いまだ十分な指針が確立されておらず、膨大な数の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。 . . .