

# CO2還元用光触媒のデータ駆動型設計

ZHANG SHUHAN

北海道大学 大学院総合化学学院学院  
情報化学研究室



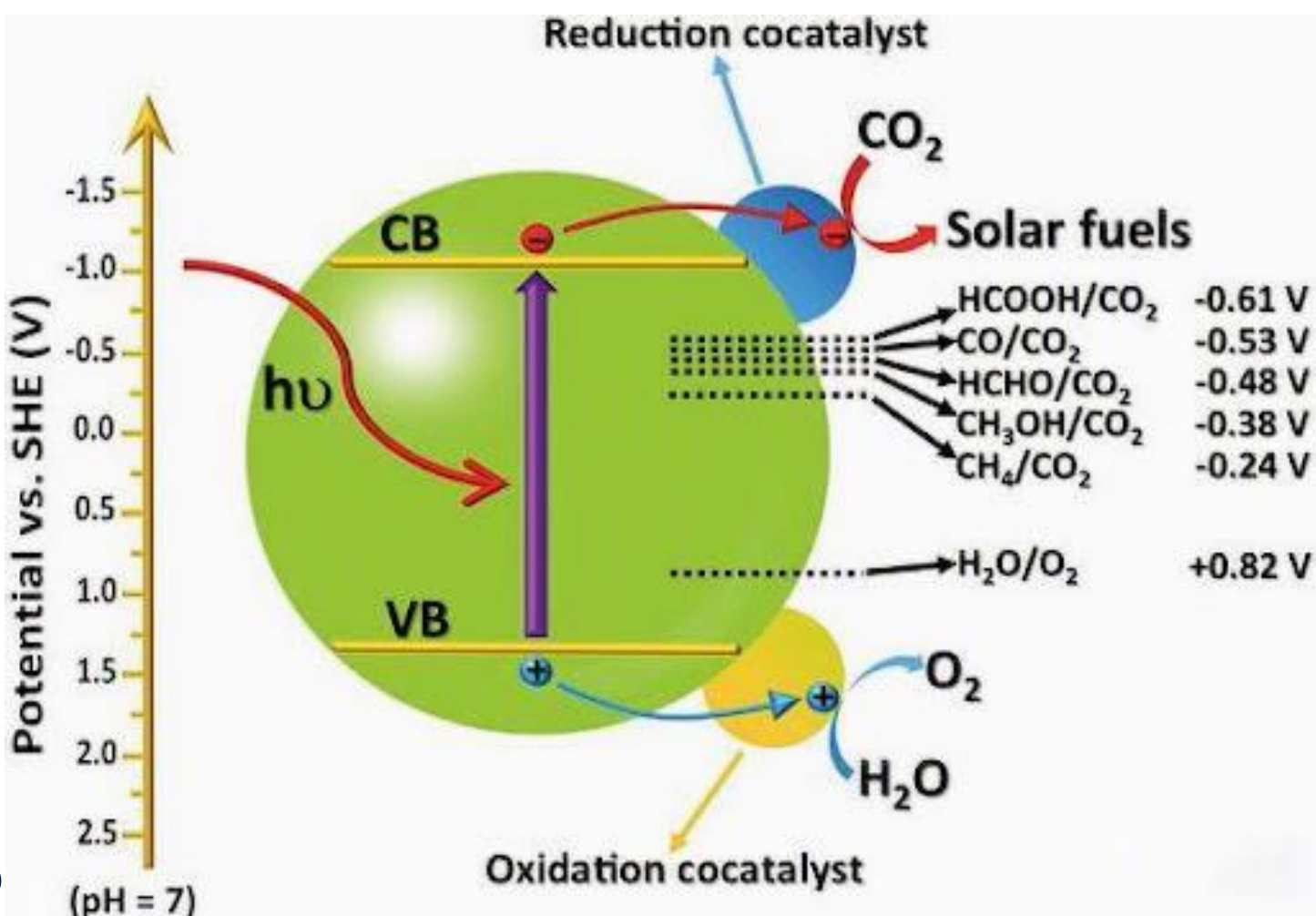
## 未来社会のあるべきかたち

- ◆ 温室効果を緩和する
- ◆ クリーンエネルギーの支援

### 背景

- 電子・正孔対の急速な再結合
- 低いCO<sub>2</sub>吸着能
- 低い量子効率

New catalyst by AI?



### 戦略



Database

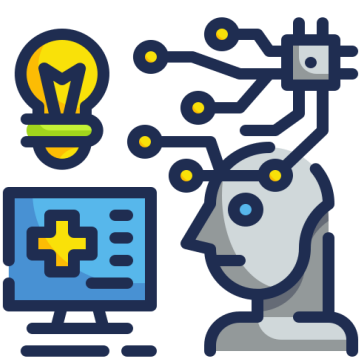
未処理：550件  
処理済み：481件  
出典：文献



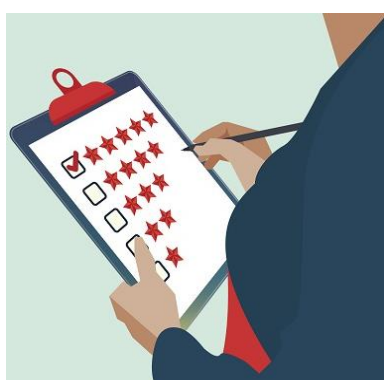
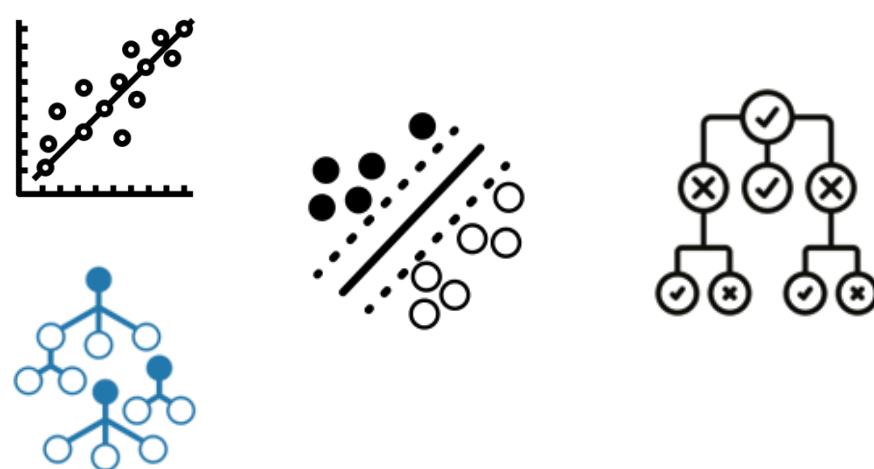
Feature Engineering

| Cu  | Encoded |
|-----|---------|
| Yes | 1       |
| No  | 0       |
| No  | 0       |

\*Data Source: Data adapted from J. Li et al., Int. J. Hydrogen Energy, 2022.



Machine Learning

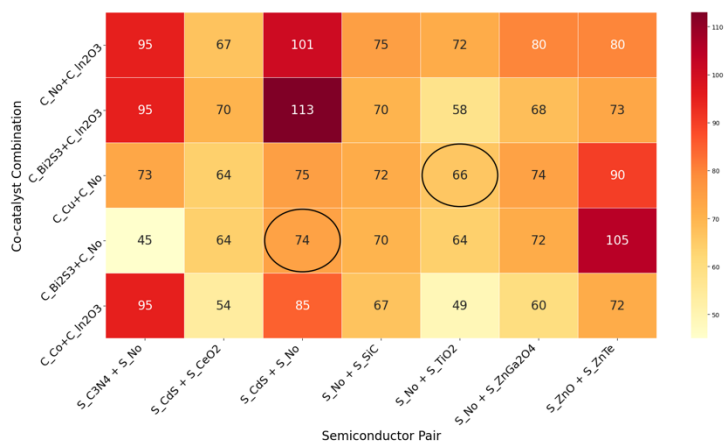


Validation

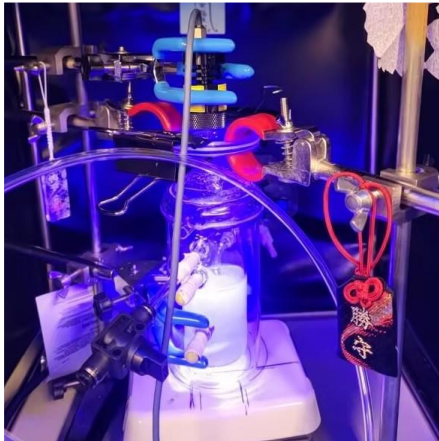
正解率： 0.84  
F1スコア： 0.83



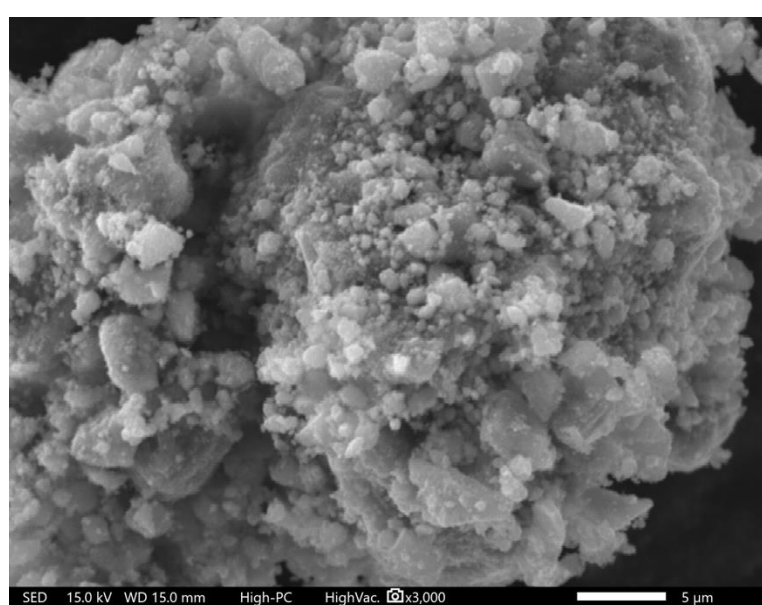
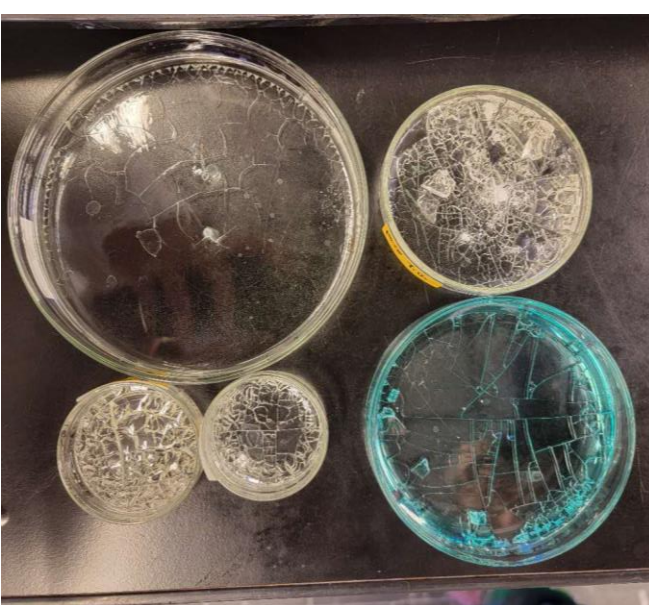
Discovery



Experiment



### 結論



- 統一データセットを構築し、500万通りの組み合わせから候補材料をスクリーニングした。
- 実験装置を設計・構築し、触媒を合成し、検証プロセスを確立し、機械学習アプローチの有効性を検証した。