

動的モンテカルロシミュレーションを組み込んだサイバーフィジカルループによる不純物ドーピング SrTiO₃ 光触媒性能の最適化

(奈良先端大¹・奈良先端大 DSC²・奈良先端大 CMP³・神戸大⁴) ○水上 昌勇¹・原嶋 庸介^{1,2}・高山 大鑑^{1,2}・高須賀 聖五¹・天能 精一郎⁴・西口 和孝⁴・藤井 幹也^{1,2,3}

Process informatics of calcination of impurity doped SrTiO₃ photocatalyst incorporating dynamic Monte Carlo simulation (¹NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ²DSC, NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ³CMP, NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ⁴Kobe University) ○ Masatake Mizukami¹, Yosuke Harashima^{1,2}, Tomoaki Takayama^{1,2}, Shogo Takasuka¹, Seiichiro Ten-no⁴, Kazutaka Nishiguchi⁴, Mikiya Fujii^{1,2,3}

Photocatalysts use solar energy to split water and produce hydrogen as an energy source that does not emit CO₂. Therefore, the photocatalytic materials are attracting attention as we move towards a decarbonized society. It is empirically known that the catalytic activity of photocatalysts changes depending on the amount of oxygen vacancies and the amount of impurity replacement that occur during calcination. Optimizing the calcination conditions that give the highest catalytic activity requires a lot of experimental effort, which makes it difficult to find the optimal condition. In this study, using SrTiO₃ as a specific example, we calculated the amount of oxygen vacancies and the amount of Mg impurity for different calcination temperatures by using dynamic Monte Carlo simulation, and constructed a predictive model by combining with a linear regression model to predict the photocatalytic activities.

Keywords: Photocatalysts; SrTiO₃; Dynamic Monte Carlo

太陽光エネルギーによって水を分解し、CO₂を排出しないエネルギー源となる水素を生成する光触媒は、脱炭素社会の達成に向けて注目される物質となる。光触媒は焼成の条件によって酸素欠陥量や不純物置換量が異なることに起因して光触媒活性が変化することが経験的に知られている。光触媒活性が最も高くなる最適な焼成条件の探索には多くの実験コストがかかるため、探索効率の向上は重要課題である。そこで本研究では、SrTiO₃を具体例として、焼成温度による酸素欠陥量や Mg 不純物置換量を統計力学と確率過程論に基づく動的モンテカルロシミュレーションで計算し、線形回帰モデルと組み合わせた光触媒活性の予測モデルを構築した。

- 1) 表面技術, Vol.64, No.10, pp.531-536, (2013).
- 2) A.Chatterjee, D.G. Vlachos; *Computer-Aided Mater. Des.*, **14**, 253 (2007)