

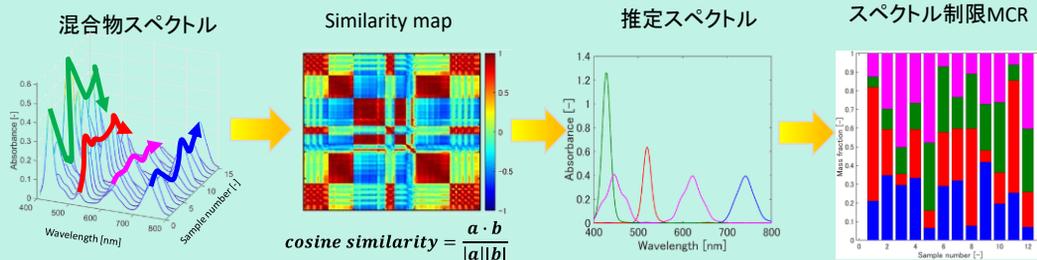
混合物のスペクトルデータのみから物質と濃度の推定

研究代表者 片山 建二 研究員

スペクトル計測による化学分析

リファレンスデータを必要としないスペクトル解析

cos-s map MCR法



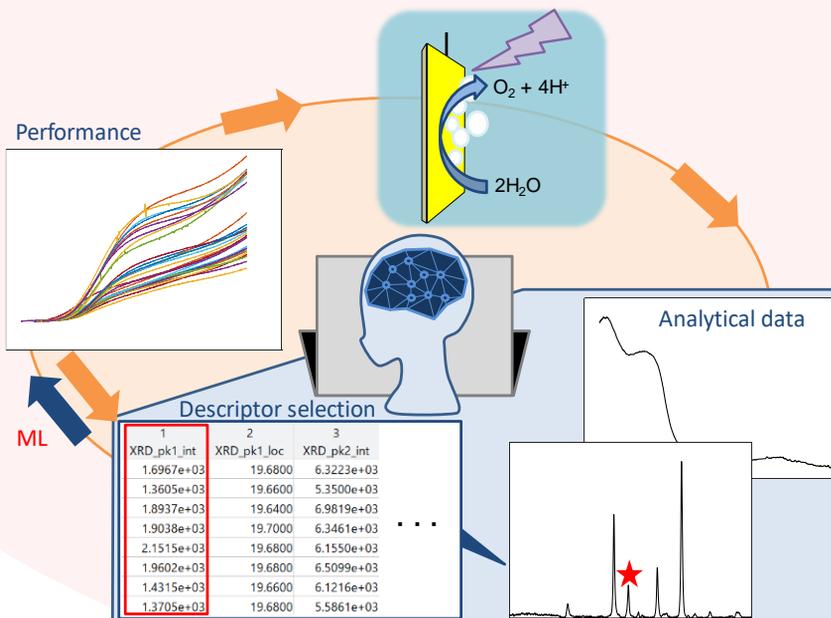
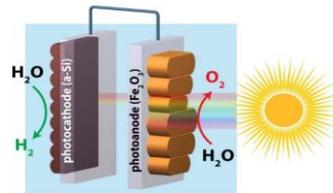
$$\text{cosine similarity} = \frac{a \cdot b}{|a||b|}$$

- “Similarity map” を導入したパラメータレススペクトル分解手法の開発。
- “cos-s map MCR” 法を使ったリファレンスデータを使わない異なる複数分析法への適用(吸光, X線回折, NMR, Raman)。
- リファレンスを得られない、反応プロセス中の中間種・不明種の解析に威力。

スペクトルデータを用いたデータ駆動材料性能予測

Hematite ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$)

- Low cost
- Earth-abundant
- Chemical stability
- Visible light absorption (1.9~2.2 V)



- 数十のデータで性能最適化
- 重要な物理的・化学的要因を抽出。