



Latvijas Zinātnes padome

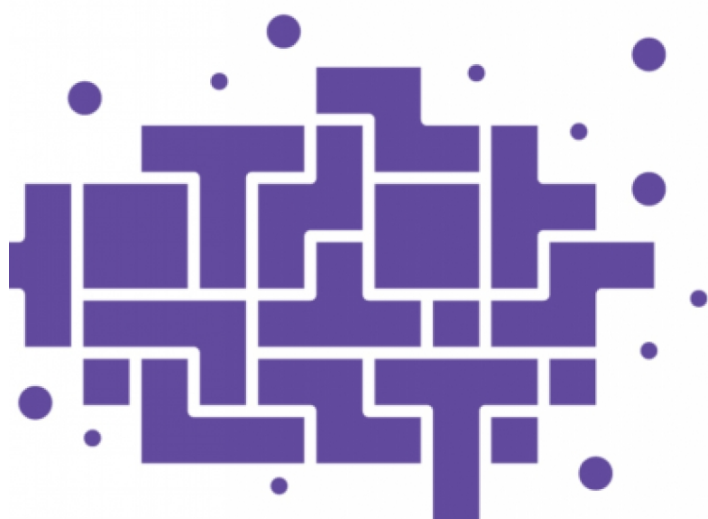
Heteropāreju fotokatalizatori zaļajai ūdeņraža ražošanai, izmantojot blīvuma funkcionāla teorijas atbalstītu ģeneratīvo mašīnmācīšanos

Statuss: Plānots

Publicēts: 06.09.2024.

Fundamentālo un lietišķo pētījumu projekti

(FLPP)



FLPP

FUNDAMENTĀLO UN LIETIŠĶO PĒTĪJUMU PROJEKTI

Sākums: 01.01.2025 Noslēgums: 31.12.2027

Projekta numurs

—● Izp-2024/1-0406

Finansējums

—● 300 000 EUR

Projekta vadītājs

—● Sergejs Piskunovs

Projektu īsteno

—● Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Zinātnes nozaru grupa: Dabaszinātnes

Projekta pamata zinātnes nozare: Fizika un astronomija

—● Papildu zinātnes nozare: Fizika un astronomija

Kopsavilkums:

Ierosinātā projekta mērķis ir izstrādāt jaunus heteropāreju fotokatalizatorus efektīvai zaļajai ūdeņraža ražošanai, izmantojot ģeneratīvās mašīnmācīšanos un blīvuma funkcionāla teorijas (Density Functional Theory, DFT) aprēķinus. Pētījums balstās uz jaunākajiem sasniegumiem mašīnmācīšanos integrētā fotokatalizē, enerģijas katalītisko materiālu viedā projektēšanā, 2D materiālu augstas caurlaidības modelēšanā un viediem algoritmiem fotokatalizatora projektēšanai un veiktspējas prognozēšanai. Galvenie mērķi ir izstrādāt ar DFT atbalstītu ģeneratīvo mašīnmācīšanos sistēmu, lai prognozētu jaunu heteropāreju fotokatalizatoru elektroniskās īpašības un fotokatalītisko veiktspēju, eksperimentāli izvērtēt prognozētos fotokatalizatorus un optimizēt to sintēzes apstākļus, kā arī izveidot daudzsološu fotokatalizatoru un to īpašību datubāzi turpmākai pētniecībai un attīstībai. Projektā tiks izmantotas daudznazaru komandas zināšanas, tostarp pētnieki no Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūta un starptautiskie dalībnieki. Paredzamie rezultāti ietver lielas ietekmes publikācijas, konferenču prezentācijas un publiski pieejamu fotokatalizatoru datubāzi. Ierosinātais pētījums var paātrināt efektīvu un rentablu fotokatalizatoru atklāšanu zaļajai ūdeņraža ražošanai, veicinot ilgtspējīgu enerģijas risinājumu izstrādi un pāreju uz videi draudzīgāku nākotni.

Projektu konkurss:

Fundamentālo un lietišķo pētījumu projektu 2024. gada atklātais konkurss

<https://www.lzp.gov.lv/lv/projekts/heteropareju-fotokatalizatori-zalajai-udenraza-razosanai-izmantojot-blivuma-funkcionala-teorijas-atbalstitu-generativo-masinmacisanos>