

未来社会創造事業 探索加速型
「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域
年次報告書(探索研究期間)

令和3年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:松田 翔一]

[国立研究開発法人 物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点・主任研究員]

[研究開発課題名:実験自動化技術とデータ科学の連携による海水電解材料のハイ
スループット探索]

実施期間 : 令和4年4月1日～令和5年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「ハイスループット探索手法開発」グループ(物質・材料研究機構)

- ① 研究開発代表者:松田 翔一 (物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点、主任
研究員)
- ② 研究項目
 - ・マルチチャンネル電気化学測定セルの開発
 - ・ハイスループット電気化学測定装置の開発

(2)「ハイスループット合成手法開発」グループ(物質・材料研究機構)

- ① 主たる共同研究者:坂牛 健 (物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点、主幹
研究員)
- ② 研究項目
 - ・金属酸化物電極合成の基盤技術の確立
 - ・ハイスループット電極触媒合成測定装置の開発

(3)「実験自動化技術に適合したデータ科学手法開発」グループ(研究機関名)

- ① 主たる共同研究者:田村 亮 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点、
主幹研究員)
- ② 研究項目
 - ・機械学習を利用した電極触媒材料探索手法の開発
 - ・ハイスループット実験用アルゴリズムの開発

§2. 研究開発成果の概要

松田 Gr においては、中性領域における酸素発生反応をターゲットとし、モデル実験系として、DSA を作用極として用い、LSV(linear sweep voltammogram)測定を実施した。LSV 測定については、マイクロプレート電気化学セル 1 プレートあたり、40min 程度 (scan rate = 1.0 mV/sec, scan range = 1.0 V 程度) で測定を実施することで、1000 sample/day の測定スループットを実現した。また、ハイスループット電極触媒材料合成手法の基盤技術確立については、陽極での酸素発生反応をターゲットとし、電極は DSA (dimensionally stable anode)をモデル系として合成システムを確立し、有望な材料組成を明らかにした。

このような実験自動化技術とデータ科学の連携を志向し、坂牛 Gr においては、田村 Gr と連携し、データ駆動型の材料探索を実施した。本実験では、代表的なデータ科学的手法である、ベイズ最適化を用い、説明変数として組成を、目的関数として OER 電流密度が $10\text{mA}/\text{cm}^2$ となる過電圧を設定した。探索の結果、全探索空間の 2%に相当する約 40 条件

を調査することで同空間内において材料組成の最適化に成功した。発見した材料は、ルテニウム酸化物 (RuO_2) に匹敵する活性を示すことが分かった。このように、水電解触媒材料探索に関する実験自動化技術基盤の構築、および、データ科学的手法との連携が順調に進展している。