

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  
終了報告書（探索研究）

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]

[所属:物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター・チームリーダー]

[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3年10月1日～令和6年3月31日

## §1. 研究実施体制

(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・環境材料研究センター 電気化学スマートラボチーム チームリーダー)

②研究項目

- ・マルチチャ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・環境材料研究センター 界面電気化学グループ 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(物質・材料研究機構)

①主たる共同研究者:田村 亮 (物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター データ駆動型アルゴリズムチーム チームリーダー)

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

(4)「新規合成手法開発」グループ(東北大学)

①主たる共同研究者:岩瀬 和至 (東北大学 多元物質科学研究所 プロセスシステム工学研究部門 超臨界ナノ工学研究分野)

②研究項目

- ・ハイスループット水熱合成に関する基盤技術の確立

(5)「電析プロセス開発」グループ(京都大学)

①主たる共同研究者:西岡 季穂 (京都大学 工学研究科 材料工学専攻材料機能学講座 助教)

②研究項目

- ・電析プロセスを用いた電極触媒開発に関する基盤技術の確立

## §2. 研究開発成果の概要

水電解性能評価のハイスループット化の実現に向けて、独自にマイクロプレート電気化学セルを構築した。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 を作用極として使い、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、SG 目標である 1000 sample/day の測定スループットを実現した。また、電極触媒材料合成手法の基盤技術確立に向け、データ駆動型の材料探索を実施した。具体的には、11 種類の白金族元素を含まない汎用元素を選定し、これ

らの中から、元素 5 つを選択し、酸素発生触媒特性の最適化に取り組んだ。5 つの元素の選択、および組成を 1:1:1:1:1 の比もしくは 1 つの元素のみ 0.5 (例えば 1:1:1:1:0.5) とした組成を考え、2772 種類の候補を用意した。その上で、第一に、全候補の中から無作為に選んだ 10 個の触媒候補について実験を実施し、電極触媒活性データを収集し、学習データとした。この学習データを元に、ベイズ最適化によって、電極触媒候補の中から有望な組成を選定した。その結果、全候補のおよそ 2% のみを実験するだけで電極触媒として有望な 5 元系酸化物を発見することに成功し、データ駆動型の材料探索手法の水電解材料開発における有効性を実証した。

#### 【代表的な原著論文情報】

- [1] W. Hoisang, K. Sakaushi Key Criteria for Next-Generation Dimensionally Stable Electrodes towards Large-Scale Green Hydrogen Production, *Current Opinion in Electrochemistry*, 36, 101136 (2022).
- [2] K. Sakaushi, W. Hoisang, R. Tamura, Human-Machine Collaboration for Accelerated Discovery of Promising Oxygen Evolution Electrocatalysts with On-Demand Elements, *ACS Central Science*, 9, 2171 (2023)