

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:村越 敬]

[所属:北海道大学 大学院理学研究院・教授]

[研究開発課題名:階層構造規制型触媒電極による革新的水電解プロセスの創出]

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)「電気化学」グループ(北海道大学)

① 研究開発代表者: 村越 敬 (北海道大学大学院理学研究院化学部門・教授)

② 研究項目

- ・階層構造電極触媒材料の探索と水素・酸素発生触媒電極能評価
- ・階層構造電極の反応中間体振動分光計測
- ・水素・酸素発生反応の速度論解析(量子化学グループと共同)

(2)「量子化学」グループ(北海道大学)

① 主たる共同研究者: 武次 徹也 (北海道大学大学院理学研究院化学部門・教授)

② 研究項目

- ・水電解反応における電極表面での反応中間体の量子化学計算による探索
(電気化学グループと共同)
- ・機械学習による反応経路探索の検討(電気化学グループと共同)

§2. 研究開発成果の概要

本課題では、非貴金属触媒電極に水分子と選択的に相互作用する表面構造を導入し、水電解時の投入過電圧が少ない次世代海水電解システム創出に向けた取り組みを推進した。水素発生反応(HER)、酸素発生反応(OER)それぞれに特徴的な活性を有するナノ・マイクロ構造電極を創出した。活性を制御する材料合成手法を開発し、それらの構造化の手法を確立した。さらに多種多様な構造電極の電気化学特性を同時多数評価可能な新たな HER/OER 発生気泡評価技術手法を開発した。これら電極表面における反応プロセスを in-situ 電気化学ラマン振動分光法によって追跡し、その活性発現の起因を明らかとした。一方、反応の分子プロセスの理論探索を実現するために界面の水和状態を考慮した量子化学計算手法を新たに構築した。理論で予測された重要反応中間体の熱力学パラメータを用い、電気化学速度論とあわせた理論解析によって電気化学電位応答を予測する理論計算手法を確立した。また、実験的に得られた電極活性に対して機械学習アルゴリズムに基づく情報解析を行い、多様な反応素過程の組み合わせを探索する手法も確立した。これらの電極活性因子と電極の構成材料、構造、電解質、電解セルなど系の構築要因をパラメータ化し、最適化することによって非極 pH 液性での OER 活性の向上ならびに非触媒金属による HER 触媒活性の発現を達成した。

【代表的な原著論文情報】

- (1) T. Fukushima, M. Fukasawa, K. Murakoshi, "Unveiling the Hidden Energy Profiles of the Oxygen Evolution Reaction via Machine Learning Analyses", *J. Phys. Chem. Lett.* 14, 30, 6808-6813 (2023); DOI: 10.1021/acs.jpcclett.3c01596.
- (2) T. Okayama, H. Minamimoto, M. Mizuhata, "Applications of Ni-Al Layered Double Hydroxide as Oxygen Evolution Reaction Catalysts Synthesized by Liquid Phase Deposition Process", *Electrochemistry*, 23-00047, 91, 6, 067005-067009 (2023); DOI:10.5796/electrochemistry.23-00047.
- (3) T. Fukushima, S. Yoshimitsu, K. Murakoshi, "Inherent Promotion of Ionic Conductivity via Collective Vibrational Strong Coupling of Water with the Vacuum Electromagnetic Field", *J. Am. Chem. Soc.* 144, 27, 12177-12183 (2022); DOI: 10.1021/jacs.2c02991.