

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:村越 敬]

[北海道大学大学院理学研究院化学部門・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4年4月1日～令和5年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(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

革新的な水電解プロセス創出のために水電解電極インフォマティクス構築に取り組んだ。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。多種多様な構造電極の特性を同時多数評価可能な新たな実験観測手法を開発し、活性の構造依存性探索を加速した。反応素過程の評価には、*in-situ* 電気化学ラマン振動分光法を適用し、構造電極特有の反応中間体の観測に成功した。反応の分子プロセス探索には、量子化学計算によって得ら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計算手法を開発、適用した。実験的に得られた電極活性については、機械学習アルゴリズムに基づく情報解析によってその特徴を明確とし、電極電位に依存した反応素過程の寄与を記述因子として示す手法を確立した。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、より最適な分子プロセスを理論探索する水電解インフォマティクスを構築した。

【代表的な原著論文情報】

- (1) 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.
- (2) T. Hayashi, H. Minamimoto, K. Murakoshi, "Understanding Spatial Distributions of Dye Molecules Coupled to Surface Lattice Resonance Mode through Electrochemical Reaction Control", *J. Phys. Chem. Lett.* 14, 2268-2276 (2023), DOI: 10.1021/acs.jpcllett.2c03442.
- (3) 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*, in press (2023).