

進化する AI がエコな水素の普及のための新規材料開発を支援する

～白金族元素を使わない電極材料を探し出す～

2023年11月30日

国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)

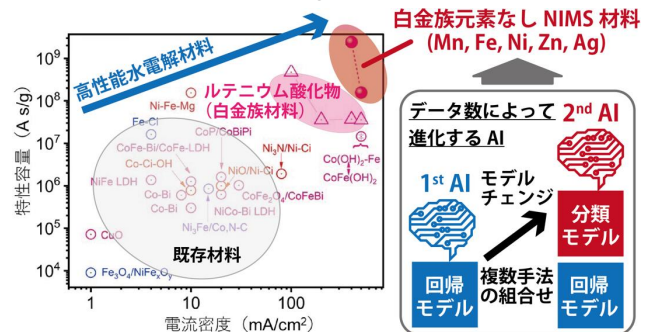
国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST)

概要

1. NIMS*は、所望の特性を持つ材料を AI と人との連携により短期間で発見する手法を開発しました。この手法は、水の電解装置に必須とされてきた白金族元素を用いない新規電極材料の発見を導き、次世代エネルギー“エコな水素”製造の低コスト化と大規模導入を加速すると期待されます。

2. カーボンニュートラル実現に向け、二酸化炭素を出さないエコな水素を製造できる水電解装置の大規模導入が求められています。しかし、現在の水電解装置の特性は高価で希少な白金族元素型の電極触媒材料に依存しています。そのため、当該材料の汎用元素化による水素製造が必須となっています。水電解による水素発生には、酸素発生反応=Oxygen evolution reaction (OER) が伴いますが、OER は反応速度が遅いという問題があり、これを速めるため電極触媒材料には高価で希少な白金族元素が必須と考えられていました。そこで、OER 電極触媒の低コスト化・大規模化対応に際し、白金族元素を用いない多元系材料が注目を集めています。しかし、元素の組合せや化学組成は無限にあり、最適な材料組成を発見するためには、膨大なコスト、時間、人的資源が必要となっていました。

3. 今回、NIMS 研究チームはデータ数によって予測する手法を変化させて進化することで、所望の特性を示す材料を正確に予測する AI を開発しました。この AI と人が連携することで、人のみで全候補材料を網羅的に探索すると6年近くかかる3000個程度の候補から、たった1カ月でOER 電極触媒材料に適した新規材料を発見しました。発見された電極触媒材料は、Mn、Fe、Ni、Zn、Ag という比較的安価かつ豊富な元素で合成できます。そして当該材料は、条件によってはこれまでの OER 電極触媒材料の中で最も OER 活性が高いルテニウム (Ru) 酸化物を超える電気化学特性を有していました。例えば、今回の新規材料の中で最も地殻存在量が少ない Ag にしても、Ru の100倍近くも多く存在しており、水電解装置の大量生産を実現する電極触媒材料であると考えています。



4. 本研究は、人のみでは膨大な時間がかかるより高特性能な材料の探索と発見を、短時間のうちに達成できたという点で、AI が人の能力を拡張したと言えます。今後、水電解向け電極材料開発を筆頭に、様々な電気化学デバイスの高効率化を実現する新材料開発を、本研究の成果 (AI と人との連携) で加速し、カーボンニュートラル実現のための実用技術開発につなげます。

5. 本研究は、国立研究開発法人科学技術振興機構における未来社会創造事業「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域「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」(JPMJM21EA) の一環として、坂牛健主幹研究員、田村亮チームリーダーらによって行われました。

6. 本研究成果は、米国化学会誌 ACS Central Science において11月30日アメリカ東部時間にオンライン速報版で掲載されます (<https://doi.org/10.1021/acscentsci.3c01009>)。

* 物質・材料研究機構は、その略称を NIMS (National Institute for Materials Science) に統一しております。

研究の背景

本邦が世界に向けて宣言した、2030年までに二酸化炭素排出の46%削減（2013年比）ならびに2050年までのカーボンニュートラル社会の実現を達成するためには、石油・天然ガス等化石燃料の水素への転換が必須です。また、そのためには2030年には2千万トン/年の水素が必要になると考えられています。二酸化炭素の排出を伴わずにこのように膨大な量の水素を製造する技術として、再生可能エネルギー（風力や太陽光）から得られる電力を用いた水の電解が有力視されています。水電解によって製造されるグリーン水素^{(*)1}だけで主要エネルギー源を賄うためには、これまで以上に高効率で安価な水素製造が必須であり、水電解装置に用いる電極触媒材料^{(*)2}に使用される素材の汎用元素化も必要です。水電解装置のみならず、電極触媒材料は、水素を利活用するデバイス（燃料電池自動車など）においても、普遍的にかつ大量に必要とされると考えられています。一方で、現在の水電解装置の特性は高価で希少な白金族元素型の電極触媒材料に依存しています。そのため、当該材料の汎用元素化による水素製造が必須となっています。水電解による水素発生には、酸素発生反応=Oxygen evolution reaction (OER) が伴いますが、OERは反応速度が遅いという問題があり、これを速めるため電極触媒材料には高価で希少な白金族元素が必須と考えられていました。そこで、OER電極触媒の低コスト化・大規模化対応に際し、白金族元素を用いない多元系材料が注目を集めています。これは、複数の元素を混ぜ合わせることで思わぬ材料の高特性化が稀に起こるためです。しかしながら、元素の組合せや化学組成は無限にあり、最適な材料組成を発見するためには、卓越した研究者の長期間にわたる知識の蓄積がもたらす直感と経験を利用したとしても膨大なコスト、時間、人的資源が必要となっていました。

研究内容と成果

今回 NIMS の研究チームは、データ数に依存して進化する AI を導入することによって、全候補を網羅的に実験すると、6年近くかかるであろう3000個程度の候補材料から、1カ月でOER電極触媒材料に適した新規材料を発見することに成功しました。発見されたOER電極触媒材料はまったくの新規材料であり、測定条件によってはこれまでのOER電極触媒材料の中で最も活性が高いルテニウム酸化物を超える電気化学特性が得られました（図1）。また、発見した電極触媒材料は、Mn、Fe、Ni、Zn、Agという比較的安価かつ豊富な元素によるもので、Ruなどの希少な白金族元素を排除しました。例えば、今回の新規材料の中で最も地殻存在量が少ないAgにしても、Ruと比較して100倍近くも多く存在しています。このため、コストダウンと世界規模での大量生産が必須な次世代水電解装置の実用化を一步近づける電極触媒材料を見つけることができました。

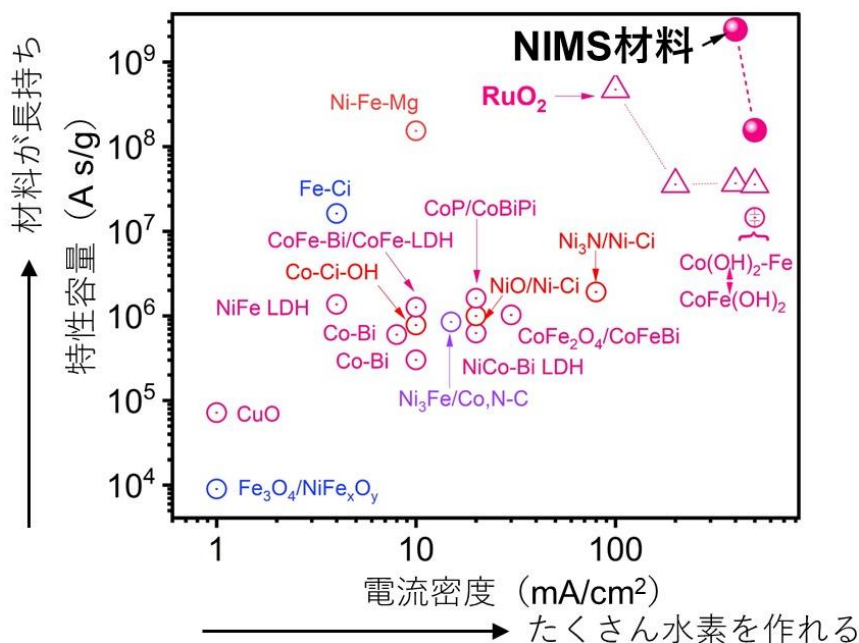


図1 本研究で発見された材料の特性比較。右上にあるほど良い材料となります。

本研究で導入した AI は、データ数に依存して進化する点に特徴があります。この特徴は、哺乳類が複雑な社会的機能を獲得する際に“Stepwise Evolution (段階的進化)”という方法により効率的に目的の複雑機能を獲得しているという仮説に着目して開発しました。また、本研究における OER 電極触媒材料探索では、Human-Machine Collaboration と言われる概念を基軸とし、人が AI と連携することで人の能力を爆発的に向上させ、その結果として通常の人を超えて効率的に新材料を発見する手法を開発することを狙いました。本研究で実施した、進化する AI による Human-Machine Collaboration の概要は以下のとおりです (図 2)。まず候補材料を用意するために、人が 11 種類の白金族元素を含まない汎用元素を選定しました。これらの元素の中から、元素 5 つを選択しその組成を最適化するために、AI を使用します。そのために、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) とした組成を考えることとし、2772 個の 5 元系酸化物を OER 電極触媒候補として用意しました。AI から、材料の予測をしてもらう前に、2772 個の候補の中から無作為に選んだ 10 個の触媒候補について人による実験を実施し、OER 活性データを収集して AI の学習データとしました。この学習データを元に、一段階目の AI (1st AI) では、回帰モデルを使用したベイズ最適化 (BO) によって、電極触媒候補の中から有望な組成を 2 つ選定します。この提案に基づき、人が実験を行い OER 活性データを取得します。人と 1st AI の連携によって十分な量のデータが得られた後、1st AI から 2nd AI に進化させます。2nd AI は、分類モデルとして使用するランダムフォレスト (RF) と BO が統合された手法です。この手法では、まず RF によって活性であると予測される材料とそうでない材料を分類します。活性であると予測される材料の中から、BO によって最も有望な材料を選定する手法です。このように AI を途中で進化させた材料探索を実施することによって、全候補のおよそ 2% のみを実験するだけで OER 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ました。残りの 98% の中に今回発見された材料よりも特性が高い材料がある可能性を否定することはできませんが、探索が収束しており、その可能性は低いと言えます。



図 2 本研究における Human-Machine Collaboration の概要。BO は回帰モデルを利用した最適化手法であるベイズ最適化を表し、RF は分類モデルとして利用したランダムフォレストを示します。

今後の展開

本研究により、これまで非常に長い時間が必要であった電極触媒材料組成の最適化が、劇的に短期間で実施できるようになると考えられます。今後、本研究で導入した AI と人が連携した手法を利用することで水素製造向け材料開発を筆頭に、様々な電気化学反応を利用した物質変換の高効率化を実現する新材料開発を加速し、水素社会への移行に必要な素材の創製に貢献します。結果として、データ利活用による超効率的な材料探索法を確立し、我が国におけるカーボンニュートラル実現のための実用技術開発につなげます。

掲載論文

題目：Human-Machine Collaboration for Accelerated Discovery of Promising Oxygen Evolution Electrocatalysts with On-Demand Elements

著者：Ken Sakaushi, Watcharaporn Hoisang, Ryo Tamura

雑誌：ACS Central Science (<https://doi.org/10.1021/acscentsci.3c01009>)

用語解説

(*1) グリーン水素

製造過程において二酸化炭素を排出することなく得られた水素。他には、化石燃料を用いて生産して得られるブルー水素などがあります。詳細は次のリンク先にある経済産業省エネルギー庁の解説を参照して下さい。：https://www.enecho.meti.go.jp/about/special/johoteikyo/suiso_tukurikata.html

(*2) 電極触媒材料

電気化学反応を触媒作用によって活性化させる材料。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

NIMS 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 坂牛 健 (さかうし けん)

TEL: 029-860-4945

E-mail: SAKAUSHI.ken[at]nims.go.jp

URL: https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakaushi_ken

NIMS 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

チームリーダー田村 亮 (たむら りょう)

TEL: 029-860-4948

E-mail: TAMURA.Ryo[at]nims.go.jp

URL: https://www.nims.go.jp/group/da/ryo_tamura/tamura_home_j.html

(報道・広報に関すること)

NIMS 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: [pressrelease\[at\]ml.nims.go.jp](mailto:pressrelease[at]ml.nims.go.jp)

国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)広報課
〒102-8666 東京都千代田区四番町5番地3
TEL: 03-5214-8404, FAX: 03-5214-8432
E-mail: jstkohoh[at]jst.go.jp

(JST 事業に関すること)

国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)未来創造研究開発推進部
武内 里香 (たけうち りか)
〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町
TEL: 03-6272-4004, FAX: 03-6268-9412
E-mail: kaikaku_mirai[at]jst.go.jp