



## 情報科学と電極触媒開発

東京工業大学 山口晃

近年、機械学習などに代表される情報科学を用いた材料開発(マテリアルインフォマティクス:MI)が盛んに行われている。私が専門としている電気化学反応も例外ではないが、学生時代から一貫して実験屋であり、機械学習はおろか第一原理計算も経験がない、コンピュータといえばデータの解析くらいにしか使ってこなかった身としてはどこか一步下がってこの流れを見ていた。しかしながら、やはり今後の材料開発を進めて行く上で非常に重要なツールであるということを確認し、一念発起してMIに片足を突っ込んだ研究を始めた結果、少しばかり成果が出始めたのでそれを紹介したいと思う。

私はこれまで、金属硫化物を電極触媒とした二酸化炭素(CO<sub>2</sub>)還元の研究を行ってきた<sup>1)</sup>。金属硫化物を用いたCO<sub>2</sub>還元は近年では報告があるものの、歴史が古い金属電極などと比べるとまだまだ黎明期の材料群であり、またその分光法の適用の困難さもあってか、どのような物性が活性に寄与するかを包括的に検討することは行われてこなかった。そこで、私はMIの手法を用いて、これを明らかにすることを試みた。

具体的な手法としては多変量解析としてはありきたりな、線形重回帰分析を用いることとした。こちらを用いて、各金属硫化物の物性パラメータとCO<sub>2</sub>還元活性の間の相関を調べ、どのようなパラメータが活性の発現に寄与しているかを調べようとした。しかし、こちらに取り組む前に一つの課題があった。それは、報告例の少なさである。前述のように、金属硫化物は電気化学的CO<sub>2</sub>還元触媒としては報告が少なく、また報告されているものも実験条件がばらばらであるため、比較が難しい。そこで、私たちは自分でデータを集めることにし、14種類の異なる金属硫化物を合成、そのCO<sub>2</sub>還元活性を調べた。調べた中では、一酸化炭

素(CO)生成においてはAg<sub>2</sub>SやCdSが、ギ酸生成ではCuSやNiS<sub>2</sub>が相対的に高い活性を示した。こちらをもとに回帰分析を行おうとしたが、ここで二つ目の困難に出会う。それは、サンプル数の少なさである。回帰分析を行う上では、説明変数として用いる物性パラメータの数はサンプル数より少ないことが必須であるが、限られたサンプル数ではたくさんのパラメータを検討することができない。また、パラメータ間に強い相関(共線性)がある場合にも、回帰がうまくいかない。これらを解決するため、回帰分析をする上でパラメータ数を削減でき、共線性の問題も回避できる主成分分析とラッソ回帰という手法を用いた。

これで準備は整った。複数の物性パラメータを説明変数、実験で得られたCO<sub>2</sub>還元の部分電流密度を目的変数として重回帰分析を行った。その結果、ギ酸を生成する反応では金属の電気陰性度などの電子的なパラメータが、COを生成する反応では結合長などの構造的なパラメータが活性に大きく寄与していることを見出した<sup>2)</sup>。特に後者は(少なくとも私にとっては)予想外の結果であり、本研究で初めて見出された知見であると考えられる。実際、報告されている金属電極に対して同様の手法を用いた際には、ギ酸生成においてもCO生成においても電子的なパラメータが寄与していることが分かった。すなわち、金属硫化物上でのCO生成は特異なメカニズムで進行していることを示唆している。本研究で得られた知見は、今後の触媒開発、特に選択性の制御などで重要な指針を与えると期待している。

当然ながら、MIに関して右も左も分からなかった私がこのような世界に踏み込めたのも、一生懸命共に勉強してくれた学生さんや共同研究者の方々のお陰である。ここで謝意を述べて、本稿を閉じさせていただきます。

- 1). A. Yamaguchi et al., *Electrochim. Acta*, 141, 311, 2014
- 2). A. Yamaguchi et al., *J. Phys Chem. C*, 126, 2772, 2022.