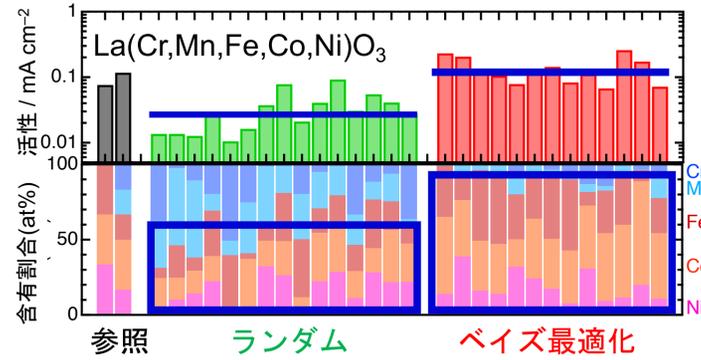


高スループット合成・評価と情報学に基づく革新的触媒材料の開発

高エントロピー酸化物触媒のベイズ最適化による設計

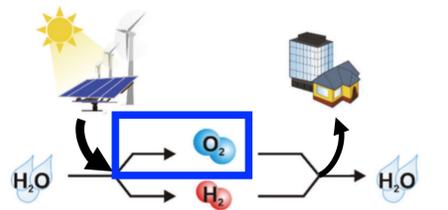
目的 5種類の金属元素が混合したペロブスカイトの化学組成をベイズ最適化を用いて設計し、高活性触媒を開発する。

概要 ✓ 最適化を実施した組成を持つ酸化物は高い触媒活性を示した。
 ✓ Fe, Co, Niの合計/個別の含有割合の調整が酸素発生触媒活性に重要だった。



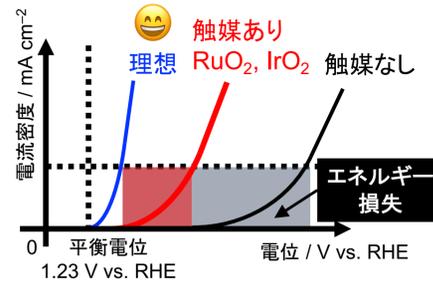
背景

次世代のエネルギー変換
酸素発生反応 (OER):
 $4OH^- \rightarrow O_2 + 2H_2O + 4e^-$

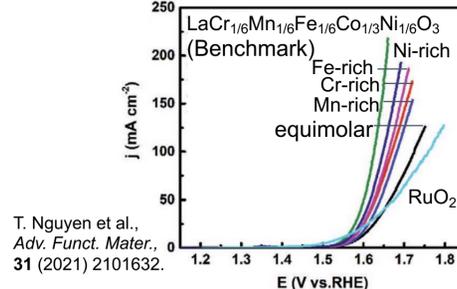


W. Hong et al., *Energy Environ. Sci.* 8 (2015) 1404.

安価な触媒でエネルギー損失を低減する。



高エントロピー酸化物は高いOER触媒活性を示す。

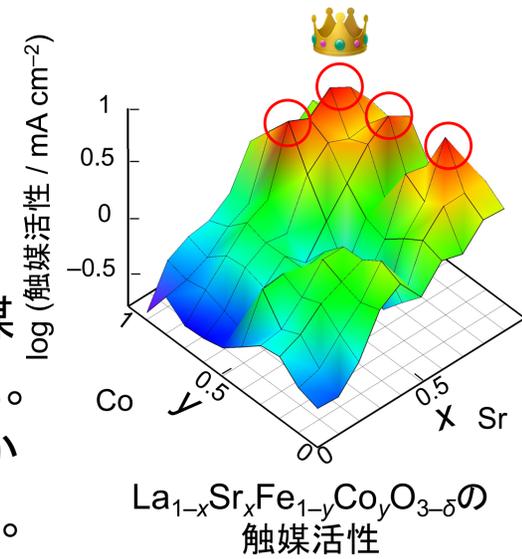


T. Nguyen et al., *Adv. Funct. Mater.*, 31 (2021) 2101632.

ペロブスカイト(La, Sr)(Fe,Co)O₃の高スループット評価

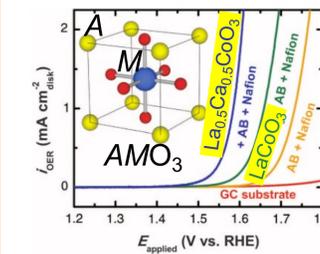
目的 二つのサイトに金属元素が混合したペロブスカイトの高温での合成と酸素発生触媒活性の評価が可能な機構を開発する。

概要 ✓ Pt上合成したペロブスカイトの触媒活性を評価可能な機構を開発した。
 ✓ (La, Sr)(Fe,Co)O₃に対する評価から、連続的なランドスケープを得た。

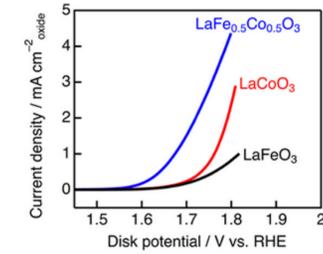


背景

金属元素の混合によるOER活性の向上



J. Suntivich et al., *Science*, 334 (2011) 138.



I. Yamada et al., *Chem. Mater.*, 32 (2020) 3893.

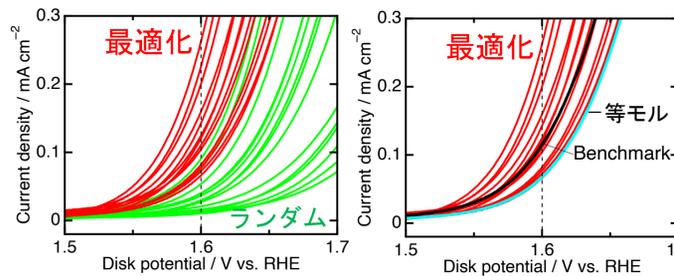
従来の手法では高温焼成が困難だった。ペロブスカイトの合成に高温焼成は必要



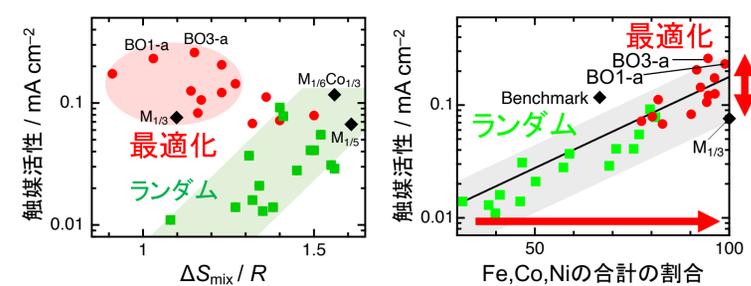
ITO基板上的酸化物(Ni,Fe,Co)O_x 水電解での触媒活性
 C. Xiang et al., *ACS Comb. Sci.*, 16 (2014) 47.

結果と考察

最適化を実施した組成の酸化物はBenchmarkより高いOER活性を示した。



既報の記述子 ΔS_{mix} はOER活性と相関なし
 Fe, Co, Niの合計の含有割合と活性に相関



実験方法

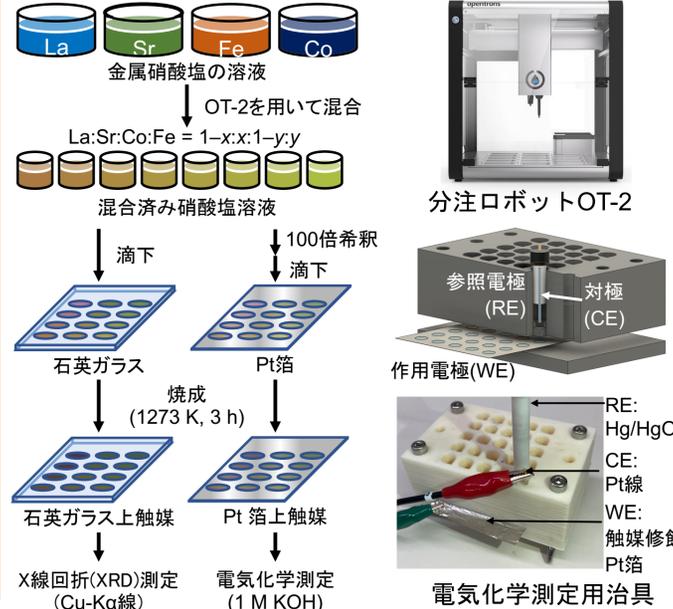
合成
 クエン酸錯体重合法
 硝酸塩 $M(NO_3)_x \cdot nH_2O$
 クエン酸、EG

相同定
 X線回折測定
 FE-SEM観察

電気化学測定
 回転ディスク電極法(0.1 M KOH)
 CV測定 0.3–0.9 V vs. RHE

ベイズ最適化
 獲得関数: 信頼性上限
 説明変数: 3d遷移金属の含有濃度
 目的変数: 1.6 V vs. RHEでの電流密度

実験方法



結果

立方晶・菱面体晶・直方晶ペロブスカイトで合成成功

