



光触媒研究の再始動と HAPPA ロボットの立ち上げ

産業技術総合研究所 ゼロエミッション国際共同研究センター 小寺正徳

私は学生時代に東京大学堂免研究室にて光触媒研究を行っていましたが、学位取得後、異分野に挑戦するべく東京工業大学舟窪研究室で研究員として強誘電体薄膜の創製に携わっておりました。2021年から現所属に異動し、改めて光触媒研究を開始したところです。今回はまだまだ走り始めた段階ではありますが研究内容の一部を紹介いたします。

機械学習を用いた材料開発は近年急激に注目度が増し、最近では研究 DX なる言葉も聞く機会が多くなってきました。産総研でも全所的な取り組みが多数始まっています。私の所属する人工光合成研究チームではチーム長の佐山首席研究員を中心に長年にわたりロボットを用いた高速探索手法の開発に取り組んできましたが、高速探索ロボットと機械学習を組み合わせることでさらなる展開を目指しています。そのために2021年に新たな高速探索ロボットを導入しました(図1)。我々はこのロボットを

High-throughput Automatic Photocatalyst Performance Analyzer と名付け頭文字をとってHAPPAと呼んでいます。これはもちろん光合成をおこなう葉っぱとかけた名称です。このロボットは各種金属を含む溶液(最大10種類)を任意の比率で混合し、最大88枚の導電性基板上に塗布後電気炉で焼成して電極を作製します。その後電極を1枚ずつロボットアームで把持し、H型電気化学セル内にて電気化学測定を行います。これにより1回に88個の試料を作製から測定まで人の介在なしにすべて自動で行うことができます。このようにして得られた数百~数千という規模のデータセットを用いて機械学習を行うことでこれまでにない知見を見出し、ベイズ最適化等を活用することで人海戦術ではたどり着けないような広範囲な探索を実現できると期待しています。また今後粉末系への展開やさらなる高機能化に向けてHAPPAの改良を行っていく予定です。

産総研のみならず日本全体で労働人口の減少や研究者不足が進むと予想される中、ロボットと人が協力して新しい化学を切り拓いていけるよう研究に邁進していく所存です。

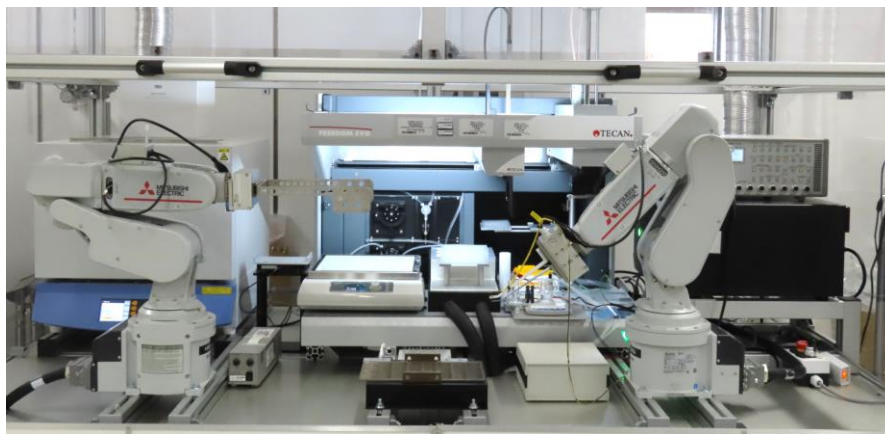


図1. 新規に立ち上げた高速自動探索ロボット(High-throughput Automatic Photocatalyst Performance Analyzer, HAPPA)