

令和3年1月27日

北陸先端科学技術大学院大学
北海道大学
科学技術振興機構

ハイスループット実験と触媒インフォマティクスが実現する ゼロからの触媒設計

ポイント

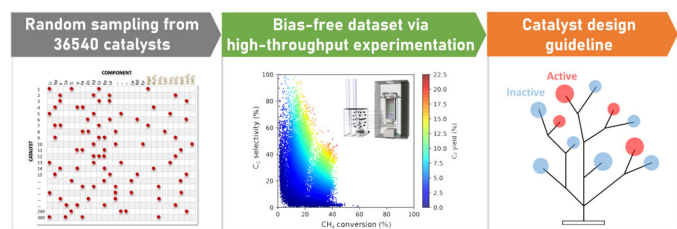
- ・物質空間からの無作為なサンプリング
- ・ハイスループット実験による触媒ビッグデータの取得
- ・バイアスを含まないデータからの触媒設計指針の抽出

北陸先端科学技術大学院大学（学長・寺野稔、石川県能美市）、先端科学技術研究科物質化学領域の谷池俊明教授らは北海道大学（総長・寶金清博、北海道札幌市）の高橋啓介准教授らと共同で、ハイスループット実験と触媒インフォマティクスを駆使して前知見に依らないゼロからの触媒設計を実現する道を示した。

ある化合物を別の化合物へと変換する化学反応は、式上では単純に見えても多くの素反応によって構成されているケースが多い。化学反応の制御とは、これらの素反応を同時に制御することであり、複数の有効成分を組み合わせる多元的な触媒の設計が鍵を握っている。しかし、組み合わせ効果の予測は非常に難しく、トライアンドエラーを通して偶発的に発見した組み合わせを段階的に発展させる経験的な方法論が、固体触媒の研究開発における常套手段であった。

谷池教授らは、日に4,000点もの触媒データを自動取得可能なハイスループット実験装置^{*1}と触媒インフォマティクスを用いて、前知見に依らないゼロからの触媒設計を実現した。具体的には、36,540通りもの組み合わせ（＝触媒）を含む広大な物質空間から300通りの組み合わせを無作為に抽出し、これらのメタンの酸化カップリング反応（OCM）^{*2}における性能をハイスループット実験により評価することで、前知見や作業仮説などのバイアスを含まない触媒ビッグデータを取得した。このデータを機械学習によって分析することで、触媒の設計指針をモデル化し、高性能触媒を80%の精度で予測することに成功した（試験した80%の触媒が高性能と見做し得る収率を示した）。

本研究が見出した高性能触媒の大半は、OCMに関する過去40年の研究開発史に照らして未知とみなされる組み合わせであった。ハイスループット実験と触媒インフォマティクスは、広大な物質空間を現実的な時間単位で効率的に探索する強力な手段である。本研究が用いた方法論は多くの材料分野に適用可能であり、前知見に縛られない物質探索は予期せぬ発見を多く生み出すだろう。



前知見を必要としない新規触媒探索スキーム

本成果は、2021年1月22日（米国東部標準時間）にACS Publications発行「ACS Catalysis」のオンライン版に掲載された。なお、本研究は、科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業CREST研究領域「多様な天然炭素資源の活用にあ資する革新的触媒と創出技術」（研究総括：上田渉）における「実験・計算・データ科学の統合によるメタン変換触媒の探索・発見と反応機構の解明・制御」（研究代表者：高橋啓介）の支援を受けて行われた。

【論文情報】

掲載誌: ACS Catalysis (ACS Publications)

論文題目: Learning Catalyst Design Based on Bias-Free Data Set for Oxidative Coupling of Methane

著者: Thanh Nhat Nguyen, Sunao Nakanowatari, Thuy Phuong Nhat Tran, Ashutosh Thakur, Lauren Takahashi, Keisuke Takahashi, Toshiaki Taniike

掲載日: 2021年1月22日付 (米国東部標準時間) にオンライン版に掲載

DOI: 10.1021/acscatal.0c04629

【用語解説】

*1 ハイスループット実験装置

実験の回転速度をスループットと呼ぶ。ハイスループット実験装置とは高度な並列化や自動化によってスループットを劇的に改善する装置を指す。

*2 メタンの酸化カップリング反応 (OCM)

普遍的に存在するメタンはそのままでは化学的な有用性が低く、これを触媒によって別の有用化合物へ変換することが望ましい。メタンの酸化的カップリングとは、メタンと酸素分子の反応を通してエタンやエチレンを直接合成する高難度反応である。

【お問合せ先】

研究内容に関すること

国立大学法人 北陸先端科学技術大学院大学

先端科学技術研究科 物質化学領域 教授 谷池 俊明 (たにいけ としあき)

〒923-1292 石川県能美市旭台1丁目1番地

TEL: 0761-51-1630 E-mail: taniike@jaist.ac.jp

国立大学法人 北海道大学

大学院理学研究院化学部門 准教授 高橋 啓介 (たかはし けいすけ)

〒060-0815 札幌市北区北15条西8丁目 北海道大学フロンティア応用科学研究棟5階 FCC 研究室エリア B5-04

TEL: 011-706-8118 E-mail: keisuke.takahashi@sci.hokudai.ac.jp

報道発表に関すること

国立大学法人 北陸先端科学技術大学院大学

評価・広報室 井村 麻衣子 (いむら まいこ)

TEL: 0761-51-1031 FAX: 0761-51-1025 E-mail: kouhou@ml.jaist.ac.jp

国立大学法人 北海道大学

総務企画部広報課広報・渉外担当

TEL: 011-706-2610 E-mail: kouhou@jimuhokudai.ac.jp

国立研究開発法人 科学技術振興機構 広報課

TEL: 03-5214-8404 FAX: 03-5214-8432 Email: jstkoho@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

戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 嶋林 ゆう子 (しまばやし ゆうこ)

TEL: 03-3512-3531 FAX: 03-3222-2066 Email: crest@jst.go.jp