

AIを用いた触媒開発方法が進展している

◆ディープラーニングを用いた新たな触媒開発法

2020年12月、奈良先端科学技術大学院大学と花王の研究グループは、触媒開発にディープラーニングを適用する手法を開発したと発表した。さらに、AIがどのように予測をしているかを明らかにすることができたとしている。

これまで、ディープラーニングを用いてAIに大量のデータを学習させ、予測を行うことで触媒開発のプロセスを短くする方法が検討されてきたが、数万個のデータが必要であり、多くの費用が掛かるため、実用化に至っていなかった。

研究グループは、少ないデータ量からディープラーニングで触媒の活性を予測ができる技術を開発した。

具体的には、電子顕微鏡写真143枚から、10,000枚の画像を切り出して、ディープラーニングで解析して高精度な活性予測モデルの作成に成功した。さらに、触媒にはマクロポアとミクロポアという構造があるが、反応原料が拡散するためのマクロポアの周辺の構造が活性に影響を与えているという予想も得られた。

◆ハイスループット実験と触媒インフォマティクスによる触媒設計

北陸先端科学技術大学院大学と北海道大学の研究グループは、ハイスループット実験（多数の反応を迅速に行う実験）と触媒インフォマティクスを駆使してゼロからの触媒設計を実現することに成功したと発表した。

従来、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もとに、経験的に触媒を開発する方法が一般的であった。

研究グループは、1日に4,000点もの触媒データを自動的に取得できるハイスループット実験装置と触媒インフォマティクスを用いて、ゼロからの触媒設計を実現した。

300通りの触媒の組み合わせを作成し、これらの触媒のメタン酸化カップリング反応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、ビッグデータを取得した。このデータをディープラーニング技術によって分析し、試験した触媒の組み合わせの80%が高性能の収率を示すことを見出した。 【松村晴雄】