

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	鳥屋尾隆
研究機関名	北海道大学
所属部署名	触媒科学研究所
役職名	助教
研究課題名	外挿的探索が可能な機械学習を用いた未踏触媒空間の探索
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

外挿的提案を可能とする機械学習手法を用いて、逆水性ガスシフト(RWGS)反応に有効な担持 Pt 系多元素触媒を開発した。触媒は、 $\text{TiO}_2$  (P25)、各種金属(M)塩、 $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_3)_2$  を用いて逐次含浸法により調製した( $\text{Pt}(3)/\text{M}_1(X_1)\text{-}\dots\text{-}\text{M}_5(X_5)_{(\text{max})}/\text{TiO}_2$ ; Xは重量%)。RWGS 反応は、固定床連続フロー反応器を用いて大気圧下、 $250^\circ\text{C}$  で実施した。獲得関数として Expected Improvement (EI) 値を用い、予測器には Extra Tree Regressor (ETR) を使用した。45 点の初期データセットから、機械学習予測 + 実験のサイクルを 45 回繰り返すことにより、合計 300 件の触媒活性を調査した。機械学習を用いて触媒探索を行った結果、 $250^\circ\text{C}$ 以下での既報 RWGS 触媒として最も高い CO 生成速度を示す  $\text{Pt}(3)/\text{Mo}(10)/\text{TiO}_2$  よりも高い活性を示す触媒を 100 件以上見出した。現状の最良触媒組成は、 $\text{Pt}(3)/\text{Rb}(1)\text{-}\text{Ba}(1)\text{-}\text{Mo}(0.6)\text{-}\text{Nb}(0.2)/\text{TiO}_2$  であり、最高活性を示すにはいずれの構成元素も必要であることを確認した。各種分光法、速度論解析により、 $\text{MoO}_x$  はレドックス種として、 $\text{Rb}_2\text{O}$  と  $\text{BaO}$  は塩基として反応を促進することを明らかにした。また、Nb は担持 Pt を電子不足にすることも明らかにした。