

2023 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	准教授
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	2023 年 4 月 1 日～2024 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、種々の触媒反応に有効な固体触媒の開発を行った。具体的には、CO₂/H₂からのエタノール合成、Selective Catalytic Reduction of NO_x with H₂ (H₂-SCR)、N₂O 直接分解反応等を行った。触媒は、担体、各種金属塩を用いて逐次含浸法により調製した。触媒反応は、いずれも固定床連続フロー反応器を用いて行った。機械学習手法としては、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。初期データセットから、機械学習予測 + 実験のサイクルを繰り返すことにより、各反応に対して数百件の触媒活性を実験的に調査した。いずれの触媒系においても、初期データセットに含まれていた高性能触媒よりも高い触媒性能を示す触媒を開発することができた。

触媒予測・発見だけでなく、機械学習モデルから化学的/物理的な示唆を得ることに挑戦し、いくつかの手法を試した。対象系における性能制御因子(記述子)の重要度を可視化することで、触媒作用機構や反応機構に関する知見を得た。今後、実験的・理論的な手法を用いながらさらなる触媒作用機構解明および反応機構解明を行っていく予定としている。