

2024 年度
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

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	2024 年 4 月 1 日～2025 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)、CH₄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。加えて、発見した高活性触媒に対して、オペランド分光を用いた解析を通じた反応機構解析を行った。特に、XAS、XPS 測定からは触媒活性種の酸化還元特性を、DRIFTS 測定からは触媒表面吸着種の情報を得た。その際、分光法におけるシグナル/ノイズ(S/N)比を劇的に向上させ、物理・化学現象の動的過程に関与する種を選択的に解析することのできる強力な手法である Modulation Excitation (ME)法も用いた。今後、計算化学的手法を用いた触媒の作用機構解析も行う。