

機械学習を用いた CO₂ 水素化触媒の開発と *in situ/operando* 実験による作用機構調査

北海道大学 鳥屋尾 隆

“最適化研究”においては、機械学習 (Machine Learning; ML) を中心とした人工知能 (Artificial intelligence; AI) 技術は圧倒的な力を発揮し、化学・材料分野においてもすでに成功例が出始めている。一方、真に革新的な材料・触媒の開発は未だ達成されていない。¹ 革新的な材料・触媒の発見は今までのデータ中に無い、もしくは極めて少ない元素の活用等から生まれるものであるが、従来型の AI 技術ではデータの中に含まれていない情報は提案できないためである。つまり、AI が提案する触媒候補元素は既出のものとなり (内挿的提案)、未探索の元素を提案 (外挿的提案) することはない。

我々のグループでは、この外挿的提案を実現することを目的とした ML モデルを開発した。^{2,3} 本手法では、触媒構成元素そのものを学習に使うのではなく、その特徴量 (原子半径、電気陰性度、イオン化エネルギー等) と構成比の積を予測記述子 (Elemental Descriptor) として利用する。Elemental Descriptor から触媒組成を復元するアルゴリズムと合わせることで、元々のデータセットに含まれている元素に縛られることなく有望な触媒候補元素を提案することが可能である。本発表では、この ML 手法を活用し、CO₂ 水素化反応の 1 つである逆水性ガスシフト (RWGS: Reverse Water Gas Shift) 反応に有効な多元素含有触媒を開発した事例を紹介する。⁴

参考文献

- (1) T. Toyao, et al., *ACS Catal.* **2020**, *10*, 2260–2297.
- (2) S. Mine, et al., *ChemCatChem* **2021**, *13*, 3636–3655.
- (3) S. Mine, et al., *Chem. Lett.* **2022**, *51*, 269–273.
- (4) G. Wang, et al., *ChemRxiv* **2022**, 10.26434/chemrxiv-2022-695rj.