

キャタリストインフォマティクスのコンセプトと実例:メタン酸化

カップリング反応

(北大・NIMS) 高橋 啓介

keisuke.takahashi@sci.hokudai.ac.jp

1. はじめに

データ科学と材料科学を融合したマテリアルズインフォマティクスは実験・理論・計算に次ぐ第4の科学としてモノづくりに大きな変化をもたらしている[1]。データ科学主導のインフォマティクスでは「逆方向」(希望する物性を持つ材料・触媒を提案)ができるところに大きな利点がある。そこで本公演ではマテリアルズインフォマティクスの概要と現状踏まえた上で、マテリアルズインフォマティクスにおける重要なコンセプト(データベース、データから知識の抽出、プラットフォーム)と触媒科学に展開した実例を紹介する。

2. キャタリストインフォマティクスによる実例

本公演ではマテリアルズインフォマティクスを触媒科学に適用したキャタリストインフォマティクスについて紹介する。特に本公演ではメタンからエチレン・エタンに直接変換する「メタン酸化カップリング反応」を実例に紹介する。

過去30年の「メタン酸化カップリング反応」文献データより触媒探索を行った[3]。文献データに対して機械学習を適用したところ、「メタン酸化カップリング反応」は触媒だけではなく、実験条件との同時最適化が必要ということが示された。また予測された触媒の実験実証までの過程についても紹介する[4]。また、触媒を固定した場合の実験条件の最適化についての事例も紹介する。最後に現在取り組んでいるハイスループット実験によるメタン酸化カップリング反応のデータ集積・解析についても紹介する。

参考文献

- [1] Keisuke Takahashi, Yuzuru Tanaka, *Dalton Transactions (Perspectives)* 45, 10497–10499 (2016)
- [2] Keisuke Takahashi, et al, *ChemCatChem* 11 (4), 1146–1152
- [3] Keisuke Takahashi, et. al, *ChemCatChem*, (2018), 10 (15), 3223–3228
- [4] Ohyama et. al, *ChemCatChem*, (2018), 11 (17), 4307–4313