

# Industrial Catalyst News

触媒学会工業触媒研究会

## 触媒研究における AI 活用事例

データ科学を用いた触媒研究に関する最近の動向を紹介する。産総研の Yada ら<sup>1)</sup>は、W 塩触媒によるオレフィンの過酸化水素を用いたエポキシ化におけるホスホン酸助触媒の AI による予測を試みた。14 種のホスホン酸でのエポキシ収率と DFT 計算で取得したホスホン酸の物性値 (11 種の記述子) を LASSO により機械学習させモデルを作成した。AI が推薦した 8 種類のホスホン酸分子を新たに合成し、予測が正しいことを実験により実証した。

Sigman ら<sup>2)</sup>は有機分子触媒(キラルホスフィン)による不斉反応データと DFT 計算で取得した各種ホスフィンの記述子を用いて多変数解析によりモデルを作成した。モデルに基づいて設計した触媒の高選択性を実証した。

データ先導型の配位子スクリーニングの成果<sup>3)</sup>も興味深い。Rh 錯体触媒によるエナミドの不斉水素化に対する配位子候補の記述子を高速計算 (分子動力学法で遷移状態の力場を計算) し、蓄積したデータをもとに計算機内で触媒を virtual screening した。予測された配位子が高選択性を示すことを実験で確認した。Zahrt ら<sup>4)</sup>は support vector machines(SVM) と deep feed-forward neural networks を用いて、キラルなリン酸触媒による N-アシルイミンへのチオール付加の ee 予測に成功した。

触媒のキャラクター化への応用も始まっている。Ong ら<sup>5)</sup>は Materials Project website で入手可能な 800,000 件の K-edge XANES データを機械学習し、未知試料の XANES から構造・酸化数・配位数を予測した (正答率 84%)。Ziatdinov ら<sup>6)</sup>は原子レベル STEM 像の Deep Learning により作成した学習

機を用いて STEM 画像から Si ドープ graphene 上の欠陥や Si-dimer 種の構造を同定した。昔 (?) は XANES や電顕画像を見慣れた専門家が構造同定の主役であった。研究室の無人化も進んでいくのであろうか?

ロボットが固体触媒を合成したとの報告は未だ聞かないが、原料の金属塩溶液を混ぜるだけ (ソフト合成) で調製できる無機固体ならロボットでもつくれるようである。Cronin ら<sup>7)</sup>は、コンピュータ制御のポンプで金属塩・酸塩基溶液を送液・混合・加熱する自動合成器を作成し、様々な条件 (濃度, 比率, pH) で無機材料 (Ce, Mo 系 polyoxometalate) を合成した。生成する数種の無機結晶の大まかな収率は実体顕微鏡の画像データから迅速に数値化される。データが増える毎に、条件と収率の関係を学習した AI が最適条件を予測する。結果的に AI 付きのロボットはポストクよりも効率的に目的物質の合成を達成した。同様の手法でロボットが多段階の有機合成を達成したとの報告<sup>8,9)</sup>も最近出てしまった。

1) Chem. Lett. 2018, 47, 284; 2) Acc. Chem. Res. 2016, 49, 1292; 3) Nature Catal. 2019, 2, 41; 4) Science 2019, 363, 247; 5) npj Computational Materials, 2018, 12; 6) ACS Nano 2017, 11, 12742; 7) Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 10815; 8) Nature 2018, 559, 377; 9) Science 2019, 365, 557.

文責 北海道大学 清水 研一