

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(2)

No. 160 (2019 年) において、データ科学を用いた触媒研究に関する動向を紹介した。本編では、その後の動向を紹介する。

大阪大学の Sasai らは、不斉有機触媒反応を含む 2 段階の有機合成をフロー型反応器で行う際の条件最適化が機械学習により可能であることを示した¹⁾。逆合成は従来、膨大なデータベースを活用できる有機合成の専門家を必要とした。最近、有機合成のデータベースを教師データに用いて、人工知能による多段階有機合成の計画立案が可能となってきた^{2,3)}。一方、有機合成の各単位操作モジュールの連結で構成されるフロー型の反応・生成物分析装置の報告例も増えてきており、制御手法も公開されている⁴⁾。自動合成における条件の最適化を機械学習によって行えば、有機合成の無人化が達成できるようである。複数の合成ロボットをインターネットで繋ぐ試み^{5,6)}も興味深い。Cronin らは既存のデータベース利用ではなく、有機合成の膨大な文献を機械が読み込んで構築した合成レシピ作成機を用いて、12 種類の化合物(鎮痛剤リドカイン等)をロボット合成した⁷⁾。最先端を走る Cronin らの勢いを持ってすれば、「文献情報の解析、研究の計画・実施、Web を介した他グループとの協業を機械が一貫して実施！」との報告も間近なのかもしれない。但し、「話が出来すぎでは？」と思うのは筆者だけではないようで、「正確に NMR チャート解析し直したら

Nature 誌⁸⁾掲載の生成物の帰属は一部間違っている」とのクレームも出ている⁹⁾。冷静にこの分野の成長を見守るべきであろう。機械学習を用いた分子触媒の予測も数多く報告された (No. 160 参照) が、一方で、機械学習を用いた真に画期的な固体触媒開発の例は極めて少ない。固体触媒開発における AI 活用が工業触媒分野におけるブレークスルーの鍵となるであろう。

固体触媒のキャラクタリゼーションにおける AI 活用に関しては、前回より複雑な系への展開が見られる。Vlachos ら¹⁰⁾は Pt ナノ粒子上の各種サイトに吸着した CO の IR スペクトルを DFT 計算により網羅的に計算した。データのニューラルネットによる学習及び、IR ピーク強度の CO 被覆率依存性の物理モデル作成を経て、Pt ナノ粒子上の CO 吸着 IR スペクトルを予測・解釈する方法論を示した。この場合も、固体触媒特有の不均一性の取り扱いが鍵であり、分子触媒に比べて桁違いに多い標準データが必要であることが思い知らされる。

1) Chem. Commun., 56, 1259 (2020); 2) Nature, 555, 604 (2018); 3) Angew. Chem. Int. Ed., 59, 725 (2020); 4) React. Chem. Eng., 5, 201 (2020); 5) Nat. Commun., 9, 3406 (2018); 6) Nat. Commun., 11, 2046 (2020); 7) Science 370, 101 (2020); 8) Nature, 559, 377 (2018); 9) Nature, 570, E54 (2019); 10) Nat. Commun., 11, 1513 (2020)

文責 北海道大学 清水 研一