

Industrial Catalyst News

触媒学会工業触媒研究会

触媒探索のハイスループット化

1. はじめに

日本においては少子高齢化による総人口および生産年齢人口（ここでは15歳～64歳）の減少が見込まれており、2055年には総人口が1億人を下回ることが予想されている。一方で、職種による人材の需給ギャップは拡大するとされており、例えば、事務職では人材が余剰となるのに対して、専門職では人材が顕著に不足すると言われている¹⁾。このことは、研究開発での専門職人材も今後大きく不足することを意味しており、研究開発の効率を向上させることは喫緊の課題である。

触媒開発においては、膨大な数の触媒や反応条件を探索し好適な系を見出すことが多くのケースにおいて不可欠な工程であるが、それには長い時間を要するのが一般的である。したがって、これからの触媒探索においては一人あたり、装置あたり、時間あたりなどの単位でのスループット（処理量・処理能力）を向上させることが必要であり、自動化や並列化などの技術を用いたハイスループット触媒探索（High-throughput catalyst screening）がアカデミアと産業界の両方で活発になっている。

2. High-throughput catalyst screening の活用

Scopusにより‘high-throughput’、‘catalyst’、‘screening’をキーワードに含む論文数を調査したところ、2000年以降で1,511件がヒットした（2023/1/15時点）。図1には2000年以降の年別論文数の推移を示した。2003年から

2005年にかけてピークが見られるが、2019年以降はそれを大きく上回る数の論文が報告されており、今後も増加すると予想される。雑誌別ではACS Catal.での報告が年々増加しており、2022年には13報が発表されている。近年の報告の急増はhigh-throughputな環境の整備や設備の実装が進んだことを示唆している。

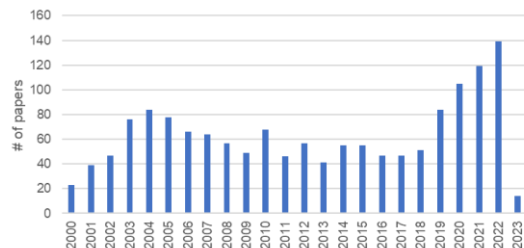


図1 High-throughput catalyst screening関連文献数の年別推移(2000～)

工業触媒開発での high-throughput screening の活用も進んでおり、Chemspeed Technologies AG（スイス）や Unchained Labs（米国）などの触媒自動調製装置、Avantium Technologies BV（オランダ）や hte GmbH（ドイツ）などの多並列反応評価装置などの導入の他、機器分析や構造解析における自動化や無人化、コンピュータの処理能力向上によるデータ解析の高速化などの結果、触媒調製～反応評価～構造解析～データ解析までの一連の工程のスループットが向上している系も多くあると推測される。また、大量に蓄積されるデータのトレーサビリティを高め管理や活用を容易にすることも今後の触媒開発には不可欠である。

参考文献 1) https://www.accenture.com/_acnmedia/PDF-120/Accenture-200017-JPN-AI-Employment.pdf

文責 三菱ケミカル 二宮 航