

清水 研一

北海道大学触媒科学研究所
教授

触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究

§ 1. 研究実施体制

(1)「清水」グループ

- ① 研究代表者: 清水 研一 (北海道大学触媒科学研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・理論先導型触媒設計
 - ・実験先導型触媒設計
 - ・文献値先導型触媒設計

(2)「蒲池」グループ

- ① 主たる共同研究者: 蒲池 高志 (福岡工業大学工学部生命環境科学科 准教授)
- ② 研究項目
 - ・理論・データ科学による触媒設計手法の構築

(3)「日沼」グループ

- ① 主たる共同研究者: 日沼 洋陽 (千葉大学先進科学センター 特任助教)
- ② 研究項目
 - ・理論材料科学による触媒設計手法の構築

§ 2. 研究実施の概要

理論・実験材料科学とデータ科学の融合領域(材料インフォマティクス)が注目されているが、触媒のような複合的・化学的現象への展開は萌芽的段階にあり、他の材料分野に遅れをとっている。本CREST研究では、触媒化学に関する理論化学データを蓄積し、データ科学の手法も用いた新しい触媒研究方法の提案を初期の目標に設定した。

金属や合金表面上のメタンの解離吸着エネルギーは、メタンの選択的転換における触媒特性予測に用いられるが、その算出(DFT 計算)には比較的大きな計算コストを要する。清水グループは、仮想的な触媒候補材表面におけるメタンの解離吸着エネルギーを網羅計算し、そのデータ群をシンプルな機械学習モデルで予測することに成功した。具体的には、Cu(111)表面に異種原子(46種)を置換させた表面における解離種(CH₃、CH₂、CH、C、H)の吸着エネルギーを

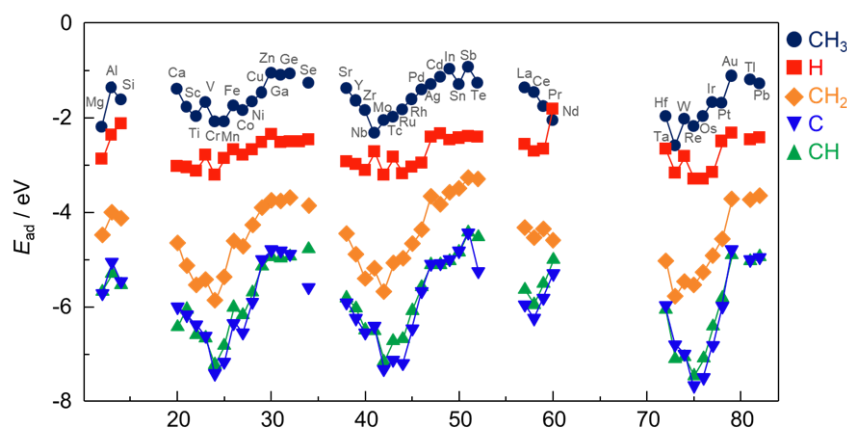
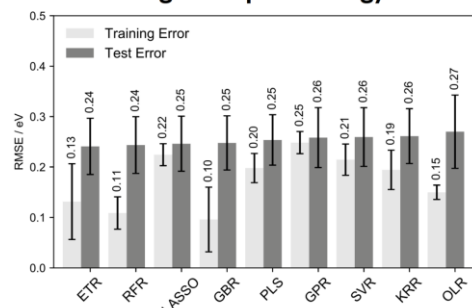


図1 異種原子ドーパ Cu(111)表面上の吸着エネルギー

DFT 計算した(図 1)。一方、ハンドブック等で容易に入手可能な 12 種の記述子、種々の回帰法を用いて DFT 計算値の予測を試みた。extra tree regression (ETR)が最も高い精度を示し、平均平方二乗誤差(test error)は 0.3eV 未満であった。触媒的メタン転換では炭素析出や CO_xへの過度な酸化の抑制が重要である。これらの副反応は CH₃種の C-H 解離(CH₂生成)に起因する。本研究では、Mg, Sn, Te, Pbを副反応抑制に効果的なドーパ原子として提案した。以上の結果は、理論化学、データ科学を用いたメタン転換触媒設計の新しい方法論を提案するものである。

Predicting Adsorption energy of CH₃



DFT calculation of adsorption energy
 • 10 hours with our 32 cores workstation (CH₃ on the Cu monometallic surface)
 • even longer time (about 34 hours) for the system containing another metal such as Pb

ML prediction
 • < 1 sec with our 1 core laptop
 • not dependent on target systems, but methods we choose

図2 MLとDFTによるハイスループット計算

蒲池グループでは、「理論・データ科学による触媒設計手法の構築」を、日沼グループでは、「理論材料科学による触媒設計手法の構築」目的として、理論計算データの蓄積を進めている。清水グループを含めた 3 グループがお互いの知識・方法を公開・共有し、単独ではできない研究を遂行している。