

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新  
2017 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書
------------------

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. 研究成果の概要

マテリアルズインフォマティクス(MI)の固体触媒への展開は萌芽的段階にある。本研究では、(1)多様な候補材料の理論計算や機械学習を積極的に用いた触媒科学(触媒インフォマティクス)の創成、及び(2)本手法を活用した触媒材料の開発を目的とする。

日沼グループ(G)は多様な金属酸化物表面のモデル化、表面の電子状態・反応性(表面欠陥生成エネルギー)の理論計算の方法論を開発し、網羅的な計算を実施してきた。今年度は Ga,Al 酸化物に関する昨年度の成果を論文発表するとともに、各種金属ナノ粒子と In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 界面の活性サイトのインフォマティクスに関する研究を開始した。蒲池 G は、表面上での分子の活性化・吸着を網羅的に理論計算し、触媒素過程のデータを蓄積すると同時に、酸化物表面と多様な分子の相互作用の理論化を進めている。今年度は欠陥を有する酸化チタン上での多様な分子の吸着活性化に関する検討結果につき論文を発表した。清水 G は上記の触媒理論データを機械学習で解析し、①機械学習による超高速な触媒理論データの計算、②機械学習による触媒設計コンセプトの提案の方法論を確立した。また、③日沼 G の理論先導で得られたコンセプトに基づいて、エチレン脱水素に有効な Inヒドライド触媒を開発した。成果③は、触媒科学分野の本質的課題(炭素析出)解決のコンセプトを与え、かつ化学産業における重要課題(シェールガスの高付加価値化)の解決にコア技術を提供したことから、データ先導型の革新触媒開発を先導するものと位置づけられる。

## § 2. 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

1. 理論先導型触媒設計
2. 実験先導型触媒設計
3. 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

1. 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 (東京工業大学 科学技術創成研究院、研究員)

#### ② 研究項目

1. 理論材料科学による触媒設計手法の構築

【代表的な原著論文情報】

- [1] A Frontier Molecular Orbital Based Analysis of Solid-Adsorbate Interactions over Group 13 Metal Oxide Surfaces, Chong Liu, Yuxin Li, Motoshi Takao, Takashi Toyao, Zen Maeno, Takashi Kamachi, Yoyo Hinuma, Ichigaku Takigawa, Ken-ichi Shimizu, J. Phys. Chem. C, 2020, 124, 15355-15365
- [2] Changes in Surface Oxygen Vacancy Formation Energy at Metal/Oxide Perimeter Sites: A Systematic Study on Metal Nanoparticles Deposited on an In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(111) Support, Yoyo Hinuma, Takashi Toyao, Nobutsugu Hamamoto, Motoshi Takao, Ken-ichi Shimizu, Takashi Kamachi, J. Phys. Chem. C, 2020, 124, 27621-27630
- [3] Surface Oxygen Vacancy Formation Energy Calculations in 34 Orientations of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and  $\theta$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Yoyo Hinuma, Takashi Kamachi, Nobutsugu Hamamoto, Motoshi Takao, Takashi Toyao, Ken-ichi Shimizu, J. Phys. Chem. C, 2020, 124, 10509-10522
- [4] Transformation of Bulk Pd to Pd Cations in Small-Pore CHA Zeolites Facilitated by NO, Shunsaku Yasumura, Hajime Ide, Taihei Ueda, Yuan Jing, Chong Liu, Kenichi Kon, Takashi Toyao, Zen Maeno, Ken-ichi Shimizu, JACS Au, 2021, 1, 201-211