

2023 年度年次報告書

地球環境と調和する物質変換の基盤科学の創成

2023 年度採択研究代表者

村岡 恒輝

東京大学 大学院工学系研究科

助教

原子シミュレーションによるゼオライト触媒のデータ駆動的設計

## 研究成果の概要

今年度は、大規模言語モデルによる分子設計に関する研究に中心的に取り組んだ。分子設計は有機分子に関わる様々な課題を解決するための根源的なアプローチであり、実験による試行錯誤によって主導されている。近年、計算資源の増加やソフトウェアの発展によって、コンピュータ上で多数の有機分子を生成、評価し、実験ではなし得ないような大規模なデータを蓄積することが行われている。このような *de novo* 分子設計は強力なツールであるものの、実験による試行錯誤を強力にサポートするにはギャップがあると言われており、人類の喫緊の課題する分子設計に挑戦するには、研究者とデータの協奏的なアプローチが求められる。本研究では、近年成長の著しい汎用大規模言語モデルを用いて分子設計が行えることを示した。対象とした分子はゼオライト合成に用いられる有機構造規定剤 (OSDA) である。ごく単純な OSDA のデータ 1 つのみを与え、汎用大規模言語モデルに新しい OSDA を生成するように自然言語で促したところ、分子として文法の正しい新しい分子を返却することを確認した。OSDA の経験則と、分子シミュレーションによるゼオライトとの親和性のデータを繰り返し与えたところ、実際に用いられる OSDA、それに類似する候補、さらにそれを上回る親和性を有する候補を予測することに成功した。本研究により、汎用大規模言語モデルが化学や材料科学に幅広く適用できる可能性が示された。

また、第一原理計算を用いて様々な AI 分布を有する ERI 型ゼオライトのモデリングを行った。Si/AI モル比の異なる 3 種類の ERI 型ゼオライトを NMR で解析した結果に合致するようなゼオライトモデルを多数生成したところ、実験で得られる ERI 型ゼオライトの AI 分布は、合成に用いられる OSDA やアルカリ金属カチオンの安定化を受け、統計的に偏ったものとなることがわかった。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Synthesis and Structural Analysis of High-Silica ERI Zeolite with Spatially-Biased Al Distribution as a Promising  $\text{NH}_3$ -SCR Catalyst. J. Zhu, **K. Muraoka\***, T. Ohnishi, Y. Yanaba, M. Ogura, A. Nakayama, T. Wakihara\*, Z. Liu\*, T. Okubo. *Adv. Sci.* 11 (2024) 2307674.
- 2) High-pressure phase and pressure-induced phase transition of  $\text{Ag}_3\text{YCl}_6$ . K. Maki, **K. Muraoka**, S. Kawaguchi, T. Tanimoto, A. Nakayama, S. Yokokura, T. Shimada, K. Tadanaga, A. Miura, *CrystEngComm* 26 (2024) 1814-1818.