

未来社会創造事業 探索加速型

「共通基盤」領域

年次報告書(探索研究期間)

令和4年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:谷池 俊明]

[北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科・教授]

[研究開発課題名:超広域材料探索を実現する
材料イノベーション創出システム]

実施期間 : 令和4年10月1日～令和5年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「ハイスループット実験」グループ、及び「社会実装」グループ(北陸先端科学技術大学院大学)

① 研究開発代表者:谷池 俊明 (北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科、教授)

② 研究項目

- ・ハイスループット実験技術の実装
- ・機械学習法の開発
- ・触媒ビッグデータの取得
- ・機械学習法の開発
- ・材料シーズ創出
- ・産業界へのヒアリング
- ・知財マネジメント

(2)「データ科学」グループ(北海道大学)

① 主たる共同研究者:高橋 啓介 (北海道大学大学院理学研究院、教授)

② 研究項目

- ・機械学習法の開発
- ・材料シーズ創出
- ・プラットフォーム開発

§2. 研究開発成果の概要

材料開発にかつてない難度と速度が要求される中、研究開発現場の課題は、研究のグランドデザインをデータ駆動型にリデザインする基盤技術及び人材の欠如にある。本研究開発の目的は2つである。①高品質な材料ビッグデータを自製するハイスループット実験技術、及び材料探索を指導するデータ科学技術を基盤とする、超高効率な材料イノベーション創出システムを構築し、周期表の大部分を網羅するような前例の無い規模の材料探索を行い、具体的な材料シーズの発見を以てシステムの有効性を実証する。②システムの社会普及を担う事業体を構想し、企業へのヒアリングを通してその前駆体たるコンソーシアムを設立する。

初年度の令和4年度は、材料イノベーション創出システムを構成する基盤技術を開発した。具体的には、メタンのドライリフォーミングを対象としたハイスループット実験技術を整備し、標準触媒を用いた実証を経て、20 触媒/日の触媒調製・評価、及び、1500 データ点/日のスループットを与える実験プロトコルを確立した。その上で、周期表から無作為に抽出した複数の元素を任意組成で組み合わせたランダム触媒をハイスループット調製・評価し、既に 14 万点もの触媒データを獲得した。現時点で既に標準触媒の 75%程度の性能を示す新規組成を発見した。任意組成の触媒に対して予備知識無しで特徴量設計を行う機械学習技術を開発した。既存の複数のハイスループット実験データセットを対象に技術の有効性を実証したところ、触媒設計や反応が異なるにも関わらず、全ての場合で精度の高い回帰モデルが得られた。社会実装準備として、ヒアリング資料・コンソー

シアムの原案等を作成し、産業界へのヒアリングを開始した。知財マネジメントチームを結成し、論文発表に先立って基本特許 1 件と、要素技術に係る特許 1 件を出願した。

【代表的な原著論文情報】

Fernando Garcia-Escobar, Shun Nishimura, and Keisuke Takahashi, "Data-Driven Design and Understanding of Noble Metal-Based Water–Gas Shift Catalysts from Literature Data", *J. Phys. Chem. C* 2023, 127, 13, 6152–6166.