

# 人工知能で触媒反応の収率を予測

## Prediction of Catalytic Activity with Artificial Intelligence (AI)

- 使用する触媒構造の情報だけで触媒反応の収率を予測するAI技術を開発
- 予測に重要なパラメーターを人工知能が自動で客観的に選別
- 人工知能を活用した高性能触媒の開発により製品開発スピードを飛躍的に加速

### 研究のねらい

触媒は基礎化学品や、医薬品、香料、電子材料などの機能性化学品を合成する反応を促進することで、触媒がないと反応しない化合物を反応させたり、反応時間を短縮させることができます。近年、製品ライフサイクルの短縮化に伴って、機能性化学品などの新素材を従来よりも短期間で効率的に開発・製造することが求められています。また、化学品製造プロセスでは、高い生産性や低コスト、省エネルギー、省資源、低環境負荷なども重要です。このような製造プロセスに適した触媒を、人工知能(AI)によって正確に素早く発見することを目指します。

### 研究内容

私たちは、触媒化学と情報科学を融合させた「カタリストインフォマティクス」という概念のもと、機能性化学品などの製造に必要な有機合成反応に用いられる触媒の活性を、AIによって予測する技術の開発に取り組んでいます。例えば、電子材料や樹脂などの原料となるエポキシ化合物を、過酸化水素を使ってオレフィンからハロゲンフリーで製造する反応に用いる触媒の活性、すなわち触媒反応の収率を、AIによって予測する技術を開発しました。このAIによって、活性が知られていない触媒による反応収率を予測することができます。

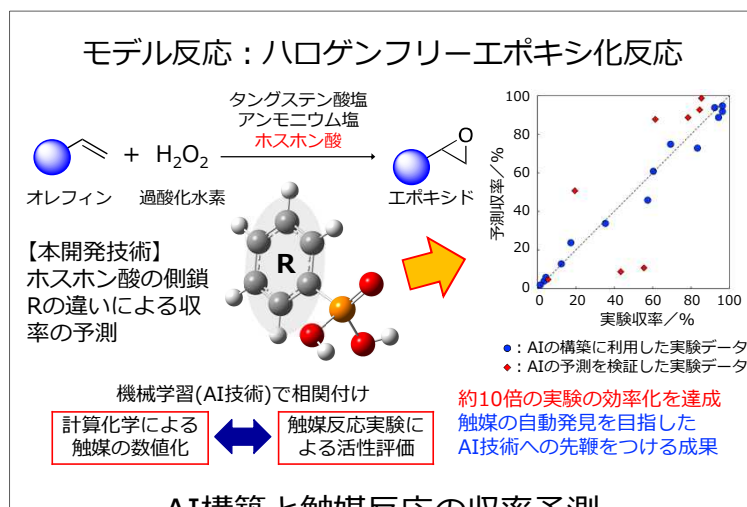
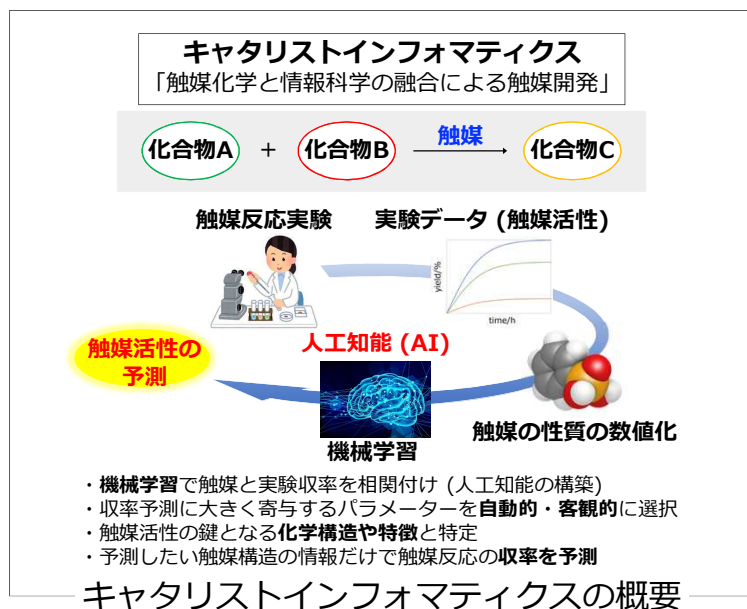
### 連携可能な技術

- ・ 高性能触媒の設計開発
- ・ Yada, A., Nagata, K., Ando, Y., Matsumura, T., Ichinoseki, S., Sato, K. *Chem. Lett.* 47, 283-287 (2018)
- ・ 本成果の一部は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (P16010) の結果得られたものです。

### 将来への技術展望

高性能触媒の開発期間の大幅な短縮によって、機能性化学品の開発・製造の高速化に大きく貢献します。

- キーワード：触媒技術、人工知能、有機合成
- 連携先業種：製造業(化学、医薬品、石油、石炭製品)



矢田 陽、佐藤 一彦  
産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター  
問い合わせ先：a-yada@aist.go.jp