

【環境・省資源分野】

仮訳

## 持続可能な技術の開発を促進するシカゴ大学と ANL の共同研究(米国)

機械学習プログラムが脱炭素を促進する触媒の開発を加速させる

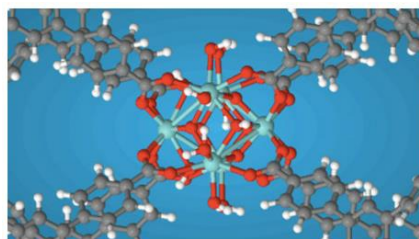
2023年3月21日

EMILY AYSHFORD

シカゴ大学とアルゴンヌ国立研究所の共同研究で、空気中から水を集めて化学反応を促進する新しい触媒を見つけるための機械学習法を開発中

水不足や気候変動を含む、最も差し迫った環境問題の解決には、空気中から水を集めたり、新しいエネルギー源に電力を供給したりするように設計された新しい材料が必要となる。

シカゴ大学(UChicago)と米国エネルギー省 (DOE) アルゴンヌ国立研究所(ANL)の共同研究では、有機金属構造体 (MOFs) と呼ばれる材料による触媒の最適化に向けて理論、実験と [人工知能\(AI\)](#) を組み合わせている。MOFs は、多孔質の内部表面積を作るその分子構造により、高い吸着力のスポンジのように機能することが可能で、ガスを格納したり、空気から水を集めたり、さらには化学反応を強化したりすることができる。



UChicago と Argonne の共同研究では、空気から水を集め、化学反応を促進する金属有機構造体(MOFs)の新しい触媒を特定する方法を開発。(画像提供: Gagliardi Group.)

[Laura Gagliardi 教授](#)と共に研究活動を実施している UChicago の大学院生の Daniel King 氏は、ANL の Max Delferro 氏の研究グループとの協力により、工業レベルの化学反応を高速化する可能性のある、新しい MOF 触媒を見つけるより優れた方法を開発した。

「触媒の効率を高めることは、持続可能な解決策を開発し、脱炭素化を促進するために不可欠です」

—— Daniel King 大学院生

この研究グループは、機械学習アルゴリズムとハイスループット実験を組み合わせたプロセスを用いて、数種類の金属の利用や多様な温度・圧力を加えた際の MOF NU-1000 の触媒活性についてスクリーニングを実施した。

2,000 回の反応の後、最終的にこのプロセスを使用してこの化学反応の収率を 0.4% から 24.4%に向上させた。

「これは、ハイスループット実験研究のベストプラクティスを示すものです」と King 氏は言う。「機械学習アルゴリズムを利用して実験を導くことは重要ですが、これは完全に自動ではありません。優れた結果を得るには、まだ人間によるインプットが必要です」。本研究の結果は、[ACS Central Science](#) に掲載されている。

King 氏は、研究資金を得て ANL の科学者らや技術者らとの緊密な研究活動を実施しており、最終的にはこのことが本研究の成功の鍵となる学習体験であったと語る。「理論と実験の直接的なコラボレーションでした」と King 氏は言う。「理論を立てる者には結果の説明を求められることが多いのですが、本研究の場合、実験の進捗を設計する上で積極的な役割を果たせました」。

本研究に関与した研究者らは、エネルギーフロンティア研究センタープログラムの一環として DOE から資金提供を受けた、[Catalyst Design for Decarbonization Center](#) のメンバーである。同センターのミッションは、脱炭素エネルギー移行のための新しい触媒を発見し、その鍵となる触媒反応を最適化することである。

「触媒の効率を高めることは、持続可能な解決策を開発し、脱炭素化を促進するために不可欠です」と King 氏は言う。「反応に最適な触媒を見つける方法を理解することは、その方向への重要なステップとなります」。

訳：NEDO（担当 技術戦略研究センター）

出典：本資料は、米国立アルゴンヌ国立研究所(ANL)の記事 “Research collaboration between UChicago and Argonne boosts development of sustainable technology” (<https://www.anl.gov/article/research-collaboration-between-uchicago-and-argonne-boosts-development-of-sustainable-technology>) を翻訳したものである。