

触媒創造の自動化を目指す分科会

(触媒分科会)

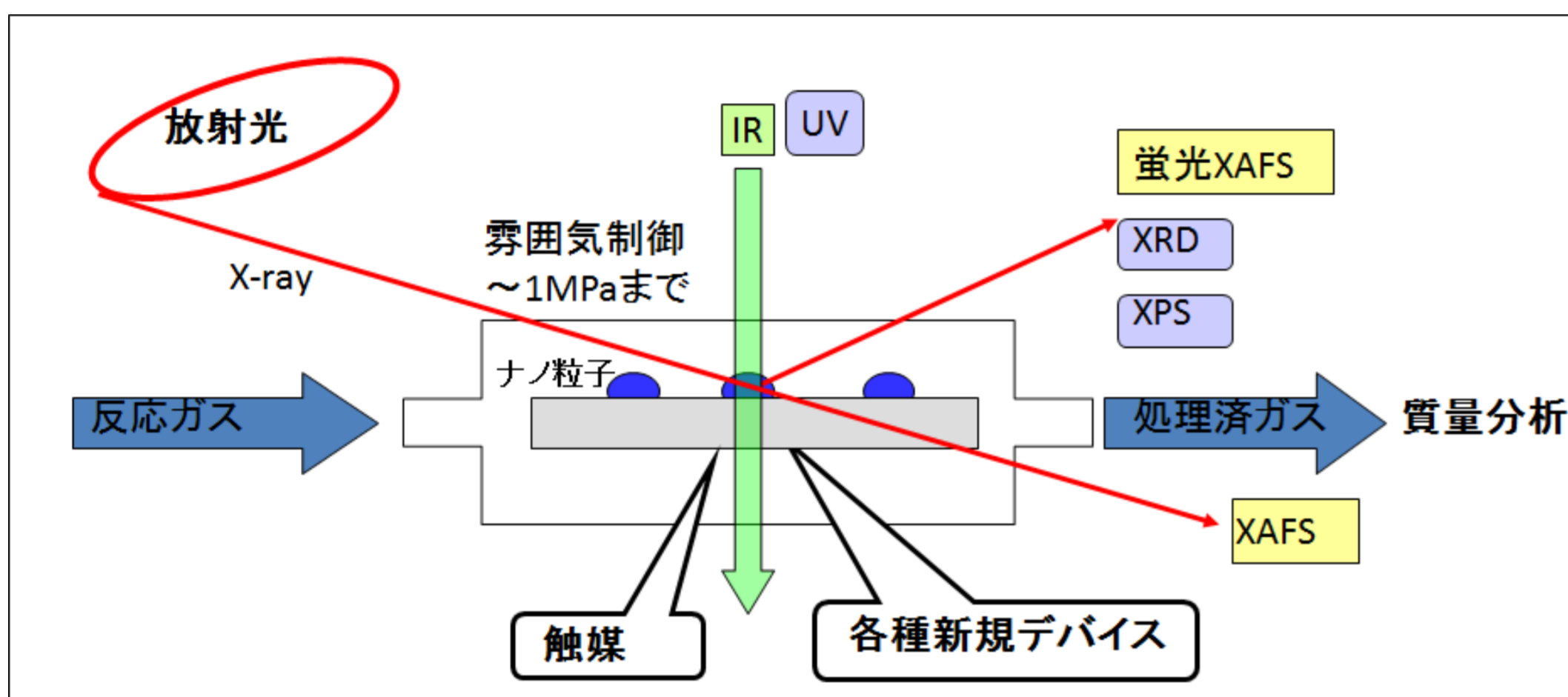
● **連絡先** 触媒分科会ML: z-catalyst-ml@aist.go.jp

● **分科会の趣旨**

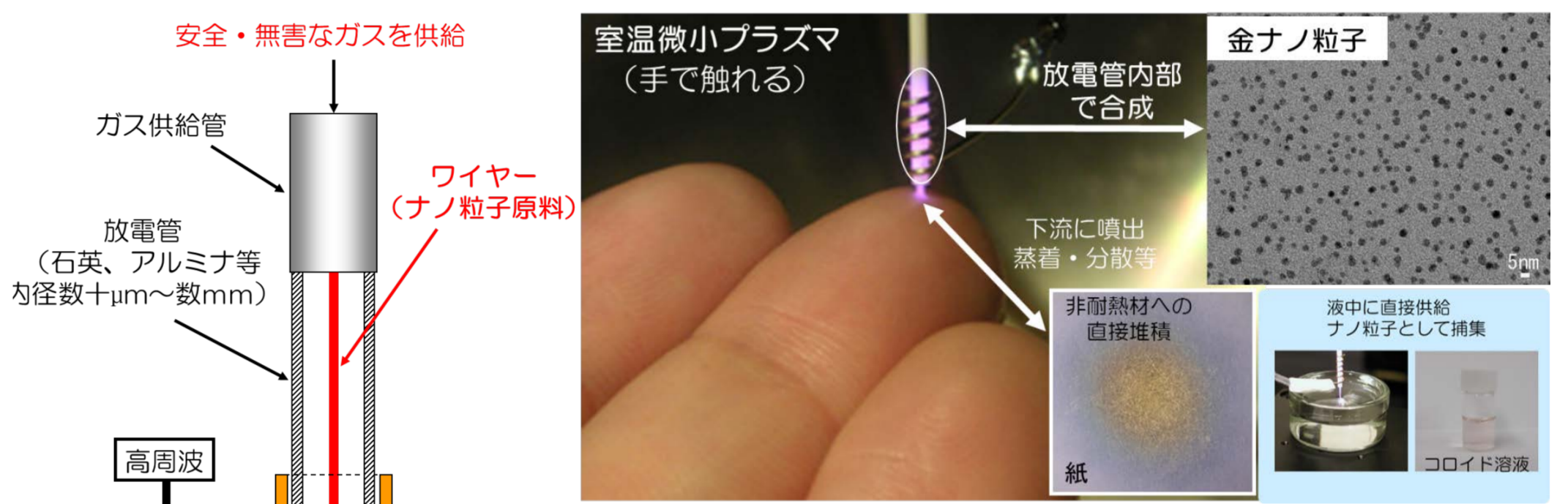
- 分野間の壁を取り払い、議論を重ねることで、固体触媒、分子触媒、バイオ触媒のそれぞれの良さを併せ持つ触媒の開発を目指す。
- 情報系の研究者と協力し、これまで発表された触媒技術の知識を抽出・統合し、ビッグデータとして活用することで、コンピューターサイエンスと触媒化学の融合により、目的とする任意の「ものづくり」を実現する触媒を自動的に創造するシステムの開発を目指す。

● **分科会メンバーの研究トピック**

◆ **ナノ粒子構造解析技術の開発**
既存時分割測定の高高度化、多手法同時測定の新規開発



◆ **大気開放型マイクロプラズマによるナノ粒子合成と直接分散・蒸着**



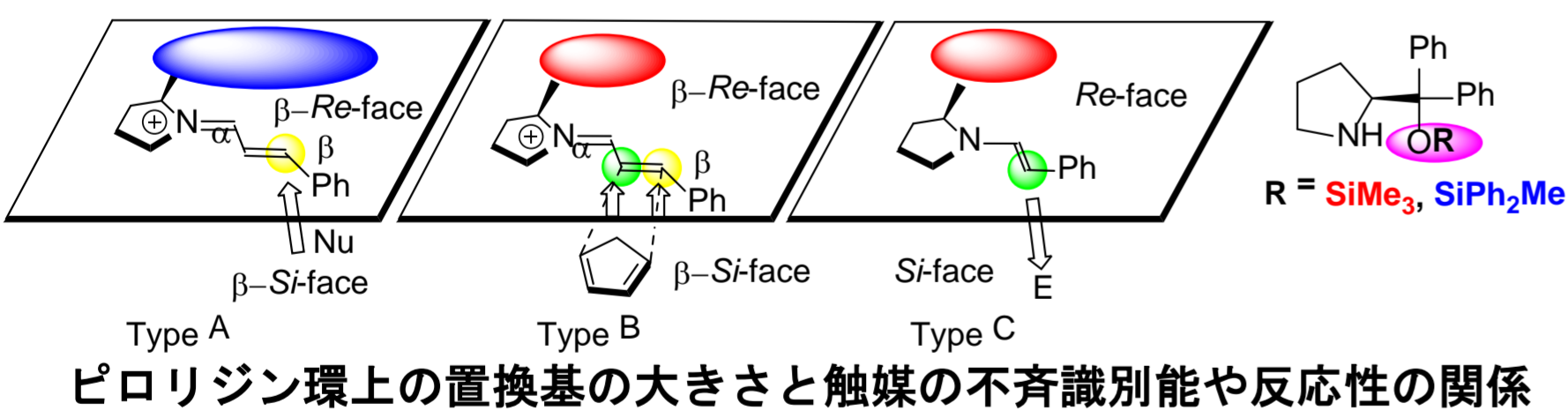
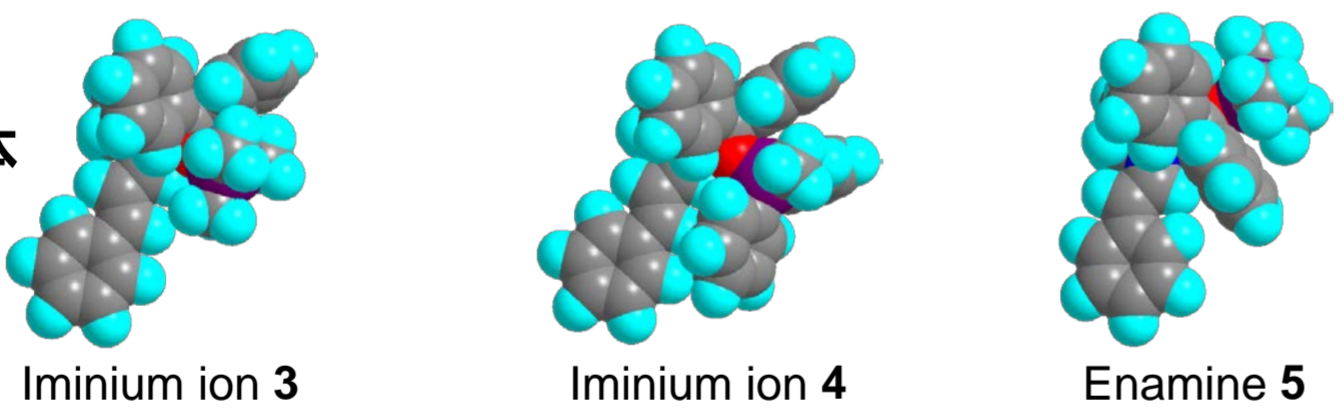
大気中に設置した内径サブミクロン～数ミリ程の細管内で、室温～数千度のプラズマを発生させ、有害なガス原料を利用せずに固体原料から金属や酸化物のナノ粒子を合成する技術です。
一例として、触媒作用が期待できる直径5nm程の金ナノ粒子は、手で触れるほどの低温プラズマで合成できます。

◆ **計算化学的手法によるジフェニルプロリノールシリルエーテル型有機分子触媒の不斉識別機構・立体制御機構の解明**

反応中間体の分子構造解析に用いた手法

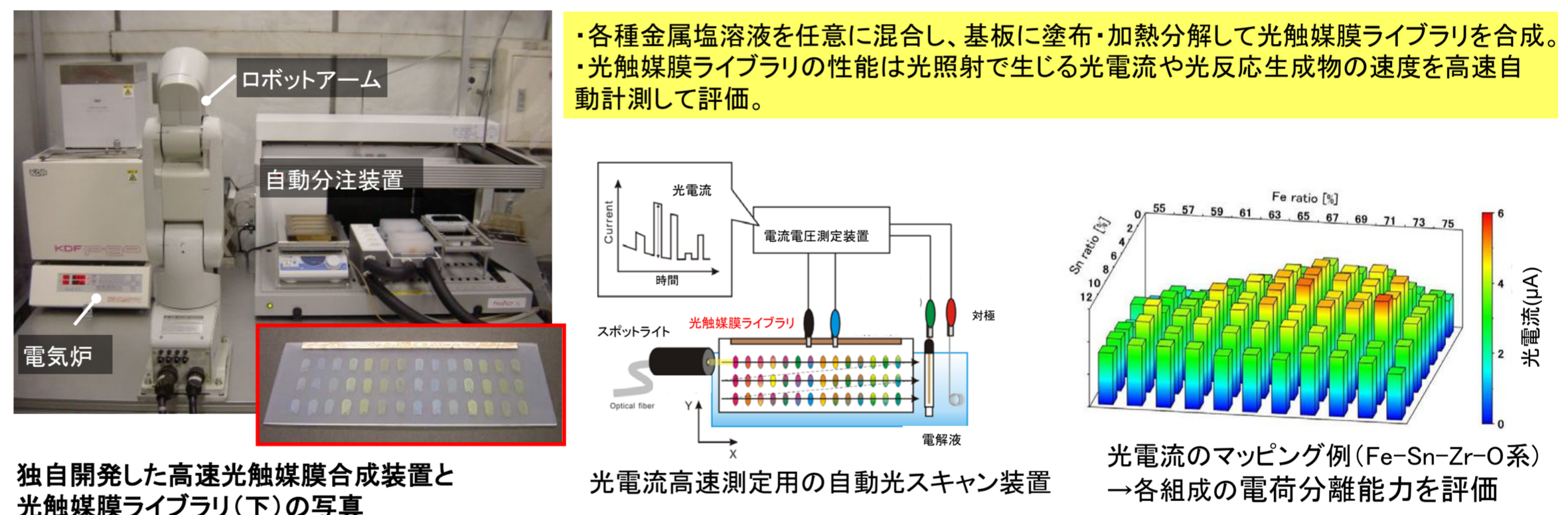
- ✓ X線結晶構造を出発とする力場計算(MMFF94s力場)による構造解析
- ✓ 密度汎関数計算(B3LYP, M06-2X)によるエネルギー評価の精密化
- ✓ それぞれの配座の存在比を計算

触媒反応の中間体の最安定構造



ピロリジン環上の置換基の大きさと触媒の不斉識別能や反応性の関係

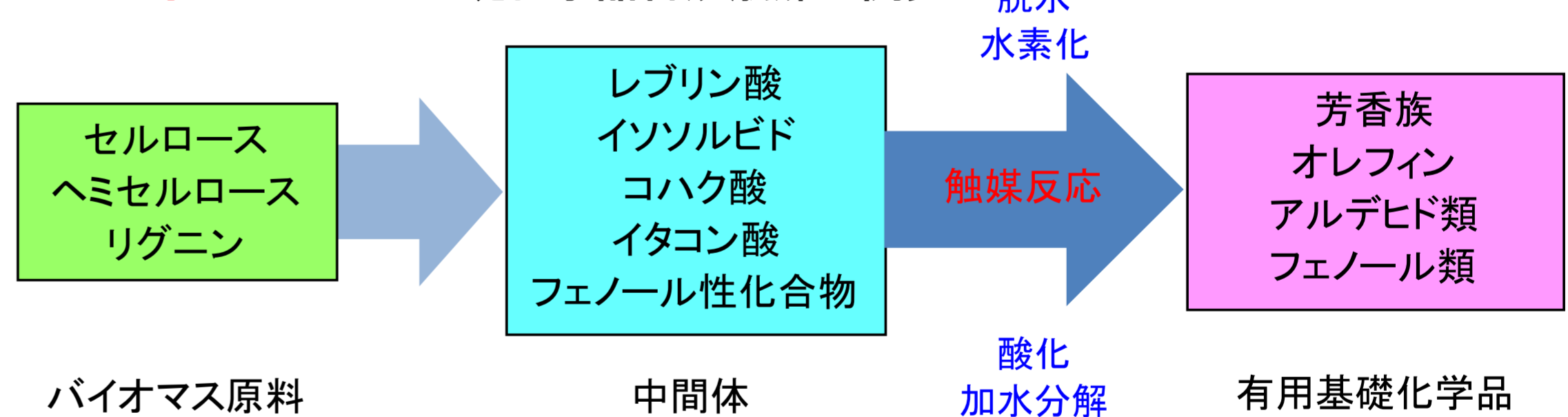
◆ **光触媒用の材料探索を加速するための高速自動探索装置の開発**



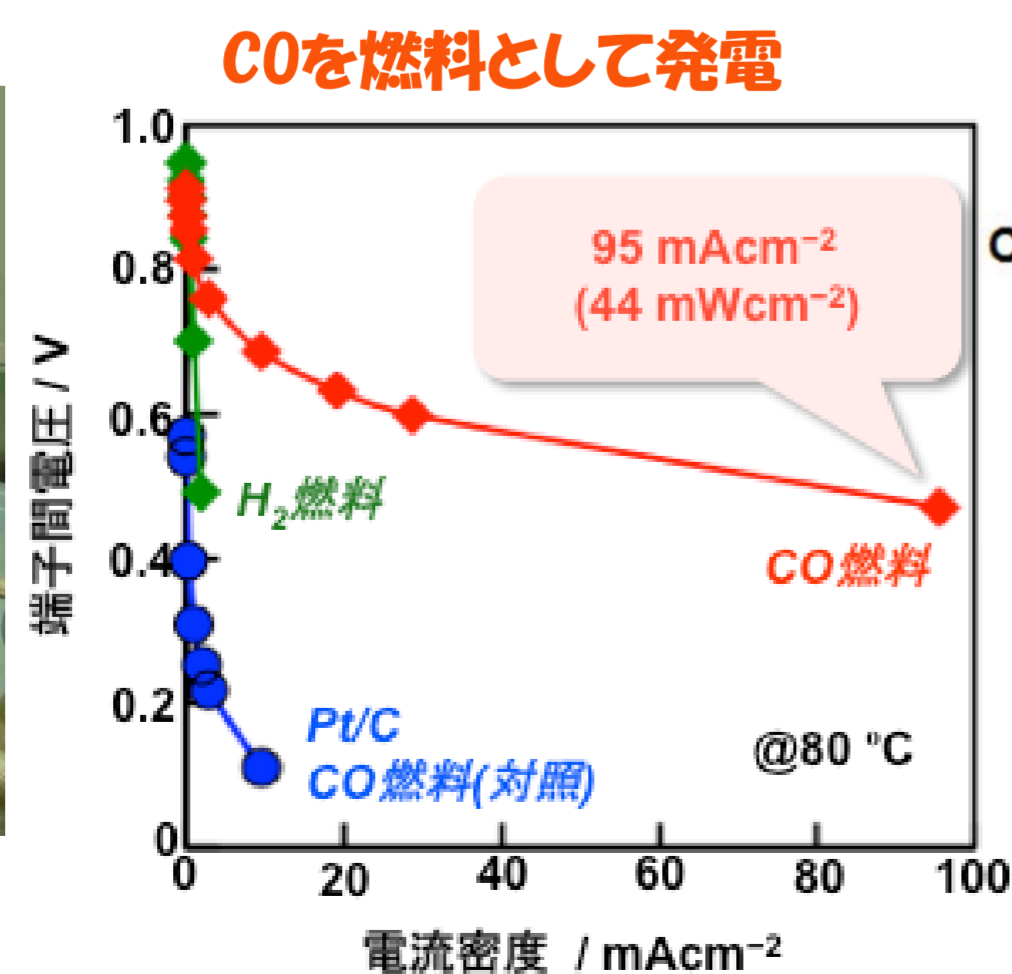
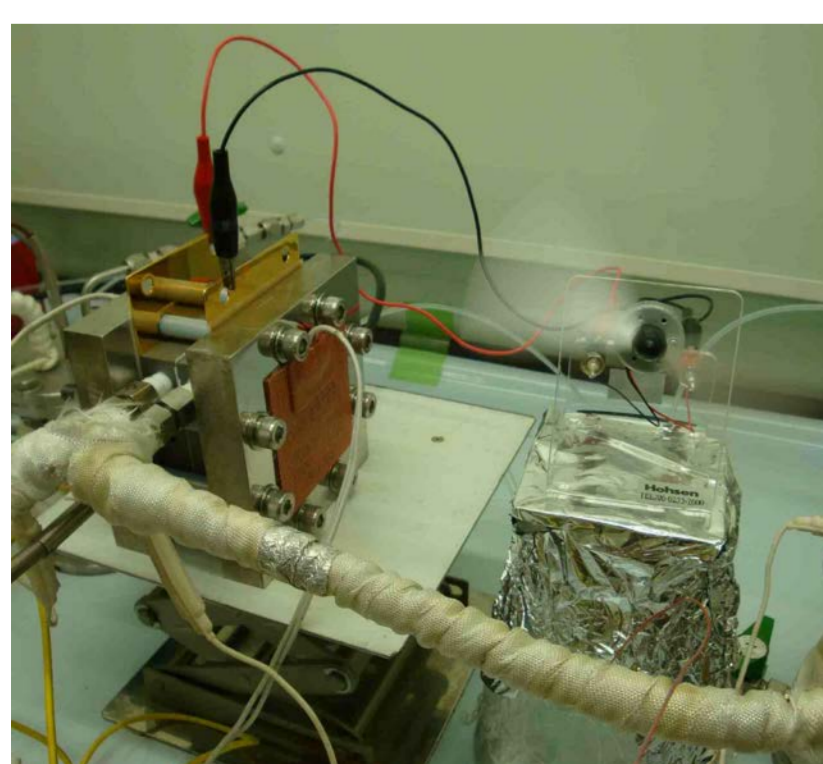
独自開発した高速光触媒膜合成装置と光触媒膜ライブラリ(下)の写真

・各種金属塩溶液を任意に混合し、基板に塗布・加熱分解して光触媒膜ライブラリを合成。
・光触媒膜ライブラリの性能は光照射で生じる光電流や光反応生成物の速度を高速自動計測して評価。

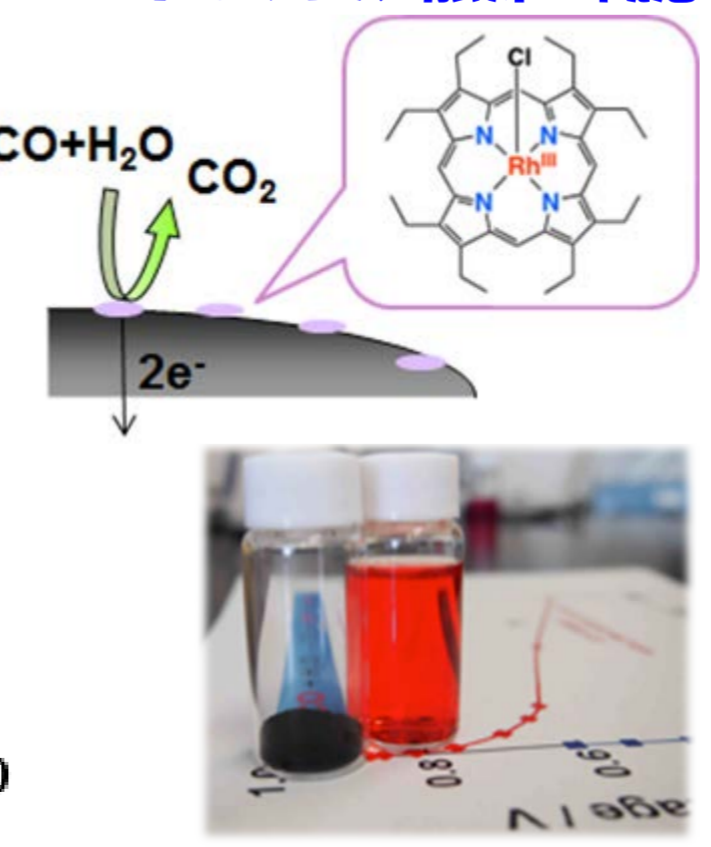
◆ **バイオマスからの基礎化学品合成触媒の開発**



◆ **燃料電池アノード触媒の開発**



Rh-ポルフィリン触媒の概念



◆ **微生物酸化反応利用によるD-グリセリン酸生産と機能性化学品を製造する技術開発**

